E-ISSN 2181-1466
9 772181 146004

ISSN 2181-6875
9 772181 687004

@buxdu_uz @buxdu1 @buxdu1 www.buxdu.uz

Научный вестник Бухарского государственного университета
Scientific reports of Bukhara State University

9(2)/2026

BUXORO DAVLAT UNIVERSITETI

BUXORO DAVLAT UNIVERSITETI ILMIY AXBOROTI



9(2)/2026

BUXORO DAVLAT UNIVERSITETI ILMIY AXBOROTI
SCIENTIFIC REPORTS OF BUKHARA STATE UNIVERSITY
НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК БУХАРСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

Ilmiy-nazariy jurnal
2026, № 9, sentabr

Jurnal 2003-yildan boshlab **filologiya** fanlari bo‘yicha, 2015-yildan boshlab **fizika-matematika** fanlari bo‘yicha, 2018-yildan boshlab **siyosiy** fanlar bo‘yicha, **tarix** fanlari bo‘yicha 2023-yil 29-avgustdan boshlab O‘zbekiston Respublikasi Oliy ta’lim, fan va innovatsiyalar Vazirligi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasining dissertatsiya ishlari natijalari yuzasidan ilmiy maqolalar chop etilishi lozim bo‘lgan zaruriy nashrlar ro‘yxatiga kiritilgan.

Jurnal 2000-yilda tashkil etilgan. Jurnal 1 yilda 12 marta chiqadi.

Jurnal O‘zbekiston matbuot va axborot agentligi Buxoro viloyat matbuot va axborot boshqarmasi tomonidan 2020-yil 24-avgust № 1103-sonli guvohnoma bilan ro‘yxatga olingan.

Muassis: Buxoro davlat universiteti
Tahririyat manzili: 200117, O‘zbekiston Respublikasi,Buxoro shahri Muhammad Iqbol ko‘chasi, 11-uy.
Elektron manzil: nashriyot_buxdu@buxdu.uz

TAHRIR HAY’ATI:

Bosh muharrir: Xamidov Obidjon Xafizovich, iqtisodiyot fanlari doktori, professor
Bosh muharrir o‘rinbosari: Samiyev Kamoliddin A’zamovich, texnika fanlari doktori (DSc), professor
Mas’ul kotib: Shirinova Mexrigiyo Shokirovna, filologiya fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD), dotsent

Kuzmichev Nikolay Dmitriyevich, fizika-matematika fanlari doktori (DSc), professor (N.P. Ogaryov nomidagi Mordova milliy tadqiqot davlat universiteti, Rossiya)
Danova M., filologiya fanlari doktori, professor (Bolgariya)
Margianti S.E., iqtisodiyot fanlari doktori, professor (Indoneziya)
Minin V.V., kimyo fanlari doktori (Rossiya)
Bezdudnaya A. G., Sankt-Peterburg davlat iqtisodiyot universiteti professori, iqtisodiyot fanlari doktori
Razumovskiy V. M., Sankt-Peterburg davlat iqtisodiyot universiteti professori, iqtisodiyot fanlari doktori
Zahidov A. A., Texas universiteti professori, fizika-matematika fanlari doktori
Kovalev I. V., Sibir Federal universiteti professori, texnika fanlari doktori
Ibrayeva K. T., Tyumen davlat universiteti, Ekologiya va qishloq xo‘jaligi biologiyasi instituti, texnika fanlari nomzodi
Tursunjon M., Shinjon Uyg‘ur Avtonom Rayoni Qishloq xo‘jaligi fanlari akademiyasi, Paxta ilmiy-tadqiqot instituti professori, qishloq xo‘jalik fanlari doktori
Ai Syan Tao, Shinjon Universiteti Aqlli qishloq xo‘jaligi instituti direktori, qishloq xo‘jalik fanlari doktori, professor
Tursunov D.A., O‘sh davlat universiteti professori, fizika-matematika fanlari doktori
Zagdkhorol Bayasgalan, Mongolian University of Science and Technology professori, fizika-matematika fanlari doktori
Gumerov Renat, Qozon federal universiteti professori, fizika-matematika fanlari doktori
Babayeva F. Sh., Ozarbayjon milliy fanlar akademiyasi professori, falsafa fanlari doktori
Tashqarayev R.A., texnika fanlari doktori (Qozog'iston)
Mo‘minov M.E., fizika-matematika fanlari nomzodi (Malayziya)
Mengliyev Baxtiyor Rajabovich, filologiya fanlari doktori, professor
Adizov Baxtiyor Rahmonovich, pedagogika fanlari doktori, professor
Rasulov To‘lqin Husenovich, fizika-matematika fanlari doktori (DSc), professor
Abuzalova Mexriniso Kadirovna, filologiya fanlari doktori, professor
Amonov Muxtor Raxmatovich, texnika fanlari doktori, professor

Barotov Sharif Ramazonovich, psixologiya fanlari doktori, professor, xalqaro psixologiya fanlari akademiyasining haqiqiy a'zosi (akademigi)
Baqoyeva Muhabbat Qayumovna, filologiya fanlari doktori, professor
Bo'riyev Sulaymon Bo'riyevich, biologiya fanlari doktori, professor
Jumayev Rustam G'aniyevich, siyosiy fanlar nomzodi, dotsent
Djurayev Davron Raxmonovich, fizika-matematika fanlari doktori, professor
Durdiyev Durdimurod Qalandarovich, fizika-matematika fanlari doktori, professor
Olimov Shirinboy Sharofovich, pedagogika fanlari doktori, professor
Qahhorov Siddiq Qahhorovich, pedagogika fanlari doktori, professor
Umarov Baqo Bafoyevich, kimyo fanlari doktori, professor
Murodov G'ayrat Nekovich, filologiya fanlari doktori, professor
O'rayeva Darmonoy Saidjonovna, filologiya fanlari doktori, professor
Navro'z-zoda Baxtiyor Nigmatovich, iqtisodiyot fanlari doktori, professor
Hayitov Shodmon Ahmadovich, tarix fanlari doktori, professor
To'rayev Halim Hojiyevich, tarix fanlari doktori, professor
Rasulov Baxtiyor Mamajonovich, tarix fanlari doktori, professor
Eshtayev Alisher Abdug'aniyevich, iqtisodiyot fanlari doktori, professor
Qahhorov Otabek Siddiqovich, iqtisodiyot fanlari doktori (DSc), professor
Quvvatova Dilrabo Habibovna, filologiya fanlari doktori, professor
Axmedova Shoira Nematovna, filologiya fanlari doktori, professor
Bekova Nazora Jo'rayevna, filologiya fanlari doktori (DSc), professor
Amonova Zilola Qodirovna, filologiya fanlari doktori (DSc), professor
Hamroyeva Shahlo Mirjonovna, filologiya fanlari doktori (DSc), dotsent
Nigmatova Lola Xamidovna, filologiya fanlari doktori (DSc), professor
Jamilova Bashorat Sattorovna, filologiya fanlari doktori, professor
Boboyev Feruz Sayfullayevich, tarix fanlari doktori
Jo'rayev Narzulla Qosimovich, siyosiy fanlar doktori, professor
Xolliyev Askar Ergashovich, biologiya fanlari doktori, professor
Artikova Hafiza To'ymurodovna, biologiya fanlari doktori, professor
Norboyeva Umida Toshtemirovna, biologiya fanlari doktori, professor
Hayitov Shavkat Ahmadovich, filologiya fanlari doktori, professor
Qurbonova Gulnoz Negmatovna, pedagogika fanlari doktori (DSc), professor
Ixtiyarova Gulnora Akmalovna, kimyo fanlari doktori, professor
Rasulov Zubaydullo Izomovich, filologiya fanlari doktori (DSc), professor
Mirzayev Shavkat Mustaqimovich, texnika fanlari doktori, professor
Yuldosheva Dilorom Nigmatovna, filologiya fanlari doktori (DSc), professor
Sharipov M. Z., fizika-matematika fanlari doktori, professor
Esanov Husniddin Qurbonovich, biologiya fanlari doktori, dotsent
Raupov Soyib Saidovich, tarix fanlari nomzodi, professor
Zaripov Gulmurot Toxirovich, texnika fanlari nomzodi, professor
Jumayev Jura, fizika-matematika fanlari nomzodi, professor
Qurbonova Manzila Bakiyevna, tarix fanlari nomzodi, professor
Ochilov Alisher To'lis o'g'li, tarix fanlari doktori, professor
Klichev Qybek Abdurasulovich, tarix fanlari doktori, dotsent
G'aybullayeva Nafisa Izattullayevna, filologiya fanlari doktori (DSc), professor
O'rinova Bozorgul Zokirovna, tarix fanlari doktori, dotsent

SERIYA: A N I Q V A T A B I I Y F A N L A R

MUNDARIJA *** CONTENTS *** СОДЕРЖАНИЕ		
FIZIKA * PHYSICS *** ФИЗИКА**		
Azimova N.Y.	Yarimo‘tkazgich materiallarning elektr va optik xossalariga harorat ta’sirini o‘rganish	4
Daminov R.Sh., Ochilov O., Malikov K.Kh., Yoldoshev O.Y., Qambarova M.S., Ne’matova Z.Z.	Extended analysis of the UV–Vis absorption spectrum of graphene oxide. Urbach energy, Tauc model ambiguity and sp^2 domain size	10
Esanov N.Q.	Qovushqoq-elastik qobiqlarning parametrik tebranishlari va turg‘unligi	16
Икрамов Р.Ғ., Мўминов Х.А., Умаров С.С.	Кубо-Гринвуд формуласи асосида аморф яримўтказгичларнинг экспоненциал оптик ютилиш коэффициенти спектрларини таҳлил қилиш	22
Ibadullayev N.A.	Magnit maydon ta’sirida misning lazerli ablatsiyasi: plazma-sirt issiqlik almashinuvi va ablatsiya chuqurligi	28
Sharipov M.Z., Ibrohimova S.Sh.	CoSi va $CoSi_2$ yupqa plyonkalarining optik yutilish spektrlari	35
Matnazarova Sh.Q., Isakjanova M.B., Xalilov U.B., Yusupov M.S.	Uglerodli nanostrukturalarning tabiiy (normal) va saraton (oksidlangan) hujayra membranalari modellari bilan o‘zaro ta’sir mexanizmlarini tadqiq qilish	40
Ruziev E.T.	Modeling and optimization of the angular distribution measurement for the $^{10}B(n,d)^{9}Be$ reaction at the NG-150 neutron generator	49
Sadullayev J.O., Sotimova M.K.	3D o‘lchamli grafen nanostrukturalar sinteziga lazer va material parametrlarining ta’siri	58
Shamuratov Sh.B., O‘rinov B.G‘.	Nanosekundli impulsli lazer ablatsiyasi yordamida metall sirtlarini qoraytirish	62
Soliyeva N.M.	Nanosuyuqliklardan tovush to‘lqinlari o‘tganda energiyaning so‘nish mexanizmlari va ularning nazariy tahlili	70
Axmedjanov F.R., Tugalov F.B.	Gamma nuri bilan nurlangan litiy ftorid kristallarida akustik to‘lqinlarning so‘nish mexanizmi	75

Usanov R.M.	$Co/SiO_2/n-Si\langle P,Zn\rangle$ moy strukturalarini tayyorlashda kimyoviy tozalash va magnetron changlatish texnologiyasi	80
Yuldashev O.Y., **Ochilov O.,** **Malikov K.Kh.,** **Daminov R.Sh.,** **Qarshiyev Z.A.,** **Toshboyev N.U.**	Skyrmion dynamics in magneto-optical tracks of ultra-thin Si(111)/CoFeB/MgO/CoFeB junctions	87
Sharafova T.S.	NI/SIO_2/n-SI<P> metall-oksid-yarimo‘tkazgich strukturalarini shakllantirish texnologiyasi va uning eksperimental-fizik asoslari	94
Djurayev D.R., **Ahadov A.A.,** **Abdujabborov L.A.**	O‘ta o‘tkazuvchanlikdagi izotop effektini tavsiflovchi turli nazariyalar	99
Sharopov U.B., **Kuryozov F.O.**	Magnetron changitish usulida olingan MoO_3 yupqa pardalarining atom tarkibi va zaryad holatlarini rentgen fotoelektron spektroskopiyasi yordamida tadqiq etish	106
Abrayeva S.T.	Katta dozali ion implantatsiyasi ta’sirida Si(111) sirt va hajm plazma tebranishlarining nazariy tahlili	112
Axmedov N.B.	Qovushqoq–elastik muhitdagi to‘ldiruvchili sferik qobiqda garmonik va nostatsionar to‘lqinlar difraksiyasi	117
Djurayev D.R., **Temirov O.F.,** **Ahadov A.A.**	NbN namunalaridagi o‘ta o‘tkazuvchanlik uchun nazariy modellar	123
Kabulov R.R., **Xojabayev B.K.**	Nikel oksidi (NiO) yupqa qatlamlarini vakuumda termal yotqizish usulida sintez qilish	128
Xalilov U.B., **Mirzayev S.Z.,** **Xusanova D.X.,** **Jo‘raboyev T.E.,** **Azamjonov A.A.**	π-STEKING holatidagi perilen trimerlarining elektron strukturasi	133
Muzafarov A.M., **Eshburiyev R.M.,** **Allaberganova G.M.,** **Fayzullayeva M.L.**	Gamma-spektrometrik usul yordamida Zarafshon daryosi suv havzasi tuproqlari tarkibidagi tabiiy radionuklidlar miqdorlarini aniqlash	139

