

**ABU RAYHON BERUNIY NOMIDAGI URGANCH DAVLAT
UNIVERSITETI HUZURIDAGI ILMIY DARAJALAR BERUVCHI
PhD.03/2025.27.12.FM.06.03 RAQAMLI ILMIY KENGASH**

**ABU RAYHON BERUNIY NOMIDAGI URGANCH DAVLAT
UNIVERSITETI**

QURBANOV DAVRON SHAVKATOVICH

**OROL BO‘YI HUDUDIDAN OLINGAN KAOLIN MATERIALINING
TARKIBINI NAZARIY VA EKSPERIMENTAL O‘RGANISH**

01.04.10 – Yarimo‘tkazgichlar fizikasi

**FIZIKA-MATEMATIKA FANLARI BO‘YICHA FALSAFA DOKTORI (PhD)
DISSERTATSIYASI AVTOREFERATI**

Urganch – 2026

**Fizika-matematika fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD)
dissertatsiyasi avtoreferati mundarijasi**

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

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

Qurbanov Davron Shavkatovich

Orol bo‘yi hududidan olingan kaolin materialining tarkibini nazariy va eksperimental o‘rganish..... 3

Курбанов Даврон Шавкатович

Теоретическое и экспериментальное изучение состава каолинового материала, полученного в районе Приаралья..... 25

Kurbanov Davron Shavkatovich

Theoretical and experimental study of the composition of kaolin material obtained from the Aral Sea region 49

E‘lon qilingan ishlar ro‘yxati

Список опубликованных работ
List of published works..... 53

**ABU RAYHON BERUNIY NOMIDAGI URGANCH DAVLAT
UNIVERSITETI HUZURIDAGI ILMIY DARAJALAR BERUVCHI
PhD.03/2025.27.12.FM.06.03 RAQAMLI ILMIY KENGASH**

**ABU RAYHON BERUNIY NOMIDAGI URGANCH DAVLAT
UNIVERSITETI**

QURBANOV DAVRON SHAVKATOVICH

**OROL BO‘YI HUDUDIDAN OLINGAN KAOLIN MATERIALINING
TARKIBINI NAZARIY VA EKSPERIMENTAL O‘RGANISH**

01.04.10 – Yarimo‘tkazgichlar fizikasi

**FIZIKA-MATEMATIKA FANLARI BO‘YICHA FALSAFA DOKTORI (PhD)
DISSERTATSIYASI AVTOREFERATI**

Urganch – 2026

Fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi mavzusi O'zbekiston Respublikasi Vazirlar Mahkamasi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasida № B2025.4.PhD/FM1428 raqam bilan ro'yxatga olingan.

Dissertatsiya Abu Rayhon Beruniy nomidagi Urganch davlat universitetida bajarilgan.

Dissertatsiya avtoreferati uch tilda (o'zbek, rus, ingliz (rezyume)) Ilmiy kengash veb-sahifasida (<https://urdu.uz.uz>) hamda "ZiyoNet" Axborot-ta'lim portalida (www.ziynet.uz) joylashtirilgan.

Ilmiy rahbar: Karajanov Smagul Jangabergenovich
fizika-matematika fanlari doktori

Ilmiy maslahatchi: Yakubov Komiljon Ruzmetovich
fizika-matematika fanlari nomzodi, professor

Rasmiy opponentlar: Rasulov Rustam Yavkachovich
Fizika-matematika fanlari doktori, professor

Kamalov Amangeldi Bazarbaevich
Fizika-matematika fanlari doktori, professor

Yetakchi tashkilot: Berdaq nomidagi Qoraqalpoq davlat universiteti

Dissertatsiya himoyasi Abu Rayhon Beruniy nomidagi Urganch Davlat universiteti huzuridagi PhD.03/2025.27.12.FM.06.03 raqamli Ilmiy kengashning 2026-yil "15" May soat 10:00 da majlisida bo'lib o'tadi. (Manzil: 220100, Urganch sh., H.Olimjon ko'chasi, 14-uy. Tel.: (99862) 224-67-00; faks: (99862) 224-66-16; e-mail: info@urdu.uz).

Dissertatsiya bilan Abu Rayhon Beruniy nomidagi Urganch Davlat universitetining Axborot-resurs markazida tanishish mumkin (D-984 - raqam bilan ro'yxatga olingan). (Manzil: 220100, Urganch sh., H. Olimjon ko'chasi, 14-uy. Tel.: (99862) 224-67-00; faks: (99862) 224-66-16) e-mail: arm@urdu.uz.

Dissertatsiya avtoreferati 2026 yil "4" May da tarqatildi.

(2026 yil "4" May daqi 13 raqamli reestr bayonnomasi).



U.O. Kutliyev
Ilmiy darajalar beruvchi ilmiy kengash raisi, f.-m.f.d., professor

U.P. Asatova
Ilmiy darajalar beruvchi ilmiy kengash ilmiy kotibi, PhD, dotsent

K.A. Ismaylov
Ilmiy darajalar beruvchi ilmiy kengash qoshidagi ilmiy seminar raisi, f.-m.f.d., professor

KIRISH (falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi annotatsiyasi)

Dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati. Jahonda ilm-fan va texnologiyalarning jadal rivojlanishi natijasida yarimo‘tkazgichlar, mikroelektronika, quyosh energetikasi, sensor texnologiyalari hamda zamonaviy elektron qurilmalar sohasida ishlab chiqarish ko‘lamini kengaytirishga tobora katta e‘tibor qaratilmoqda. Bu esa kremniy va turli oksid materiallariga bo‘lgan ehtiyojning izchil ravishda oshib borishi hamda ularni an‘anaviy usullar bilan olishdagi yuqori energiya sarfi va iqtisodiy xarajatlarning kattaligi yangi yechimlarni talab etmoqda. Shu sababli, ushbu muammolarni bartaraf etish uchun arzon, ekologik xavfsiz hamda muqobil xomashyo manbalarini izlab topish va ularni qayta ishlash texnologiyalarini yaratish bugungi kunda dolzarb vazifa sifatida belgilangan. Shu nuqtai nazardan, tarkibi alyuminiy va kremniy oksidlariga boy bo‘lgan, tabiiy, keng tarqalgan va iqtisodiy jihatdan samarali xomashyo manbasi sifatida kaolinga — funksional materiallar, yarimo‘tkazgichlar hamda turli yuqori texnologik qurilmalar yaratishda alohida e‘tibor qaratilmoqda.

Jahonda qazib olinadigan kaolin materiallari hududning geologik tuzilishi, mineralogik tarkibi va shakllanish sharoitlariga bog‘liq ravishda turli xil fizik-kimyoviy xossalarga ega bo‘lishi xususida turli tadqiqotlar olib borilmoqda. Xususan, turli mintaqalardan olingan kaolin namunalarida zarracha o‘lchamining taqsimoti, kristall tuzilishi, kimyoviy tarkibi shuningdek, qo‘shimcha aralashmalar miqdori sezilarli darajadagi farqlar kaolinning mexanik, optik, elektr va adsorbsion xususiyatlariga bevosita ta’sir ko‘rsatib, uning sanoat, elektronika va sensor texnologiyalaridagi qo‘llanish samaradorligini belgilab bermoqda. Shu sababli, kaolinning xossalarini zamonaviy eksperimental (XRD, FTIR, SEM/TEM) va nazariy (DFT) usullar yordamida kompleks o‘rganish muhim ahamiyat kasb etadi. Uning mikro va nano darajadagi tuzilishi, elektron xususiyatlari hamda gazlar bilan o‘zaro ta’sirini tahlil qilish – yuqori samarali gaz sensorlari, katalitik tizimlar va yarimo‘tkazgich materiallar yaratish uchun mustahkam ilmiy asos bo‘lib xizmat qiladi. Shu jihatdan, tabiiy kaolinning fizik-kimyoviy xususiyatlarini tizimli tadqiq etish orqali ekologik xavfsiz, yangi avlod funksional materiallarini ishlab chiqish dolzarb vazifalardan hisoblanmoqda.

Respublikamizda so‘nggi yillarda tabiiy xomashyo resurslari, xususan kaolin asosidagi materiallarning fizik-kimyoviy xossalarini chuqur o‘rganish, ularning strukturaviy, energetik xususiyatlarini aniqlash hamda ushbu materiallarni zamonaviy yarimo‘tkazgichli qurilmalar yaratishda qo‘llashga yo‘naltirilgan keng ko‘lamli chora tadbirlar amalga oshirilmoqda.

O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 19-mart 2021-yildagi “Fizika sohasidagi ta’lim sifatini oshirish va ilmiy tadqiqotlarni rivojlantirish chora-tadbirlari to‘g‘risida”¹ gi PQ-5032 son qarorida fizika sohasida ilmiy izlanishlarni kengaytirish, ularni ishlab chiqarish bilan uzviy bog‘lash hamda innovatsion faoliyat samaradorligini oshirish ustuvor vazifalar sifatida belgilangan. Mazkur qarorda belgilangan vazifalar ijrosini ta’minlash, xususan, yarimo‘tkazgichlar fizikasi yo‘nalishidagi izlanishlarni amaliyotga tatbiq etishda mahalliy xomashyo hisoblangan

¹ O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining qarori, “Fizika sohasidagi ta’lim sifatini oshirish va ilmiy tadqiqotlarni rivojlantirish chora-tadbirlari to‘g‘risida”, 19.03.2021 yildagi PQ-5032-son

kaolindan oqilona foydalanish muhim ahamiyat kasb etadi. Shu nuqtai nazardan, kaolin tarkibidagi yarimo‘tkazgich va oksid materiallarning fizik xossalarini chuqur tadqiq etish, ular asosida zamonaviy qurilmalarni yaratish hamda energiya samaradorligini oshirish orqali amaliy qo‘llanish sohasini kengaytirish – yuqoridagi qarorda ilgari surilgan ilm-fan va ishlab chiqarish integratsiyasining uzviy ilmiy-amaliy asosi bo‘lib xizmat qiladi.

O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2022-yil 28-yanvardagi PF-60-son “2022 - 2026-yillarga mo‘ljallangan Yangi O‘zbekistonning taraqqiyot strategiyasi to‘g‘risida”² gi farmoni, O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2023-yil 16-fevraldagi PQ-57-son “2023-yilda qayta tiklanuvchi energiya manbalarini va energiya tejoyvchi texnologiyalarni joriy etishni jadallashtirish chora-tadbirlari to‘g‘risida”³ gi qarori, O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2024-yil 8-yanvardagi PQ-13-son “Qayta tiklanuvchi energiya manbalari qurilmalarini ishlab chiqaruvchilar va ularni ekspluatatsiya qiluvchilarni qo‘llab-quvvatlash”⁴gi qarori, Vazirlar Mahkamasining 2025-yil 17-dekabrda 795-sonli qarori “Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy universiteti huzurida Nazariy fizika institutini tashkil etish to‘g‘risida”⁵ gi qarorlarida ko‘zda tutilgan vazifalarini bajarishga ma’lum darajada xizmat qiladi.

Tadqiqotning respublika fan va texnologiyalar rivojlanishi ustuvor yo‘nalishlariga mosligi. Ushbu dissertatsiya ishi O‘zbekiston Respublikasi fan va texnologiyalarni rivojlanishining III va IV: “Energetika, energoresurs tejamkorligi, transport, mashina va asbobsozlik, zamonaviy elektronika, mikroelektronika, fotonika va elektron asbobsozligini rivojlanishi” va “Qayta tiklanadigan energiya manbalaridan foydalanish usullarini ishlab chiqish, nanotexnologiya, fotonika va boshqa zamonaviy texnologiyalar asosida yangi texnologiyalar va qurilmalar ishlab chiqish” ustuvor yo‘nalishlari doirasida bajarildi.

Muammoning o‘rganilganlik darajasi.

Jahonda kaolin alyumosilikat minerali sifatida geologiya, materialshunoslik va yarimo‘tkazgich texnologiyalari sohasida katta ilmiy qiziqish uyg‘otib, uning kimyoviy tarkibi, kristall panjarasi va fizik-kimyoviy xususiyatlari zamonaviy eksperimental hamda nazariy yondashuvlar asosida tadqiq etilmoqda. Dewi R, M. Ivanović, Alian Wang larning ilmiy adabiyotlarda kaolinning tarkibini aniqlashda rentgen difraksiyasi (XRD), skanerlovchi elektron mikroskopiya (SEM), rentgen fotoelektron spektroskopiya (XPS), Fourier infraqizil spektroskopiya (FTIR), Raman spektroskopiyasi va boshqa metodlar keng qo‘llanilgan. Ushbu tadqiqotlar natijasida kaolinning kristall fazalari, morfologiyasi, komponentlari, termik qayta ishlash natijasida yuzaga keladigan faza o‘zgarishlari haqida ma’lumotlar olingan. Hozirgi kunda kaolinning yarimo‘tkazgich tarkibiga oid xossalari va undan olingan

² O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining Farmoni “2022 — 2026-yillarga mo‘ljallangan Yangi O‘zbekistonning taraqqiyot strategiyasi to‘g‘risida”, 28.01.2022 yildagi PF-60-son

³ O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining Qarori, “2023-yilda qayta tiklanuvchi energiya manbalarini va energiya tejoyvchi texnologiyalarni joriy etishni jadallashtirish chora-tadbirlari to‘g‘risida”, 16.02.2023 yildagi PQ-57-son

⁴ O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining Qarori “Qayta tiklanuvchi energiya manbalari qurilmalarini ishlab chiqaruvchilar va ularni ekspluatatsiya qiluvchilarni qo‘llab-quvvatlash”, 08.01.2024 yildagi PQ-13-son

⁵ Vazirlar Mahkamasining qarori “Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy universiteti huzurida Nazariy fizika institutini tashkil etish to‘g‘risida”, 17.12.2025 yildagi 795-sonli

yarimo'tkazgich mahsulotlarning elektron xususiyatlari bo'yicha ham tadqiqotlar olib borilmoqda. Kaolin asosida tayyorlangan materiallarning adsorbsiya, katalitik va elektron o'tkazuvchanlik xossalari, shuningdek, gaz sezgich sifatida qo'llanish imkoniyatlari ko'plab xorijiy tadqiqotlarda yoritilgan. Nazariy yo'nalishda esa kaolinning elektron tuzilishi va kimyoviy faol xossalarini o'rganishda zichlik funksional nazariyasi (DFT) hisoblashlari muhim o'rin tutadi. Layla Shafei, Andrea Zen, Fei Fang, Jessica E lar tominidan DFT yordamida kaolinning panjara barqarorligi, elektron zichlik taqsimoti, valentlik va o'tkazuvchanlik zonalari oralig'idagi energiya bo'shlig'i, shuningdek, turli-xil molekularining adsorbsiyasi o'rganilgan. Bu esa kaolinning nafaqat an'anaviy sorbent yoki keramika materiali sifatida, balki fotokataliz, gaz sezgichlar va ekologik monitoring qurilmalarida ham qo'llanish istiqbollari ochib beradi.

Respublikamizda Matchonov Sh. K, Alexander Yu Sidorenko, Baxauatdin Kalbaev tomonlaridan olib borilgan tadqiqotlarda asosan kaolinning sanoat xomashyosi sifatidagi qo'llanilishi o'rganilgan. Hozirgi paytda jahonda va respublikamizda kaolin hamda uning tarkibidagi komponentlar bo'yicha XRD, FTIR, Raman, XPS, SEM va XRF kabi eksperimental spektroskopik va morfologik usullarni birgalikda qo'llash orqali to'liq tizimli tahlil olib borilgan ilmiy tadqiqotlar mavjud emas. Bundan tashqari, olingan eksperimental natijalar asosida DFT ga asoslangan VASP ab initio hisoblashlari bilan birlashtirilgan kompleks ilmiy izlanishlar ham deyarli mavjud emas. Xususan, Orolbo'yi mintaqasiga oid kaolin xomashyosi bo'yicha bunday zamonaviy eksperimental–nazariy integratsiyalangan tadqiqotlar hozircha yetarlicha amalga oshirilmagan.

Dissertatsiya tadqiqotining dissertatsiya bajarilgan oliy ta'lim muassasasining ilmiy-tadqiqot ishlari bilan bog'liqligi.

Dissertatsiya doirasida UZB-IND-2021-88 O'zbekiston-Hindiston hamkorlikdagi "Quyosh elementlarida foydalaniladigan nanotuzilmali gidrofobik va supergidrofobik materiallarni o'rganish" hamda PQ-307 qaror asosida moliyalashtirilgan "Quyosh batareyalari uchun samarali kompozitsion shaffoflantiruvchi qoplamalar yaratish" xorijiy va drayver loyihalari amalga oshirildi.

Tadqiqotning maqsadi Orolbo'yi hududining mahalliy kaolin xomashyosi hamda u asosida ajratib olingan oksid materiallarning fazaviy-tuzilmaviy va elektron xossalarini zamonaviy eksperimental va nazariy hisoblash usullari yordamida kompleks tadqiq etish orqali, ulardan zamonaviy sensor va mikroelektronika qurilmalari uchun arzon hamda muqobil yarimo'tkazgich material sifatida foydalanishning ilmiy-amaliy asoslarini yaratishdan iborat.

Tadqiqotning vazifalari:

Orolbo'yi hududi mahalliy kaolin xomashyosidan maqsadli yarimo'tkazgich va oksid materiallarni (SiO_2 , Al_2O_3) ajratib olishning texnologik bosqichlarini ishlab chiqish;

ajratib olingan materiallarning sirt morfologiyasi, fazaviy-strukturaviy xususiyatlari, miqdoriy elementar tarkibi hamda sirt qatlamidagi kimyoviy bog'lanishlar holatini kompleks tadqiq etish;

yarimoʻtkazgich va oksid materiallar sirtlarining nazariy modellarini yaratish hamda ularning parametrlarini birinchi prinsiplar (ab initio) yordamida strukturaviy optimallashtirish;

kaolin, TiO_2 , Al_2O_3 va SiO_2 materiallariga oʻtish metallarini (Fe, Zn, Cu, Cr) kiritish orqali hosil boʻladigan yangi elektron xususiyatlar va energetik sathlarning oʻzgarish mexanizmlarini nazariy aniqlash;

yarimoʻtkazgich va oksid materiallar asosida hosil qilingan geterostrukturalar chegaraviy sohasidagi zaryadlar taqsimoti hamda kimyoviy bogʻlanishlarning xususiyatlarini modellashtirish;

tadqiq etilayotgan geterostrukturali sirtlarning turli gazlar bilan oʻzaro taʼsirlashuv (adsorbsiya) mexanizmlarini hisoblash va ularning sensorlik xususiyatlarini ilmiy asoslash.

Tadqiqotning obyekti Orol boʻyi hududidan olingan kaolin va uning tarkibidagi yarimoʻtkazgich va boshqa materiallar.

Tadqiqotning predmeti Kaolinning kimyoviy tarkibi, kristall tuzilishi, morfologiyasi hamda uning komponentlarini zamonaviy eksperimental XRD, SEM, XPS, FTIR, Raman, XRF qurilmalar yordamida aniqlash, shuningdek, oʻrganilgan tarkib asosida zichlik funksional nazariyasi (DFT) hisoblashlarini VASP dasturida bajarish.

Tadqiqotning usullari. Tadqiqotlarni amalga oshirishda skanerlovchi elektron mikroskopiya (SEM), rentgen nurlari difraksiyasi (XRD), rentgen nurlari flouresens spektroskopiyasi (XPS), infraqizil nurlar spektroskopiyasi (IR), Raman, fotoelektron spektroskopiya, zichlik funksional nazariyasi (DFT) usullari qoʻllanildi.

Tadqiqotning ilmiy yangiligi quyidagilardan iborat:

ilk bor Orolboʻyi hududi kaolini va metakaolinining fazaviy-tuzilmaviy xususiyatlari asosida ularning qatlamli morfologiyasi hamda kristall panjarasidagi Al–O–Si, Si–O va Al–OH kovalent-ion bogʻlanishlarining modda sirtidagi fizik-kimyoviy jarayonlarga taʼsir mexanizmi ochib berilgan;

ilk bor SEM morfologik tahlillari asosida kaolin namunasining tartiblangan qatlamli tuzilishga ega ekanligi hamda metakaolinda plastinkasimon tuzilmaviy xususiyatlar mavjudligi aniqlangan;

ilk bor oʻtish metallari (Fe, Zn, Cu, Cr) kiritilgan kaolin, SiO_2 , Al_2O_3 va TiO_2 materiallarida taqiqlangan zonaning oʻzgarishi hamda qoʻshimcha yarimoʻtkazgich xususiyatli energetik sathlar shakllanishining fizik mexanizmlari asoslangan;

ilk bor Si, Al_2O_3 , TiO_2 va SiO_2 materiallaridan tashkil topgan geterostrukturalar chegaralarida Si–O–Si, Si–O–Ti hamda Si–O–Al interfeys bogʻlanishlarining hosil boʻlish qonuniyatlari va interfeys hududidagi kislorod atomlari boʻylab zaryadlar (Bader zaryadlari) taqsimlanishining koʻchish mexanizmlari aniqlangan;

ilk bor geterostrukturali sirtlarda gaz molekulalarining oʻzaro taʼsirlashuv modellari asosida Si va SiO_2 sirtlarining NO_2 hamda SO_2 gazlariga nisbatan yuqori adsorbsion faollik va selektivlik xususiyatlarini namoyon etishi isbotlangan;

Tadqiqotning amaliy natijalari quyidagilardan iborat:

Orolboʻyi hududidagi mahalliy kaolin xomashyosidan kremniy olinish jarayonida uzviy qoʻllaniladigan sof SiO_2 va Al_2O_3 moddalarini ajratib olishning

samarali va tejamkor texnologiyasi ishlab chiqilgan hamda ularni sanoat miqyosida qo'llash imkoniyati yaratilgan;

kaolin va uning komponentlarining mayda dispersli, plastinkasimon hamda qatlamli morfologik tuzilishidan maqsadli foydalangan holda, ularni atrof-muhitdagi gazlar (NO_2 , SO_2 va boshqalar) tarkibini aniqlovchi yarimo'tkazgichli datchiklarning (sensorlarning) faol ishchi komponenti sifatida qo'llash imkoniyati amaliy jihatdan asoslangan;

kaolin va oksidli materiallarga (SiO_2 , Al_2O_3 , TiO_2) o'tish metallarini (Fe, Zn, Cu, Cr) kiritish orqali boshqariladigan muayyan energetik sathlarni (mos ravishda 2.8 eV, 0.839 eV, 1.52 eV va 1.33 eV) hosil qilish usuli ishlab chiqilgan bo'lib, bu ulardan arzon muqobil yarimo'tkazgichlar sifatida hamda zamonaviy mikroelektronika qurilmalarining sezgirligini oshiruvchi qatlam sifatida foydalanish imkonini yaratgan.

Tadqiqot natijalarining ishonchliligi. Olingan natijalarning ishonchliligi yuqori aniqlikka ega bo'lgan va jahon amaliyotida faol qo'llaniluvchi qurilmalar SEM, XRD, XPS, XRF, FTIR, Raman spektrometri va DFT bazasida mavjud bo'lgan VASP dasturi yordamida bajarilganligi bilan asoslanadi.

Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati.

Tadqiqot natijalarining ilmiy ahamiyati Orol bo'yi hududidan olingan yarimo'tkazgich tarkibli kaolin materialining tarkibini zamonaviy spektroskopik, tahlil va morfologik qurilmalar bilan ilk bor kompleks o'rganilganligi va ular asosida zichlik funksional nazariyasi (DFT) hisoblashlarini VASP yordamida sirtlarning gaz molekulari bilan ta'sirlashuvi, materiallar tarkibiga kirishma kiritish orqali elektron tuzilishdagi o'zgarishlar hamda geterastruktura chegarasida lokallashgan elektron holatlar va zaryad ko'chishini hisoblanganligi bilan izohlanadi.

Tadqiqot natijalarining amaliy ahamiyati mahalliy xomashyo kaolindan Al_2O_3 va SiO_2 larni ajratib olishing tejamkor usuli ishlab chiqilganligi, nazariy hisoblashlarda olingan Si, Al_2O_3 , SiO_2 , TiO_2 sirtlarining gazlar bilan ta'sirlashuvi, Si/ Al_2O_3 , Si/ SiO_2 , Si/ TiO_2 chegara sohalaridagi zaryad almashinuvi, Al_2O_3 , SiO_2 , TiO_2 larga mos ravishda Cu, Zn, Cr larni kiritilishi, yarimo'tkazgich, sensorlar, elektronika sohaları uchun tavsiyalar ishlab chiqilgani bilan izohlanadi.

Tadqiqot natijalarining amaliyotga joriy qilinishi. Orol bo'yi hududidan olingan kaolin materialining tarkibini nazariy va eksperimental o'rganish bo'yicha olingan ilmiy-amaliy natijalar asosida:

Titan oksid sirtining H_2O va SO_2 gazlar bilan o'zaro ta'siridagi mos ravishda 0.8eV hamda 0.27eV adsorbsiya energiyasining shakllanishiga oid natijalar Buyuk Britaniyaning Ekseter universiteti tomonidan 2023–2025 yillarda amalga oshirilgan 101087367-sonli "Antibakterial aqlli qoplamalar" xalqaro tadqiqot loyihasiga joriy qilingan (Ekseter universitetining 2025-yil 26-noyabrdagi 10-12-00-son ma'lumotnomasi). Natijada, titan oksid sirtlarida H_2O va SO_2 gaz molekularining yuqori adsorbsiyalanish xususiyatidan foydalanib, antibakterial qoplamalarda zararli gazlarni samarali ushlab qolish va ularning atrof-muhitga ta'sirini kamaytirishga erishilgan.

Metakaolinning spektroskopik tahlillari asosida Si2p spektrida 103.28 eV energiyali Si-O kimyoviy bog'lanishlarga oid natijalar Xitoyning Sichuan universiteti

va sanoat korxonalari hamkorligida bajarilgan 23H0521-raqamli “Materialshunoslikda kompozit materiallar nuqsonlarini xarakterlash va yuza nuqsonlarini modellashtirish” xalqaro tadqiqot loyihasida amaliyotga qo‘llanilgan (Sichuan universitetining 2025-yil 10-noyabrdagi 2025-11-son ma‘lumotnomasi). Natijada, kompozit materiallarning chegara sohasida hosil bo‘ladigan nuqsonlarni shakllantiruvchi elementlarni modellashtirish aniqligini hamda sirt yuza jarayonlarini bashorat qilish samaradorligini oshirish imkonini bergan;

SiO₂ ga rux (Zn) atomlarini kiritish orqali taqiqlangan zonani qisqartirish va 0.839 eV energiyaga ega infraqizil sohada sezgir energetik sath hosil qilish texnologiyasi Toshkent davlat texnika universitetida bajarilgan FL-8824063221-sonli “Getterlovchi kirishma atomlari bilan legirlangan kremniyli fotoelektrik quyosh energiyasi o‘zgartirgichlarining radiatsiyaga bardoshlilikini tadqiq qilish” mavzusidagi fundamental loyihaga joriy etilgan (O‘zbekiston Respublikasi Oliy ta‘lim, fan va innovatsiyalar vazirligining 2025-yil 16-dekabrdagi 04-22-2097-son ma‘lumotnomasi). Natijada, qurilmalarning infraqizil nurlanish sharoitidagi ish ko‘rsatkichlarini hamda fotoelektrik o‘zgartirgichlarning radiatsiyaga bardoshlilik samaradorligini sezilarli darajada oshirishga erishilgan.

Tadqiqot natijalarining aprobatsiyasi. Dissertatsiya ishi natijalari 10 ta xalqaro va 13 ta respublika miqyosidagi ilmiy va amaliy anjumanlarda muhokamadan o‘tkazilgan.

Tadqiqot natijalarining e‘lon qilinganligi. Dissertatsiya mavzusi bo‘yicha jami 23 ta ilmiy ish chop etilgan, shulardan, O‘zbekiston Respublikasi Oliy attestatsiya komissiyasining dissertatsiyalar asosiy ilmiy natijalarni chop etish tavsiya etilgan ilmiy nashrlarda 3 ta maqola (Scopus bazasida indeksatsiyalangan jurnallarda), jumladan, 7 tasi respublikada indeksatsiyalangan (OAK) jurnallarda nashr etilgan.

Intellektual mulk agentligi tomonidan 1 ta foydali model uchun patent olingan.

Dissertatsiyaning hajmi va tuzilishi. Dissertatsiyaning tarkibi kirish, to‘rtta bob, umumiy xulosalar, foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxati va ilovalardan iborat. Dissertatsiyaning hajmi 110 bet bo‘lib, unda 6 ta jadval 57 ta rasm va grafiklar keltirilgan.

DISSERTATSIYANING ASOSIY MAZMUNI

Dissertatsiyaning kirish qismida tanlangan mavzuning dolzarbligi, muammoning o'rganilganlik darajasi, tadqiqotni respublikada fan va texnologiya rivojlanishining ustuvor yo'nalishi bilan bog'liqligi, dissertatsiya ishining maqsadi va vazifasi, olingan natijalarning ilmiy yangligi, ilmiy va amaliy ahamiyati, ish natijasining joriy qilinganligi va aprobsiya hamda dissertatsiya hajmi va tuzilishi haqida qisqacha ma'lumotlar keltirilgan.

Dissertatsiyaning "**Adabiyotlar tahlili**" deb nomlangan I bobi ishning qisqacha adabiyotlar tahliliga bag'ishlangan bo'lib; unda kaolinning yarimo'tkazgich sanoatida qo'llaniladigan material sifatida o'rganilishi, turli hududlardagi kaolin zaxiralari va ularning mineralogik tarkibi, kaolinni zamonaviy usullarda tahlil qilish va ular asosida nazariy hisoblashlar bajarilishi ko'rib chiqilgan.

Bobning oxirida adabiyotlar tahlili yuzasidan olingan xulosalar, dissertatsiya ishining maqsadi va vazifalari keltirilgan.

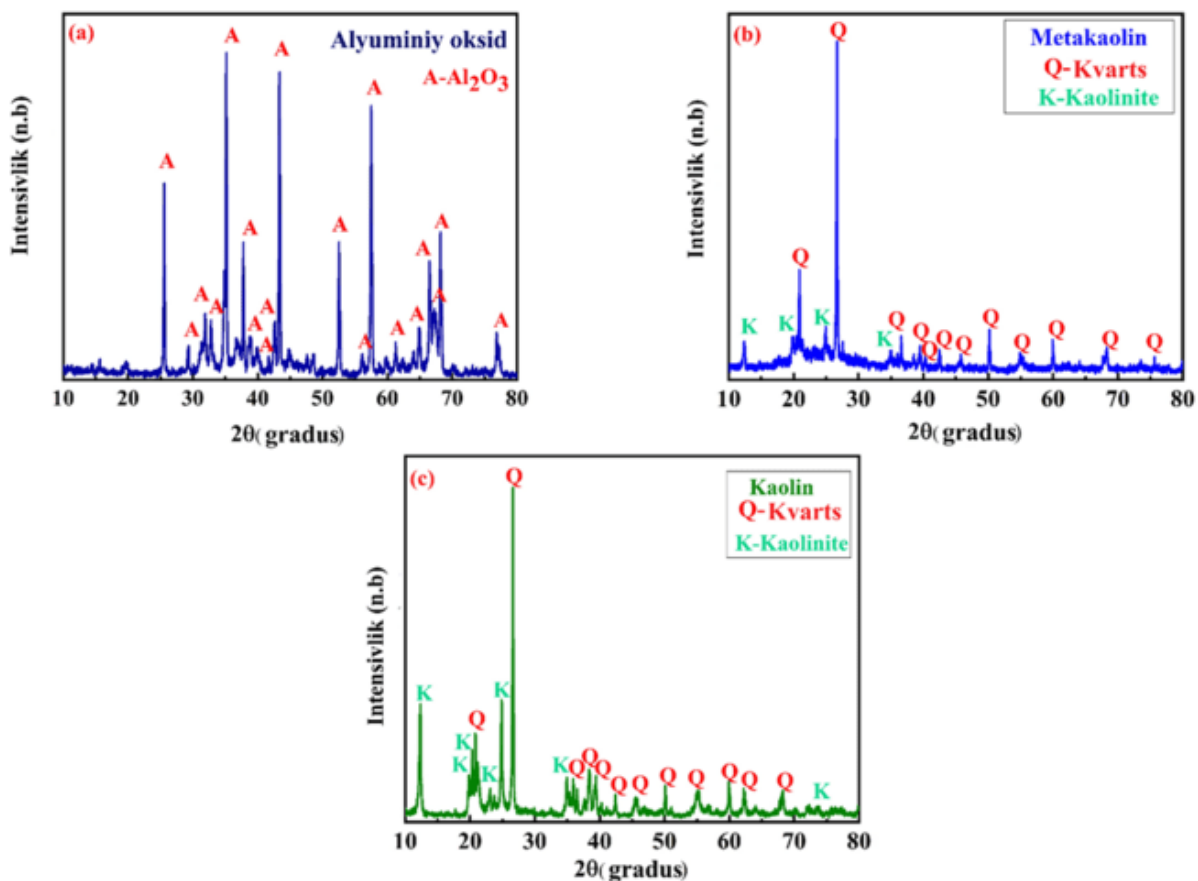
Dissertatsiyaning "**Yarimo'tkazgich tarkibli kaolin namunalarini tahlil qilish va ular asosidagi nazariy hisoblash usullari**" nomli II bobida yarimo'tkazgich tarkibli kaolin tarkibidan komponentalarni ajratib olish bo'yicha arzon va tejamkor usuli bayon qilingan. Ajratib olingan komponentalarining tarkibni tadqiq qilishda foydalanilgan eksperimental XRD, XRF, SEM, Raman, FTIR, XPS usullarga asoslangan qurilmalar haqida ma'lumot keltirilgan. Shuningdek, eksperimental natijalar asosida yarimo'tkazgich tarkibli kaolin va tarkibidagi elementlarning elektron xususiyatlari DFT asosidagi VASP Ab initio dasturi yordamida hisoblash usuli bayon qilingan.

Dissertatsiyaning "**Yarimo'tkazgich tarkibli kaolin materialini spektroskopik va morfologik tahlil natijalari**" nomli III bobida yarimo'tkazgich tarkibli kaolin hamda uning qayta ishlagan minerallarining kristall struktura fazalari, sirt elementlarining kimyoviy holatlari, kimyoviy bog'larga to'g'ri keluvchi funktsional guruhlar, elementar tarkib, tebranish bog'lanishlari, yuzaning morfologik tasvirlari XRD, XPS, FTIR, XRF, Raman, SEM qurilmalari yordamida o'rganish natijalari keltirildi.

Kaolin va uni tarkibiy komponentlari rentgen difraksiya tahlili yordamida tahlil qilindi. Unga ko'ra mineral alyuminiy oksidning yuqori intensivlikli diffraksiya cho'qqi pozitsiyalari $2\theta = 25.6^\circ, 35.18^\circ, 43.36^\circ, 57.52^\circ$ larda va zaif intensivlik cho'qqilari $37.8^\circ, 52.56^\circ, 66.48^\circ, 68.18^\circ$ da paydo bo'lishi kuzatildi. Bu cho'qqilar (012), (104), (113), (116), (110), (024), (214) va (300) kristallografik tekisliklarga mos kelishi topildi. Elementar panjara parametrlari $a = b = 4.7589 \text{ \AA}$ va $c = 12.9919 \text{ \AA}$ mos ravishda rombedral $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ ning kristalli tuzilishiga mos keldi(1a-rasm).

Metakaolin va kaolin uchun XRD spektrlari orasidagi farq juda kichik. Metakaolin va kaolin rentgen nurlari difraksiyasi kaolinit va α -kvars fazalarining mavjudligini ko'rsatadi. Metakaolin namunasida $\sim 26,6^\circ$ da yuzaga keladigan dominant cho'qqi kvarts kristalli silikaga to'g'ri keldi. Shu sababli, ushbu tadqiqot shuni ko'rsatadiki, alyuminiy oksididan tashqari barcha mineral namunalarda yuqori strukturaviy barqarorlikka ega. Kristallografik yo'nalishlarning (100) va (011)

tekisliklariga mos kelgan $\sim 20,9^\circ$ va $\sim 26,6^\circ$ dagi diffraksiya cho‘qqilari kvarts mineralining dominantligini ko‘rsatadi.



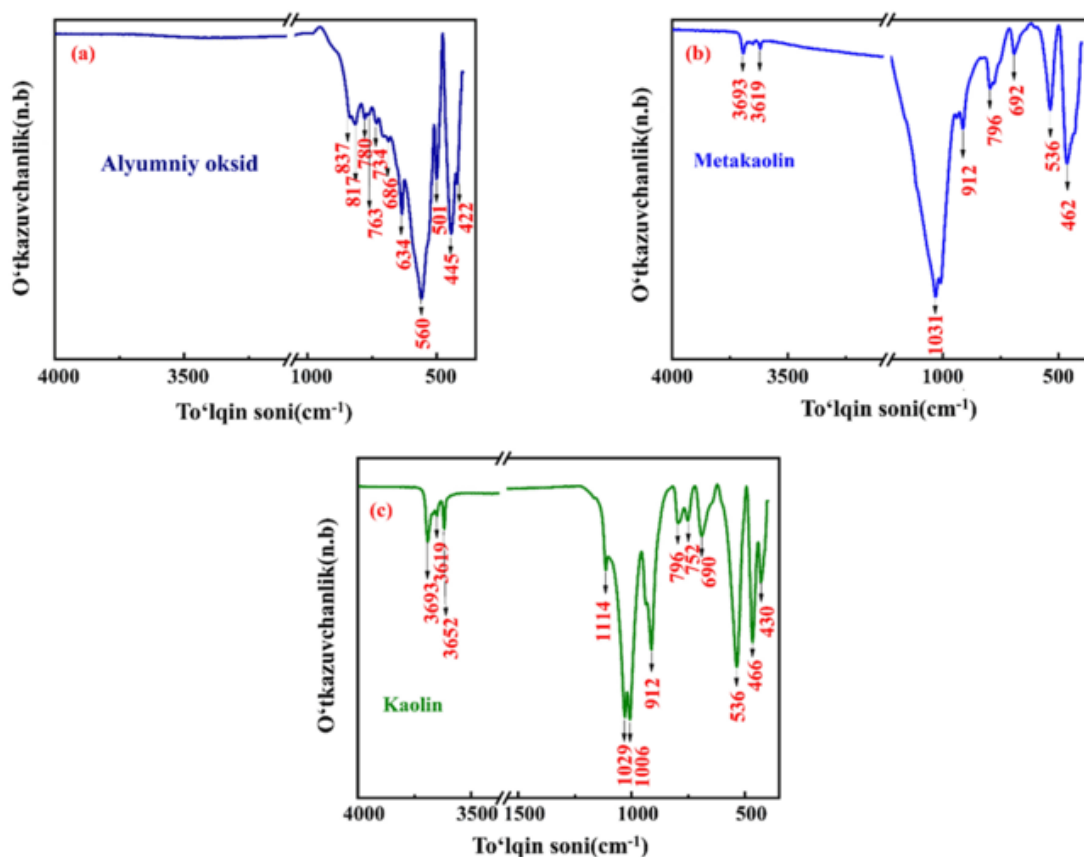
1-rasm. Namunalarning rentgen nurlari difraksiyasi. (a) alyuminiy oksidi, (b) metakaolin, (c) kaolin.

Bragg burchagi cho‘qqilari 12.3° , 19.6° , 24.9° va 34.8° lar (001), (020), (002) va $(2\bar{0}1)$ ning kaolinit difraksiya tekisliklariga to‘g‘ri keladi. Kvarts va kaolinitdan tashkil topgan kaolin namunasining XRD spektrini tahlil qilganida o‘ziga xos cho‘qqilar paydo bo‘ldi. Ayniqsa, mineral kvartsning mos ravishda (100) va (011) tekisliklariga mos keladigan 20.8° va 26.6° da cho‘qqilar namoyon bo‘ldi. Kaolinit uchun esa 12.3° , 19.6° , 20.4° , 23.1° , 24.9° va 34.8° cho‘qqilar (001), (020), (110), $(021\bar{1})$, (002) va $(2\bar{0}1)$ kristallografik orientatsiyalarida namoyon bo‘ldi (1b,c-rasm).

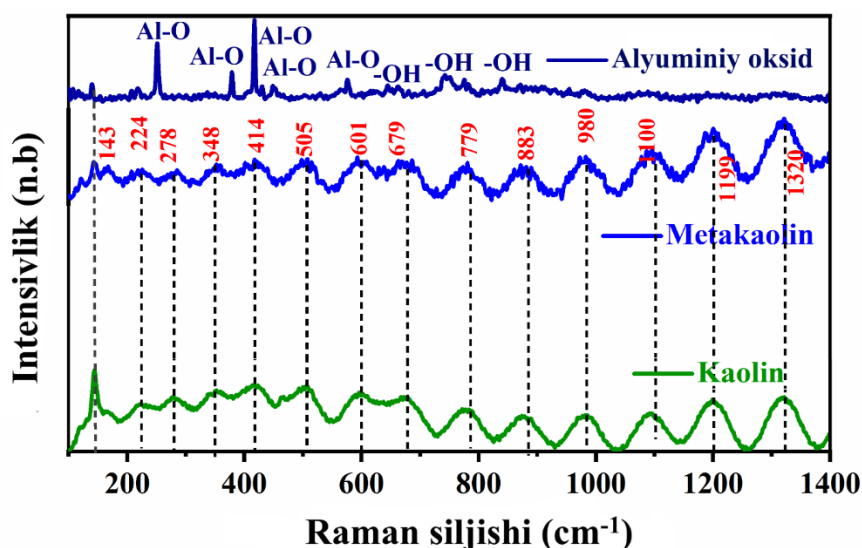
Kaolin va alyuminiy oksid va metakaolin namunalarning infraqizil spektrlari va ularga mos keladigan tebranishlarni turli-xil kimyoviy bog‘lanishlar anqilandi. Alyuminiy oksid mineralining yutilish spektrini ko‘rganimizda $422\text{--}445\text{ cm}^{-1}$ oralig‘ida oktaedral sohalarga mos keladigan Al-O kimyoviy bog‘lanishining egilish rejimi cho‘qqilari aniqlandi. Metakaolin va kaolinlarda to‘lqin sonining 3693 cm^{-1} qiymatida -OH gidroksil guruhlarining cho‘zilish tebranishiga bilan bog‘liq fazalarni ko‘rsatdi. O‘z navbatida yutilish darajasi 3619 cm^{-1} dagi cho‘qqilar barcha tabiiy minerallardan aniqlangan OH ichki gidroksil guruhlarining simmetrik cho‘zilish tebranishlariga to‘g‘ri keldi. To‘lqin sonining $1006\text{--}1010\text{ cm}^{-1}$ qiymatida aniqlangan yuqori yutilish Si-O ning cho‘zilma tebranishlari bilan bog‘liq bo‘lgan cho‘qqilarda kvarts izlari aniqlangan. Al-OH kimyoviy bog‘iga

to'g'ri kelgan egilish deformatsiyali tebranishlar $912-914\text{ cm}^{-1}$ da qayd qilindi. Si-O ning perpendikulyar cho'zilish rejimi $752-796\text{ cm}^{-1}$ qiymatiga mos keldi. Xuddi shu turdagi yutilish cho'qqisi barcha kaolinit minerallari uchun $690-692\text{ cm}^{-1}$ da yuzaga keldi. Al-O-Si ning tebranish rejimlari $536-540\text{ cm}^{-1}$ yutilish zonalarida namoyon bo'ldi.

Keng va o'rta yutilish intensivligi cho'qqilari $430-466\text{ cm}^{-1}$ da kuzatildi. Bu Si-O-Si deformatsiyasi hamda Si-O ning egilish deformatsiya holatiga bog'liq barcha minerallarda kvarts aralashmalari mavjudligini ko'rsatadi. FTIR spektrlari aluminiy oksidning turli tarkibidagi tarkibiy qismlari ko'p miqdorda Al-O ni ko'rsatadi. Metakaolinlar va kaolindlarda esa mos ravishda Al-O va Si-O birgalikda kuzatildi(2a,b,c-rasm).