Sabirova R.A., Sulaymonova G.X., Fayzullayev F.B., Salimova D.B., Isayev N.F.	Suyuqlik bilan aloqada bo‘lgan egri chiziqli quvurning majburiy tebranishlari	146
Маматкаримов О.О., Кучкоров Б.Х., Абдулхаев А.А., Носирдинов И.К.	Формирование полярной асимметрии на поверхности N^+-Si:Sb(100) после химической обработки HF и её проявление в вольт-амперной характеристике	152
Maxmanov U.K., Musurmonov Q.N., Aslanov B.A., Nematov V.F.	“Spray coating” usuli yordamida C_{60} fullereni yupqa qatlamini hosil qilish va uning optik xossalari tadqiqi	159
Turayev A.A., Ergashov A.Q., Sharipbayev S.S., Tursunov R.I.	TiO_2 asosidagi fotoanodli quyosh batareyalari morfologiyasini zamonaviy komyuter texnologiyalari yordamida o‘rganish	164
Тураев А.А., Шарипбаев С.С., Эргашов А.К., Турсунов Р.И.	Современные достижения в области морфологии наноструктур TiO_2 для эффективных DSSC	172
Safarov O.J.	Statistical test of regular black-hole geometry using HFQPO observations	178
Абдурахимов Ж.Т., Бекпулатов И.Р., Игамов Б.Дж.	Изучение морфологии, фазовой эволюции и оптических свойств тонких плёнок ZrO_2 с помощью раман-спектроскопии	185
KIMYO * CHEMISTRY *** ХИМИЯ**		
Khudoyberdiyev Sh.Sh., Abdukhakimova A.O.	Synthesis, structure and properties of N-Carboxymethyl chitosan	192
INFORMATIKA * INFORMATICS *** ИНФОРМАТИКА**		
Hayitov U.H., Egamberdiyeva Sh.U.	Moodle LMS platformasida sun’iy intellekt texnologiyalari asosida talabalar akademik monitoringi va moslashuvchan tavsiya tizimini ishlab chiqish	196
Xamroyev U.N.	Markov zanjirli Monte-Karlo usullari konvergensiyasining algoritmik tahlili va ma’lumotlar tuzilmalari bilan bog‘liqligi	201

UO‘K 621.315.592

YARIMO‘TKAZGICH MATERIALLARNING ELEKTR VA OPTIK XOSSALARIGA HARORAT TA’SIRINI O‘RGANISH

Azimova Nazokat Yoqubjon qizi,
Namangan davlat texnika universiteti
2-son akademik litseyi fizika fani o‘qituvchisi
nazokatazimova07@gmail.com

Annotatsiya. *Yarimo‘tkazgich materiallarning elektr va optik xossalari haroratga kuchli bog‘liq. Harorat o‘zgarishi kristall panjara tebranishlari, energetik zonalar, zaryad tashuvchilar konsentratsiyasi va harakatchanligiga ta’sir qiladi. Ushbu maqolada kremniy (Si), germaniy (Ge) va galliy arsenid (GaAs) misolida haroratning yarimo‘tkazgich xossalariga ta’siri nazariy jihatdan tahlil qilindi. Varshni tenglamasi asosidagi hisoblashlar 77–400 K oralig‘ida harorat oshishi bilan taqiqlangan energetik soha kengligi kamayishini va optik yutilish chegarasi uzunroq to‘lqinlar tomon siljishini ko‘rsatdi. Shu bilan birga, harorat oshganda zaryad tashuvchilar konsentratsiyasi ortadi, biroq fononlar bilan sochilish tufayli ularning harakatchanligi pasayadi. Natijalar yarimo‘tkazgichli datchiklar, fotodetektorlar, quyosh elementlari va optoelektron qurilmalarni loyihalashda harorat omilini hisobga olish muhimligini ko‘rsatadi.*

Kalit so‘zlar*: yarimo‘tkazgich, kremniy, germaniy, galliy arsenid, harorat, elektr o‘tkazuvchanlik, optik yutilish, fotoo‘tkazuvchanlik, Varshni tenglamasi.*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Аннотация. *Электрические и оптические свойства полупроводниковых материалов в значительной степени зависят от температуры. Изменение температуры влияет на колебания кристаллической решётки, энергетическую зонную структуру, концентрацию и подвижность носителей заряда. В данной статье теоретически проанализировано влияние температуры на свойства полупроводников на примере кремния (Si), германия (Ge) и арсенида галлия (GaAs). Расчёты, выполненные на основе уравнения Варшни, показали, что при повышении температуры в диапазоне 77–400 K ширина запрещённой зоны уменьшается, а край оптического поглощения смещается в область более длинных волн. Одновременно с повышением температуры концентрация носителей заряда увеличивается, однако их подвижность снижается вследствие усиления рассеяния на фононах. Полученные результаты подтверждают необходимость учёта температурного фактора при проектировании полупроводниковых датчиков, фотодетекторов, солнечных элементов и оптоэлектронных устройств.*

Ключевые слова*: полупроводник, кремний, германий, арсенид галлия, температура, электропроводность, оптическое поглощение, фотопроводимость, уравнение Варшни.*

STUDY OF THE EFFECT OF TEMPERATURE ON THE ELECTRICAL AND OPTICAL PROPERTIES OF SEMICONDUCTOR MATERIALS

Abstract. *The electrical and optical properties of semiconductor materials are strongly dependent on temperature. Variations in temperature affect crystal lattice vibrations, energy band structure, charge carrier concentration, and carrier mobility. This article theoretically analyzes the effect of temperature on semiconductor properties using silicon (Si), germanium (Ge), and gallium arsenide (GaAs) as representative materials. Calculations based on the Varshni equation showed that, within the temperature range of 77–400 K, an increase in temperature leads to a decrease in the band gap energy and shifts the optical absorption edge toward longer wavelengths. At the same time, the concentration of charge carriers increases with temperature, whereas their mobility decreases due to enhanced phonon scattering. The obtained results demonstrate the importance of considering temperature effects in the design of semiconductor sensors, photodetectors, solar cells, and optoelectronic devices.*

Keywords*: semiconductor, silicon, germanium, gallium arsenide, temperature, electrical conductivity, optical absorption, photoconductivity, Varshni equation.*

Kirish. Zamonaviy elektronika, mikroelektronika va optoelektronikaning rivojlanishini yarimo‘tkazgich materiallarsiz tasavvur qilish qiyin. Kremniy asosidagi integral mikrosxemalar, quyosh elementlari, turli sensorlar, galliy arsenid asosidagi yorug‘lik chiqaruvchi va yuqori chastotali qurilmalar, germaniy va uning birikmalari asosidagi infraqizil fotodetektorlar bugungi texnologik tizimlarning muhim qismini tashkil etadi. Bu qurilmalarning ishonchli ishlashi esa ular tayyorlangan materialning fizik parametrlarini aniq bilishni talab qiladi.

Yarimo‘tkazgichlarning metallardan asosiy farqlaridan biri ularning elektr xossalari tashqi sharoitga juda sezgir ekanidir. Harorat, yorug‘lik, elektr va magnit maydon, bosim hamda ionlashtiruvchi nurlanish ta’sirida yarimo‘tkazgichning elektr o‘tkazuvchanligi bir necha tartibga o‘zgarishi mumkin. O‘zbek olimlari M.K. Baxodirxonov, N.F. Zikrillayev va X.M. Iliyev tomonidan yaratilgan “Yarimo‘tkazgichlar fizikasi” darsligida ham yarimo‘tkazgich materiallarining elektrofizik parametrlari tashqi ta’sirlar, xususan, harorat o‘zgarishi natijasida keskin o‘zgarishi qayd etilgan. Aynan shu xususiyat yarimo‘tkazgichlardan termodatchik va boshqa sezgir qurilmalar yaratishda foydalanish imkonini beradi.

Haroratning ta’siri birgina elektr o‘tkazuvchanlik bilan cheklanmaydi. Kristall harorati oshganda panjara atomlarining tebranish amplitudasi ortadi. Bu jarayon elektronlarning kristall panjara bilan o‘zaro ta’sirini kuchaytiradi va energetik zonalarning holatini o‘zgartiradi. Odatda harorat ortishi bilan ko‘pchilik klassik yarimo‘tkazgichlarda taqiqlangan energetik soha kengligi (E_g) kamayadi. Ushbu hodisa optik yutilish chegarasi, fotolyuminessensiya maksimumi, fotosezgirlik va yarimo‘tkazgichli lazerlarning nurlanish to‘lqin uzunligiga bevosita ta’sir ko‘rsatadi. Varshni tomonidan 1967-yilda taklif qilingan yarim empirik tenglama Si, Ge, GaAs, InP, InAs va boshqa qator yarimo‘tkazgichlarda taqiqlangan soha kengligining haroratga bog‘lanishini ifodalashda keng qo‘llanadi.

Yarimo‘tkazgichlarda elektr o‘tkazuvchanlikning haroratga bog‘liqligi yanada murakkabdir. Elektr o‘tkazuvchanlik

$$\sigma = q(n\mu_n + p\mu_p)$$

munosabat bilan ifodalanadi. Bu yerda (q) — elementar zaryad, (n) va (p) — elektron hamda kovaklar konsentratsiyasi, (\mu_n) va (\mu_p) esa ularning harakatchanligi. Demak, haroratning elektr o‘tkazuvchanlikka ta’sirini baholashda zaryad tashuvchilar soni bilan bir qatorda ularning kristalldagi harakat sharoitini ham hisobga olish zarur.

Harorat ortishi ko‘pincha zaryad tashuvchilar konsentratsiyasining ortishiga sabab bo‘ladi. Donor yoki akseptor qo‘shimchali yarimo‘tkazgichlarda past haroratlarda kirishma atomlarining hammasi ham ionlashgan bo‘lmaydi. Harorat oshgani sari ular ionlashib, erkin zaryad tashuvchilar soni ortadi. O‘zbek tilidagi zamonaviy “Yarimo‘tkazgichlar fizikasi” darsligida donorli yarimo‘tkazgichlarda elektron konsentratsiyasi harorat ortishi bilan dastlab eksponensial ko‘payishi, donorlar to‘liq ionlashgandan so‘ng ma’lum harorat oralig‘ida deyarli o‘zgarmasligi va yanada yuqori haroratda xususiy o‘tkazuvchanlik ustunlik qila boshlashi ko‘rsatilgan.

Biroq zaryad tashuvchilarning harakatchanligi ham haroratga bog‘liq. Harorat ko‘tarilganda kristall panjaradagi fononlar soni va panjara tebranishlarining intensivligi ortadi. Natijada elektron va kovaklarning fononlarda sochilish ehtimoli oshib, ularning harakatchanligi kamayadi. Kremniy uchun Arora, Hauser va Roulston tomonidan ishlab chiqilgan model elektron va kovaklar harakatchanligini 250–500 K harorat oralig‘ida ham temperatura, ham legirlash konsentratsiyasiga bog‘liq holda tavsiflaydi. GaAsda esa yuqoriroq haroratlarda elektronlarning qutbiy optik fononlar bilan sochilishi muhim rol o‘ynashi aniqlangan.

Optik xossalarda ham shunga o‘xshash murakkab holat kuzatiladi. Yarimo‘tkazgichda fotonning yutilishi elektronning valent zonadan o‘tkazuvchanlik zonasiga o‘tishi bilan bog‘liq. O‘zbek fizik adabiyotlarida GaAs kabi materiallar to‘g‘ri zonali, Si va Ge esa bilvosita zonali yarimo‘tkazgichlar sifatida qaraladi. To‘g‘ri zonali materialda elektronning optik o‘tishi foton orqali nisbatan bevosita yuz bersa, kremniy va germaniyda impuls saqlanishi uchun fonon ishtiroki ham zarur bo‘ladi. Shu sababli materialning zona tuzilishi optik yutilish va nurlanish samaradorligiga katta ta’sir ko‘rsatadi.

Mazkur ishning maqsadi Si, Ge va GaAs misolida yarimo‘tkazgichlarning elektr hamda optik xossalariga harorat ta’sirining fizik mexanizmlarini tahlil qilish, taqiqlangan soha kengligidagi o‘zgarishni sonli baholash va olingan natijalarning yarimo‘tkazgichli qurilmalar ishlashidagi ahamiyatini ochib berishdan iborat.

Material va metodlar. Tadqiqot nazariy-tahliliy xarakterga ega bo‘lib, unda yangi eksperimental o‘lchovlar o‘tkazilmadi. Asosiy materiallar sifatida yarimo‘tkazgichlar fizikasi bo‘yicha O‘zbekistonda chop etilgan oliy ta’lim darslik va o‘quv qo‘llanmalari, shuningdek xalqaro ilmiy jurnallarda nashr etilgan klassik va zamonaviy tadqiqotlardan foydalanildi.

Milliy manbalardan M.K. Baxodirxonov, N.F. Zikrillayev va X.M. Iliyevning 2020-yilda “Tafakkur” nashriyotida chop etilgan “Yarimo‘tkazgichlar fizikasi” darsligi asosiy manbalardan biri sifatida olindi. Ushbu darslik texnika oliy o‘quv yurtlari talabalari, doktorantlar va pedagoglar uchun mo‘ljallangan bo‘lib, unda yarimo‘tkazgichlarning kristall tuzilishi, energetik zonalari, zaryad tashuvchilar statistikasi, elektr o‘tkazuvchanlik, fotoelektrik hodisalar va yarimo‘tkazgichli asboblarning fizik asoslari yoritilgan.

Shuningdek, A. Teshaboyev, S. Zaynobidinov, S. Vlasov, I. Karimov va V. Abduazimovning “Yarimo‘tkazgichlar sirti fizikasi” o‘quv qo‘llanmasidan foydalanildi. Mazkur manba O‘zbekiston Respublikasi Oliy va o‘rta maxsus ta’lim vazirligi tomonidan oliy o‘quv yurtlari uchun tavsiya etilgan bo‘lib, yarimo‘tkazgich sirtidagi fizik-kimyoviy jarayonlar va tashqi omillar ta’sirini yoritadi. A. Teshaboyev, S. Zaynobidinov va E.A. Musayevning “Yarimo‘tkazgichlar va yarimo‘tkazgichli asboblar texnologiyasi” o‘quv qo‘llanmasi ham mavzuning texnologik jihatlarini tahlil qilishda asosiy milliy manbalardan biri bo‘ldi.

Taqiqlangan energetik sohaning haroratga bog‘liqligini hisoblashda Varshni tenglamasi qo‘llanildi:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T+\beta}$$

Bu yerda (E_g(0)) — absolyut nol haroratdagi taqiqlangan zona kengligi, (T) — absolyut harorat, (\alpha) va (\beta) esa muayyan material uchun tajribadan aniqlangan koeffitsiyentlardir. Varshni ushbu ifodaning Si, Ge, GaAs va boshqa yarimo‘tkazgichlarning eksperimental natijalarini qoniqarli darajada ifodalashini ko‘rsatgan.

Hisoblashlarda kremniy uchun (E_g(0)=1.166) eV, (\alpha=4.73\times10^{-4}) eV/K va (\beta=636) K; germaniy uchun (E_g(0)=0.7437) eV, (\alpha=4.77\times10^{-4}) eV/K va (\beta=235) K; GaAs uchun esa (E_g(0)\approx1.519) eV, (\alpha\approx5.405\times10^{-4}) eV/K va (\beta=204) K qiymatlaridan foydalanildi. GaAs uchun ushbu parametrlar ilmiy adabiyotlarda keng qo‘llanadi.

Optik yutilish chegarasining taxminiy to‘lqin uzunligi

$$\lambda_g \approx \frac{1240}{E_g}$$

munosabat orqali hisoblandi. Bu yerda (E_g) elektronvoltlarda, (\lambda_g) esa nanometrlarda ifodalanadi. Hisoblashlar 77 K, 300 K va 400 K haroratlar uchun bajarildi. Natijalar haqiqiy namunadagi kirishmalar, nuqsonlar, deformatsiya va boshqa omillarni hisobga olmaydigan idealizatsiyalangan baholash sifatida talqin qilindi.

Natijalar. Hisoblash natijalari birinchi navbatda haroratning energetik zonalar tuzilishiga sezilarli ta’sirini ko‘rsatdi. Kremniy uchun 77 K haroratda taqiqlangan soha kengligi taxminan 1.162 eV ga teng bo‘lsa, 300 K da 1.121 eV, 400 K da esa 1.093 eV gacha kamayadi. Demak, 77 K dan 400 K gacha bo‘lgan harorat oralig‘ida kremniyning taqiqlangan energetik sohasi qariyb 0.069 eV ga torayadi.

Germaniyda harorat ta’siri nisbatan kuchliroq namoyon bo‘ladi. Hisoblashga ko‘ra, uning fundamental taqiqlangan soha kengligi 77 K da 0.735 eV atrofida bo‘lsa, 300 K da 0.663 eV va 400 K da 0.624 eV gacha kamayadi. Bunday o‘zgarish germaniyning infraqizil diapazondagi optik xususiyatlariga sezilarli ta’sir ko‘rsatadi.

GaAs uchun ham xuddi shunday qonuniyat kuzatiladi. 77 K da hisoblangan (E_g) qiymati 1.508 eV, 300 K da 1.422 eV, 400 K da esa 1.376 eV ni tashkil etdi. Xona haroratidagi hisoblangan qiymat GaAs uchun tajribada keng qabul qilingan taxminan 1.42 eV qiymat bilan yaxshi mos keladi. Zamonaviy temperatura-bog‘liq fotolyuminessensiya tadqiqotlarida ham GaAs uchun xona haroratida taxminan 1.422 eV va past haroratda 1.52 eV ga yaqin qiymatlar kuzatilgan.

Bu natijaning fizik sababi, avvalo, harorat ortishi bilan kristall panjaraning issiqlik kengayishi va elektron–fonon o‘zaro ta’sirining kuchayishidir. Panjara atomlarining muvozanat holati atrofidagi tebranish amplitudasi ortgani sari elektron energetik holatlarining o‘rtacha energiyasi ham o‘zgaradi. Natijada valent va o‘tkazuvchanlik zonalarining chetlari o‘zaro yaqinlashib, (E_g) kamayadi. Varshni tenglamasi ushbu jarayonni empirik shaklda juda qulay ifodalasa-da, uning parametrlarini fundamental fizik doimiylar sifatida emas, muayyan harorat intervaliga moslashtirilgan parametrlar sifatida talqin qilish to‘g‘riroqdir. Elektron–fonon o‘zaro ta’siriga asoslangan tadqiqotlarda ham Varshni modelining ayrim sharoitlarda yaqinlashuv ekanligi ko‘rsatilgan.

Taqiqlangan soha torayishi optik yutilish chegarasining uzun to‘lqinlar tomon siljishiga olib keladi. Kremniy uchun 77 K da hisoblangan yutilish chegarasi taxminan 1067 nm bo‘lsa, 300 K da 1107 nm, 400 K da esa 1135 nm ga yaqinlashadi. Germaniyda mos ravishda taxminan 1688, 1869 va 1989 nm qiymatlar olinadi. GaAsda esa yutilish chegarasi 77 K da 823 nm atrofida bo‘lib, xona haroratida 872 nm va 400 K da taxminan 901 nm tomon siljiydi.

Bu hodisa optoelektronikada “qizil siljish” sifatida amaliy ahamiyat kasb etadi. Masalan, yarimo‘tkazgichli yorug‘lik manbai yoki lazerning ishchi harorati ortganda uning nurlanish maksimumi

koʻpincha kattaroq toʻlqin uzunligi tomon siljiydi. Fotodetektorda esa sezgirlik spektrining chegarasi ham harorat bilan oʻzgaradi. Demak, yuqori aniqlik talab qilinadigan optik tizimlarda nafaqat elektr parametrlarni, balki spektral xarakteristikalarni ham temperaturaviy stabilizatsiya qilish zarur.

Kirishmali yarimoʻtkazgichlarda elektr xossalarining temperatura boʻyicha oʻzgarishini shartli ravishda bir necha fizik rejimlar orqali tushuntirish mumkin. Juda past haroratda donor va akseptorlarning bir qismi ionlashmagan holatda boʻladi va erkin tashuvchilar soni kam boʻladi. Harorat oshganda kirishmalar ionlasha boshlaydi va oʻtkazuvchanlik tez ortadi. Keyingi harorat oraligʻida donor yoki akseptorlar deyarli toʻliq ionlashib boʻlganligi sababli asosiy zaryad tashuvchilar konsentratsiyasi nisbatan barqaror boʻladi. Shu vaqtda panjara sochilishi kuchaygani uchun harakatchanlikning kamayishi oʻtkazuvchanlik oʻzgarishida muhim rol oʻynay boshlaydi. Nihoyat, yuqori haroratda xususiy elektron–kovak juftlari generatsiyasi keskin kuchayib, xususiy oʻtkazuvchanlik ustunlashadi. Bu holat Oʻzbekiston oliy ta’limida foydalaniladigan “Yarimoʻtkazgichlar fizikasi” darsligida ham zaryad tashuvchilar konsentratsiyasi va Fermi sathining haroratga bogʻliqligi orqali batafsil tushuntirilgan.

Harorat optik yutilish jarayoniga faqat (E_g) ning oʻzgarishi orqali emas, balki fononlarning roli orqali ham ta’sir koʻrsatadi. Bu ayniqsa Si va Ge kabi bilvosita zonali yarimoʻtkazgichlar uchun muhim. Bunday materiallarda optik oʻtish vaqtida elektron impulsi oʻzgarishi kerakligi sababli fonon yutilishi yoki chiqarilishi jarayonda qatnashadi. Harorat oshganda fononlarning statistik taqsimoti oʻzgaradi, shuning uchun bilvosita optik oʻtishlar ehtimoli va yutilish spektrining shakli ham temperaturaga bogʻliq boʻladi.

GaAsda esa oʻtkazuvchanlik zonasining minimumi va valent zonaning maksimumi bir xil (k) qiymatiga mos kelgani sababli toʻgʻri optik oʻtishlar ustun. Oʻzbek darsligida GaAs toʻgʻri zonali, Si va Ge esa bilvosita zonali materiallar sifatida koʻrsatilgan. Shu sababli GaAs yorugʻlik chiqaruvchi diod va yarimoʻtkazgichli lazerlar uchun Si ga qaraganda ancha qulay materialdir. Biroq harorat oshishi bilan GaAsda ham nurlanish energiyasining pasayishi, spektrning kengayishi va ayrim hollarda fotolyuminessensiya intensivligining kamayishi kuzatiladi. Soʻnggi temperatura-bogʻliq GaAs tadqiqotlarida yuqori haroratda nurlanish intensivligining termik soʻnishi nurlanmaydigan rekombinatsiya markazlari faollashishi bilan bogʻlangan.

Fotooʻtkazuvchanlik ham haroratga kuchli bogʻliq. Bunda bir tomondan fotonlar yaratadigan qoʻshimcha elektron–kovak juftlari, ikkinchi tomondan ularning yashash vaqti va rekombinatsiya tezligi muhim. Harorat ayrim tuzoq va rekombinatsiya markazlarini faollashtirishi mumkin. Natijada fototokning qiymati harorat bilan monoton ravishda oshishi shart emas. Oʻzbek olimlari kompensatsiyalangan kremniyda fotooʻtkazuvchanlikning harorat ta’sirida soʻnish hodisasidan past haroratli termodatchiklar yaratishda foydalanish mumkinligini ham koʻrsatganlar.

Umuman, hisoblash va adabiyot tahlili shuni koʻrsatadiki, harorat yarimoʻtkazgichning elektr va optik xossalarini bitta parametr orqali emas, oʻzaro bogʻlangan bir qancha fizik mexanizmlar orqali oʻzgartiradi. Taqiqlangan soha kengligi, tashuvchilar konsentratsiyasi, harakatchanlik, rekombinatsiya tezligi va fononlar sonining bir vaqtda oʻzgarishi real qurilmaning yakuniy temperaturaviy xarakteristikasini belgilaydi.

Muhokama. Olingan natijalarni amaliy nuqtayi nazardan baholaganda harorat ta’sirini yarimoʻtkazgich qurilmalari uchun ham foydali, ham salbiy omil sifatida koʻrish mumkin. Haroratga yuqori sezgirlik termistor, termodatchik, bolometr va ayrim infraqizil detektorlarning ishlash prinsipining oʻzini tashkil etadi. Shu bilan birga, mikroprotsessor, kuch elektronikasidagi diod yoki tranzistor, quyosh elementi va lazerda ortiqcha qizish qurilma parametrlarining belgilangan qiymatdan chetga chiqishiga olib keladi.

Kremniy asosidagi elektron qurilmalarda ishchi harorat oshganda xususiy tashuvchilar konsentratsiyasining ortishi teskari toklarning kuchayishiga sabab boʻlishi mumkin. p–n oʻtishli qurilmalarda bu jarayon ayniqsa muhim, chunki teskari toʻyinish toki temperaturaga juda sezgir. Shu bilan bir vaqtda tashuvchilar harakatchanligining kamayishi tranzistor kanali yoki hajmiy yarimoʻtkazgich qarshiligiga ta’sir qiladi. Yuqori quvvatli qurilmada elektr energiyasining bir qismi issiqlikka aylanishi, harorat oshishi va natijada elektr parametrlarning yana oʻzgarishi issiqlik bilan bogʻliq qayta aloqa mexanizmini yuzaga keltirishi mumkin. Shu sababli zamonaviy yarimoʻtkazgichli tizimlarda issiqlikni olib chiqish muammosi material tanlash kabi muhim muhandislik vazifasidir.

Haroratning optik xossalarga ta’siri quyosh energetikasida ham muhim. Quyosh elementi qiziganida yarimoʻtkazgichning taqiqlangan sohasi kamayadi. Bu ma’lum darajada uzunroq toʻlqinli fotonlarni yutish imkonini kengaytirishi mumkin, biroq ochiq zanjir kuchlanishining pasayishi va rekombinatsiya jarayonlarining kuchayishi umumiy samaradorlikka salbiy ta’sir koʻrsatishi mumkin. Demak, quyosh batareyasining faqat yorugʻlik yutishi emas, uning ishchi temperaturasi va issiqlik almashinuvi ham hisobga olinishi zarur.

GaAs va boshqa III–V birikmalarda nurlanish toʻlqin uzunligining temperaturaga bogʻliqligi optik aloqa va lazer texnologiyasida alohida ahamiyat kasb etadi. Masalan, lazer diodi muayyan toʻlqin uzunligida

ishlashi kerak bo‘lgan optik tizimda kristall haroratining bir necha o‘n kelvinga o‘zgarishi nurlanish maksimumining siljishiga sabab bo‘lishi mumkin. Vurgaftman, Meyer va Ram-Mohan tomonidan III–V yarimo‘tkazgichlar parametrlarining keng qamrovli tahlilida ham zona parametrlarining haroratga bog‘lanishi optoelektronik tuzilmalarni hisoblash uchun muhim kattalik sifatida qaralgan.