2-rasm. Namunalarning infraqizil spektrlari; (a) alyuminiy oksidi, (b) metakaolin, (c) kaolin.



3-rasm . Alyuminiy oksid, metakaolin va kaolin minerallarining Raman spektrlari

Raman spektrlari asosan gil minerallarining kristallik darajasi bilan bog‘liq hisoblanadi. Ko‘proq kristallik Raman tahlilini oson aniqlashga olib keladi. 3-rasmda gil minerallari metakaolin va kaolin spektrlarida sezilarli farqni ko‘rsatmaydi. Bundan tashqari 143 cm^{-1} cho‘qqi holatidagi intensivlik o‘zgarishi tabiiy ravishda kaolinit mineralining mavjudligini ko‘rsatadi. Bu vaqtda cho‘qqining intensivligi metakaolonga nisbatan kaolinda yuqori bo‘ladi. Aksincha, cho‘qqiga yaqin joyda metakaolindagi 143 cm^{-1} ga teng bo‘lgan yana ikkita cho‘qqi mavjud bo‘lib, ular kaolinda uchramaydi. $143\text{-}224\text{ cm}^{-1}$ da cho‘qqi pozitsiyasi AlO_6 oktaedriga mos keldi. 278 cm^{-1} da kaolinit mineralining uchburchakli O-H-O cho‘zilishi bilan bog‘liq bo‘ldi. $348\text{-}601\text{ cm}^{-1}$ da cho‘qqisining holati SiO_4 oktaedriga tegishli bo‘ldi. Bu kvartsnig mavjudligidan dalolat beradi. To‘lqin sonining 679 cm^{-1} qiymatida Si-O-Al translatsiya mintaqasi kuzatiladi. $779\text{-}883\text{ cm}^{-1}$ da sodir bo‘lgan tarmoqli pozitsiyasi bir xil OH guruhining translatsiya va ajralish mintaqasiga tegishli. $980\text{-}1100\text{ cm}^{-1}$ oralig‘ida kuzatilgan keng cho‘qqi perpendikulyar rejimda Si-O cho‘zilgan tebranishlarga to‘g‘ri keldi. Yuqori intensiv keng cho‘qqi $1199\text{-}1320\text{ cm}^{-1}$ oralig‘ida aniq kuzatiladi. Bu Si-O tebranish rejimi bo‘lishi mos keldi. Yuqoridagi kuzatishlarga ko‘ra, tabiiy kaolin va metakaolin gil minerallarida kaolinit fazalari va kvarts izlari ustun ekanligi aniqlandi.

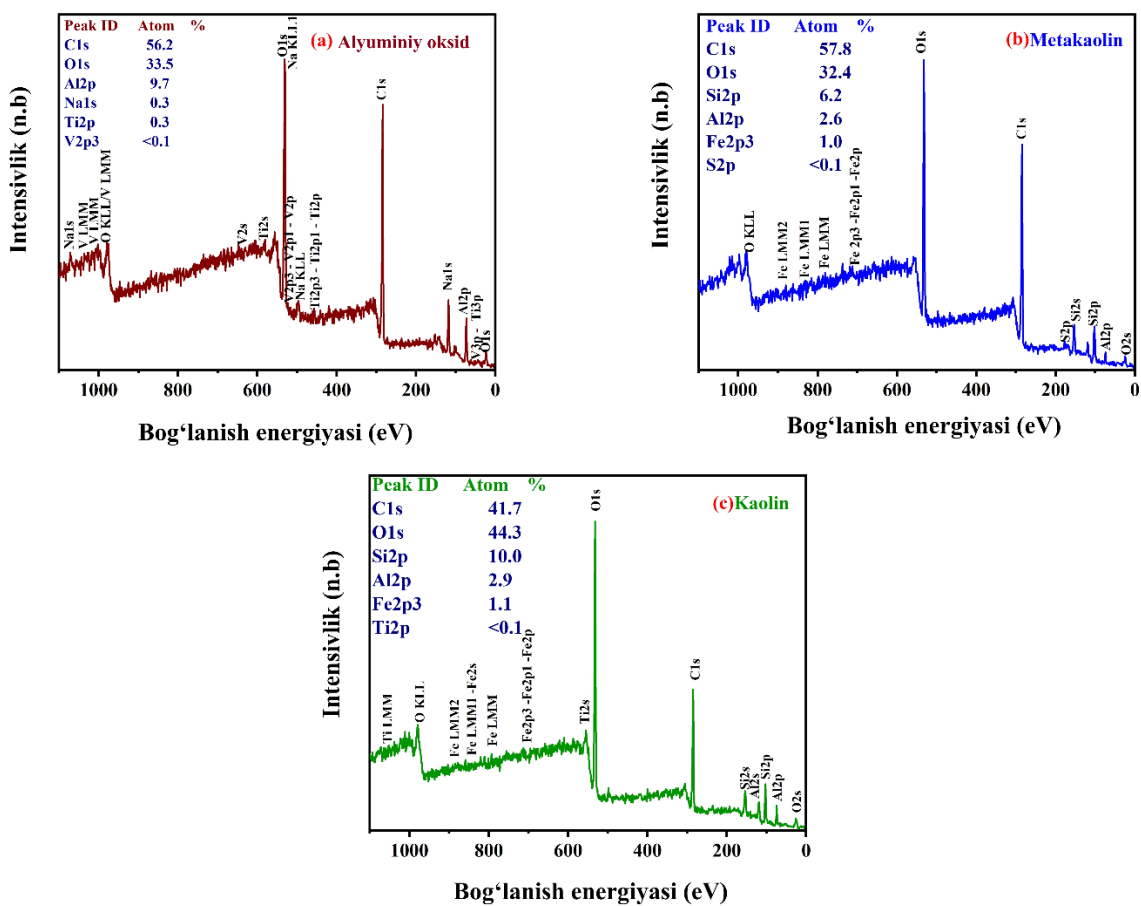
Infraqizil spektrda kuzatilgan yuqori yutilish cho‘qqilari, asosan, 1-jadvalda ko‘rsatilgan ushbu elementlarning o‘zaro ta’siri bilan bog‘liq. Al_2O_3 ning asosiy tarkibi barcha minerallarda mavjud, ammo dominant yuqori tarkib darajasi korund mineralida mavjud bo‘ldi. Bu XRD va FTIR spektrlari bilan tasdiqlangan. Aluminiy oksid mineralining tarkibida kam miqdordagi Na, V, Fe, Ca va Ti kabi boshqa elementlar ham aniqlandi. Kaolinning asosiy tarkibi kremniy oksidi va aluminiy oksididan iborat bo‘lib, unda oz miqdorda Na, Fe va Ti bor. Buni XRF miqdoriy tahlili ham tasdiqladi. Metakaolin mineralida Fe, Ti, Al, Si va O ga nisbatan oz miqdorda mavjudligi kuzatildi. Shu sababli, ustun faza natijasida Kremniy dioksidi (SiO_2) va alyuminiy oksidi (Al_2O_3) birikmalariga boshqa elementar aralashmalar, ya’ni Na, V, Fe, Ti, Mg, Ca, S va boshqalar qo‘shilishi tasdiqlanadi. Bu ham FTIR

o‘lchovlari bilan bajarilgan funktsional tahlilga mos keladi. Shunday qilib, silikat va aluminat gil minerallarning ikkita asosiy komponentasi bo‘lib xizmat qiladi. Ular tarkibining ko‘p qismini tashkil qiladi.

1-jadval. XRF tahlilida olingan minerallarning tarkibi

Tarkibi	Aluminiy oksid Miqdoriy ulushi %	Metakaolin Miqdoriy ulushi %	Kaolin Miqdoriy ulushi %	Spektroskopik chiziq
O	51.3415	56.3899	58.5817	O Ka
Si	-	24.8916	24.4941	Si Ka
Al	47.5049	15.634	15.0749	Al Ka
Na	0.5419	0.1900	0.1425	Na Ka
V	0.2680	-	-	V Ka
Fe	0.0349	0.9156	0.8631	Fe Ka
Ti	0.079	0.3769	0.3834	Ti Ka
Cl	0.0774	-	0.0777	Cl Ka
Mg	-	0.1699	0.1577	Mg Ka
Ca	0.0795	0.0758	0.1231	Ca Ka
S	0.0242	1.3107	0.0804	S Ka
P	-	-	-	P Ka
Cr	-	0.0268	-	Cr Ka
Zr	-	0.0188	0.0215	Zr Ka

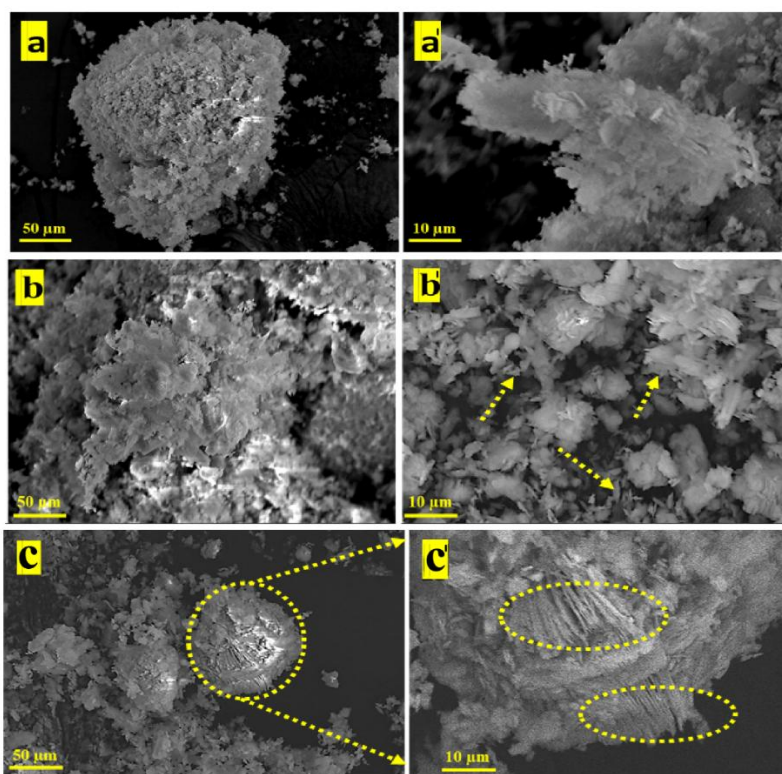
Rentgen fotoelektron spektroskopiya qurilmasi yordamida aluminiy oksid, metakaolin va kaolin kabi qayta ishlangan minerallarining oksidlanish darajasini o‘rganish uchun amalga oshiriladi. Yuqorida qayd etilgan minerallarning kuzatuv spektrlari 4-rasmda, ularning tegishli atom foiz qiymatlari esa 2-jadvalda keltirilgan. Bu namunalar yuzasida uglerod mavjudligini atmosfera ta’sirining natijasi ekanligini aniq ko‘rsatadi. Alyuminiy oksidi va qayta ishlangan kaolinit minerallarining XPS tadqiqoti C1s, Al2p, Si2p va O1s cho‘qqilarining holati hamda boshqa aralashmalar Na, V, Ti va Fe kabi atomar tarkibi bilan ajralib turadi. Bog‘lanish energiyasining 73, 102, 282 va 531 eV cho‘qqilari valentlik zonasi o‘tishlarini ifodalovchi Al2p, Si2p, C1s va O1s larga tegishli ekanligi aniqlandi [4-(a-d) rasm].



4-rasm. Namunalarning XPS tadqiqot spektrlari; (a) Aluminiy oksid (b) Metakaolin, (c) Kaolin.

2-jadval. C1s, O1s, Al2p, Si2p va boshqa aralashmalarning atom % ini ko'rsatuvchi minerallarning XPS tadqiqotlari.

Mineral	C1s (%)	O1s (%)	Al2p (%)	Si2p (%)	Boshqa elementlar
Aluminiy oksid	56.2	33.5	9.7	-	0.3 (Na)
Metakaolin	57.8	32.4	2.6	6.2	1.0 (Fe)
Kaolin	41.7	44.3	2.9	10.0	1.1 (Fe)



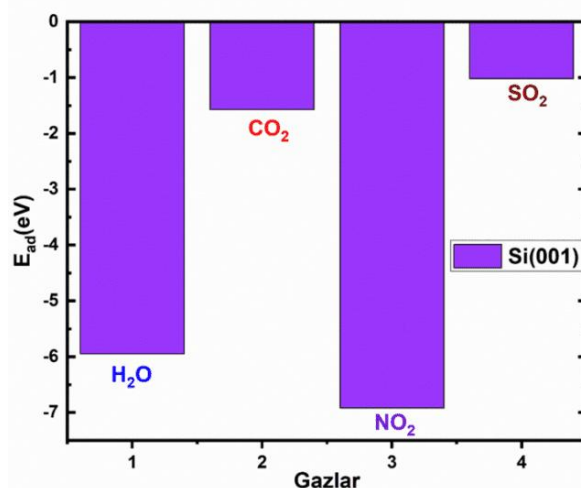
5-rasm. Namunalarning SEM tasviri. (a,a') Alyuminiy oksidi, (b,b') Metakaolin, (c,c') Kaolin.

Orol bo'yi hududidan olingan minerallarining sirt morfologiyasini o'rganish, ularning sifati va ishlatilishiga katta ta'sir ko'rsatadigan noyob xususiyatlarni ko'rsatadi [5-rasm (a,a'- c,c')]. Orol bo'yi hududidan olingan aluminiy oksidi zarralari o'rganilayotgan boshqa minerallar orasida yaxshi agregatsiyalangan, mayda o'lchamli zarrachalarga ega bo'lishi bilan ajralib turadi. Bu xususiyat XRD spektr tahlili kuzatuvlariga mos keladi [5-rasm (a,a')]. Agregatsiyaning bu shakli ko'pincha ko'plab material xususiyatlari va ishlatilishiga ta'sir qiladi. Bu esa zarrachalar hajmi va tuzilishining aluminiy oksidiga asoslangan materiallar uchun qanchalik muhimligini ta'kidlaydi. Boshqa tomondan, metakaolin minerali noyob xususiyatlarga ega. U aluminiy oksididan plastinka shaklidagi ko'rinishi va mayda yoriqlari bilan ajralib turadi [5-rasm (b,b'-c,c')].

Uning turli sharoitlarda qo'llanilishidagi xususiyatlari va xatti-harakatlari ularning strukturaviy konfiguratsiyasiga katta ta'sir ko'rsatadi. Bu xususiyatlar ularning o'ziga xos tarkibini va qayta ishlash paytida qilingan o'zgarishlarni ko'rsatadi. Tahlil qilinayotgan yana bir mineral kaolin plastinkasimon tuzilishga ega. U o'zining tartibli qatlamli strukturasi ega ekanligi bilan ajralib turadi. Ushbu qatlamlar bir-biriga buklet yoki varaqsimon teksturalar hosil qilgan holda joylashgan bo'lib, bu kaolinning o'ziga xos morfologik xususiyatini yuzaga keltiradi [5-rasm(c,c')]. XRF tahlili natijalariga ko'ra, namunadagi elementar tarkibda SiO_2 va Al_2O_3 oksidlarining yuqori miqdorda mavjudligi kaolinning qatlamli hamda tartibli tuzilishining shakllanishida asosiy ro'l o'ynaydi. Buklet shakllarining bir xilligi kaolinning aniq chegaralari bilan birgalikda teksturaning turli xil qo'llanilishlardagi ahamiyatini ta'kidlaydi. Yaxshi aniqlangan va tartibli bukletga o'xshash tuzilmalari

bilan kaolinning noyob teksturasi suv filtrlash tizimlari kabi qo‘llanilishlar uchun juda muhimdir. Bunday yaxshi tashkil qilingan geometrik tuzilma samarali filtrlash jarayonlarini osonlashtirib, tizimning nazorat darajasi va ish faoliyatini sezilarli darajada yaxshilash imkonini beradi. Keskin chegaralangan kaolin zarralari tartibli tarzda joylashtirilgan bo‘lib, ularning filtrlash samaradorligini oshiradi va minerallarining turli maqsadlar uchun qo‘llanilishini baholashda morfologiyaning ahamiyatini ta’kidlaydi.

To‘rtinchi bob “**Yarimo‘tkazgich tarkibli kaolin materialining DFT hisoblash natijalarini tahlili**” deb nomlanib, unda kaolin va uning tarkibi XRD, XPS, XRF, Raman, FTIR, SEM qurilmalarda olingan elementar tarkib bo‘yicha olingan eksperimental natijalardan nazariy hisoblashlar bajarildi. Olingan natijalarga ko‘ra kaolin va uning qayta ishlangan materiallari tarkibida Si, Al₂O₃, SiO₂, TiO₂ mavjudligi aniqlandi. Aniqlangan tarkib asosida zichlik funksional nazariyasiga asoslangan VASP Ab initio litsenzion dasturi (VASP6.5) yordamida nazariy hisoblash bajarildi. Hisoblashlar asosan Si, Al₂O₃, SiO₂, TiO₂ materiallardan sirtlar, geterostrukturalar hosil qilinib turli xil gazlar bilan ta’sirlashuvi, elektron holatlar va zaryad zichligidagi o‘zgarishlar hisoblandi. Bundan tashqari, ushbu bobda materiallarga kirishma kiritilishi natijasida elektron xususiyatlarda yuzaga kelgan o‘zgarishlar bilan bog‘liq ilmiy natijalar ham keltirilgan.

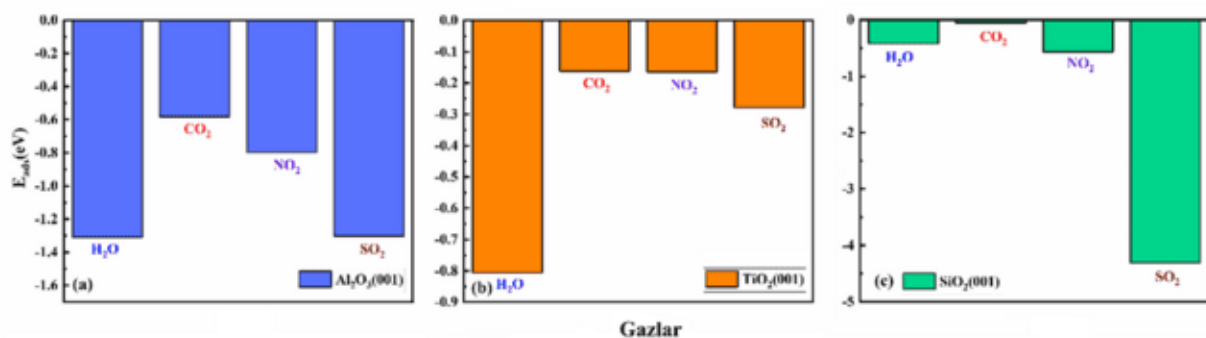


6-rasm. Gaz molekularining Si(001) yuzasida adsorbsion energiyalari.

Hisoblashlardan olingan natijaga ko‘ra NO₂ gaz molekulasini Si(001) sirti bilan yuqori ta’sirlashuv energiyasini namoyon qildi. Ta’sirlashuv energiyasining qiymatlari NO₂>H₂O>CO₂>SO₂ munosabat bo‘yicha kamayib bordi (6-rasm). Bundan ko‘rinib turibdiki eng kam ta’sirlashuv energiyasi SO₂ ga tegishli. Kremniy sirtining NO₂ va H₂O qutbli molekular uchun barqaror Si-O bog‘lanishni hosil qilish qobiliyati tufayli ta’sirlashuv energiyalari qolgan molekularga nisbatan juda katta. NO₂ molekulaning bukilgan tuzilishi va yuqori elektromanfiy kislorod atomlari mavjudligi barqaror dipol momentini hosil qiladi. Barqaror dipol momenti uning qutbli Si(001) yuzasi bilan o‘zaro ta’sirini kuchaytiradi. Suv molekulasi kuchli vodorod bog‘lash hosil qilish qobiliyati uni yuqori qutblilik namoyon qilishiga sababchi bo‘ladi. Qutblilik kremniy sirti bilan o‘zaro ta’sirlashuvni kuchaytiradi. CO₂ chiziqli qutbsiz molekula bo‘lganligi tufayli zaif Van der Waals kuchlari bilan

ta'rilashadi. Boshqalar bilan solishtirganda, SO₂ kamroq dipol momentga ega bo'lganligi sababli Si(001) bilan kamroq qulay o'zaro ta'sirlashuv energiyasiga ega. Oltinugurt atomining azotga nisbatan pastroq elektronegativligi SO₂ ning NO₂ ga nisbatan kamroq nukleofil ekanligini bildiradi. Shuning uchun u kremniy yuzasi bilan kuchsiz o'zaro ta'sirlashuvni amalga oshiradi. Azot dioksidi azot atomidagi juftlanmagan elektronlari bo'lgan yuqori reaktiv va elektron yetishmaydigan molekula hisoblanadi. Bu NO₂ ni kuchli elektrofil qiladi, bu unga Si(001) yuzasida mavjud bo'lgan elektronga boy juftlashmagan bog'lar bilan mustahkam o'zaro ta'sirni vujudga keltirish imkonini beradi.