Natijalardan yana bir muhim xulosa kelib chiqadi: yarimo‘tkazgichning temperaturaviy xossasini faqat uning kimyoviy nomi bilan aniqlash yetarli emas. Bir xil kremniy materiali turli legirlash darajasida, turli nuqson konsentratsiyasida yoki turli kristall sifati sharoitida haroratga turlicha javob beradi. Past haroratda ionlashgan kirishmalar va nuqsonlarda sochilish ustun bo‘lishi mumkin, yuqori haroratda esa fononlar bilan sochilish asosiy mexanizmga aylanadi. GaAsda bir turdagi fonon, Si da boshqa fonon tarmoqlari transport jarayoniga katta hissa qo‘shishi mumkin. Birinchi prinsiplar asosidagi hisoblashlarda ham Si va GaAs uchun fonon-chegaralangan elektron va kovaklar harakatchanligining fizik mexanizmlari bir xil emasligi ko‘rsatilgan.

Optik o‘lchovlarda ham materialning to‘g‘ri yoki bilvosita zonali ekanini hisobga olish zarur. GaAsning yutilish chegarasini fotolyuminessensiya yoki yutilish spektri orqali kuzatish nisbatan sodda bo‘lsa, Si va Ge da fonon yordamidagi jarayonlar sababli spektrni talqin qilish murakkabroq bo‘lishi mumkin. Bundan tashqari, yuqori haroratda spektral chiziqlarning kengayishi band chetini aniq aniqlashga ta’sir qiladi. Germaniyning dielektrik funksiyasini 100–850 K oralig‘ida ellipsometrik o‘rgangan tadqiqotlarda ham kritik energiyalar temperaturaga bog‘liq ravishda siljishi va spektral kengayish parametrlarining o‘zgarishi kuzatilgan.

Mazkur ishda foydalanilgan Varshni modeli sodda va amaliy jihatdan qulay. Lekin uni universallashtirib yuborish maqsadga muvofiq emas. Juda past haroratlarda yoki Debye temperaturasi yuqori bo‘lgan materiallarda elektron–fonon o‘zaro ta’sirini fizik jihatdan aniqroq ifodalovchi Bose–Einstein tipidagi modellar yaxshiroq natija berishi mumkin. Ayrim tadqiqotlarda Varshni tenglamasi ma’lum diapazonda yaxshi yaqinlashuv berishi, biroq uning (\alpha) va (\beta) parametrlarini to‘g‘ridan-to‘g‘ri fundamental fizik ma’noga ega deb qabul qilish ehtiyotkorlikni talab qilishi ko‘rsatilgan.

Shunga qaramay, Si, Ge va GaAs uchun bajarilgan hisob-kitoblar asosiy fizik tendensiyani aniq ko‘rsatadi. Harorat oshishi bilan energetik soha torayadi, optik yutilish chegarasi uzun to‘lqin tomon siljiydi, xususiy tashuvchilar konsentratsiyasi ortadi va fononlar bilan sochilish kuchayadi. Qurilmaning yakuniy elektr yoki optik xususiyati aynan shu jarayonlarning o‘zaro nisbatiga bog‘liq bo‘ladi.

O‘zbekiston sharoitida bu masalaning amaliy ahamiyati yanada yuqori. Elektron va fotoelektrik qurilmalar yoz faslida yuqori atrof-muhit haroratida ishlashi mumkin, quyosh elementlarining sirt harorati esa havo haroratidan ham yuqoriga ko‘tariladi. Shu sababli mahalliy iqlim sharoitida ishlatiladigan yarimo‘tkazgich qurilmalarini yaratish yoki tanlashda pasportdagi xona haroratiga tegishli parametrlarning o‘zi bilan cheklanmasdan, ularning keng temperatura oralig‘idagi xususiyatlarini hisobga olish zarur.

Xulosa. Yarimo‘tkazgich materiallarning elektr va optik xossalariga haroratning ta’siri ularning fundamental fizik tabiatidan kelib chiqadi. Haroratning oshishi kristall panjara tebranishlarini kuchaytirib, elektron–fonon o‘zaro ta’siri va issiqlik kengayishi orqali energetik zonalar tuzilishiga ta’sir ko‘rsatadi. Si, Ge va GaAs uchun Varshni tenglamasi asosida bajarilgan hisoblashlar harorat 77 K dan 400 K gacha oshirilganda taqiqlangan soha kengligining barcha materiallarda kamayishini ko‘rsatdi.

Kremniyda (E_g) taxminan 1.162 eV dan 1.093 eV gacha, germaniyda 0.735 eV dan 0.624 eV gacha, GaAsda esa 1.508 eV dan 1.376 eV gacha kamayishi aniqlandi. Natijada optik yutilish chegarasi uzunroq to‘lqinlar tomon siljiydi. Bu hodisa fotodetektorlar, LED, yarimo‘tkazgichli lazerlar va boshqa optoelektron qurilmalar uchun katta amaliy ahamiyatga ega.

Elektr xossalari bo‘yicha esa haroratning ta’siri ikki asosiy jarayonning raqobati bilan belgilanadi. Harorat oshishi zaryad tashuvchilar konsentratsiyasini, ayniqsa, xususiy o‘tkazuvchanlik sohasida, keskin oshiradi. Biroq panjara fononlarida sochilishning kuchayishi elektron va kovaklarning harakatchanligini pasaytiradi. Shu sababli elektr o‘tkazuvchanlikning temperaturaviy bog‘lanishi material turi, legirlash darajasi va harorat intervaliga qarab turlicha bo‘lishi mumkin.

Tahlillar yarimo‘tkazgich qurilmalarni loyihalashda haroratni ikkinchi darajali tashqi omil sifatida emas, balki materialning asosiy fizik parametrlarini belgilovchi muhim omillardan biri sifatida qarash lozimligini ko‘rsatadi. Yarimo‘tkazgichlarning aynan shu yuqori temperaturaviy sezgirligi bir tomondan elektron qurilmalarda termik barqarorlik muammosini tug‘dirsa, ikkinchi tomondan yuqori sezgir termodatchik, fotodetektor va boshqa funksional qurilmalarni yaratish uchun fizik asos bo‘lib xizmat qiladi.

ADABIYOTLAR:

1. Baxodirxonov, M.K., Zikrillayev, N.F., Iliyev, X.M. Yarimo'tkazgichlar fizikasi. Toshkent: Tafakkur, 2020. 480 b. ISBN 978-9943-24-215-9.

2. Teshaboyev, A., Zaynobidinov, S., Vlasov, S., Karimov, I., Abduazimov, V. Yarimo'tkazgichlar sirti fizikasi. Toshkent: Ilm Ziyo, 2010. Oliy o'quv yurtlari uchun o'quv qo'llanma.

3. Teshaboyev, A., Zaynobidinov, S., Musayev, E.A. Yarimo'tkazgichlar va yarimo'tkazgichli asboblar texnologiyasi. Toshkent: Talqin, 2006. 336 b.

4. Nazirov, E.N., Nazirov, D.E., Teshaboyev, A.T. Yarimo'tkazgichlar fizikasi lug'ati. Qayta ishlangan va to'ldirilgan 2-nashr. Toshkent: Universitet, 2008.

5. Varshni, Y.P. Temperature dependence of the energy gap in semiconductors. Physica. 1967;34(1):149–154. DOI: 10.1016/0031-8914(67)90062-6.

6. Green, M.A. Intrinsic concentration, effective densities of states, and effective mass in silicon. Journal of Applied Physics. 1990;67(6):2944–2954. DOI: 10.1063/1.345414.

7. Arora, N.D., Hauser, J.R., Roulston, D.J. Electron and hole mobilities in silicon as a function of concentration and temperature. IEEE Transactions on Electron Devices. 1982;29(2):292–295. DOI: 10.1109/T-ED.1982.20698.

8. Vurgaftman, I., Meyer, J.R., Ram-Mohan, L.R. Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. Journal of Applied Physics. 2001;89(11):5815–5875. DOI: 10.1063/1.1368156.

9. Ma, J., Nissimagoudar, A.S., Li, W. First-principles study of electron and hole mobilities of Si and GaAs. Physical Review B. 2018;97:045201. DOI: 10.1103/PhysRevB.97.045201.

10.El Allali, M., Sørensen, C.B., Veje, E., Tidemand-Petersson, P. Experimental determination of the GaAs and $Ga_{1-x}Al_xAs$ band-gap energy dependence on temperature and aluminum mole fraction in the direct band-gap region. Physical Review B. 1993;48:4398–4404. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.4398.

11.Viña, L., Logothetidis, S., Cardona, M. Temperature dependence of the dielectric function of germanium. Physical Review B. 1984;30:1979–1991. DOI: 10.1103/PhysRevB.30.1979.

UDC 535.34.546.26

EXTENDED ANALYSIS OF THE UV–VIS ABSORPTION SPECTRUM OF GRAPHENE OXIDE. URBACH ENERGY, TAUC MODEL AMBIGUITY AND sp^2 DOMAIN SIZE

Daminov Rakhimjon Shokir ugli,
Nanotechnology Development Center,
National University of Uzbekistan named after
Mirzo Ulugbek, Tashkent, Uzbekistan
daminov_r@nuu.uz
Ochilov Odil,
Nanotechnology Development Center,
National University of Uzbekistan named after
Mirzo Ulugbek, Tashkent, Uzbekistan
ochilovodil@mail.ru
Malikov Komiljon Kholmuratovich,
Nanotechnology Development Center,
National University of Uzbekistan named after
Mirzo Ulugbek, Tashkent, Uzbekistan
komiljonmalikov1995@gmail.com
Yoldoshev Ozodbek Yoldosh ugli
Nanotechnology Development Center,
National University of Uzbekistan named after
Mirzo Ulugbek, Tashkent, Uzbekistan
ozodbekyoldoshev997@gmail.com
Qambarova Mukhayyo Sodikjon kizi
Nanotechnology Development Center,
National University of Uzbekistan named after
Mirzo Ulugbek, Tashkent, Uzbekistan
muhayyoqambarova1@gmail.com
Ne'matova Zumrad Zayniddin kizi
National University of Uzbekistan named
after Mirzo Ulugbek, Tashkent, Uzbekistan
toxirovazumrad@gmail.com

Abstract. *The ultraviolet–visible absorption spectra of graphene oxide synthesized by the Hummers method are analysed, yielding optical parameters not published previously. The Urbach energy is determined for the first time and equals 0.91 ± 0.01 eV, the exponential region spans 2.00–3.45 eV and is concentration-independent. A model comparison rules out a light-scattering artefact. The steepness parameter σ = kT/EU equals 0.028. Three methods of locating the n→π* shoulder differ by up to 20 nm. The sp^2 domain size is evaluated independently from optical and Raman data. The values obtained are proposed as baseline parameters for GO/Fe_3O_4 magneto-optical systems.*

Key words: *graphene oxide, Urbach energy, optical band gap, Tauc method, derivative spectroscopy, n→π* transition, sp^2 domain, disorder, magneto-optics, Hummers method.*

GRAFEN OKSIDINING UV-VIS YUTILISH SPEKTRINI KENGAYTIRILGAN TAHLILI. URBACH ENERGIYASI, TAUC MODELI NOANIQLIGI VA sp^2 DOMEN O'LCHAMI

Annotatsiya. *Maqolada Hummers usulida sintez qilingan grafen oksidining ultrabinafsha-ko'rinuvchi yutilish spektrlari kengaytirilgan tahlil qilinib, ilgari e'lon qilinmagan optik parametrlar aniqlandi. Urbach energiyasi birinchi marta hisoblanib, u 0,91 ± 0,01 eV ni tashkil etdi, eksponensial soha 2,00–3,45 eV kenglikda saqlanadi va natija konsentratsiyaga bog'liq emas. Model taqqoslash yo'li bilan kuzatilgan signal cheti yorug'lik tarqalishi artefakti emasligi ko'rsatildi. Tikkalik parametri σ = kT/EU 0,028 ga teng bo'ldi. n→π* yelkasining holati uchta usulda baholanib, ular orasidagi tafovut 20 nm ga yetishi aniqlandi. sp^2 domen o'lchami optik va Raman ma'lumotlaridan mustaqil baholandi. Olingan qiymatlar GO/Fe_3O_4 magnitooptik tizimlari uchun bazaviy parametrlar sifatida taklif etiladi.*

Kalit so‘zlar: *grafen oksidi, Urbach energiyasi, optik zona kengligi, Tauc usuli, hosila spektroskopiyasi, n→π* o‘tish, sp² domen, tartibsizlik, magnitooptika, Hummers usuli.*

РАСШИРЕННЫЙ АНАЛИЗ СПЕКТРА УФ-ВИДИМОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ОКСИДА ГРАФЕНА. ЭНЕРГИЯ УРБАХА, НЕОДНОЗНАЧНОСТЬ МОДЕЛИ ТАУКА И РАЗМЕР sp^2-ДОМЕНОВ

Аннотация. *В статье представлен расширенный анализ спектров ультрафиолетового и видимого поглощения оксида графена, синтезированного методом Хаммерса, в результате которого определены ранее не публиковавшиеся оптические параметры. Впервые рассчитана энергия Урбаха, составившая 0,91 ± 0,01 эВ, экспоненциальная область сохраняется в интервале 2,00–3,45 эВ, а результат не зависит от концентрации. Сравнением моделей показано, что наблюдаемый хвост не является артефактом светорассеяния. Параметр крутизны σ = kT/EU составил 0,028. Положение плеча n→π* оценено тремя методами, расхождение между которыми достигает 20 нм. Размер sp²-доменов независимо оценён по оптическим и рамановским данным. Полученные значения предлагаются как базовые параметры для магнитооптических систем GO/Fe_3O_4.*

Ключевые слова: *оксид графена, энергия Урбаха, оптическая ширина запрещённой зоны, метод Таука, производная спектроскопия, переход n→π*, sp²-домен, разупорядочение, магнитооптика, метод Хаммерса.*

Introduction. Graphene oxide (GO) is a two-dimensional material obtained by the chemical oxidation of graphite, in which sp^2- and sp^3-hybridized carbon regions coexist. Its electronic structure is governed precisely by the ratio of these two regions, and for this reason the accurate measurement of the optical characteristics is of primary importance when GO is applied in optoelectronics, sensing and energy storage devices [1, 2].

UV–Vis spectroscopy is one of the most widely used techniques for characterizing GO, and two indicators are normally extracted from it. the maximum near 230 nm assigned to the π→π* transition of aromatic C=C bonds, and the shoulder near 300 nm assigned to the n→π* transition of the carbonyl group [3, 4]. A third indicator, the optical band gap E_g obtained from the Tauc equation, is also widely reported [5, 6].

However, a considerable spread is observed in the literature for each of these indicators. values of 290–305 nm are quoted for the n→π* shoulder and 3.2–3.9 eV for the optical band gap [3, 4, 7]. Part of this spread does arise from genuine differences in the degree of oxidation between samples. The other part depends on the choice of the data-processing method, yet this second source is almost never quantified.

Furthermore, the Urbach energy E_U, which is a standard descriptor for disordered semiconductors, is only rarely reported for GO [8]. This quantity nevertheless characterizes the width of the distribution of localized states at the band edge and constitutes a direct quantitative measure of the structural disorder introduced by sp^3 defects.

The aim of the present work is, using a single well-characterized GO sample, (i) to determine the Urbach energy, (ii) to locate the n→π* shoulder by three independent methods and thereby quantify the method-dependent spread, (iii) to expose the ambiguity in the transition type within the Tauc model, and (iv) to evaluate the sp² domain size independently from optical and Raman data.

The GO sample synthesized and characterized by Raman, UV–Vis and SEM–EDS in [9] was taken as the object of investigation. The present paper re-processes the absorption spectra of that sample, all the analytical procedures and results reported below were not published in [9].

Object of investigation and methods applied.

Sample. GO was synthesized by the Hummers method [9]. A mixture of 1 g of natural graphite and 0.5 g of $NaNO_3$ was stirred in 75 mL of 98% H_2SO_4 in an ice bath (T < 5 °C) for 30 min, 4 g of $KMnO_4$ was added in small portions over 6 h (T ≤ 20 °C), the reaction was quenched with distilled water and 32% H_2O_2, the precipitate was washed with 1 M HCl and distilled water until pH 6–7 (8000 rpm) and dried at 50 °C for 24 h.

Measurement. UV–Vis absorption spectra were recorded on a Shimadzu UV-1900i spectrophotometer in a quartz cuvette (l = 1 cm) over the 200–600 nm range with a 0.5 nm step at concentrations of 0.01, 0.08 and 0.12 mg·mL^{-1}.

Analysis. The absorption coefficient was calculated as $\alpha = 2.303A/l$. In all the analyses below it is not the absolute value of α but its variation with photon energy that matters, so the results are independent of the proportionality factor.

The Urbach energy was obtained from the relation $\alpha = \alpha_0 \exp(h\nu/E_U)$ as the reciprocal of the slope of the linear region of the ln α versus $h\nu$ dependence [8]. The optical band gap was evaluated from the Tauc equation $(\alpha h\nu)^n = B(h\nu - E_g)$ for $n = 2$ (direct allowed transition) and $n = 1/2$ (indirect transition) [10]. The linear regions were not selected by hand but automatically. the widest window satisfying the condition $R^2 > 0.999$ was searched for. This approach removes the subjectivity involved in choosing the limits of the linear region.

Derivative spectra were computed with a Savitzky–Golay filter (third-order polynomial, window width 11–51 points), and the dependence of the result on the window width was checked separately. The Gaussian deconvolution was performed over the 3.0–6.15 eV range as the sum of two Gaussian components and a background, three different background models — exponential, power-law λ^{-n} and linear — were tested independently.

The size of the sp^2 clusters was estimated from the optical data using the Robertson–O'Reilly cluster model $E_g \approx 2|\beta|/\sqrt{N}$ ($|\beta| = 2.9$ eV, where N is the number of fused aromatic rings) [11], and from the Raman data using the Ferrari–Robertson relation $I_D/I_G = C'(\lambda)L_a^2$ ($C' \approx 0.0055$ Å^{-2}) [12]. All computations were carried out in Python 3 (NumPy, SciPy).

Results obtained and their analysis.

1. Absorption spectrum and the Beer–Lambert law. In the smoothed spectra the π→π* maximum was recorded at 230.5 nm for all three concentrations. The absorbance at 230.5 nm is linear in concentration ($R^2 = 0.9997$) with an intercept of 0.004, that is, effectively zero. From the slope the mass absorption coefficient $\varepsilon_{230} = 7.9$ mL·mg^{-1}·cm^{-1} was determined. This quantity is of practical value for the spectrophotometric control of the concentration of GO dispersions.

2. Dependence of the n→π* shoulder position on the method of estimation. The position of the shoulder was determined by three independent methods (Figure 1). The extremum of the first derivative gave 292.5–294.5 nm, the minimum of the second derivative 304–305 nm, and the Gaussian deconvolution 312.8–312.9 nm.

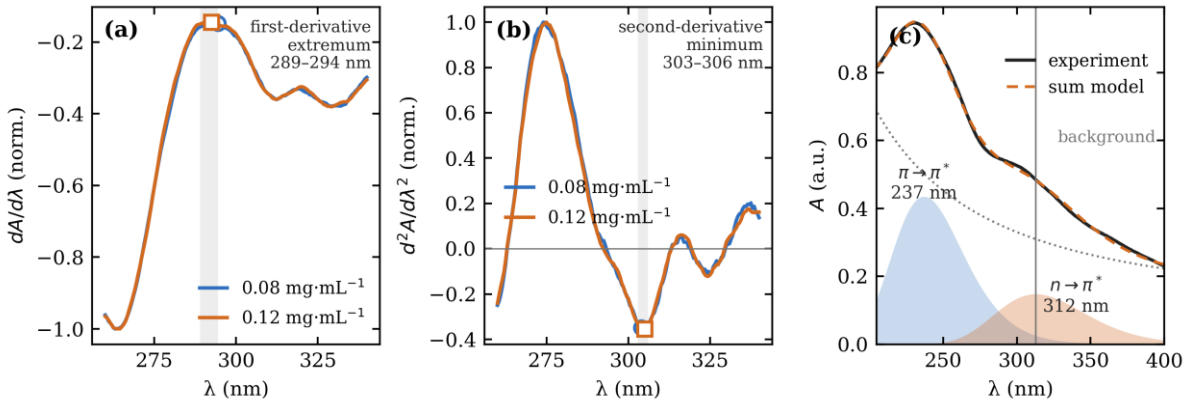


Figure 1. Location of the n→π* shoulder by three methods. (a) first derivative, (b) second derivative, (c) deconvolution into two Gaussian components and an exponential background (0.12 mg·mL^{-1}). The grey bands mark the range of values obtained for the two concentrations.

Each method is highly reproducible within itself. the difference between the two concentrations did not exceed 2 nm, and in the deconvolution the result remained within 311.6–312.9 nm even when the background model was changed three times. Nevertheless, the difference between the methods reached 20 nm, or 0.25 eV in energy units (Table 1).

Table 1. Dependence of the n→π* shoulder position on the method of estimation

Method of estimation	0.08 mg·mL⁻¹	0.12 mg·mL⁻¹	Energy, eV
First-derivative extremum	294.5 nm	292.5 nm	4.21–4.24
Second-derivative minimum	304.0 nm	305.0 nm	4.07–4.08
Gaussian deconvolution	312.9 nm	312.8 nm	3.96
Literature values [3, 4]	300–303 nm	—	4.09–4.13

The reason for the discrepancy is that the shoulder is located on the steeply falling wing of the π→π* band. The extremum of the first derivative merges with the slope of the background and therefore yields a systematically blue-shifted value. The minimum of the second derivative is insensitive to the linear

component of the background, whereas the deconvolution models the background explicitly but relies on an assumption about the line shape.

It follows that a significant part of the 290–305 nm spread observed in the literature originates not from genuine differences between samples but from the choice of the processing method. For this reason the method of determination must be stated whenever the position of the n→π* shoulder is reported, otherwise the results of different studies are not comparable.

3. Ambiguity of the transition type in the Tauc analysis. The direct allowed transition model (n = 2) gave E_g = 3.36 eV in the 3.70–4.15 eV window (R^2 = 0.9992). The indirect transition model (n = 1/2), however, gave E_g = 1.87 eV with practically the same quality of fit (R^2 = 0.9992) in the 3.45–4.05 eV window (Figure 2).

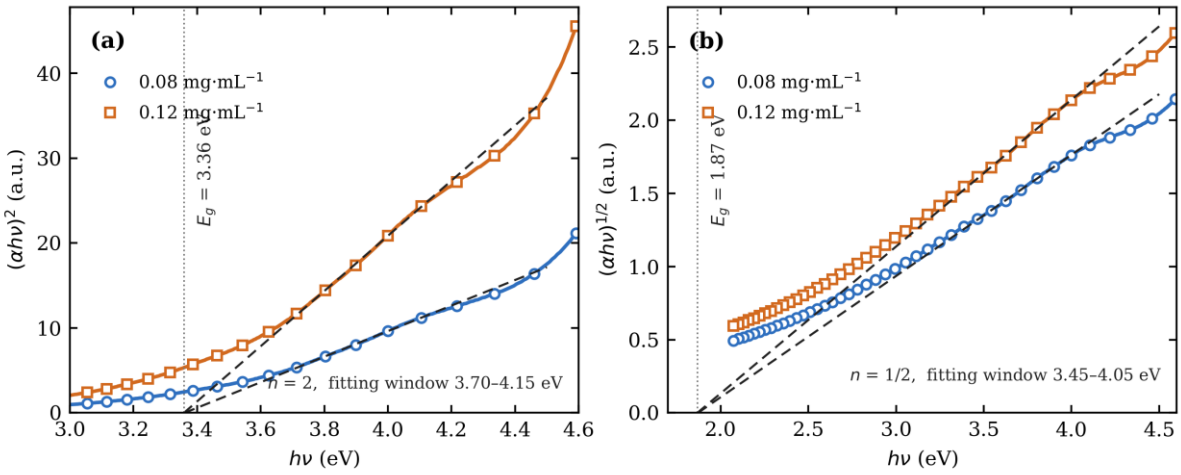


Figure 2. Tauc plots. (a) direct allowed transition, n = 2, (b) indirect transition, n = 1/2. The dashed lines are the extrapolations of the linear region to the energy axis

The fact that both models yield the same coefficient of determination shows that the linearity of a Tauc plot is not evidence confirming the transition type. For GO the value n = 2 is usually adopted in the literature and justified by the allowed character of the π→π* transition [5, 6], but this choice follows from an external physical argument rather than from the plot itself. Consequently, the chosen value of n and the fitting window must always be stated when an E_g value is reported.

4. Urbach energy and structural disorder. The ln α versus $h\nu$ dependence proved to be linear with high accuracy over the 2.00–3.45 eV range, that is, over a region 1.45 eV wide (R^2 = 0.9994, Figure 3a). This yields E_U = 0.919 eV (0.08 mg·mL^{-1}) and 0.904 eV (0.12 mg·mL^{-1}), with a mean value of 0.91 ± 0.01 eV. The difference between the two concentrations did not exceed 1.6%, which confirms that E_U is an intrinsic property of the material and not concentration-dependent. In a narrow range close to the band edge (2.80–3.40 eV) E_U = 0.96–0.98 eV, so the result depends only weakly on the width of the chosen window.