Alyuminiy oksidi (Al₂O₃), ayniqsa uning (001) yuzasi, o'zining amfoter tabiati, yuqori kimyoviy barqarorligi va kuchli sirt qutblanishi bilan mashhur bo'lib, uni kataliz va gazni aniqlash uchun mos qiladi. H₂O, CO₂, NO₂ va SO₂ ning barcha to'rtta gaz molekulasini bu sirda adsorbsiyani namoyon etdi. H₂O vodorod bog'lanishi va xemosorbsiya orqali kuchli o'zaro ta'sir qiladi va dissotsiatsiya orqali sirt gidroksil guruhlarini hosil qiladi. Bu namlikni aniqlash va katalitik reaksiyalar uchun muhim bo'lgan sirt kislotaliligi va proton o'tkazuvchanligini oshiradi (7a-rasm). CO₂ asosan cheklangan zaryad o'tkazilishi bilan fizisorbsiyaga uchraydi. Quruq sirtlarda xemosorbsiya karbonat yoki bikarbonat hosil bo'lishi orqali sodir bo'lishi mumkin, ammo adsorbsiya umuman zaif bo'lib qoladi. NO₂ kuchli yaqinlikni namoyon etadi, molekulyar yoki dissotsiativ adsorbsiya orqali nitrit yoki nitrat turlarini hosil qiladi. Sirt nuqsonlari va gidroksil guruhlari bu o'zaro ta'sirni kuchaytiradi, bu esa Al₂O₃ ni NO₂ sezish uchun mos qiladi. SO₂ osongina xemosorblanadi, sulfid yoki sulfat turlarini hosil qiladi. Ifloslantiruvchi moddalarni olib tashlash uchun foydali bo'lsa-da, kuchli bog'lanish vaqt o'tishi bilan sirt zaharlanishiga olib kelishi mumkin. O'zaro ta'sir kuchlari molekulyar qutblanish va vodorod bog'lanishlarini hosil qilish yoki elektron uzatishda ishtirok etish qobiliyati bilan bog'liq. CO₂, qutbsiz va doimiy dipol momentiga ega bo'lmagan holda, eng zaif o'zaro ta'sirni namoyon etadi. NO₂ va SO₂, ikkalasi ham qutblangan holda, yanada kuchliroq o'zaro ta'sir qiladi, SO₂ esa yolg'iz elektron juftligi va qutblanishi tufayli ayniqsa yuqori adsorbsiya energiyasini ko'rsatadi.

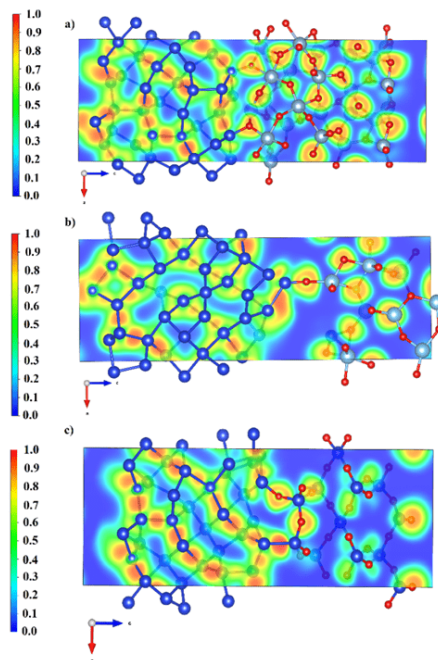


7-rasm. (a) Al₂O₃(001), (b) TiO₂(001) va (c) SiO₂(001) larning H₂O, CO₂, NO₂ va SO₂ molekullari bilan o'zaro ta'sir energiyasi.

TiO₂ ning anataz fazasi fotokataliz va atrof-muhitni barqarorlashtirishda keng qo'llaniladi. Uning (001) yuzasi mos ravishda Lyuisning kislotasi va asos joylari bo'lib xizmat qiladigan yetarlicha muvofiqlashtirilmagan Ti⁴⁺ kationlari va ko'priki kislorod

atomlarini ochib beradi. H₂O barqaror adsorbsiyaga erishgan yagona molekula edi (7b-rasm). U vodorod bog‘lanishi va qisman dissotsiatsiya orqali adsorbsiyalanadi, fotokatalitik reaksiyalarni osonlashtiradigan sirt gidroksillarini hosil qiladi. CO₂, NO₂ va SO₂ standartlashtirilgan sharoitlarda barqaror adsorbsiyaga erisha olmadi. Ularning o‘zaro ta’sir energiyalari barqaror bog‘lanish uchun zarur bo‘lgan chegaradan past edi, bu esa O bilan tugaydigan TiO₂(001) yuzasida qulay faol joylarning yo‘qligini ko‘rsatadi. Kislorodning yuqori elektromanfiyligi tufayli O bilan tugaydigan sirtning manfiy zaryadlangan tabiati adsorbsiya xatti-harakatlariga ta’sir qiladi. H₂O vodorod bog‘lanishi va qutblanish xususiyati yaxshi bo‘lgani bilan, boshqa molekular bilan yetarli o‘zaro ta’sir kuchiga yoki mos bog‘lanish konfiguratsiyalariga ega emas.

Kremniy dioksidi (SiO₂) kimyoviy jihatdan inert bo‘lsa ham sensorlar va qoplamalarda keng qo‘llaniladi. Uning sirt o‘zaro ta’siri silanol guruhlarini, Lyuisning kislotasi-asos joylari va nuqsonlar bilan boshqariladi. SO₂ SiO₂(001) yuzasida barqaror adsorbsiyalangan yagona molekula bo‘ldi (7c-rasm). Uning qutbli tabiati va sirt gidroksillari bilan vodorod bog‘lanishlarini hosil qilish qobiliyati xemosorbsiyani ta’minlaydi. H₂O, CO₂ va NO₂ standartlashtirilgan sharoitlarda adsorbsiyalanmadi, ehtimol bu o‘zaro ta’sir energiyasining yetarli emasligi yoki qulay bog‘lanish joylarining yo‘qligi bilan bog‘liq. Inertligiga qaramay, SiO₂ SO₂ uchun selektiv yaqinlikni ko‘rsatadi, bu ifloslantiruvchi moddalarni aniqlash dasturlarida funksionalizatsiya qilish potentsialini ko‘rsatadi.



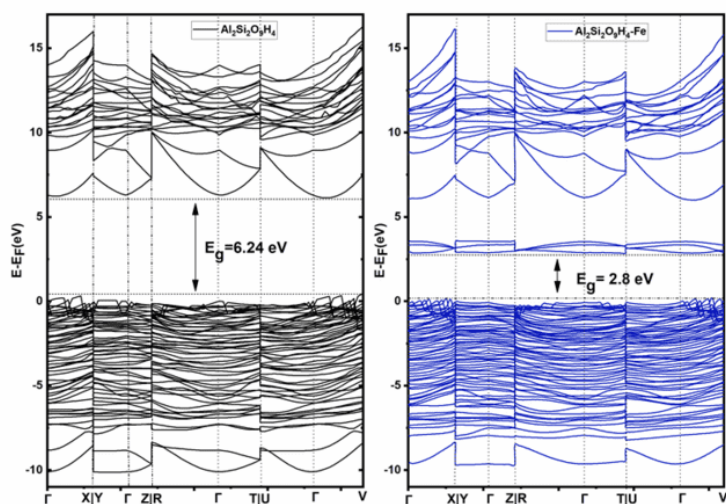
8-rasm a,b,c. Optimallashtirilgan Si(001)/Al₂O₃(001), Si(001)/TiO₂(001) va Si(001)/SiO₂(001) geterostruktura chegara yuzalari uchun elektron lokalizatsiya.

Si(001)/Al₂O₃(001), Si(001)/TiO₂(001) va Si(001)/SiO₂(001) geterostrukturalar optimallashtirgandan so‘ng, chegara mintaqasida bir nechta o‘zgarishlar yuz berdi. Xususan, Si(001)/Al₂O₃(001) interfesysining ELF tahlilida Si-O-Al bog‘lanishi paydo bo‘ldi. Elektron zichligi O atomlari atrofida to‘plangan, Si va Al esa elektronlarini yo‘qotgan. Natijada, Si va Al musbat ionlarga, kislorod esa manfiy ionga aylandi.

Bu kuchli ion bog‘lanishni aks ettiradi. Bader zaryad tahlili ham buni tasdiqlaydi. Kislorodning yuqori elektromanfiyligi elektronlarni o‘ziga jalb qilishga moyil bo‘lib, ular Al_2O_3 va TiO_2 kabi metall oksidlarini o‘z ichiga olgan bog‘lanishlarda mahalliy zaryad to‘planishi orqali ion xarakteriga olib keladi. $\text{Si}(001)/\text{Al}_2\text{O}_3(001)$ chegarasida kislorod atomlari uchun bader zaryad qiymati $-1.378e$ va $-1.23e$ bo‘lishi ortiqcha elektronlarning to‘planishini ko‘rsatadi. Kremniy yuzasidan eng katta zaryad yo‘qotilishi $\text{Si}(001)/\text{Al}_2\text{O}_3(001)$ chegarasiga mos keladi. Boshqa geterostrukturalarning chegaralarida chegaralararo bog‘lanish ham kislorod orqali sodir bo‘lgan (8a,b,c-rasm). $\text{Si}(001)/\text{TiO}_2(001)$ uchun ELFga qaralganda, Ti atrofida elektron yo‘qotilishi uning atrofida kuchli lokalizatsiyalangan elektron juftlarining yo‘qligini ko‘rsatadi.

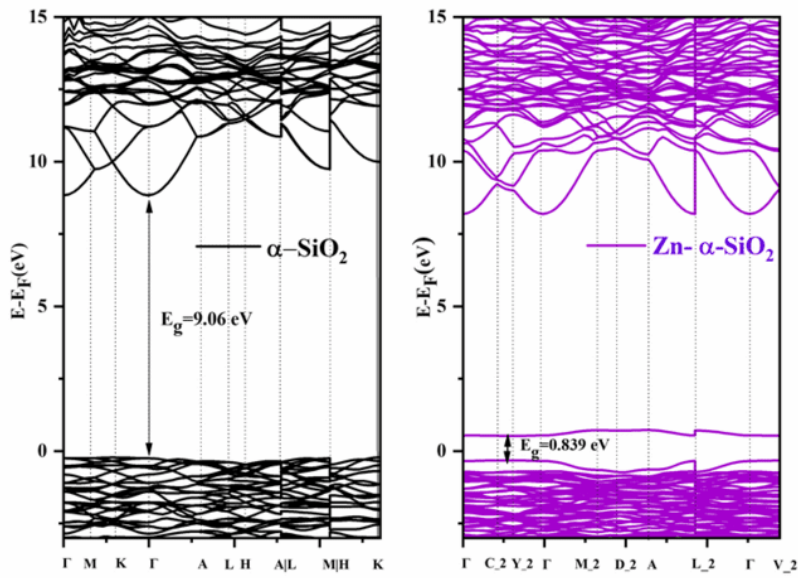
$\text{Si}(001)/\text{TiO}_2(001)$ ning bader zaryad tahlilida biz $-1.27e$ zaryadining Si–O–Ti chegaraviy bog‘lanishini hosil qiluvchi kislorod atomi sababchi ekanligini ko‘ramiz. $\text{Si}(001)/\text{Al}_2\text{O}_3(001)$ chegara yuzasidagi Al ga mos keladigan mintaqalarda ham shunga o‘xshash zaryad uzatish xususiyatlarini kuzatishimiz mumkin. $\text{Si}(001)/\text{SiO}_2(001)$ geterostrukturasida sirtlar Si–O–Si va Si–Si bog‘lanishlari orqali bog‘langan. Bu shuni ko‘rsatadiki, sirtlar chegara yuzasi mintaqasida ham ion (Si–O–Si), ham kovalent (Si–Si) tipidagi bog‘lanishlar orqali bog‘langan. $\text{Si}(001)/\text{Al}_2\text{O}_3(001)$ yuzasida bog‘lanish asosan aniq ion xarakteriga ega Si–O–Al bog‘lanishlari orqali sodir.

Zona tuzilishini Fe kiritma qilinmasdan oldin kaolinning hisoblangan taqiqlangan zona energiyasi 6.24 eV ni tashkil qildi. Temir kiritma qilingandan keyin taqiqlangan zona energiya qiymati keskin tushib ketdi. Hosil bo‘lgan taqiqlangan zona energiya qiymati 2.8 eV ga teng bo‘lib qoldi (9-rasm). Temirdagi valent elektronlar sonining ko‘pligi o‘tkazuvchanlik zonasining pastki qismida qo‘shimcha elektron sathlarni paydo bo‘lishiga sababchi bo‘ladi. Buning natijasida kichikroq energiya bilan elektronlar valent zonadan o‘tkazuvchanlik zonasiga tezda o‘tib oladi. Temir kiritilgandan keyin kaolin atomlari orasidagi masofa sezilarli oshirdi. Natijada panjara doimiysi ham oshdi. Shu tufayli qo‘shimcha ravishda taqiqlangan zona energiyasini kamayishiga sababchi bo‘ldi.

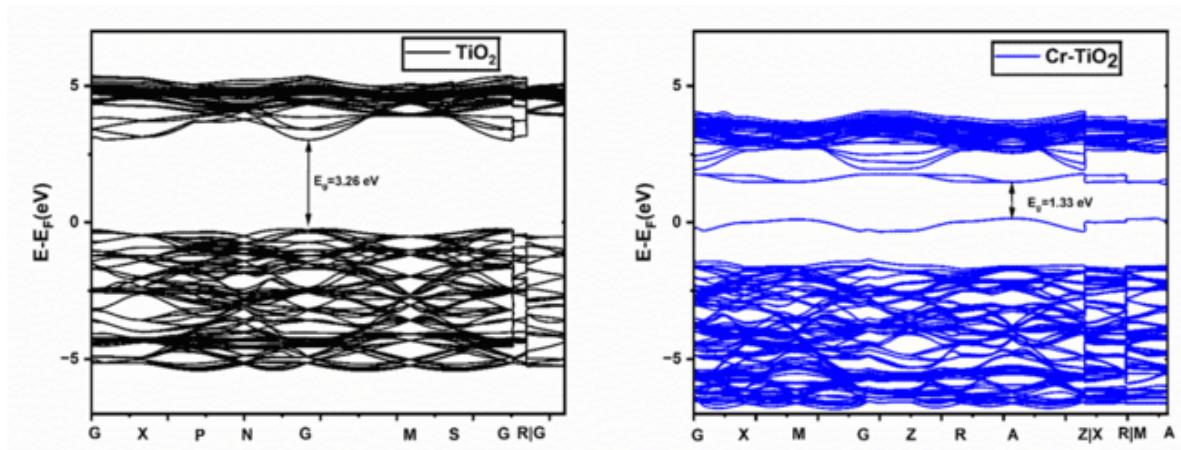


9-rasm. Kaolining Fe kiritilmasdan oldingi(a) va keyingi holatdagi(b) zona strukturasi

SiO₂ ga kremniy atomlar soniga nisbatan 8.33% Zn kirishma qilingan va qilinmagan holati uchun zona tuzulishi tahlil qilindi. Unga ko'ra sof holatdagi α-SiO₂ ni 45% Hartri-Fock (HF) aniq almashinuv ulushli HSE06 gibrid funksiyasi bilan hisoblanganda taqiqlangan zona energiyasi 9.06 eV bo'ldi. Rux kirishma qilingandan keyin taqiqlangan zona energiyasi 0.839 eV bo'ldi. Bunday kamayishni to'liq va qisman elektron holatlar zichligi tahlili ham tasdiqladi. Unga ko'ra Zn ning d valent orbitali aralashuvi tufayli O ning p orbitalini qo'shimcha sathi yuzaga keltirdi. Buning natijasida taqiqlangan sohada qo'shimcha energetik sath paydo bo'ldi (10-rasm).

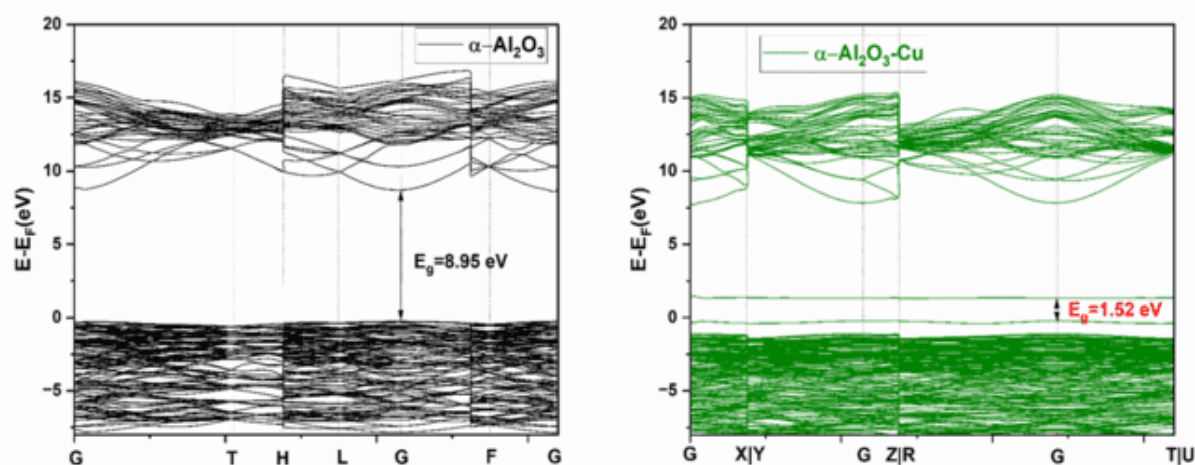


10-rasm. α-SiO₂ ga Zn kirishma qilinmagan va qilingan holati uchun bandstrukturasini



11-rasm. Anataza TiO₂ ga Cr kiritilmasdan oldin va keyingi holatlar uchun zona tuzulishi.

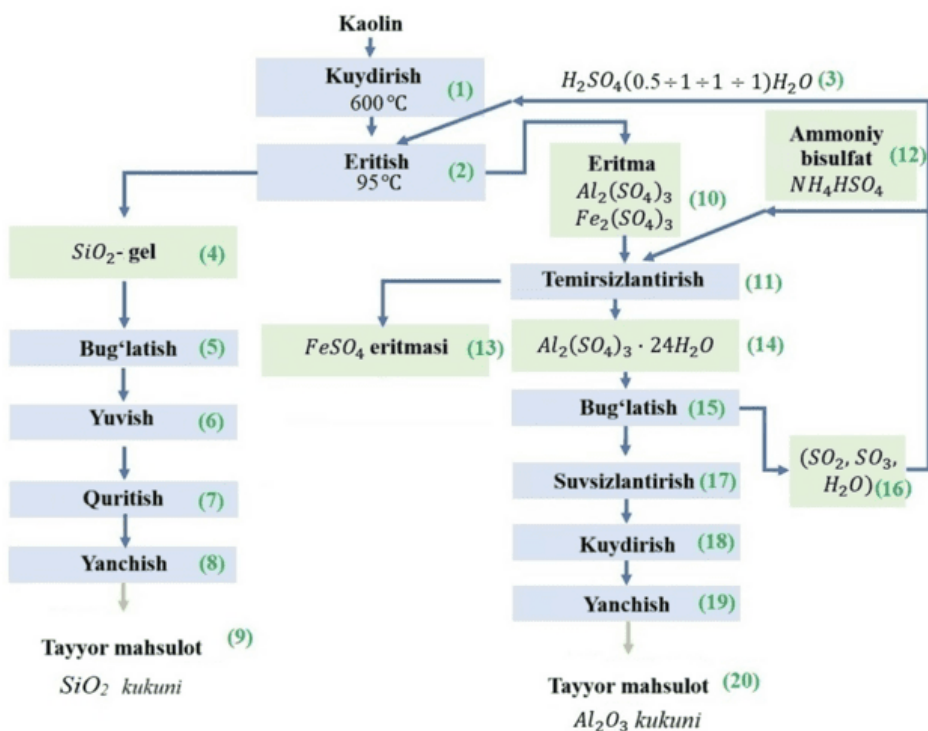
Sof holatdagi anataza TiO₂ ning taqiqlangan zona energiyasi hisoblanganda 3.26 eV teng bo'ldi. Bu eksperimental qiymatga mos keldi. Bu qiymat asosan G gamma brillion zonasiga to'g'ri keldi. Anataza TiO₂ ga Cr 6.25 % kiritilgandan keyin taqiqlangan zona energiyasi qayta hisoblanganda 1.33 eV bo'ldi. Bu A brillion zonasiga mos keldi (11-rasm).



12-rasm. α - Al_2O_3 ga Cu kiritilmasdan oldin va keyingi holatlar uchun zona tuzulishi.

α - Al_2O_3 ga 4.1 % Cu kiritilmasdan oldin va keyingi holatlar uchun zona tuzulishi ko‘rib chiqilganda ham elektron holatlar zichligi bo‘yicha olingan natijalar bilan mos natijalarni ko‘rsatdi. Sof holatdagi α - Al_2O_3 ning taqiqlangan zona energiyasi hisoblanganda 8.95 eV teng bo‘ldi. Bu eksperimental qiymatga mos keldi. Bu qiymat asosan G gamma brillion zonasiga mos keldi. α - Al_2O_3 ga Cu kiritilgandan keyin taqiqlangan zona energiyasi qayta hisoblanganda, uning qiymati 1.52 eV bo‘ldi (12-rasm). Bu ham G gamma brillion zonasiga mos keldi

Dissertatsiya ishi natijasi sifatida Orol bo‘yi hududidan olingan kaolin mineralidan quyosh panellariga qoplama va kremniy olish uchun qo‘llaniladigan Al_2O_3 hamda SiO_2 kukuni olishning arzon texnologiyasi yaratildi va unga foydali model uchun patent olindi (13-rasm).



13-rasm. Orol bo‘yi hududidan olingan kaolin mineralini tarkibidan Al_2O_3 va SiO_2 ni ajratib olish texnologiyasi

Ushbu texnologiya yordamida kaolin mineralidan Al_2O_3 va SiO_2 ni ajratib olish kam bosqichli bo'lib, jarayonda arzon va keng tarqalgan kimyoviy reagentlardan foydalanildi.

XULOSA

1. Ilk bora kaolin tarkibida mavjud bo'lgan kremniydan hosil qilingan Si(001) sirtning gazlar bilan ta'siri zichlik funksional nazariyasi asosida (VASP Ab initio dasturida) hisoblandi va katta ta'sirlashuv NO_2 ga, eng kichigi esa SO_2 molekulasiga to'g'ri kelishi aniqlandi.

2. Hisoblashlar natijasida ilk bor $\text{TiO}_2(001)$, $\text{Al}_2\text{O}_3(001)$ yuzalari bilan H_2O va SO_2 molekulari, $\text{SiO}_2(001)$ yuzasi bilan esa SO_2 molekulasi kuchli o'zaro ta'sirlashuvni yuzaga keltirishi aniqlandi. Shu bilan birga, sirtlarning CO_2 molekulasi bilan zaif o'zaro ta'sirlashuvni namoyon qilishi asoslandi.

3. Hisoblashlarda ilk bora Si(001)/ $\text{SiO}_2(001)$ ning chegara sohasida yuqori darajadagi lokalizatsiyasi mos keluvchi Si-Si, Si-O-Si kovalent va ion bog'lanishlari aniqlandi.

4. Hisoblash natijalarida Si(001)/ $\text{TiO}_2(001)$ va Si(001)/ $\text{Al}_2\text{O}_3(001)$ chegara yuzalari Si-O-Ti va Si-O-Al ion bog'lanishlarni namoyon qildi va kremniy yuzasidan eng katta zaryad yo'qotilishi Si(001)/ $\text{Al}_2\text{O}_3(001)$ chegara yuzasiga mos kelishi aniqlandi.

5. Ilk bora eksperimental tadqiqotlarda XRD, XRF va XPS tahlilida namunalar tarkibida kaolinit ($\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$) va kvarts (SiO_2) cho'qqilari mavjudligi, hamda uni qayta ishlashda olingan namunlarning tarkibida Si, SiO_2 , Al_2O_3 , TiO_2 lar mavjudligini asoslovchi Si, O, Al, Ti elementlar va Si2p, O1s, Al2p, Ti2s, Ti2p bog'lanishlarga mos keluvchi cho'qqilar aniqlandi.

6. Ilk bora FTIR va Raman spektroskopik tahlillarida namunalarning tarkibida Si, Al_2O_3 va SiO_2 lar borligini tasdiqlovchi Al-O, Al-O-Si, Si-O, Al-OH bog'lanishlarga to'g'ri keluvchi yutilish cho'qqilari aniqlandi.

7. Yarimo'tkazgich tarkibli kaolingga temir kiritilgandan keyin taqiqlangan zona energiyasi 2.8 eV teng bo'lishi va taqiqlangan zona energiyasi yarimo'tkazgich diapozonga mos kelishi asoslandi.

8. Ilk bora Al_2O_3 ga Cu, TiO_2 ga Cr va SiO_2 ga Zn kiritilganda taqiqlangan zonalar o'zgarib mos ravishda 1.52 eV, 1.33 eV va 0.839 eV larga teng bo'lganligi va bu qiymatlar yarimo'tkazgizlar zonalariga to'g'ri kelishi aniqlandi.

9. Orol bo'yi hududidan olingan kaolindan tejamkor usulda Al_2O_3 va SiO_2 kukunlari ajratib olindi va "Alyuminiy oksidi kukunini olish usuli" bo'yicha foydali model uchun FAP2529 raqamli patent olindi.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ PhD.03/2025.27.12.FM.06.03 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ
УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ УРГЕНЧСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ
УНИВЕРСИТЕТЕ ИМЕНИ АБУ РАЙХАНА БЕРУНИ**

**УРГЕНЧСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АБУ
РАЙХАНА БЕРУНИ**

КУРБАНОВ ДАВРОН ШАВКАТОВИЧ

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
СОСТАВА КАОЛИНА, ДОБЫТОГО В ПРИАРАЛЬСКОМ РЕГИОНЕ**

01.04.10- Физика полупроводников

**АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ (PhD) ПО
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК**

Ургенч – 2026

Тема диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за номером № В2025.4.PhD/FM1428

Диссертация выполнена в Ургенчском государственном университете имени Абу Райхана Беруни.

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

Научный руководитель: Каражанов Смагуль Жанабергеневич
доктор физико-математических наук

Научный консультант: Якубов Комилжон Рузметович
кандидат физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: Расулов Рустам Явкачович
доктор физико-математических наук, профессор.
Камалов Амангельди Базарбаевич
доктор физико-математических наук, профессор.

Ведущая организация: Каракалпакский государственный университет имени Бердаха

Защита диссертации состоится « 15 » Мая 2026 года в 10 : 00 часов на заседании Научного совета PhD.03/2025.27.12.FM.06.03 при Ургенчском государственном университете имени Абу Райхана Беруни. (Адрес: 220100, г. Ургенч, ул. Х. Алимджана, дом 14. Тел.: (99862)224-66-11, факс: (99862) 224-67-00, e-mail: info@urdu.uz)

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Ургенчского государственного университета имени Абу Райхана Беруни (зарегистрирована за № D-984) (Адрес: 220100, г. Ургенч, ул. Х.Алимджана, дом 14. Тел.: (99862) 224-66-11, факс: (99862) 224-67-00). e-mail: arm@urdu.uz.

Автореферат диссертации разослан « 4 » Мая 2026 года.
(протокол рассылки № 13 от « 4 » Мая 2026 года).



У.О. Кутлиев

Председатель Научного совета по
присуждению ученых степеней,
д.ф.-м.н., профессор

У.П. Асатова

Ученый секретарь Научного совета
по присуждению ученых степеней,
PhD, доцент

К.А. Исмаилов

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

ВВЕДЕНИЕ (аннотация к диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и востребованность темы диссертации.

В условиях стремительного развития науки и технологий в мире всё большее внимание уделяется расширению масштабов производства в области полупроводников, микроэлектроники, солнечной энергетики, сенсорных технологий и современных электронных устройств. Это, в свою очередь, приводит к устойчивому росту потребности в кремнии и различных оксидных материалах, а также выявляет проблемы, связанные с высокими энергозатратами и значительными экономическими расходами при их получении традиционными методами, что требует поиска новых решений. В связи с этим, поиск дешёвых, экологически безопасных альтернативных источников сырья и разработка технологий их переработки рассматриваются как актуальная задача современности. С этой точки зрения каолин, богатый оксидами алюминия и кремния, как природный, широко распространённый и экономически эффективный источник сырья, привлекает особое внимание при создании функциональных материалов, полупроводников и различных высокотехнологичных устройств.

В мире проводятся многочисленные исследования, посвящённые изучению физико-химических свойств каолиновых материалов, добываемых в различных регионах, которые зависят от геологического строения, минералогического состава и условий формирования. В частности, различия в распределении размеров частиц, кристаллической структуре, химическом составе, а также содержании примесей в образцах каолина из разных регионов оказывают существенное влияние на его механические, оптические, электрические и адсорбционные свойства, определяя эффективность его применения в промышленности, электронике и сенсорных технологиях. В этой связи комплексное исследование свойств каолина с использованием современных экспериментальных (XRD, FTIR, SEM/TEM) и теоретических (DFT) методов имеет важное значение. Анализ его микро- и наноструктуры, электронных свойств, а также взаимодействия с газами служит прочной научной основой для создания высокоэффективных газовых сенсоров, каталитических систем и полупроводниковых материалов. В этом контексте систематическое исследование физико-химических свойств природного каолина является одной из актуальных задач разработки экологически безопасных функциональных материалов нового поколения.

В Республике Узбекистан в последние годы реализуется комплекс мероприятий, направленных на углублённое изучение физико-химических свойств природных сырьевых ресурсов, в частности материалов на основе каолина, определение их структурных и энергетических характеристик, а также на их использование при создании современных полупроводниковых устройств.

В Постановлении Президента Республики Узбекистан № ПП-5032 от 19 марта 2021 года «О мерах по повышению качества образования в области физики и развитию научных исследований» в качестве приоритетных задач

определены расширение научных исследований в области физики, их неразрывная связь с производством, а также повышение эффективности инновационной деятельности.

Обеспечение исполнения задач, предусмотренных данным постановлением, в частности внедрение в практику исследований в области физики полупроводников, требует рационального использования местного сырья — каолина, что имеет важное значение.

С этой точки зрения глубокое исследование физических свойств полупроводниковых и оксидных материалов, входящих в состав каолина, создание на их основе современных устройств, а также расширение сфер их практического применения за счёт повышения энергоэффективности служат неотъемлемой научно-практической основой интеграции науки и производства, предусмотренной в вышеуказанном постановлении.

Данная работа в определённой степени служит выполнению задач, предусмотренных Указом Президента Республики Узбекистан № ПФ-60 от 28 января 2022 года «О Стратегии развития Нового Узбекистана на 2022–2026 годы», Постановлением Президента Республики Узбекистан № ПП-57 от 16 февраля 2023 года «О мерах по ускорению внедрения возобновляемых источников энергии и энергосберегающих технологий в 2023 году», Постановлением Президента Республики Узбекистан № ПП-13 от 8 января 2024 года «О поддержке производителей и эксплуатирующих организаций устройств возобновляемых источников энергии», а также Постановлением Кабинета Министров № 795 от 17 декабря 2025 года «Об организации Института теоретической физики при Национальном университете Узбекистана имени Мирзо Улугбека».

Соответствие исследования с основными приоритетными направлениям развития науки и технологий в республике. Данная диссертационная работа выполнена в рамках III и IV приоритетных направлений развития науки и технологий Республики Узбекистан: «Энергетика, энергосбережение, транспорт, машиностроение и приборостроение, современная электроника, микроэлектроника, фотоника и развитие электронной приборостроительной отрасли» и «Разработка методов использования возобновляемых источников энергии, создание новых технологий и устройств на основе нанотехнологий, фотоники и других современных технологий».

Степень изученности проблемы. В мире каолин, как алюмосиликатный минерал, вызывает большой научный интерес в областях геологии, материаловедения и полупроводниковой техники, а его химический состав, кристаллическая решетка и физико-химические свойства изучаются на основе современных экспериментальных и теоретических подходов. В научной литературе Деви Р., М. Ивановича, Алиана Вана для определения состава каолина широко используются рентгеновская дифракция (XRD), сканирующая электронная микроскопия (SEM), рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (XPS), фурье-инфракрасная спектроскопия (FTIR), рамановская спектроскопия и другие методы. В результате этих исследований получена

информация о кристаллических фазах, морфологии, компонентах каолина и фазовых переходах, происходящих в результате термической обработки. В настоящее время также проводятся исследования полупроводниковых свойств каолина и электронных свойств полупроводниковых изделий, полученных из него. Адсорбционные, каталитические и электропроводящие свойства материалов на основе каолина, а также их потенциальное применение в качестве газовых сенсоров, были рассмотрены во многих зарубежных исследованиях.

В теоретическом направлении важную роль в изучении электронной структуры и химически активных свойств каолина играют расчеты методом теории функционала плотности (DFT). Лайла Шафей, Андреа Зен, Фэй Фан, Джессика Э. изучали стабильность решетки каолина, распределение электронной плотности, энергетический зазор между валентной и проводимостью полосами, а также адсорбцию различных молекул с использованием DFT. Это открывает перспективы использования каолина не только в качестве традиционного сорбента или керамического материала, но и в фотокатализе, газовых сенсорах и устройствах экологического мониторинга в нашей республике.

В нашей республике исследования, проведенные Ш. К. Матчановым, Ю. Сидоренко и Бахауатдином Калбаевым, в основном были посвящены использованию каолина в качестве промышленного сырья. В настоящее время в мире и в нашей республике отсутствуют научные исследования, в которых проводился бы полный систематический анализ каолина и его компонентов с использованием экспериментальных спектроскопических и морфологических методов, таких как XRD, FTIR, Raman, XPS, SEM и XRF. Кроме того, практически отсутствуют комплексные научные исследования, основанные на полученных экспериментальных результатах в сочетании с *ab initio* расчетами VASP на основе DFT. В частности, такие современные экспериментально-теоретические комплексные исследования каолинового сырья из Аральского моря еще недостаточно развиты.

Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ высшего образовательного учреждения, где выполнена диссертация.

В рамках диссертации были реализованы зарубежные и ведущие проекты UZB-IND-2021-88 (совместный узбекско-индийский проект «Изучение наноструктурированных гидрофобных и супергидрофобных материалов, используемых в солнечных элементах») и «Создание эффективных композитных прозрачных покрытий для солнечных элементов», финансируемые в соответствии с резолюцией ПП-307.

Целью исследования Целью работы является создание научно-практических основ использования местного каолинового сырья Приаральского региона, а также выделенных на его основе оксидных материалов в качестве недорогих и альтернативных полупроводниковых материалов для современных сенсорных и микроэлектронных устройств путём их комплексного исследования с применением современных экспериментальных и

теоретических методов расчётов, включая анализ фазово-структурных и электронных свойств.

Задачи исследования:

разработка технологических этапов получения целевых полупроводниковых и оксидных материалов (SiO_2 , Al_2O_3) из местного каолинового сырья Приаральского региона;

комплексное исследование поверхностной морфологии, фазово-структурных характеристик, количественного элементного состава, а также состояния химических связей в поверхностном слое полученных материалов;

создание теоретических моделей поверхностей полупроводниковых и оксидных материалов и структурная оптимизация их параметров с использованием методов первых принципов (*ab initio*);

теоретическое определение механизмов формирования новых электронных свойств и изменения энергетических уровней при легировании материалов (каолин, TiO_2 , Al_2O_3 и SiO_2) переходными металлами (Fe, Zn, Cu, Cr);

моделирование распределения зарядов и особенностей химических связей в приграничной (интерфейсной) области гетероструктур, сформированных на основе полупроводниковых и оксидных материалов;

расчёт механизмов взаимодействия (адсорбции) исследуемых гетероструктурных поверхностей с различными газами и научное обоснование их сенсорных свойств.

Объектами исследования Каолин, добываемый в районе Приаральского, а также полупроводниковые и другие материалы, полученные из этого моря.

Предметом исследования Определение химического состава, кристаллической структуры, морфологии и компонентов каолина с использованием современных экспериментальных приборов XRD, SEM, XPS, FTIR, Raman, XRF, а также проведение расчетов методом теории функционала плотности (DFT) на основе исследуемого состава в программе VASP.

Методы исследований: При проведении исследований были использованы методы сканирующей электронной микроскопии (SEM), рентгеновской дифракции (XRD), рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS), инфракрасной спектроскопии (IR), рамановской спектроскопии, фотоэлектронной спектроскопии, а также методы теории функционала плотности (DFT).

Научная новизна исследования заключается в следующем:

Впервые на основе фазово-структурных характеристик каолина и метакаолина Приаральского региона раскрыт механизм влияния их слоистой морфологии, а также ковалентно-ионных связей Al–O–Si, Si–O и Al–OH в кристаллической решётке на физико-химические процессы, протекающие на поверхности вещества;

впервые на основе морфологического анализа методом СЭМ установлено, что образец каолина обладает упорядоченной слоистой структурой, а в метакаолине выявлены пластинчатые структурные особенности;

впервые обоснованы физические механизмы изменения ширины запрещённой зоны, а также формирования дополнительных энергетических

уровней с полупроводниковыми свойствами в материалах каолина, SiO_2 , Al_2O_3 и TiO_2 , легированных переходными металлами (Fe, Zn, Cu, Cr);

впервые установлены закономерности формирования интерфейсных связей Si–O–Si, Si–O–Ti и Si–O–Al на границах гетероструктур, состоящих из материалов Si, Al_2O_3 , TiO_2 и SiO_2 , а также определены механизмы перераспределения зарядов (заряды Бадера) вдоль атомов кислорода в области интерфейса;

впервые на основе моделей взаимодействия газовых молекул с поверхностями гетероструктур доказано, что поверхности Si и SiO_2 проявляют высокую адсорбционную активность и селективность по отношению к газам NO_2 и SO_2 .

Практические результаты исследования заключаются в следующем:

Разработана эффективная и экономичная технология выделения высокочистых веществ SiO_2 и Al_2O_3 , органически применяемых в процессе получения кремния из местного каолинового сырья Приаральского региона, а также создана возможность их использования в промышленном масштабе;

практически обоснована возможность целенаправленного использования каолина и его компонентов с мелкодисперсной, пластинчатой и слоистой морфологической структурой в качестве активного рабочего компонента полупроводниковых датчиков (сенсоров), предназначенных для определения состава газов окружающей среды (NO_2 , SO_2 и др.);

разработан способ формирования управляемых определённых энергетических уровней (соответственно 2,8 эВ, 0,839 эВ, 1,52 эВ и 1,33 эВ) путём введения переходных металлов (Fe, Zn, Cu, Cr) в каолин и оксидные материалы (SiO_2 , Al_2O_3 , TiO_2), что создаёт возможность их использования в качестве дешёвых альтернативных полупроводников, а также в качестве слоя, повышающего чувствительность современных микроэлектронных устройств.

Достоверность результатов исследований Надежность полученных результатов основана на том, что они были получены с использованием высокоточных и широко применяемых в мировой практике приборов: SEM, XRD, XPS, XRF, ИК-спектроскопия (FTIR), рамановский спектрометр и программное обеспечение VASP на основе теории функционала плотности (DFT).

Научная и практическая значимость диссертации.

Научная значимость результатов исследования объясняется тем, что впервые проведено комплексное изучение состава каолинового материала полупроводникового типа, полученного из Приаральского региона, с использованием современных спектроскопических, аналитических и морфологических методов и приборов. На их основе с применением теории функционала плотности (DFT) и программного комплекса VASP были выполнены расчёты взаимодействия поверхностей с газовыми молекулами, изменений электронной структуры при введении примесных атомов в состав материалов, а также локализованных электронных состояний и переноса заряда на границах гетероструктур.

Практическая значимость результатов исследования заключается в разработке экономичного способа выделения Al_2O_3 и SiO_2 из местного сырья — каолина, а также в разработке рекомендаций для областей полупроводников, сенсоров и электроники на основе теоретических расчётов взаимодействия поверхностей Si , Al_2O_3 , SiO_2 и TiO_2 с газами, процессов обмена зарядом в приграничных областях $\text{Si}/\text{Al}_2\text{O}_3$, Si/SiO_2 и Si/TiO_2 , а также введения Cu , Zn и Cr в Al_2O_3 , SiO_2 и TiO_2 соответственно..

Внедрение результатов исследования. На основе научно-практических результатов, полученных при теоретическом и экспериментальном исследовании состава каолинового материала, отобранного из Приаральского региона:

Результаты, связанные с формированием адсорбционных энергий 0,8 эВ и 0,27 эВ при взаимодействии поверхности оксида титана с газами H_2O и SO_2 соответственно, были внедрены в международный исследовательский проект №101087367 «Антибактериальные интеллектуальные покрытия», реализованный Университетом Эксетера (Великобритания) в 2023–2025 годах (справка Университета Эксетера №10-12-00 от 26 ноября 2025 года). В результате использование высокой адсорбционной способности молекул H_2O и SO_2 на поверхности TiO_2 позволило обеспечить эффективное удержание вредных газов в антибактериальных покрытиях и снижение их воздействия на окружающую среду.

Результаты спектроскопического анализа метакаолина, в частности данные, относящиеся к химическим связям $\text{Si}-\text{O}$ с энергией 103,28 эВ в спектре $\text{Si}2p$, были внедрены в международный исследовательский проект №23H0521 «Характеризация дефектов композитных материалов и моделирование поверхностных дефектов в материаловедении», реализованный совместно Сычуаньским университетом (КНР) и промышленными предприятиями (справка Сычуаньского университета №2025-11 от 10 ноября 2025 года). В результате это позволило повысить точность моделирования дефектов, формирующихся в граничных областях композитных материалов, а также эффективность прогнозирования поверхностных процессов.

Технология снижения ширины запрещённой зоны и формирования энергетического уровня с энергией 0,839 эВ, чувствительного в инфракрасной области, путём введения атомов цинка (Zn) в SiO_2 , была внедрена в фундаментальный проект FL-8824063221 «Исследование радиационной стойкости фотоэлектрических кремниевых преобразователей солнечной энергии, легированных геттерирующими примесными атомами», реализованный в Ташкентском государственном техническом университете (справка Министерства высшего образования, науки и инноваций Республики Узбекистан №04-22-2097 от 16 декабря 2025 года). В результате достигнуто значительное повышение эксплуатационных характеристик устройств в условиях инфракрасного излучения, а также устойчивости фотоэлектрических преобразователей к радиационному воздействию.

Апробация научных исследований. Результаты диссертационной работы обсуждались на 10 международных и 13 национальных научно-практических конференциях.

Опубликованность результатов исследований. В общей сложности по теме диссертации опубликовано 23 научные работы, из которых 3 статьи (в журналах, индексируемых в базе данных Scopus) были опубликованы в научных изданиях, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов диссертаций, в том числе 7 в журналах, индексируемых в республике (ОАК).

Структура и объем диссертации. Структура диссертации включает введение, четыре главы, общие выводы, список использованной литературы и приложения. Объем диссертации составляет 110 страницы, включая 6 таблиц и 57 рисунков и графиков.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, описана степень изученности проблемы, приводится связь исследований с приоритетными направлениями развития науки и технологий в республике, сформулирована цель и задачи диссертационной работы, приводится научная новизна, научная и практическая значимость полученных результатов, приведены краткие сведения о внедрении результатов и апробации работы, а также об объеме и структуре диссертации.

Первая глава диссертации, озаглавленная **«Анализ литературы»**, посвящена краткому анализу литературы по данной работе; в ней рассматривается изучение каолина как материала, используемого в полупроводниковой промышленности, запасы каолина в различных регионах и их минералогический состав, анализ каолина с использованием современных методов и теоретические расчеты, основанные на них.

В конце главы представлены выводы, сделанные на основе анализа литературы, а также цели и задачи диссертационной работы.

Вторая глава диссертации, озаглавленная **«Анализ образцов каолина полупроводникового состава и основанные на них теоретические методы расчета»**, описывает недорогой и экономичный метод извлечения компонентов из каолина полупроводникового состава. Представлена информация об экспериментальном оборудовании, использующем методы XRD, XRF, SEM, Raman, FTIR, XPS для изучения состава выделенных компонентов. Также на основе экспериментальных результатов описан метод расчета электронных свойств каолина полупроводникового состава и входящих в него элементов с использованием программы VASP Ab initio, основанной на теории функционала плотности (DFT).

В главе III диссертации, озаглавленной **«Результаты спектроскопического и морфологического анализа полупроводникового каолина»**, представлены результаты изучения фаз кристаллической структуры, химических состояний поверхностных элементов, функциональных групп, соответствующих

химическим связям, элементного состава, колебательных связей и морфологических изображений поверхности полупроводникового каолина и его обработанных минералов с использованием приборов XRD, XPS, FTIR, XRF, Raman и SEM.