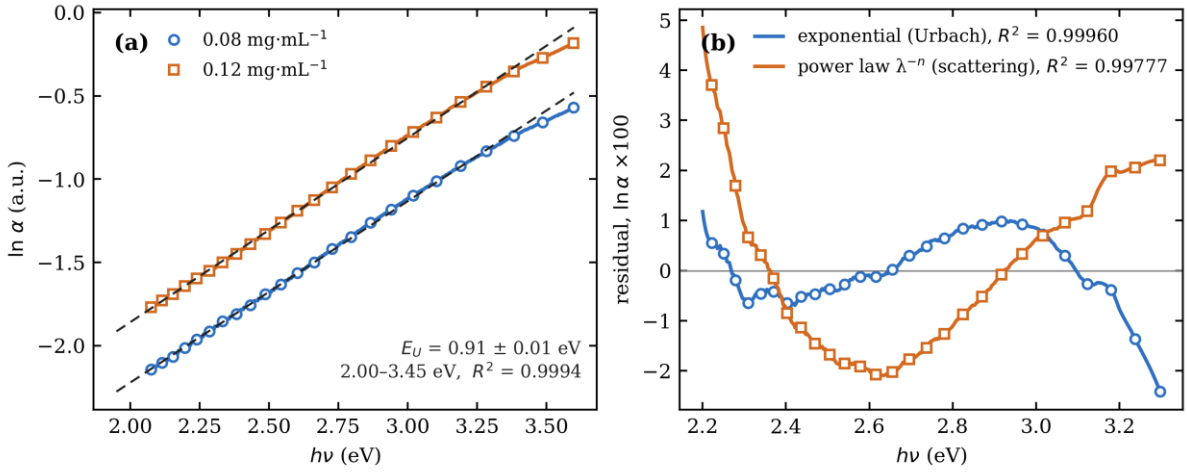


Figure 3. (a) Urbach plot and its linear approximation over the 2.00–3.45 eV range. (b) Residuals of the exponential (Urbach) and power-law λ^{-n} (scattering) models over 2.2–3.3 eV (0.12 mg·mL^{-1}, smoothed for display)

Because the measurement was performed on an aqueous dispersion, the observed tail could in principle have resulted from light scattering. To exclude this, two models were compared over the 2.2–3.3

eV range. the exponential model gave R^2 = 0.99960 and the power-law λ^{-n} model R^2 = 0.99777. The distribution of the residuals is even more indicative. for the power-law model the residuals have a systematic S shape and an amplitude two to three times larger than for the exponential model (Figure 3b). The observed tail is therefore not a scattering artefact but genuine band-tail absorption.

The value E_U = 0.91 eV is several times larger than the 10–100 meV typical of crystalline semiconductors. The steepness parameter $\sigma = kT/E_U$ equals 0.028 at 300 K and the ratio E_U/E_g equals 0.27. These values indicate a strongly smeared band edge, that is, a high fraction of sp^3 defects and small, isolated sp^2 domains. The conclusion is fully consistent with the Raman (I_D/I_G = 0.83, no 2D band observed) and EDS (C/O = 1.54) results reported in [9], as well as with data showing that the defect density increases with oxidation time [13].

5. Two independent estimates of the sp^2 domain size. According to the Robertson–O'Reilly cluster model, E_g = 3.36 eV corresponds to $N \approx 3$ fused aromatic rings, the equivalent diameter of such a cluster is 0.45 nm. The Ferrari–Robertson relation applied to the Raman data gives $L_a \approx 1.2$ nm. Both estimates are below 2 nm, which corresponds to the second stage of the Ferrari–Robertson amorphization trajectory and makes the use of the adopted C' coefficient self-consistent.

The factor of about 2.7 between the two estimates is not a contradiction but is physically expected. the optical estimate "sees" only the fully conjugated sp^2 cluster, whereas the Raman L_a gives the in-plane correlation length, which also includes distorted regions, so $L_a > d$ is natural. Tuinstra–Koenig type relations, by contrast, are not applicable in this case at all. depending on the coefficient adopted they give values in the 5–23 nm range, which contradicts the complete absence of the 2D band and shows that the range of validity of the model (L_a > 2 nm) has been exceeded [14].

Table 2. Summary of the optical parameters determined in this work

Parameter	Value	Condition / fitting window	R^2
π→π* maximum	230.5 nm	all three concentrations	—
ε_{230}	7.9 mL·mg^{-1}·cm^{-1}	Beer–Lambert, 3 points	0.9997
n→π* (2nd derivative)	304–305 nm	—	—
Eg (n = 2)	3.36 eV	3.70–4.15 eV	0.9992
Eg (n = 1/2)	1.87 eV	3.45–4.05 eV	0.9992
EU	0.91 ± 0.01 eV	2.00–3.45 eV	0.9994
EU (close to band edge)	0.96–0.98 eV	2.80–3.40 eV	0.999
σ = kT/EU (300 K)	0.028	—	—
EU/Eg	0.27	—	—
N (aromatic rings)	≈ 3	Robertson–O'Reilly	—
Cluster diameter	≈ 0.45 nm	Robertson–O'Reilly	—
La (Raman)	≈ 1.2 nm	Ferrari–Robertson	—

6. Application of the parameters obtained. The values determined here are directly required for the study of GO-based magneto-optical systems. In GO/Fe_3O_4 hybrid systems the magnetic circular dichroism (MCD) signal is proportional to the energy derivative of the absorption profile, while the Kerr rotation is linked to the absorption spectrum through the Kramers–Kronig relation. In a matrix with E_U = 0.91 eV the MCD lines belonging to the Fe^{3+}/Fe^{2+} transitions at the tetrahedral and octahedral sites of Fe_3O_4 are expected to overlap strongly, and a signal is expected to appear even below the band gap [15]. Re-measuring E_U in composite samples then allows two mechanisms to be distinguished. an increase in E_U indicates that the Fe_3O_4 particles have introduced additional structural disorder, whereas a red shift of the absorption edge at constant E_U indicates restoration of the sp^2 domains or GO ↔ Fe^{3+} charge transfer. The values obtained in this work serve as the zero point for that comparison.

Conclusions.

1. The Urbach energy of graphene oxide synthesized by the Hummers method was determined for the first time. E_U = 0.91 ± 0.01 eV, exponential region 2.00–3.45 eV, R^2 = 0.9994. The result is independent of concentration, and a model comparison showed that it is not a light-scattering artefact.

2. The position of the n→π* shoulder was estimated by three methods, and the systematic discrepancy between them was found to reach 20 nm (0.25 eV), although the reproducibility of each individual method is better than 2 nm. This accounts for a substantial part of the spread found in the literature and requires the method to be stated whenever the shoulder position is reported.

3. The Tauc analysis was shown to give the same quality of fit (R^2 = 0.9992) for both the n = 2 and the n = 1/2 model. Conclusions about the transition type must therefore not rest on the linearity of a Tauc plot alone.

4. The sp^2 domain size was estimated in two independent ways. 0.45 nm ($N \approx 3$ rings) from the optical data and 1.2 nm from the Raman data. Both values are below 2 nm, and the difference between them is explained by the physical meaning of the two methods.

5. The values E_g = 3.36 eV and E_U = 0.91 eV obtained here are proposed as baseline parameters for the interpretation of MCD and Kerr spectra in GO/Fe_3O_4 systems.

REFERENCES:

1. Donato K.Z., Tan H.L., Marangoni V.S., Martins M.V.S., Ng P.R., Costa M.C.F., Jain P., Lee S.J., Koon G.K.W., Donato R.K., Castro Neto A.H. Graphene oxide classification and standardization // Scientific Reports. — 2023. — Vol. 13. — 6064.

2. Krishnamoorthy K., Veerapandian M., Yun K., Kim S.-J. The chemical and structural analysis of graphene oxide with different degrees of oxidation // Carbon. — 2013. — Vol. 53. — P. 38–49.

3. Lai Q., Zhu S., Luo X., Zou M., Huang S. Ultraviolet-visible spectroscopy of graphene oxides // AIP Advances. — 2012. — Vol. 2. — 032146.

4. Aliyev E., Filiz V., Khan M.M., Lee Y.J., Abetz C., Abetz V. Structural characterization of graphene oxide. surface functional groups and fractionated oxidative debris // Nanomaterials. — 2019. — Vol. 9. — 1180.

5. Maphiri V.M., Bakhoum D.T., Sarr S., Sylla N.F., Rutavi G., Manyala N. Impact of thermally reducing temperature on graphene oxide thin films and microsupercapacitor performance // Nanomaterials. — 2022. — Vol. 12. — 2211.

6. Yu H., Zhang B., Bulin C., Li R., Xing R. High-efficient synthesis of graphene oxide based on improved Hummers method // Scientific Reports. — 2016. — Vol. 6. — 36143.

7. Dimiev A.M., Halbig C.E., Talyzin A. A critical review to avoid common misinterpretations in characterizing graphene oxide // Chemical Reviews. — 2026. — Vol. 126. — P. 3055–3088.

8. Urbach F. The long-wavelength edge of photographic sensitivity and of the electronic absorption of solids // Physical Review. — 1953. — Vol. 92. — P. 1324.

9. Daminov R., Ochilov O., Malikov K.Kh., Yoldoshev O., Qambarova M., Nematova Z., Turdiyev U. Cross-validated assessment of the oxidation degree of Hummers-derived graphene oxide by Raman, UV–Vis, and SEM–EDS // [journal]. — [year]. — [volume]. — [pages].

10. Tauc J., Grigorovici R., Vancu A. Optical properties and electronic structure of amorphous germanium // Physica Status Solidi B. — 1966. — Vol. 15. — P. 627–637.

11. Robertson J., O'Reilly E.P. Electronic and atomic structure of amorphous carbon // Physical Review B. — 1987. — Vol. 35. — P. 2946–2957.

12. Ferrari A.C., Robertson J. Interpretation of Raman spectra of disordered and amorphous carbon // Physical Review B. — 2000. — Vol. 61. — P. 14095–14107.

13. Saxena S., Kumar A., Yadav N., Jung S., Sharma M.K., Jeon S.-C., Koo B.H. Influence of oxidation time on defect density and crystallinity in graphene oxide synthesized via modified Hummer's method // Journal of Physical Chemistry Letters. — 2025. — Vol. 16. — P. 10932–10937.

14. Tuinstra F., Koenig J.L. Raman spectrum of graphite // Journal of Chemical Physics. — 1970. — Vol. 53. — P. 1126–1130.

15. Zubir N.A., Yacou C., Motuzas J., Zhang X., Diniz da Costa J.C. Structural and functional investigation of graphene oxide–Fe3O4 nanocomposites for the heterogeneous Fenton-like reaction // Scientific Reports. — 2014. — Vol. 4. — 4594.

UO‘K 539.3

QOVUSHQOQ-ELASTIK QOBIQLARNING PARAMETRIK TEBRANISHLARI VA TURG‘UNLIGI

Esanov Nuriddin Qurbonovich,
Osiyo xalqaro universiteti dotsenti
esanovnuriddin@oxu.uz

Annotatsiya. *Maqolada qovushqoq-elastik qobiqlarning vaqt bo‘yicha davriy o‘zgaruvchi yuk ta’siridagi parametrik tebranishlari va dinamik turg‘unligi tadqiq etiladi. Qobiqning ko‘ndalang harakati moddalar bo‘yicha yoyilib, Galyorkin usuli yordamida modal integro-differensial tenglamaga keltiriladi. Matyerialning irsiy xususiyatlari Boltsman–Volterra prinsipi asosida hisobga olinadi. Garmonik parametrik qo‘zg‘atish holida tenglama so‘nishga ega Xill va Matye tenglamalari ko‘rinishida tahlil qilinadi. O‘rtachalash usuli asosida asosiy parametrik rezonans sohasi, turg‘unlik chegarasi va kritik parametrik amplituda aniqlanadi. Shuningdek, Floke nazariyasi va monodromiya matritsasi orqali turg‘unlik mezoni bayon qilinadi. Natijalar qovushqoqlik va energiya dissipatsiyasining ortishi kritik qo‘zg‘atish amplitudasini oshirib, parametrik noturg‘unlik sohasini toraytirishi hamda konstruksiyaning dinamik turg‘unligini yaxshilashini ko‘rsatadi.*

Kalit so‘zlar: *qovushqoq-elastik qobiq, parametrik tebranish, dinamik turg‘unlik, parametrik rezonans, dempferlash, integro-differensial tenglama, Floke nazariyasi, monodromiya matritsasi.*

ПАРАМЕТРИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ И УСТОЙЧИВОСТЬ ВЯЗКОУПРУГИХ ОБОЛОЧЕК

Аннотация. *В статье исследуются параметрические колебания и динамическая устойчивость вязкоупругих оболочек при действии периодически изменяющейся во времени нагрузки. Поперечное движение оболочки разлагается по формам собственных колебаний и с помощью метода Галёркина сводится к модальному интегро-дифференциальному уравнению. Наследственные свойства материала учитываются на основе принципа Больцмана–Вольтерры. При гармоническом параметрическом возбуждении уравнение анализируется в форме уравнений Хилла и Матье с затуханием. Методом усреднения определяются область основного параметрического резонанса, граница устойчивости и критическая амплитуда параметрического воздействия. Кроме того, критерий устойчивости формулируется на основе теории Флоке и матрицы монодромии. Полученные соотношения показывают, что увеличение вязкости и диссипации энергии повышает критическую амплитуду возбуждения, сужает область параметрической неустойчивости и способствует повышению динамической устойчивости конструкции.*

Ключевые слова: *вязкоупругая оболочка, параметрические колебания, динамическая устойчивость, параметрический резонанс, демпфирование, интегро-дифференциальное уравнение, теория Флоке, матрица монодромии.*

PARAMETRIC OSCILLATIONS AND STABILITY OF VISCOELASTIC SHEETS

Abstract. *The paper investigates parametric vibrations and dynamic stability of viscoelastic shells subjected to time-periodic loading. The transverse motion of the shell is expanded in natural vibration modes and reduced, by means of the Galerkin method, to a modal integro-differential equation. The hereditary properties of the material are incorporated using the Boltzmann–Volterra principle. Under harmonic parametric excitation, the governing equation is analyzed in the form of damped Hill and Mathieu equations. The averaging method is employed to determine the principal parametric resonance region, the stability boundary, and the critical parametric excitation amplitude. In addition, the stability criterion is formulated using Floquet theory and the monodromy matrix. The obtained relations show that increasing viscosity and energy dissipation raises the critical excitation amplitude, narrows the parametric instability region, and improves the dynamic stability of the structure.*

Keywords: *viscoelastic shell, parametric vibration, dynamic stability, parametric resonance, damping, integro-differential equation, Floquet theory, monodromy matrix.*

Kirish. Qovushqoq-elastik qobiqlarning parametrik tebranishlari masalasida asosiy maqsad - vaqt bo‘yicha davriy ravishda o‘zgaruvchi yuk ta’sirida konstruksiyaning dinamik turg‘unlik sohalarini, parametrik rezonans chegaralarini va kritik qo‘zg‘atish amplitudalarini aniqlashdan iborat.