Каолин и его составляющие компоненты были проанализированы методом рентгеновской дифракции. Согласно результатам, были обнаружены высокоинтенсивные дифракционные пики минерала оксида алюминия при $2\theta = 25,6^\circ, 35,18^\circ, 43,36^\circ, 57,52^\circ$ и слабоинтенсивные пики при $37,8^\circ, 52,56^\circ, 66,48^\circ, 68,18^\circ$. Было установлено, что эти пики соответствуют кристаллографическим плоскостям (012), (104), (113), (116), (110), (024), (214) и (300). Параметры элементарной ячейки $a = b = 4,7589 \text{ \AA}$ и $c = 12,9919 \text{ \AA}$ соответственно соответствуют кристаллической структуре ромбоэдрического $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (рис. 1а).

Разница между рентгенодифракционными спектрами метакаолина и каолина очень мала. Рентгеновская дифракция метакаолина и каолина указывает на присутствие каолинита и α -кварцевых фаз. Доминирующий пик, наблюдаемый при $\sim 26,6^\circ$ в образце метакаолина, соответствует кристаллическому кремнезему кварца. Таким образом, данное исследование показывает, что все образцы минералов, за исключением оксида алюминия, обладают высокой структурной стабильностью. Дифракционные пики при $\sim 20,9^\circ$ и $\sim 26,6^\circ$, которые соответствуют плоскостям (100) и (011) кристаллографических направлений, указывают на преобладание минерала кварца.

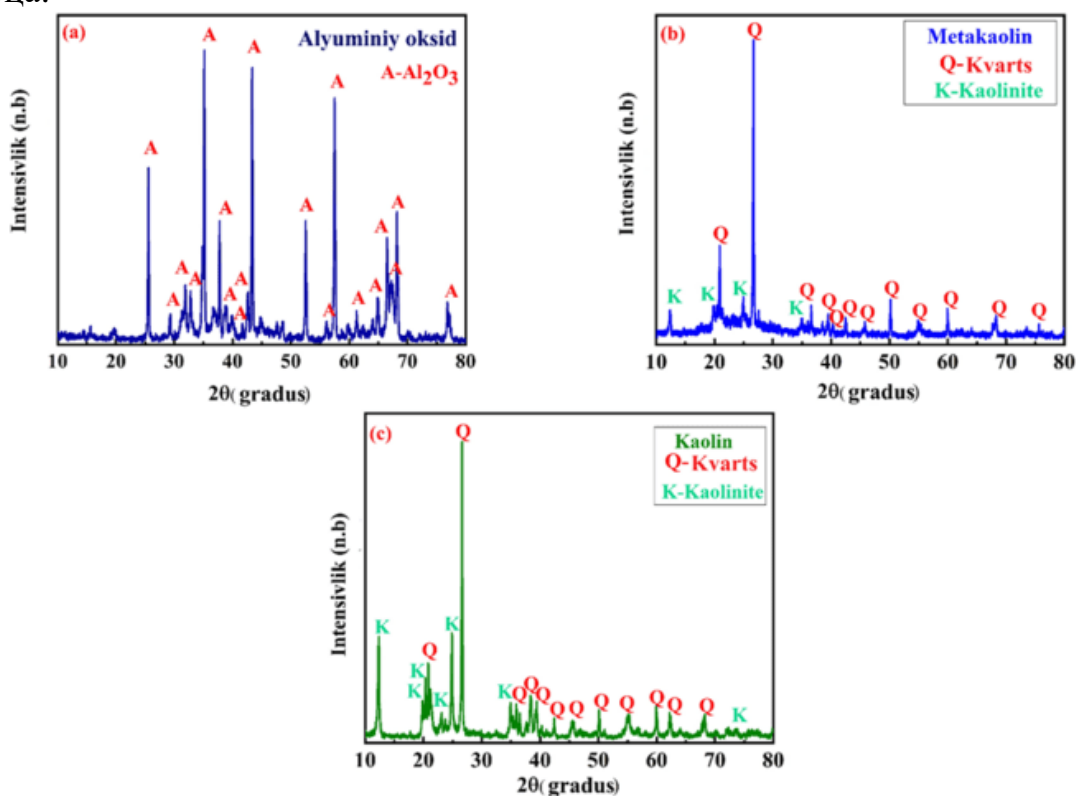


Рисунок 1. Рентгеновская дифракция образцов. (а) оксид алюминия, (б) метакаолин, (с) каолин.

Пики угла Брэгга при $12,3^\circ, 19,6^\circ, 24,9^\circ$ и $34,8^\circ$ соответствуют дифракционным плоскостям каолинита (001), (020), (002) и ($\bar{2}01$). При анализе

рентгенодифракционного спектра образца каолина, состоящего из кварца и каолинита, появились характерные пики. В частности, наблюдались пики при $20,8^\circ$ и $26,6^\circ$, соответствующие плоскостям (100) и (011) минерала кварца, соответственно. Для каолинита в кристаллографических ориентациях (001), (020), (110), $(021\bar{1})$, (002) и $(2\bar{0}1)$ наблюдались пики при $12,3^\circ$, $19,6^\circ$, $20,4^\circ$, $23,1^\circ$, $24,9^\circ$ и $34,8^\circ$ (рис. 1b,c).

Для определения различных химических связей были использованы инфракрасные спектры образцов каолина, оксида алюминия и метакаолина, а также соответствующие колебания. При рассмотрении спектра поглощения минерала оксида алюминия в диапазоне $422\text{--}445\text{ см}^{-1}$ были обнаружены пики изгибных колебаний химической связи Al-O, соответствующие октаэдрическим сферам. Метакаолин и каолин показали фазы, связанные с валентными колебаниями гидроксильных групп -OH при волновом числе 3693 см^{-1} . В свою очередь, пики с уровнем поглощения 3619 см^{-1} соответствовали симметричным валентным колебаниям внутренних гидроксильных групп OH, обнаруженным во всех природных минералах. Высокое поглощение, обнаруженное при волновом числе $1006\text{--}1010\text{ см}^{-1}$, было выявлено в пиках, связанных с валентными колебаниями Si-O, что указывает на наличие следов кварца. Изгибные деформационные колебания, соответствующие химической связи Al-OH, были зарегистрированы при $912\text{--}914\text{ см}^{-1}$. Перпендикулярное валентное колебание Si-O соответствовало значению $752\text{--}796\text{ см}^{-1}$. Аналогичный пик поглощения наблюдался в диапазоне $690\text{--}692\text{ см}^{-1}$ для всех минералов каолинита. Колебательные моды Al-O-Si проявлялись в зонах поглощения $536\text{--}540\text{ см}^{-1}$.

Широкие и среднеинтенсивные пики поглощения наблюдались в диапазоне $430\text{--}466\text{ см}^{-1}$. Это указывает на присутствие примесей кварца во всех минералах из-за деформации Si-O-Si и изгибного деформационного состояния Si-O. Спектры FTIR показывают большое количество Al-O в различных компонентах оксида алюминия. В метакаолинах и каолинах Al-O и Si-O наблюдались вместе (рис. 2a,b,c) соответственно.

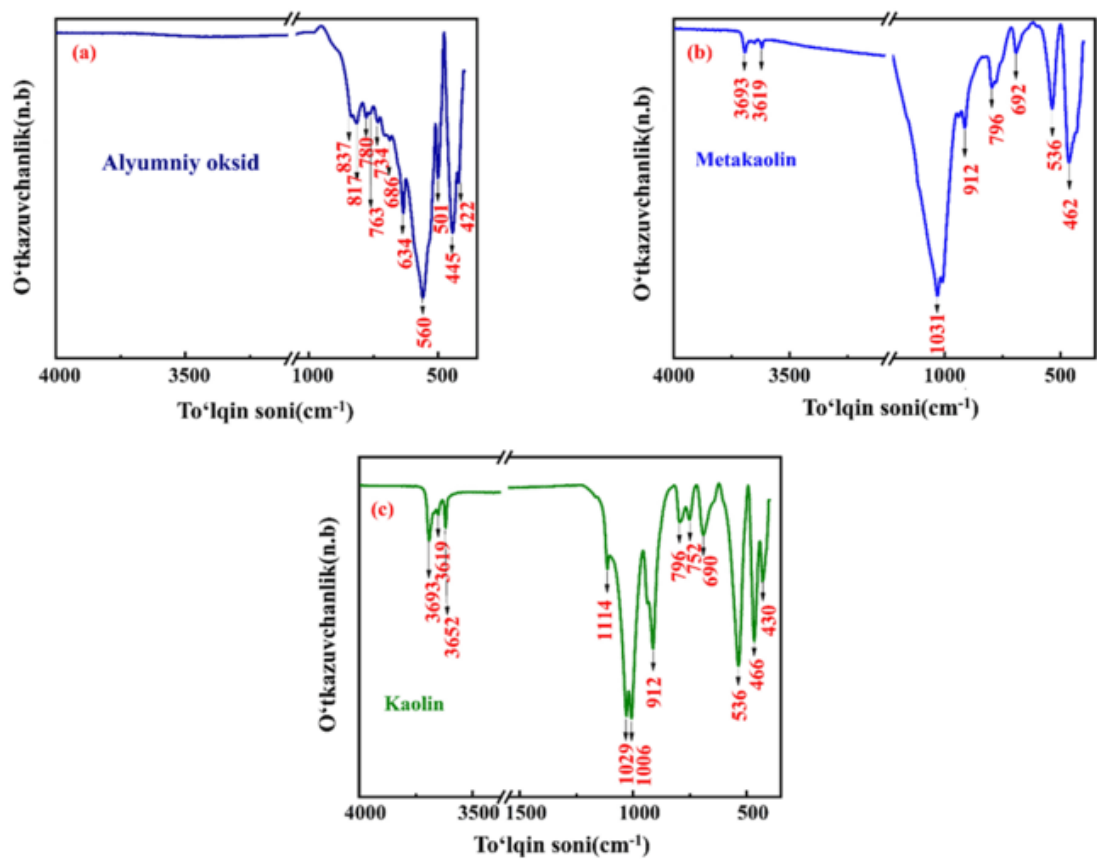


Рисунок 2. Инфракрасные спектры образцов; (а) оксид алюминия, (б) метаклоин, (с) каолин.

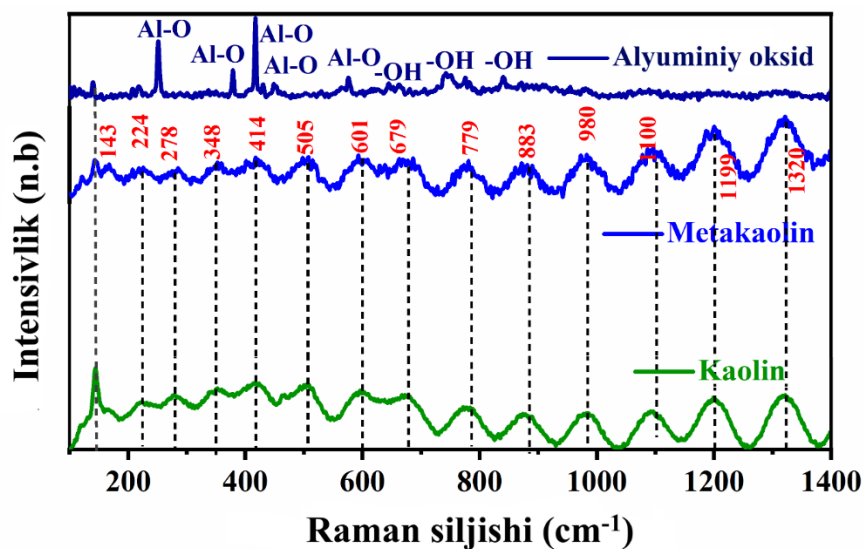


Рисунок 3. Рамановские спектры минералов оксида алюминия, метаклоина и каолина.

Рамановские спектры в основном связаны со степенью кристалличности глинистых минералов. Более высокая степень кристалличности облегчает обнаружение с помощью рамановского анализа. На рисунке 3 глинистые минералы не показывают существенных различий в спектрах метаклоина и каолина. Кроме того, изменение интенсивности в пиковом положении 143 cm^{-1} естественным образом указывает на присутствие минерала каолинита. При

этом интенсивность пика выше в каолине, чем в метакаолине. Напротив, вблизи пика 143 см^{-1} в метакаолине присутствуют два других пика, которые отсутствуют в каолине. Пиковое положение в диапазоне $143\text{-}224\text{ см}^{-1}$ соответствует октаэдру AlO_6 . Пик при 278 см^{-1} связан с треугольными колебаниями O-H-O минерала каолинита. Пиковое положение в диапазоне $348\text{-}601\text{ см}^{-1}$ принадлежит октаэдру SiO_4 . Это указывает на присутствие кварца. При волновом числе 679 см^{-1} наблюдается область трансляции Si-O-Al. Положение полосы в диапазоне $779\text{-}883\text{ см}^{-1}$ относится к области трансляции и разделения той же OH-группы. Широкий пик, наблюдаемый в диапазоне $980\text{-}1100\text{ см}^{-1}$, соответствует колебаниям растяжения Si-O в перпендикулярном режиме. В диапазоне $1199\text{-}1320\text{ см}^{-1}$ четко наблюдается широкий пик высокой интенсивности, соответствующий колебательному режиму Si-O. На основании вышеизложенных наблюдений было установлено, что в природных глинистых минералах каолинита и метакаолина преобладают фазы каолинита и следы кварца.

Высокие пики поглощения, наблюдаемые в инфракрасном спектре, в основном обусловлены взаимодействием элементов, показанных в таблице 1. Основной компонент Al_2O_3 присутствует во всех минералах, но преобладающее высокое содержание было обнаружено в минерале корунде. Это было подтверждено рентгенодифракционным анализом (XRD) и ИК-спектроскопией (FTIR). Небольшие количества других элементов, таких как Na, V, Fe, Ca и Ti, также были обнаружены в минерале оксида алюминия. Основной состав каолина состоит из кремнезема и оксида алюминия с небольшим количеством Na, Fe и Ti. Это также было подтверждено количественным рентгенофлуоресцентным анализом (XRF). Относительно небольшие количества Fe, Ti, Al, Si и O были обнаружены в минерале метакаолина. Таким образом, преобладающая фаза подтверждает добавление других примесей элементов, а именно Na, V, Fe, Ti, Mg, Ca, S и т. д., к соединениям кремнезема (SiO_2) и оксида алюминия (Al_2O_3). Это также согласуется с функциональным анализом, выполненным с помощью ИК-спектроскопии. Таким образом, силикат и алюминат являются двумя основными компонентами глинистых минералов. Они составляют большую часть их состава.

Таблица 1. Состав минералов, определенный методом рентгенофлуоресцентного анализа.

Содержание	Оксид алюминия Количественное содержание %	Метакаолин Количественное содержание %	Каолин Количественное содержание %	Спектроскопическая линия
O	51.3415	56.3899	58.5817	O Ka
Si	-	24.8916	24.4941	Si Ka
Al	47.5049	15.634	15.0749	Al Ka
Na	0.5419	0.1900	0.1425	Na Ka
V	0.2680	-	-	V Ka
Fe	0.0349	0.9156	0.8631	Fe Ka
Ti	0.079	0.3769	0.3834	Ti Ka
Cl	0.0774	-	0.0777	Cl Ka
Mg	-	0.1699	0.1577	Mg Ka
Ca	0.0795	0.0758	0.1231	Ca Ka

S	0.0242	1.3107	0.0804	S Ka
P	-	-	-	P Ka
Cr	-	0.0268	-	Cr Ka
Zr	-	0.0188	0.0215	Zr Ka

Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (XPS) используется для изучения степени окисления обработанных минералов, таких как оксид алюминия, метаколин и каолин. Спектры наблюдения вышеупомянутых минералов показаны на рисунке 4, а соответствующие им значения атомного процента приведены в таблице 2. Это ясно показывает, что присутствие углерода на поверхности образцов является результатом воздействия атмосферы. Исследования XPS оксида алюминия и обработанного каолинита характеризуются положениями пиков C1s, Al2p, Si2p и O1s, а также атомным составом других примесей, таких как Na, V, Ti и Fe. Пики при энергии связи 73, 102, 282 и 531 эВ принадлежат Al2p, Si2p, C1s и O1s, представляя собой переходы валентной полосы [рисунок 4-(a-c)].

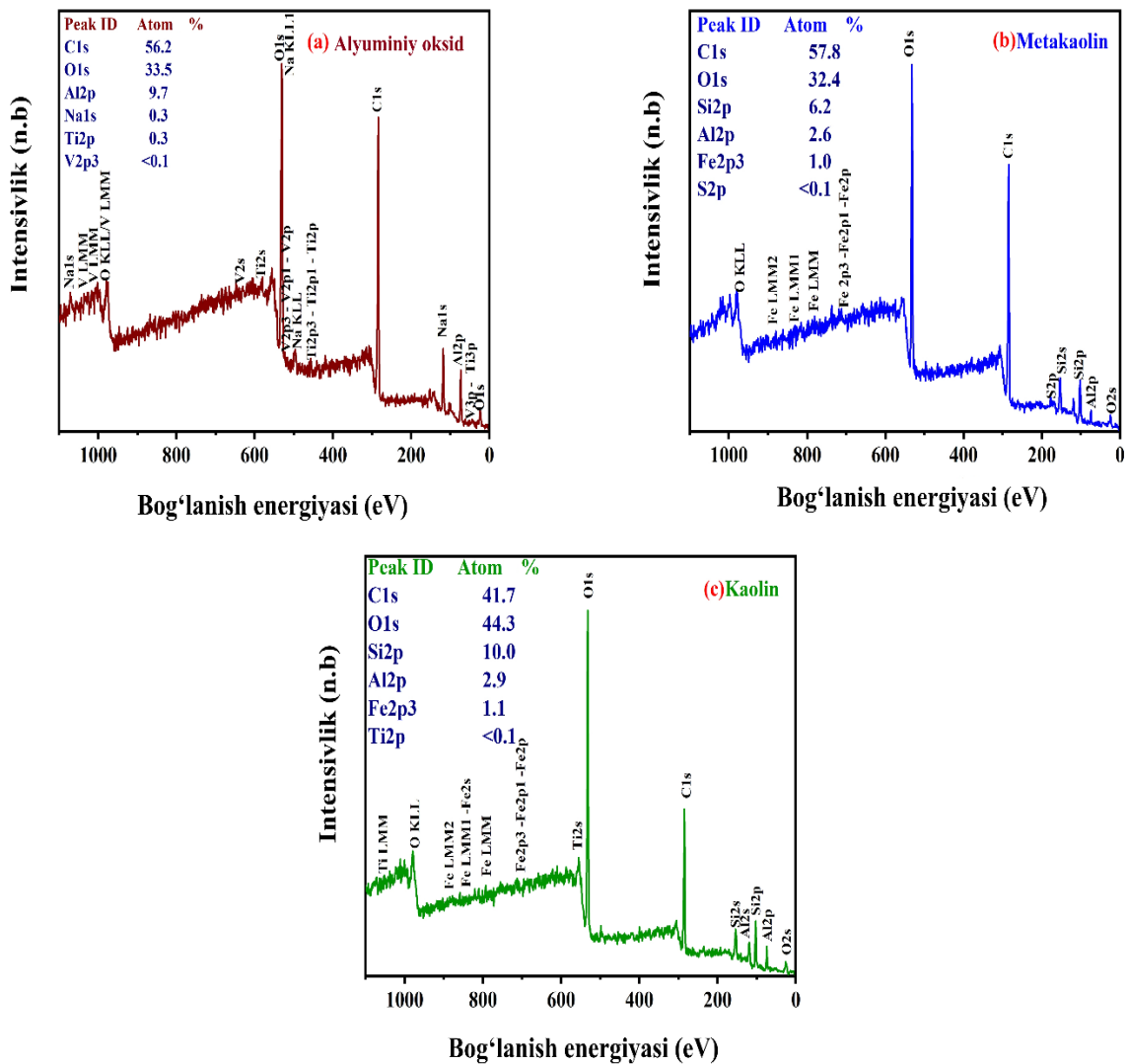


Рисунок 4. Обзорные спектры XPS образцов; (а) оксид алюминия, (б) метаколин, (с) каолин.

Таблица 2. Результаты рентгеноспектрального анализа минералов, показывающие атомный процент C1s, O1s, Al2p, Si2p и других примесей.

Минерал	C1s (%)	O1s (%)	Al2p (%)	Si2p (%)	Другие элементы
Оксид алюминия	56.2	33.5	9.7	-	0.3 (Na)
Метакаолин	57.8	32.4	2.6	6.2	1.0 (Fe)
Каолин	41.7	44.3	2.9	10.0	1.1 (Fe)

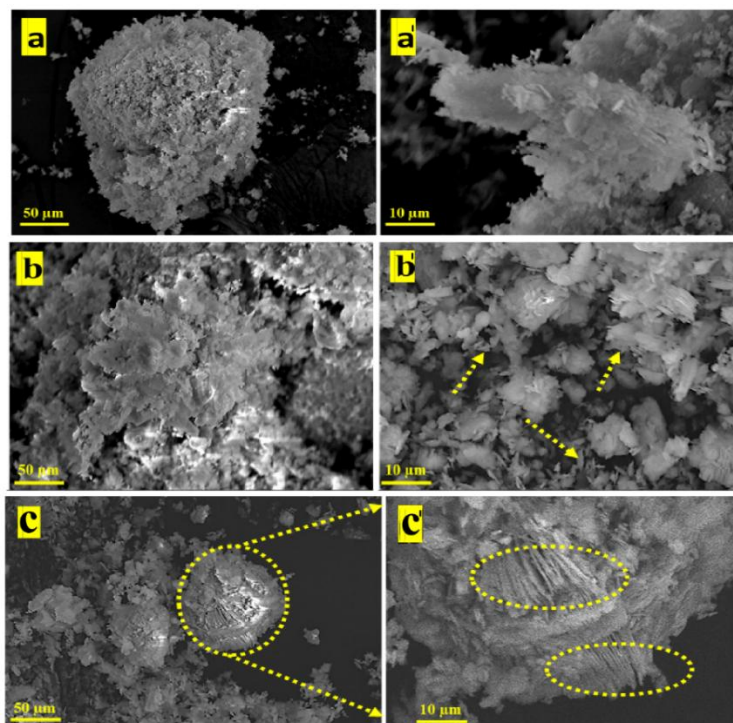


Рисунок 5. SEM-изображения образцов. (a,a') оксид алюминия, (b,b') Метакаолин, (c,c') Каолин.

Изучение морфологии поверхности минералов из региона Аральского моря выявляет уникальные свойства, которые существенно влияют на их качество и применение [Рисунок 5 (a,a'- c,c')]. Частицы оксида алюминия из Аральского моря отличаются от других изученных минералов наличием хорошо агрегированных частиц малого размера. Эта особенность согласуется с результатами анализа спектра рентгеновской дифракции [Рисунок 5 (a,a')]. Такая форма агрегации часто влияет на многие свойства и области применения материалов. Это подчеркивает важность размера и структуры частиц для материалов на основе оксида алюминия. С другой стороны, минерал метакаолин обладает уникальными свойствами. Он отличается от оксида алюминия своей пластинчатой структурой и мелкими трещинами [Рисунок 5 (b,b')]. Их свойства и поведение в различных областях применения в значительной степени зависят от их структурной конфигурации. Эти особенности указывают на их специфический состав и изменения,

происходящие в процессе обработки. Другой проанализированный минерал, каолин, имеет пластинчатую структуру.

Каолин характеризуется хорошо упорядоченной слоистой структурой. Эти слои расположены в виде листовидных или пластинчатых текстур, что придает каолину его уникальные морфологические характеристики [Рисунок 5(с,с')]. Согласно результатам рентгенофлуоресцентного анализа, высокое содержание оксидов SiO_2 и Al_2O_3 в элементном составе образца играет ключевую роль в формировании слоистой и упорядоченной структуры каолина. Однородность формы листовидных структур, наряду с четкими границами каолина, подчеркивает важность текстуры в различных областях применения. Уникальная текстура каолина с его четко выраженными и упорядоченными листовидными структурами очень важна для таких применений, как системы фильтрации воды. Такая хорошо организованная геометрическая структура способствует эффективным процессам фильтрации и значительно улучшает управляемость и производительность системы. Четко очерченные частицы каолина расположены упорядоченно, что повышает их фильтрующую способность и подчеркивает важность морфологии при оценке возможностей применения минерала в различных целях.

Четвертая глава называется «Анализ результатов расчетов DFT полупроводникового каолинового материала», в которой теоретические расчеты были выполнены на основе экспериментальных результатов, полученных по элементному составу каолина и его составу с помощью методов XRD, XPS, XRF, Raman, FTIR, SEM. Согласно полученным результатам, в составе каолина и его переработанных материалов было определено присутствие Si , Al_2O_3 , SiO_2 , TiO_2 . На основе определенного состава были выполнены теоретические расчеты с использованием программы VASP Ab initio (VASP6.5) на основе теории функционала плотности. Расчеты в основном основывались на формировании поверхностей, гетероструктур из материалов Si , Al_2O_3 , SiO_2 , TiO_2 и их взаимодействии с различными газами, изменениях электронных состояний и плотности заряда. Кроме того, в этой главе также представлены научные результаты, касающиеся изменений электронных свойств в результате введения примесей в материалы.

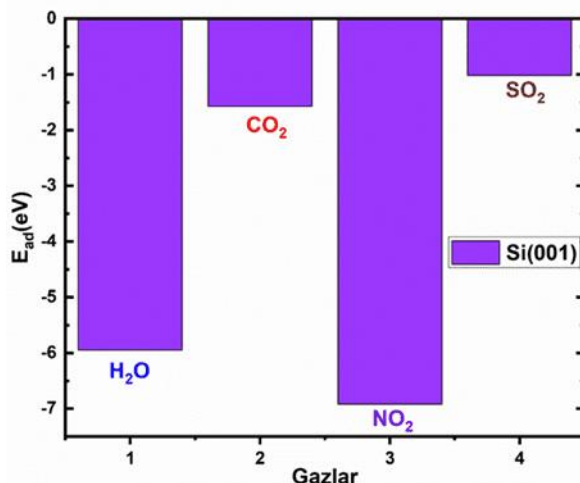


Рисунок 6. Энергии адсорбции молекул газа на поверхности $\text{Si}(001)$.

Согласно результатам расчетов, молекула газа NO_2 продемонстрировала высокую энергию взаимодействия с поверхностью $\text{Si}(001)$. Значения энергии взаимодействия уменьшались в порядке $\text{NO}_2 > \text{H}_2\text{O} > \text{CO}_2 > \text{SO}_2$ (рис.6). Очевидно, что наименьшая энергия взаимодействия принадлежит SO_2 . Благодаря способности кремниевой поверхности образовывать стабильные связи Si-O для полярных молекул NO_2 и H_2O , энергия взаимодействия очень велика по сравнению с другими молекулами. Изогнутая структура молекулы NO_2 и наличие высокоэлектроотрицательных атомов кислорода создают стабильный дипольный момент. Стабильный дипольный момент усиливает ее взаимодействие с полярной поверхностью $\text{Si}(001)$. Способность молекулы воды образовывать прочные водородные связи обуславливает ее высокую полярность. Полярность усиливает взаимодействие с кремниевой поверхностью. Поскольку CO_2 является линейной неполярной молекулой, она связана слабыми силами Ван дер Ваальса. По сравнению с другими, SO_2 имеет менее благоприятную энергию взаимодействия с $\text{Si}(001)$ из-за своего более низкого дипольного момента. Более низкая электроотрицательность атома серы по сравнению с азотом означает, что SO_2 менее нуклеофилен, чем NO_2 . Следовательно, он слабо взаимодействует с поверхностью кремния. Диоксид азота — это высокореактивная и электронодефицитная молекула с неспаренными электронами на атоме азота. Это делает NO_2 сильным электрофилом, позволяющим ему образовывать сильные взаимодействия с богатыми электронами неспаренными связями, присутствующими на поверхности $\text{Si}(001)$.

Оксид алюминия (Al_2O_3), особенно его поверхность (001), известен своей амфотерной природой, высокой химической стабильностью и сильной поверхностной поляризацией, что делает его пригодным для катализа и обнаружения газов. Было показано, что все четыре молекулы газа — H_2O , CO_2 , NO_2 и SO_2 — адсорбируются на этой поверхности. H_2O сильно взаимодействует посредством водородных связей и хемосорбции, диссоциируя с образованием поверхностных гидроксильных групп. Это повышает кислотность поверхности и протонную проводимость, что важно для обнаружения влаги и каталитических реакций (рис.7а). CO_2 в основном адсорбируется физически за счет ограниченного переноса заряда. На сухих поверхностях может происходить хемосорбция посредством образования карбоната или бикарбоната, но адсорбция, как правило, слабая. NO_2 проявляет сильное сродство, образуя нитритные или нитратные соединения посредством молекулярной или диссоциативной адсорбции. Дефекты поверхности и гидроксильные группы усиливают это взаимодействие, делая Al_2O_3 подходящим для обнаружения NO_2 . SO_2 легко хемосорбируется, образуя сульфитные или сульфатные соединения. Хотя это полезно для удаления загрязняющих веществ, сильное связывание со временем может привести к токсичности поверхности. Сила взаимодействия связана с молекулярной поляризацией и способностью образовывать водородные связи или участвовать в переносе электронов. CO_2 , будучи неполярным и не имея постоянного дипольного момента, демонстрирует самое слабое взаимодействие. NO_2 и SO_2 ,

будучи поляризованными, взаимодействуют еще сильнее, в то время как SO_2 демонстрирует особенно высокую энергию адсорбции благодаря своей неподеленной электронной паре и поляризации. Анатазная фаза TiO_2 широко используется в фотокатализе и стабилизации окружающей среды. Ее поверхность (001) содержит недокоординированные катионы Ti^{4+} и мостиковые атомы кислорода, которые служат кислотными и основными центрами Льюиса соответственно. H_2O была единственной молекулой, которая достигла стабильной адсорбции (рис.7b). Она адсорбируется посредством водородных связей и частичной диссоциации, образуя поверхностные гидроксильные группы, которые облегчают фотокаталитические реакции. CO_2 , NO_2 и SO_2 не достигли стабильной адсорбции в стандартизированных условиях. Их энергии взаимодействия были ниже порогового значения, необходимого для стабильного связывания, что указывает на отсутствие благоприятных активных центров на поверхности $\text{TiO}_2(001)$ с кислородным окончанием.

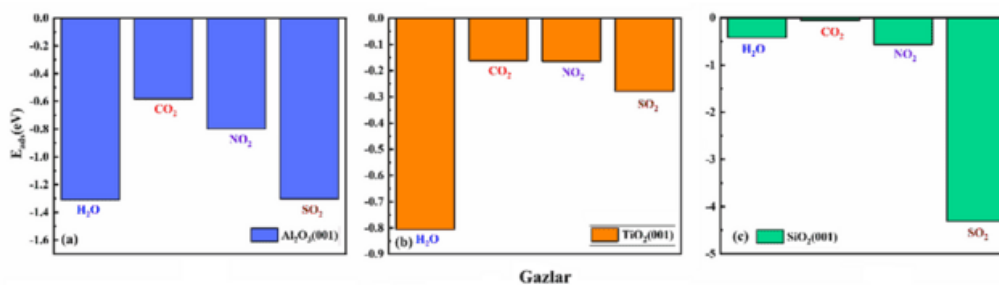


Рисунок 7. Энергии взаимодействия (a) $\text{Al}_2\text{O}_3(001)$, (b) $\text{TiO}_2(001)$ и (c) $\text{SiO}_2(001)$ с молекулами H_2O , CO_2 , NO_2 и SO_2 .

Отрицательный заряд поверхности с кислородным окончанием, обусловленный высокой электроотрицательностью кислорода, влияет на адсорбционное поведение. Хотя H_2O обладает хорошими водородными связями и поляризуемостью, она не имеет достаточной силы взаимодействия или подходящих конфигураций связей с другими молекулами. Диоксид кремния (SiO_2) химически инертен, но широко используется в датчиках и покрытиях. Его поверхностные взаимодействия определяются силанольными группами, кислотно-основными центрами Льюиса и дефектами. SO_2 была единственной молекулой, стабильно адсорбированной на поверхности $\text{SiO}_2(001)$ (рис.7c).

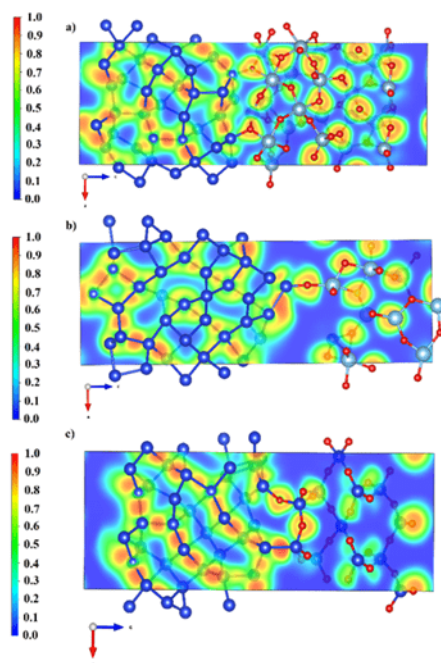


Рисунок 8 а,б,с. Локализация электронов для оптимизированных гетероструктурных интерфейсов Si(001)/Al₂O₃(001), Si(001)/TiO₂(001) и Si(001)/SiO₂(001).

Ее полярная природа и способность образовывать водородные связи с поверхностными гидроксильными группами способствуют хемосорбции. H₂O, CO₂ и NO₂ не адсорбировались в стандартизированных условиях, вероятно, из-за недостаточной энергии взаимодействия или отсутствия благоприятных мест связывания. Несмотря на свою инертность, SiO₂ проявляет избирательное сродство к SO₂, что предполагает потенциал для функционализации в приложениях обнаружения загрязняющих веществ. После оптимизации гетероструктур Si(001)/Al₂O₃(001), Si(001)/TiO₂(001) и Si(001)/SiO₂(001) в области интерфейса произошли несколько изменений. В частности, в анализе ELF интерфейса Si(001)/Al₂O₃(001) появилась связь Si-O-Al. Плотность электронов сконцентрировалась вокруг атомов кислорода, в то время как кремний и алюминий потеряли свои электроны. В результате кремний и алюминий стали положительными ионами, а кислород — отрицательным. Это отражает сильную ионную связь. Анализ зарядов Бадера также подтверждает это. Высокая электроотрицательность кислорода стремится притягивать электроны, что приводит к ионному характеру за счет локального накопления заряда в связях, включающих оксиды металлов, такие как Al₂O₃ и TiO₂. Значения заряда Бадера для атомов кислорода на границе раздела Si(001)/Al₂O₃(001) составляют $-1.378e$ и $-1.23e$, что указывает на накопление избыточных электронов. Наибольшая потеря заряда с поверхности кремния соответствует границе раздела Si(001)/Al₂O₃(001). Межфазное связывание на границах раздела других гетероструктур также происходит через кислород (рис. 8а,б,с). Рассматривая функцию распределения электронов (ELF) для

Si(001)/TiO₂(001), потеря электронов вокруг Ti указывает на отсутствие сильно локализованных электронных пар вокруг него. В анализе заряда Бадера для Si(001)/TiO₂(001) мы видим, что заряд $-1.27e$ обусловлен атомом кислорода, образующим межфазную связь Si–O–Ti. Аналогичные свойства переноса заряда можно наблюдать и в областях, соответствующих Al на границе раздела Si(001)/Al₂O₃(001). В гетероструктуре Si(001)/SiO₂(001) поверхности соединены связями Si–O–Si и Si–Si. Это указывает на то, что в области границы раздела поверхности соединены как ионными (Si–O–Si), так и ковалентными (Si–Si) связями. На границе раздела Si(001)/Al₂O₃(001) связь осуществляется в основном через связи Si–O–Al, которые имеют отчетливый ионный характер. Было рассчитано, что ширина запрещенной зоны каолина до легирования железом составляет 6.24 эВ. После легирования железом значение энергии запрещенной зоны резко уменьшилось. В результате значение энергии запрещенной зоны составило 2.8 эВ (рис. 9). Большое количество валентных электронов в железе приводит к появлению дополнительных электронных уровней в нижней части зоны проводимости. В результате электроны с более низкой энергией могут быстро переходить из валентной зоны в зону проводимости. После введения железа расстояние между атомами каолина значительно увеличилось. В результате постоянная решетки также увеличилась. Это дополнительно привело к уменьшению энергии запрещенной зоны.

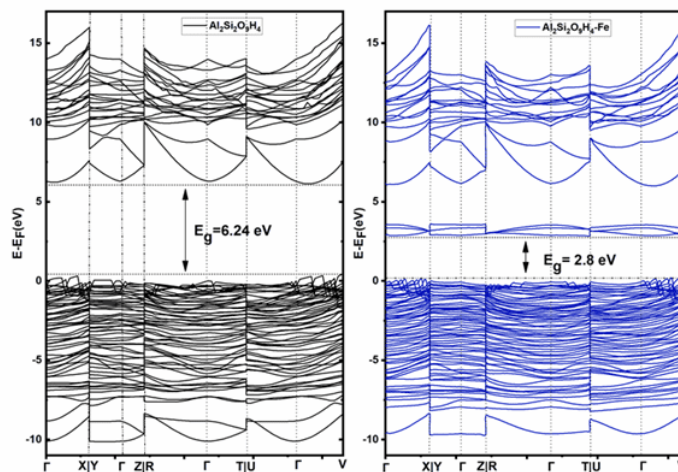


Рисунок 9. Зонная структура для случаев до и после добавления железа к каолину.

Была проанализирована зонная структура для случая легирования 8.33% Zn относительно количества атомов кремния в SiO₂ и для случая отсутствия легирования. Согласно этому анализу, при расчете чистого α -SiO₂ с использованием гибридной функции HSE06 с 45% чистой обменной долей Хартри-Фока (HF) энергия запрещенной зоны составила 9,06 эВ. После легирования цинком энергия запрещенной зоны составила 0.839 эВ. Это уменьшение также подтверждается анализом полной и частичной электронной

плотности состояний. Согласно этому анализу, из-за интерференции d-валентной орбитали Zn был создан дополнительный уровень p-орбитали O. В результате в запрещенной зоне появился дополнительный энергетический уровень (рис.10).

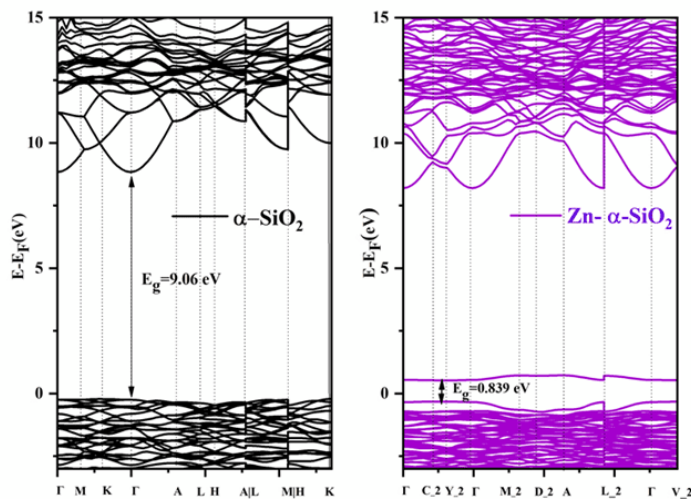


Рисунок 10. Зонная структура α -SiO₂ без и с легированием цинком.

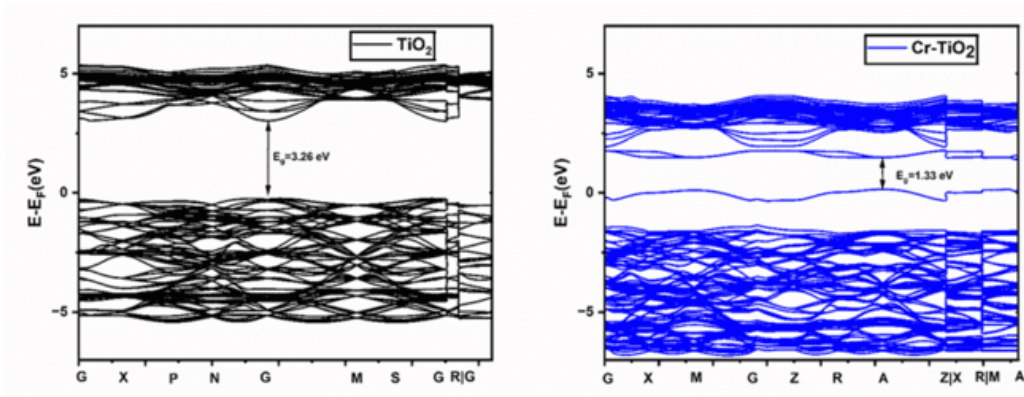


Рисунок 11. Зонная структура для случаев до и после введения хрома в анатаз TiO₂.

Расчетная энергия запрещенной зоны чистого анатаза TiO₂ составила 3.26 эВ. Это согласуется с экспериментальным значением. Это значение в основном соответствует полосе G-гамма-бриллиона. После добавления 6.25% Cr к анатазу TiO₂ пересчитанная энергия запрещенной зоны составила 1.33 эВ. Это соответствует полосе A-бриллиона (рис.11).

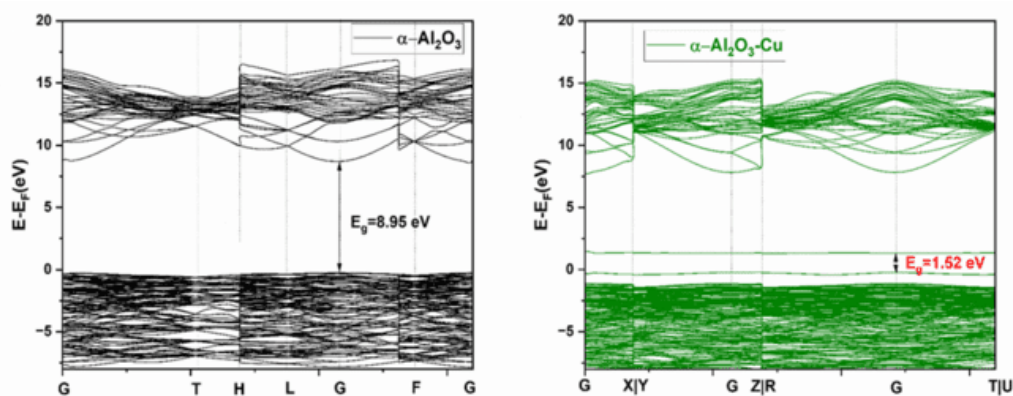


Рисунок 12. Зонная структура для случаев до и после введения Cu в $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$

При рассмотрении зонной структуры до и после добавления 4.1% Cu к $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ были получены результаты, согласующиеся с результатами, полученными из плотности электронных состояний. Энергия запрещенной зоны чистого $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ была рассчитана как 8.95 эВ. Это согласуется с экспериментальным значением. Это значение в основном соответствует полосе Γ_4 Бриллианта. При перерасчете энергии запрещенной зоны после добавления Cu к $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ ее значение составило 1.52 эВ (рис. 12). Это также соответствовало гамма-бриллионной зоне G.

В результате диссертационной работы была разработана недорогая технология получения порошка Al_2O_3 и SiO_2 из каолина, добываемого в районе Аральского моря, который используется для покрытия солнечных панелей и получения кремния, а также получен патент на полезную модель (рис. 13).