Qobiqning o‘rta sirtidagi ichki kuchlarni

$$N_j(t) = N_{j0} - N_{j1}\varphi(t), \qquad j = 1,2 \quad (1)$$

ko‘rinishida qabul qilamiz. Bunda N_{j0} – kuchning doimiy tashkil etuvchisi, N_{j1} – parametrik ta’sir amplitudasi, $\varphi(t)$ esa

$$\varphi(t+T) = \varphi(t) \quad (2)$$

shartni qanoatlantiruvchi (T)-davrli funksiyadir. Garmonik qo‘zg‘atish uchun

$$\varphi(t) = \cos\theta t \quad (3)$$

bu yerda θ – tashqi parametrik ta’sirning burchak chastotasi.

2. Qobiq harakatining umumiy tenglamasi

Qobiqning ko‘ndalang ko‘chishini modalar bo‘yicha

$$w(x,y,t) = \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} q_{mn}(t) W_{mn}(x,y) \quad (4)$$

ko‘rinishida ifodalash mumkin.

Bu yerda $W_{mn}(x,y)$ – qobiqning xususiy tebranish shakllari, $q_{mn}(t)$ – vaqtga bog‘liq modal koordinatalar. Galyorkin usuli qo‘llanilganda har bir moda uchun umumlashgan harakat tenglamasi

$$\begin{cases} M_{mn}\ddot{q}_{mn} + \int_0^t C_{mn}(t-\tau)\dot{q}_{mn}(\tau)d\tau + \left[K_{mn} - N_{10}K_{g1} - N_{20}K_{g2}\right]q_{mn} + \\ + \left[N_{11}K_{g1} + N_{21}K_{g2}\right]\varphi(t)q_{mn} = 0 \end{cases} \quad (5)$$

ko‘rinishiga keladi. Bu yerda M_{mn} – modal massa, K_{mn} – elastik qattiqlik, K_{g1}, K_{g2} – geometrik qattiqlik koeffitsiyentlari, $C_{mn}(t)$ – esa materialning qovushqoq-elastik xususiyatlarini hisobga oluvchi irsiy yadrodir.

Tenglamani M_{mn} ga bo‘lib,

$$\begin{cases} \omega_{mn}^2 = \dfrac{K_{mn} - N_{10}K_{g1} - N_{20}K_{g2}}{M_{mn}} \\ \mu_{mn} = \dfrac{N_{11}K_{g1} + N_{21}K_{g2}}{M_{mn}} \end{cases}, \quad (6)$$ belgilashlarni kiritsak,

$$\ddot{q}_{mn} + \omega_{mn}^2 q_{mn} + \mu_{mn}\varphi(t)q_{mn} + \int_0^t R_{mn}(t-\tau)q_{mn}(\tau)d\tau = 0 \quad (7)$$

(7) tenglama hosil bo‘ladi. Qovushqoq-elastik materialda kuchlanish faqat joriy deformatsiyaga emas, balki deformatsiyaning oldingi tarixiga ham bog‘liq bo‘ladi.

3. Boltsman–Volterra prinsipi va konstitutiv munosabatlar

Boltsman–Volterra prinsipiga asosan bir o‘lchovli holat uchun

$$\sigma(t) = E_0\left[\varepsilon(t) - \int_0^t R_E(t-\tau)\varepsilon(\tau)d\tau\right] \quad (8)$$

deb yozish mumkin.

Bunda E_0 – oniy Yung moduli, R_E – relaksatsiya yadrosi.Siljish deformatsiyalari uchun xuddi shunday

$$\tau(t) = G_0\left[\gamma(t) - \int_0^t R_G(t-\tau)\gamma(\tau)d\tau\right] \quad (9)$$

Izotrop qovushqoq-elastik materialda hajmiy va siljish modullarining vaqtga bog‘liqligi Puasson koeffitsiyentining ham vaqtga bog‘liq bo‘lishiga olib keladi. Laplas sohasida

$$\bar{\nu}(s)=\frac{3\bar{K}(s)-2\bar{G}(s)}{2\left[3\bar{K}(s)+\bar{G}(s)\right]} \quad (10)$$

bunda $\bar{K}(s)-$hajmiy modulning, $\bar{G}(s)-$esa siljish modulining operator ko‘rinishlari. Shu sababli umumiy holda $\nu=\nu(t)$ deb qarash fizik nuqtai nazardan asosli hisoblanadi.

4. Integro-differensial tenglama

Qobiqning fazoviy koordinatalar bo‘yicha masalasi o‘zgaruvchilarni ajratish va qovushqoq-elastik moslik prinsipidan foydalanish orqali vaqtga nisbatan integro-differensial tenglamaga keltiriladi:

$$\ddot{f}+2\alpha\dot{f}+\left[\omega^2+\mu\varphi(t)\right]f+2\alpha\mu\int_0^t\Phi(t-\tau)\varphi(\tau)f(\tau)d\tau=0 \quad (11)$$

bunda $\alpha>0-$ekvivalent so‘nish koeffitsiyenti;

$\omega-$qovushqoq-elastik qobiqning samarali xususiy chastotasi;

$\mu-$parametrik ta’sir intensivligi;

$\Phi-$materialning irsiy xususiyatlarini ifodalovchi funksiya.

$2\alpha\mu\int_0^t\Phi(t-\tau)\varphi(\tau)f(\tau)d\tau$ (12) had kichik bo‘lsa, birinchi yaqinlashishda

$\ddot{f}+2\alpha\dot{f}+\left[\omega^2+\mu\varphi(t)\right]f=0$ (13) tenglama hosil bo‘ladi. Bu so‘nishga ega Xill tenglamasidir.

5. Garmonik parametrik qo‘zg‘atish

Agar $\varphi(t)=\cos(\theta t)$ bo‘lsa $\ddot{f}+2\alpha\dot{f}+\left[\omega^2+\mu\cos(\theta t)\right]f=0$ (14)

O‘lchamsiz parametrik amplitudani $h=\frac{\mu}{\omega^2}$ (15)deb belgilasak,

$\ddot{f}+2\alpha\dot{f}+\omega^2\left[1+h\cos(\theta t)\right]f=0$ (16) ko‘rinishdagi so‘nishli Mate tenglamasi olinadi.

Dempfirlashning o‘lchamsiz koeffitsiyenti $\zeta=\frac{\alpha}{\omega}$ (18)deb qabul qilinadi.

6. Asosiy parametrik rezonans

Parametrik rezonansning eng xavfli birinchi sohasi

Asosiy parametrik rezonans sharti: $\theta\approx 2\omega$ (19) shart bajarilganda yuzaga keladi.

Normallashtirilgan chastota $r=\frac{\theta}{2\omega}$ (20) deb olinsa, asosiy rezonans r=1 nuqta atrofida joylashadi. Yechimni sekin o‘zgaruvchi amplitudalar yordamida

$$f(t)=A(t)\cos\frac{\theta t}{2}+B(t)\sin\frac{\theta t}{2} \quad (21)$$ ko‘rinishida qidiramiz.

O‘rtachalash usuli natijasida o‘sish yoki so‘nishni xarakterlovchi xarakteristik ko‘rsatkichlar birinchi yaqinlashishda Xarakteristik ko‘rsatkichlar $\frac{\lambda_{\pm}}{\omega}=-\zeta\pm\sqrt{\left(\frac{h}{4}\right)^2-(r-1)^2}$ (22) ko‘rinishida olinadi.

Agar $\mathrm{Re}\,\lambda_+>0$ (23) bo‘lsa, tebranish amplitudasi vaqt bo‘yicha o‘sadi va sistema dinamik noturg‘un bo‘ladi.

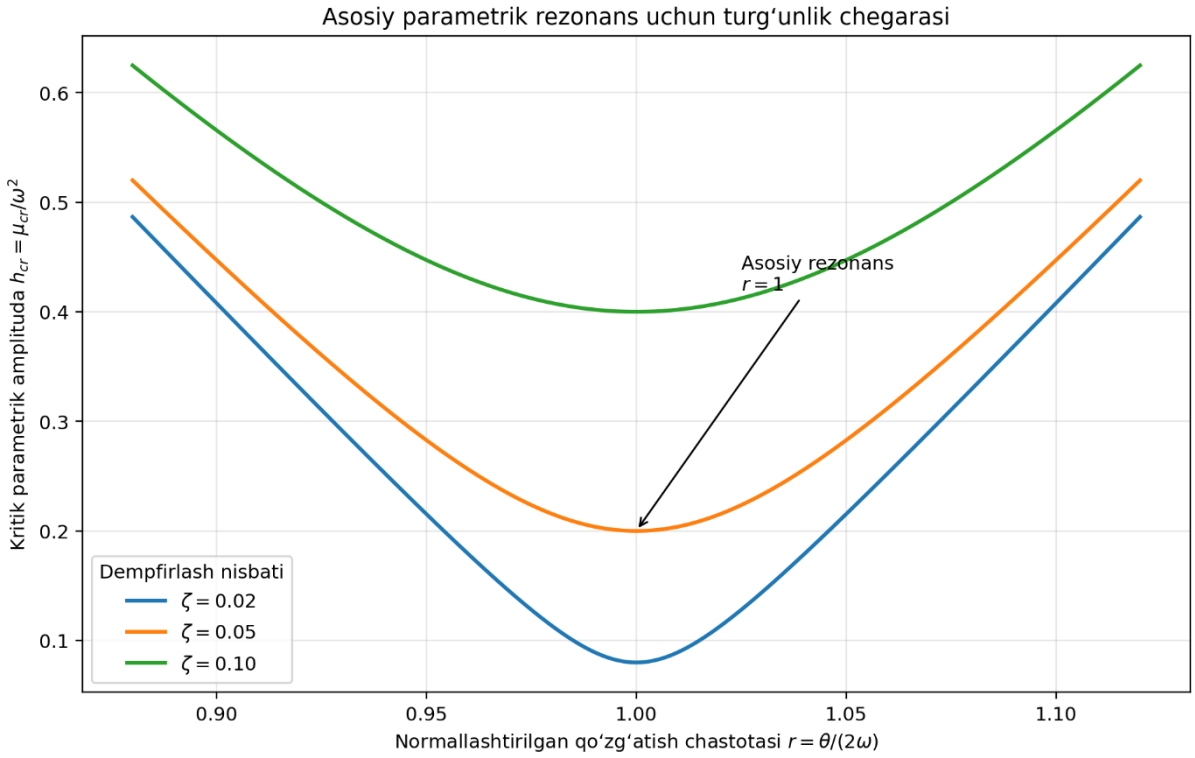
7. Turg‘unlikning kritik sharti

Noturg‘unlik paydo bo‘lishi uchun Noturg‘unlik sharti $\left(\frac{h}{4}\right)^2 > \zeta^2 + (r-1)^2$ (23) bajarilishi kerak. Bundan $\left(\frac{h}{4}\right)^2 > \zeta^2 + (r-1)^2$ (24) kelib chiqadi. Demak, turg‘unlik chegarasi

Kritik parametrik amplituda $h_{cr} = 4\sqrt{\zeta^2 + (r-1)^2}$ (25)bilan aniqlanadi. Aslida

$$h = \frac{\mu}{\omega^2}, \qquad r = \frac{\theta}{2\omega}, \qquad \zeta = \frac{\alpha}{\omega} \text{ (26)}$$

bo‘lgani uchun, o‘lchamli ko‘rinishidagi $\mu_{cr} = 4\omega^2\sqrt{\left(\frac{\alpha}{\omega}\right)^2 + \left(\frac{\theta}{2\omega} - 1\right)^2}$ (27) ifoda hosil bo‘ladi. Bu parametrik tebranishlarning muhim natijalaridan biridir.



1-rasm. Turli dempfirlash koeffitsiyentlarida asosiy parametrik rezonans uchun dinamik turg‘unlik chegaralari. Dempfirlash ortishi bilan kritik parametrik ta’sir amplitudasi ortadi va noturg‘unlik sohasi qisqaradi

ζ – dempfirlash nisbati. Dempfirlash ortishi bilan egri chiziq yuqoriga ko‘tariladi. Bu esa sistema noturg‘un holatga o‘tishi uchun kattaroq parametrik ta’sir talab qilinishini anglatadi.

Egri chiziqlarning eng past nuqtasi r=1 atrofida joylashgan. Demak, $\theta \approx 2\omega$ bo‘lganda sistema parametrik rezonansga eng moyil bo‘ladi. Aynan shu nuqtada kritik amplituda eng kichik qiymatga ega:

8. Aniq rezonans holati

Agar $\theta = 2\omega$ (28) ya’ni r=1 bo‘lsa, kritik parametrik amplituda

$h_{cr} = 4\zeta$ (29) ko‘rinishga keladi. Shunday qilib, $\mu_{cr} = 4\alpha\omega$ (30) bo‘ladi. Bu natijadan ko‘rinadiki, dempfirlash koeffitsiyenti α ortishi bilan parametrik rezonansni paydo qilish uchun zarur bo‘lgan kritik tashqi ta’sir amplitudasi ham chiziqli ravishda ortadi.