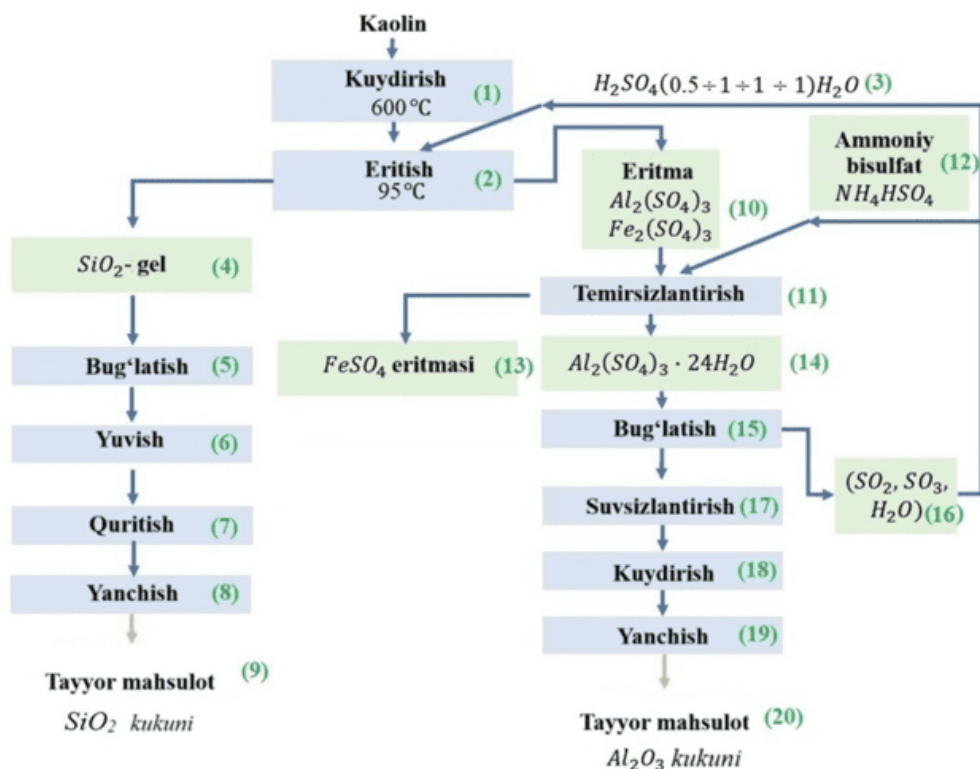


Рисунок 13. Технология извлечения Al_2O_3 и SiO_2 из каолина, полученного из региона Аральского моря.

С помощью этой технологии извлечение Al_2O_3 и SiO_2 из каолина осуществлялось в несколько этапов, а сам процесс проводился с использованием недорогих и широко доступных химических реагентов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Впервые на основе теории функционала плотности (в программе VASP Ab initio) было рассчитано взаимодействие поверхности Si(001), образованной из кремния, присутствующего в каолине, с газами, и установлено, что наибольшее взаимодействие соответствует NO₂, а наименьшее — молекуле SO₂.

2. В результате расчетов впервые установлено, что молекулы H₂O и SO₂ сильно взаимодействуют с поверхностями TiO₂(001) и Al₂O₃(001), а молекулы SO₂ — с поверхностью SiO₂(001). Одновременно было доказано, что поверхности проявляют слабое взаимодействие с молекулой CO₂.

3. В расчетах впервые была определена высокая степень локализации Si(001)/SiO₂(001) в граничной области ковалентными и ионными связями Si-Si, Si-O-Si.

4. Результаты расчетов показали, что на границах раздела Si(001)/TiO₂(001) и Si(001)/Al₂O₃(001) наблюдаются ионные связи Si-O-Ti и Si-O-Al, а наибольшая потеря заряда с поверхности кремния соответствует границе раздела Si(001)/Al₂O₃(001).

5. Впервые экспериментальные исследования выявили наличие пиков каолинита (Al₂Si₂O₅(OH)₄) и кварца (SiO₂) в образцах, а также пиков, соответствующих элементам Si, O, Al, Ti и связям Si2p, O1s, Al2p, Ti2s, Ti2p в образцах, полученных в процессе их обработки, что подтверждает присутствие Si, SiO₂, Al₂O₃, TiO₂.

6. Впервые спектроскопический анализ методом ИК-Фурье и Рамана выявил пики поглощения, соответствующие связям Al-O, Al-O-Si, Si-O, Al-OH, подтверждая присутствие Si, Al₂O₃ и SiO₂ в образцах.

7. Было установлено, что после введения железа в полупроводниксодержащий каолин энергия запрещенной зоны составляла 2.8 эВ, и эта энергия соответствовала ширине запрещенной зоны полупроводника.

8. Впервые было обнаружено, что при введении Cu в Al₂O₃, Cr в TiO₂ и Zn в SiO₂ значения ширины запрещенной зоны изменялись до 1.52 эВ, 1.33 эВ и 0.839 эВ соответственно, и эти значения соответствуют полупроводниковым полосам.

9. Порошки Al₂O₃ и SiO₂ были экономично извлечены из каолина, полученного из региона Аральского моря, и был получен патент номер FAP2529 на полезную модель «Способ получения порошка оксида алюминия»..

**SCIENTIFIC COUNCIL ON AWARDING OF SCIENTIFIC
DEGREES PhD.03/2025.27.12.FM.06.03 URGENCH
STATE UNIVERSITY NAMED AFTER ABU RAYHAN BIRUN**

URGENCH STATE UNIVERSITY NAMEDAFTER ABU RAYHAN BIRUNI

KURBANOV DAVRON SHAVKATOVICH

**THEORETICAL AND EXPERIMENTAL STUDY OF THE COMPOSITION
OF KAOLIN MATERIAL OBTAINED FROM THE ARAL SEA REGION**

01.04.10- PHYSICS OF SEMICONDUCTORS

ABSTRACT

**of dissertation of the doctor of philosophy (PhD) on physical and
mathematical sciences**

Urgench – 2026

The theme of dissertation of doctor of philosophy (PhD) on physical and mathematical sciences was registered at the Supreme Attestation Commission at the Cabinet of Ministers of Republic of Uzbekistan under number № B2025.4.PhD/FM1428

Dissertation has been prepared Urgench State University named after Abu Rayhan Biruni.

The abstract of the dissertation is posted in three languages (Uzbek, Russian, English (resume)) on the scientific council website (www.urdu.uz) and on the website of "Ziyonet" Information and educational portal (www.ziyonet.uz).

Research supervisors: Karazhanov Smagul Zhanabergenovich
Doctore of Physical and Mathematical Sciences

Research advisor: Yakubov Komiljon Ruzmetovich
Candidate of Physical and Mathematical Sciences,
Professor

Official opponents: Rustam Yavkachovich Rasulov
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor.
Amangeldi Bazarbaevich Kamalov
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

Leading organization: Karakalpak State University named after Berdaq

The defense will take place on "15th May" 2026 at 10:00 at the meeting of scientific council number PhD.03/2025.27.12.FM.06.03 at the Urgench State University named after Abu Rayhan Beruni. (Address: 220100, Uzbekistan, Urgench, st. Kh. Alimjana, house 14. Phone: (99862)224-66-11. Fax: (99862) 224-67-00, e-mail: info@urdu.uz)

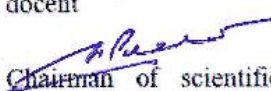
The doctoral dissertation is possible to review in Information-resource centre at the Urgench State University named after Abu Rayhan Beruni. (is registered № D-984). (Address: 220100, Uzbekistan, Urgench, st. Kh. Alimjana, house 14. Phone: (99862)224-66-11. Fax: (99862) 224-67-00. e-mail: arm@urdu.uz)

The dissertation abstract was distributed on "4" May 2026.
(mailing report № 13 on "4" May 2026)



U.O. Kutliyev
Chairman of Scientific Council on award of scientific degrees, doctor of physical and mathematical sciences, professor

U.P. Asatova
Scientific Secretary of scientific council on award of scientific degrees, PhD, docent


K.A. Ismaylov
Chairman of scientific seminar under scientific Council on award of scientific degrees, doctor of physical and mathematical sciences, professor

INTRODUCTION (Abstract for dissertation of Doctor of Philosophy (PhD))

Research Objective. The objective of this study is to establish the scientific and practical foundations for utilizing locally sourced kaolin from the Aral Sea region and the oxide materials derived from it as low-cost alternative semiconductor materials for modern sensor and microelectronic devices, through a comprehensive investigation of their phase-structural and electronic properties using advanced experimental and theoretical (computational) methods.

Research Object. Kaolin obtained from the Aral Sea region and the semiconductor and other materials contained within it.

Scientific Novelty of the Research is as follows:

For the first time, based on the phase-structural properties of kaolin and metakaolin from the Aral Sea region, the layered morphology and the mechanism of influence of covalent-ionic bonds (Al–O–Si, Si–O, and Al–OH) in the crystal lattice on physicochemical processes occurring on the material surface were elucidated;

for the first time, SEM morphological analysis revealed that the kaolin sample possesses an ordered layered structure, while metakaolin exhibits platy structural characteristics;

for the first time, the physical mechanisms of bandgap variation and the formation of additional semiconductor-like energy levels in kaolin, SiO₂, Al₂O₃, and TiO₂ materials doped with transition metals (Fe, Zn, Cu, Cr) were established;

for the first time, the formation regularities of interfacial bonds (Si–O–Si, Si–O–Ti, and Si–O–Al) at the boundaries of heterostructures composed of Si, Al₂O₃, TiO₂, and SiO₂, as well as the charge redistribution mechanisms (Bader charge transfer) along oxygen atoms in the interfacial region, were determined;

for the first time, based on gas-surface interaction models on heterostructured surfaces, it was demonstrated that Si and SiO₂ surfaces exhibit high adsorption activity and selectivity toward NO₂ and SO₂ gas molecules.

Implementation of the research results. Based on the scientific and practical results obtained from the theoretical and experimental investigation of the composition of kaolin materials from the Aral Sea region:

The results related to the formation of adsorption energies of 0.8 eV and 0.27 eV arising from the interaction of the titanium oxide surface with H₂O and SO₂ gases, respectively, were implemented within the international research project No. 101087367 “Antibacterial Smart Coatings,” carried out by the University of Exeter (United Kingdom) during 2023–2025 (reference letter No. 10-12-00 dated November 26, 2025, University of Exeter). As a result, the high adsorption capability of H₂O and SO₂ gas molecules on TiO₂ surfaces has been utilized to efficiently capture harmful gases in antibacterial coatings and reduce their environmental impact.

The results of the spectroscopic analysis of metakaolin, particularly the findings related to Si–O chemical bonding with a binding energy of 103.28 eV in the Si2p spectrum, were implemented in the international research project No. 23H0521 “Characterization of Defects in Composite Materials and Modeling of Surface Defects in Materials Science,” carried out in collaboration between Sichuan University (China) and industrial partners (reference letter No. 2025-11 dated

November 10, 2025, Sichuan University). As a result, the accuracy of defect modeling in interfacial regions of composite materials and the efficiency of predicting surface processes were significantly improved.

The technology of bandgap narrowing and the formation of an infrared-sensitive energy level at 0.839 eV through the incorporation of zinc (Zn) atoms into SiO₂ was implemented in the fundamental project FL-8824063221 “Investigation of Radiation Resistance of Silicon-Based Photovoltaic Solar Energy Converters Doped with Getter Impurity Atoms,” carried out at Tashkent State Technical University (reference letter No. 04-22-2097 dated December 16, 2025, Ministry of Higher Education, Science and Innovation of the Republic of Uzbekistan). As a result, a significant improvement was achieved in the operational performance of devices under infrared radiation conditions, as well as in the radiation resistance efficiency of photovoltaic converters.

The structure and scope of the thesis. The dissertation consists of an introduction, four chapters, general conclusions, a list of references, and appendices. The total length of the dissertation is 110 pages, including 6 tables and 57 figures and graphs.

E'LON QILINGAN ISHLAR RO'YXATI
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I bo'lim (I часть, part I)

1. Davron Kurbanov, Savithri Mysamy, Biao Zhou, Zabibulla Babayev, Rustam Bazarbayev, Atabek Allaniyazov, S.Balakumar, Guanggen Zeng, Komiljon Yakubov, Smagul Karazhanov. Investigation of the composition and morphology of raw materials from the Aral Sea region, February 2024, Zeitschrift für Physikalische Chemie 238(11) DOI: 10.1515/zpch-2023-0401 (Scopus, IF=4.13, Q2)

2. Matchonov Sh. K., Ruzmetova A. Sh, Yakubov Yu. Kh., Kurbanov D. Sh. Khodzhakul kaolins of Uzbekistan: composition, physical and chemical properties, and processing methods. October 2023. Obogashchenie Rud, DOI: 10.17580/or.2023.05.06. (Scopus,Q3)

3. D. Sh. Kurbanov, K. R.Yakubov, K. Vinoth Kumar, S. Premkumar, M. Klopov, R. B. Bazarbayev, S. Zh. Karazhanov. Investigation of CO₂, NO₂, SO₂, and H₂O gas adsorption on Al₂O₃, TiO₂, and SiO₂ surfaces.(MDPI. Chemosensors,IF 3.7 Q1. <https://doi.org/10.3390/chemosensors14030065>)

4. Kurbanov D. Sh., Yakubov K.R., Ismaylov Q.A., Bazarbayev R.B., Raximboyev R.Sh., Sultonboyeva N.D, R.B.Qadambayeva. Kremniy yuzasiga H₂O, CO₂, NO₂, SO₂ gaz molekularining ta'sirni zichlik funksional nazariyasi yordamida o'rganish. Вестник КГУ им. Бердаха. № 3 (70) 2025 (OAK jurnal).

5. D. Sh. Kurbanov, K. R. Yakubov, R. B. Bazarbayev, R. Sh. Rahimboyev, S. Zh. Karazhanov, A. A. Vardiyashvili. Analysis of electron distribution and chemical bonding at the interface region of Si(001)/ Al₂O₃(001), Si(001)/ TiO₂(001), and Si (001)/ SiO₂(001) heterostructures. International scientific journal «Science and Innovation» Special Issue: “Green energy and Economics”, May 2-3, 2025. (OAK jurnal).

6. Qurbanov Davron Shavkatovich, Bekchanov Munisbek Mahmudovich, Yakubov Komlijon Ruzmetovich. α -Al₂O₃ qoplamasi yordamida CdTe/Se yupqa qatlamli quyosh elementlarining samaradorligini oshirish. ILM SARCHASHMALARI.7.2023 Urganch – 2023. (OAK jurnal).

7. Qurbanov Davron Shavkatovich, Raximboyev Ravshanbek Rustamovich, Yakubov Komlijon Ruzmetovich. Sb₂Se₃/Si yupqa quyosh elementlarining samaradorligini α -Al₂O₃ qoplamasi yordamida oshirish. ILM SARCHASHMALARI.1-son (yanvar 2024) Urganch – 2024.(OAK jurnal)

8. D.Sh.Kurbanov, K.R.Yakubov, R.B.Bazarbayev, R.Sh.Raximboyev, S. Zh.Karazhanov. Changes in electronic properties of Cu doped α -Al₂O₃ . (Science and Education in Karakalpakstan. 2026 №1/1 ISSN 2181-9203).(OAK jurnal)

9. D.Sh.Kurbanov, K.R.Yakubov, R.B.Bazarbayev, R.Sh.Raximboyev. Impact of Fe Doping on the Electronic Structure of Kaolinite. Ilm sarchashmalari. 3-son (mart 2026) Urganch – 2026. (OAK jurnal).

10. D.Sh.Kurbanov, K.R.Yakubov, R.B.Bazarbayev, R.Sh.Raximboyev Calculation of Electronic Property Changes in Zn-Doped α -SiO₂. Using Density

Functional Theory Ilm sarchashmalari. 2-son (fevral 2026). Urganch – 2026. (OAK jurnal).

11. D.Sh.Kurbanov, K.R.Yakubov, R.B.Bazarbayev, R.Sh.Raximboyev, S. Zh.Karazhanov. Gibrid funksiya yordamida Cr kiritilgan anataza TiO₂ ning elektron xususiyatlarini hisoblash. Gibrid funksiya yordamida Cr kiritilgan anataza TiO₂ ning elektron xususiyatlarini hisoblash.(Xorazm Ma'mun akademiyasi axborotnomasi – 2/2-2026).

Patentlar

1.K.R.Yakubov, D.Sh.Kurbanov, R.B.Bazarbayev, Sh.K.Matchanov. “Alyuminiy oksidi kukunini olish usuli” Foydali model uchun patent № FAP2529

II bo‘lim (II часть, part II)

1. K.Yakubov, Z.Babaev, R. Bazarbaev, D. Kurbanov, S. Karazhanov. Mahalliy xomashyoni qo‘llab quyosh elementlari sirtini qoplovchi gidrofob material olish. “Mahalliy xomashyolar va ikkilamchi resurslar asosida innovatsion texnologiyalar” mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy konferensiya materiallari to‘plami. Urganch shahri, Urganch davlat universiteti, 2021. I jild 530 bet

2. K.Yakubov, R.Bazarbayev, D. Kurbanov, S. Karazhanov. Quyosh fotovoltaik panellari yuzasiga chang o‘tirish tezligini gidrofob materiallar yordamida kamaytirishni laboratoriya sharoitida tadqiq qilish. Физика фанининг техника соҳасидаги тутган ўрни Республика илмий-амалий конференция материаллари. 2021 йил 28-май Нукус – 2021.

3. K.Yakubov, D.Qurbanov, R. Bazarbayev, O.Avezmurotov, S. Karajanov. Alyuminiy oksidi plyonkasining gidrofobligini baholashda zarur modellarni moderinizatsiya qilish. The 2021 International Workshop “Functional materials for energy applications” (FUNMAT) Urgench – 2021

4. K. Yakubov, R. Bazarbayev, D. Qurbanov, Q. Wei, H.Qian, S. Karajanov. The study of the characteristics of crystalline solar cells in the climatic conditions of the pre-Aral Sea region. The 2021 International Workshop “Functional materials for energy applications”(FUNMAT) Urgench – 2021

5. K.Yakubov,R. Bazarbayev,D. Qurbanov,S. Karajanov. Fotovoltaik panellarda changga qarshi va yorug‘likni kam akslantiruvchi kompozit materiallar asosidagi qoplamalarni qo‘llash istiqbollari. “Яримўтказгичлар ва полимерлар физикасининг долзарб муаммолари” mavzusidagi xoriжий олимлар иштирокида Республика илмий-амалий анжумани материаллари Академик А.Т. Мамадалимовнинг 75 йиллик таваллудига бағишланади .2022 йил, 1 февраль, Тошкент-2022.

6. Vinoth Kumar K, Elizaveta Shmagina, Sergei Bereznev, Sujin P. Jose, Jeyanthinath Mayandi, S.Zh.Karazhanov. Encapsulation of YHO film with polysilazane for photochromic window application. Three-day International Workshop / Summer School & Course preparation on “Solar Water Splitting and Artificial Photosynthesis” (SWAP-2023). Namangan, 2023-yil.

7. D.Sh.Kurbanov, K.R.Yakubov, R.B.Bazarbayev, Vinoth Kumar K, Dr.S.Premkumar, M.Klopov, S.Zh. Karazhanov. Comparative study of gas adsorption on Al₂O₃(001) and TiO₂(001) surfaces using density functional theory. ECOLOGY AND RENEWABLE ENERGY TECHNOLOGIES (ERANET-2023) 22–23th

November, 2023 International Workshop and school. Karakalpak State University, Nukus, Karakalpakstan, Uzbekistan.

8. Davron Kurbanov, Savithri Mylsamy, Biao Zhou, Zabibulla Babayev. Rustam Bazarbayev, Atabek Allaniyazov, S.Balakumar, Guanggen Zeng, Komiljon Yakubov, Smagul Karazhanov. Investigation of the composition and morphology of raw materials from the Aral Sea region. Three-day International Workshop / Summer School & Course Preparation on “Solar Water Splitting And Artificial Photosynthesis”(SWAP)- 05 to 07 June 2023. Venue : Madurai Kamaraj University.

9. D.Sh.Kurbanov , K.R.Yakubov, R.B.Bazarbayev, S. Zh. Karazhanov, Vinoth Kumar K, Dr.S.Premkumar, M.Klopov. Gaz molekularining Al₂O₃(001) yuzasida adsorbsiyasini zichlik funksional nazariyasi yordamida o‘rganish. International Workshop “Functional materials for energy applications” (FUNMAT-2) 28 June,2024 Urgench State University, H. Olimjon Street 14, 220100 Urgench, Khorezm, Uzbekistan.

10. D.Sh. Kurbanov, K.R. Yakubov, R.B. Bazarbayev, R.Sh. Rahimboyev, S. Zh. Karazhanov. Kaolinga temir kiritilganda elektron xususiyatning o‘zgarishini DFT asosida tadqiq qilish. Материалы III международной конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы физики полупроводников, микро- и наноэлектроники» конференция посвящается 70-летию профессора Ш.Б. Утамурадовой ташкент, 20-21 июня 2025 г.

11. Kurbanov D.Sh., Karajanov S.J., Sultonboyeva N.D, Ro‘zmetov J. Orol bo‘yi hududidan olingan yarimo‘tkazgich tarkibli kaolin materialini nazariy va eksperimental o‘rganish. Материалы республиканской научно-практической конференции «Современные проблемы физики полупроводников» спфп-2025 посвященной 34-летию независимости Республики Узбекистан.7-8 ноября 2025 г.

12. Yakubov K.R., Boltayev J.M., Kurbanov D.Sh. Qayta tiklanuvchi energiya manbalarida gidrofobik materiallarning qo‘llanilishi va ularning samaradorlikka ta’siri. Каракалпакский государственный университет имени бердаха м а т е р и а л ы республиканской научно-практической конференции «современные проблемы физики полупроводников» спфп-2025 посвященной 34-летию независимости республики узбекистан 7-8 ноября 2025 г.

Dissertatsiya avtoreferati “Khwarezm publication” nashriyotida tahrir qilindi.

Bosishga ruxsat etildi: 30.04.2026-yil.
Bichimi 60x84^{1/16}, “Times New Roman”
garniturada raqamli bosma usulida bosildi.
Shartli bosma tabog‘i 3,5. Adadi: 100. Buyurtma: № 278
“Khwarezm travel” bosmaxonasida chop etildi
220502, Xorazm, Urganch tumani, Zargarlar mahallasi,
Marvarid ko‘cha 7-yo‘lak 4-uy