Masalan: $\zeta = 0.02 \Rightarrow h_{cr} = 0.08$

$\zeta = 0.05 \Rightarrow h_{cr} = 0.20$

$\zeta = 0.10 \Rightarrow h_{cr} = 0.40$

Demak, dempfirlash besh marta oshirilganda parametrik rezonansni qo‘zg‘atish uchun talab etiladigan kritik amplituda ham sezilarli ortadi.

9. Noturg‘unlik sohasining kengligi

Berilgan (h) uchun noturg‘unlik sohasini $|r-1|<\sqrt{\left(\frac{h}{4}\right)^2-\zeta^2}$ (31) tengsizlik bilan aniqlash mumkin. Ya’ni

$$1-\sqrt{\left(\frac{h}{4}\right)^2-\zeta^2}<\frac{\theta}{2\omega}<1+\sqrt{\left(\frac{h}{4}\right)^2-\zeta^2}$$ (32) bo‘ladi.

Chastota orqali yozsak, $|\theta-2\omega|<2\omega\sqrt{\left(\frac{h}{4}\right)^2-\zeta^2}$ (33) kelib chiqadi.

Bu formula parametrik rezonans sohasining chastota bo‘yicha kengligini ko‘rsatadi. Agar $h\le 4\zeta$ bo‘lsa, asosiy parametrik rezonans sohasi ochilmaydi.

10. Floke nazariyasi va monodromiya matritsasi

Tenglamani birinchi tartibli Floke sistema ko‘rinishiga keltiramiz:

$x_1=f,\qquad x_2=\dot{f}$

U holda

$$\dot{x}_1=x_2\quad \dot{x}_2=-2\alpha x_2-\left[\omega^2+\mu\varphi(t)\right]x_1-2\alpha\mu\int_0^t\Phi(t-\tau)\varphi(\tau)x_1(\tau)d\tau$$ (34)

Integral had e’tiborga olinmagan birinchi yaqinlashishda

Matritsali ko‘rinish: $\dot{x}=A(t)x$ bu yerda

$$A(t)=\begin{pmatrix}0 & 1\\ -\left[\omega^2+\mu\varphi(t)\right] & -2\alpha\end{pmatrix}$$ (35)

Fundamental matritsa: $\dot{X}(t)=A(t)X(t),\qquad X(0)=I$ tenglamani qanoatlantiradi. Bir davrdan keyingi $\mathrm{M=X(T)}$ matritsa monodromiya matritsasi deb ataladi. Uning xos qiymatlari $\det(M-\rho I)=0$ tenglamadan aniqlanadi va Floke multiplikatorlari deb ataladi.

Turg‘unlik mezoni:

Turg‘unlik mezoni: $\max_i|\rho_i|<1$ - asimptotik turg‘unlik;

$\max_i|\rho_i|=1$- turg‘unlik chegarasi;

$\max_i|\rho_i|>1$- dinamik noturg‘unlik.

Shunday qilib, spektral radius: $\rho(M)=\max_i|\rho_i|$ uchun $\rho(M)<1$ bo‘lishi turg‘unlikning asosiy sharti hisoblanadi.

Agar irsiy yadro eksponensial funksiyalar yig‘indisi bilan $\Phi(t)=\sum_{k=1}^{N}c_k e^{-b_k t}$

ko‘rinishida yaqinlashtirilsa, integro-differensial tenglamani oddiy differensial tenglamalar sistemasiga keltirish mumkin.

Qo‘shimcha o‘zgaruvchilarni $z_k(t)=\int_0^t e^{-b_k(t-\tau)}\varphi(\tau)f(\tau)d\tau$ (36)deb kiritamiz.

U holda $\dot{z}_k=\varphi(t)f(t)-b_k z_k$ (37) bo‘ladi. Shunda harakat tenglamasi

$$\ddot{f}+2\alpha\dot{f}+\left[\omega^2+\mu\varphi(t)\right]f+2\alpha\mu\sum_{k=1}^{N}c_k z_k=0$$ (38)ko‘rinishga keladi. Natijada (N+2) o‘lchovli davriy koeffitsiyentli sistema hosil bo‘ladi va unga Floke nazariyasini to‘g‘ridan-to‘g‘ri qo‘llash mumkin.

Bu usul qovushqoq-elastik materialning haqiqiy irsiy xususiyatlarini hisobga olishda juda qulay.

12. Qovushqoq–elastiklikning turg‘unlikka ta’siri

Garmonik deformatsiyada materialning kompleks moduli $E^*(\Omega) = E'(\Omega) + iE''(\Omega)$ ko‘rinishida yoziladi. Bu yerda (E') – to‘planuvchi energiyani xarakterlovchi dinamik modul, (E") – energiya dissipatsiyasini xarakterlovchi yo‘qotish moduli.

Yo‘qotish koeffitsiyenti $\eta = \dfrac{E''}{E'}$ bilan aniqlanadi. Kichik dempfirlash holatida qovushqoq-elastik material uchun $\zeta_v \approx \dfrac{\eta}{2}$ deb baholash mumkin. Umumiy dempfirlash

$\zeta_{\text{eff}} = \zeta_0 + \zeta_v$ ko‘rinishida qabul qilinsa, $\mu_{\text{cr}} = 4\omega^2\sqrt{\left(\dfrac{\alpha}{\omega}\right)^2 + \left(\dfrac{\theta}{2\omega} - 1\right)^2}$ (39)Demak,

$\zeta_{\text{eff}} \uparrow \Rightarrow h_{\text{cr}} \uparrow$ Ya’ni materialning qovushqoqligi ortishi parametrik noturg‘unlik boshlanadigan kritik amplitudani oshiradi.

Asosiy xulosa. Qovushqoq-elastik qobiqning parametrik turg‘unligi tashqi qo‘zg‘atish chastotasi ζ, sistema xususiy chastotasi ω, parametrik ta’sir intensivligi μ va dempfirlash koeffitsiyenti α ning o‘zaro munosabati bilan belgilanadi.

Asosiy parametrik rezonans $\theta \approx 2\omega$ atrofida yuzaga keladi.Bu sohada birinchi yaqinlashishda kritik amplituda

$$\mu_{\text{cr}} = 4\omega^2\sqrt{\left(\frac{\alpha}{\omega}\right)^2 + \left(\frac{\theta}{2\omega} - 1\right)^2}$$ (40) bilan baholanadi. Aniq rezonansda esa $\mu_{\text{cr}} = 4\alpha\omega$ bo‘ladi.Shu sababli qovushqoq-elastik materialda energiya dissipatsiyasining ortishi parametrik rezonans chegarasini yuqoriga siljitib, konstruksiyaning dinamik turg‘unligini oshiradi.

Bu xulosa qovushqoq-elastik tayanchlar, prujinalar, sterjenlar, qobiqlar va dinamik so‘ndirgichlarni hisoblashda muhim ahamiyatga ega.

ADABIYOTLAR:

1.Ilyasov M.H. Parametric vibrations and stability of viscoelastic shells // Mechanics of Time-Dependent Materials. – 2010. – Vol. 14. – P. 153–171. DOI: 10.1007/s11043-009-9100-2.

2. Bolotin V.V. The Dynamic Stability of Elastic Systems. – San Francisco: Holden-Day, 1964. – 451 p.

3. Nayfeh A.H., Mook D.T. Nonlinear Oscillations. – New York: Wiley, 1979. – 720 p.

4. Christensen R.M. Theory of Viscoelasticity: An Introduction. 2nd ed. – New York: Dover Publications, 2013. – 384 p.

УЎК 537.311.322:535.34

КУБО-ГРИНВУД ФОРМУЛАСИ АСОСИДА АМОРФ ЯРИМЎТКАЗГИЧЛАРНИНГ ЭКСПОНЕНЦИАЛ ОПТИК ЮТИЛИШ КОЭФФИЦИЕНТИ СПЕКТРЛАРИНИ ТАҲЛИЛ ҚИЛИШ

Икрамов Рустамжон Ғуломжонович,
Наманган давлат техника университети
Fizika kafedrasi professori (DSc)
rgikramov@mail.ru
Мўминов Хуршидбек Адхамжон ўғли,
Наманган давлат техника университети
Fizika kafedrasi dotsenti (PhD)
xamuminov@mail.ru
Умаров Сарвар Савриддин ўғли,
Наманган давлат техника университети
Fizika kafedrasi tayanch doktoranti
DrSavridinovich@gmail.com

Аннотация. *Ушбу ишда Дэвис – Моот яқинлашиш усулига кўра ёзиладиган Кубо – Гринвуд формуласини иккала кўринишидан экспоненциаль оптик ютилиш коэффициенти спектрларини ҳисоблашда, бу формуладаги интегрални аниқ интеграл кўринишда ёзиш кераклиги кўрсатилди. Шу билан бирга Кубо – Гринвуд формуласини аморф яримўтказгичларда энергияси ҳаракатчанлик тирқишини (тақиқланган зона) энергетик кенглигидан кичик энергияли фотонлар ютилганда юз берадиган электронларни оптик ўтишларига мос ҳолда ажратиб ёзиш кераклиги кўрсатилди. Фақат шу ҳолда Кубо – Гринвуд формуласини икки хил кўринишдаги ифодасидан олинадиган аналитик ечимлар бир хил кўринишга эга бўлиши кўрсатилди.*

Калит сўзлар: *аморф яримўтказгичлар, Дэвис – Моот яқинлашиш усули, Кубо –Гринвуд формуласи, экспоненциаль ютилиш спектрлари.*

АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ АМОРФНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ ФОРМУЛЫ КУБО-ГРИНВУДА

Аннотация. *В данной работе показано, что при вычислении спектров экспоненциального коэффициента оптического поглощения формулы Кубо-Гринвуда в обеих формах, записанных согласно приближению Дэвиса-Мута, интеграл в этой формуле следует записывать в точной интегральной форме. Одновременно показано, что формулу Кубо-Гринвуда следует записывать отдельно для аморфных полупроводников, соответствующих оптическим переходам электронов, происходящим при поглощении фотонов с энергией меньше ширины запрещенной зоны подвижности (запрещённой зоны). Только в этом случае показано, что аналитические решения, полученные из двух форм формулы Кубо-Гринвуда, будут иметь одинаковую форму.*

Ключевые слова: *аморфные полупроводники, приближение Дэвиса-Мута, формула Кубо-Гринвуда, спектры экспоненциального поглощения.*

ANALYSIS OF EXPONENTIAL OPTICAL ABSORPTION SPECTRA OF AMORPHOUS SEMICONDUCTORS BASED ON THE KUBO-GREENWOOD FORMULA

Abstract. *This paper demonstrates that when calculating the exponential optical absorption coefficient spectra of the Kubo-Greenwood formula in both forms written using the Davis-Muth approximation, the integral in this formula should be written in exact integral form. It is also shown that the Kubo-Greenwood formula should be written separately for amorphous semiconductors corresponding to electron optical transitions occurring upon absorption of photons with energies smaller than the band gap. Only in this case is it shown that the analytical solutions obtained from the two forms of the Kubo-Greenwood formula will have the same form.*

Keywords: *amorphous semiconductors, Davis-Muth approximation, Kubo-Greenwood formula, exponential absorption spectra.*

Кириш. Маълумки, аморф яримўтказгичларни ютилиш коэффициенти спектрларни ҳисоблашда Дэвис – Моот яқинлашиш усулига кўра ёзиладиган Кубо-Гринвуд формуласидан фойдаланилади [1]. Бу формулани қуйидаги кўринишда ёзилади:

$$\alpha(\hbar\omega) = A\int g_V(\varepsilon)g_C(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} \tag{1}$$

Бу ерда $g_V(\varepsilon)$ - ва $g_C(\varepsilon)$ – лар мос равишда оптик ўтишларда иштирок этадиган электронларни бошланғич ва охирги ҳолатлари зичликларини тақсимотлари, $\hbar\omega$ – ютилган фотонларни энергияси.

Бу формуладан аналитик ечимни олиш учун [2] ишда ундаги интегрални аниқ интеграл кўринишда ёзиш кераклиги кўрсатилган. Шунинг учун (1) формулани қуйидаги кўринишда ёзамиз:

$$\alpha(\hbar\omega) = A\int\limits_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} g_V(\varepsilon)g_C(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} \tag{2}$$

Бу ерда ε_0 – валент ва ўтказувчанлик зоналарини экспоненциал думларнини кесишиш нуқтасини энергетик ўрни.

Агар аморф яримўтказгичларда энергияси ҳаракатчанлик тирқишининг энергетик кенглигидан кичик энергияли фотонлар ютилса улар бир вақтни ўзида электронларни оптик ўтишлари: валент зона думидан ўтказувчанлик зонасига, валент зона думидан ўтказувчанлик зонасининг думига ва валент зонадан ўтказувчанлик зонасининг думига юз беради. Шунинг учун (2) формулани юқоридаги электронларни оптик ўтишларига мослаб учга ажратиш керак:

$$\begin{aligned}\alpha(\hbar\omega) &= A\int\limits_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} g_V(\varepsilon)g_C(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = A\int\limits_{\varepsilon_C-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} g_V(\varepsilon)g_C(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + \\ &+ A\int\limits_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_C-\hbar\omega} g_V(\varepsilon)g_C(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + \\ &+ A\int\limits_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_V} g_V(\varepsilon)g_C(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \alpha_1(\hbar\omega)+\alpha_2(\hbar\omega)+\alpha_3(\hbar\omega)\end{aligned} \tag{3}$$

Бу ерда $\alpha_1(\hbar\omega)$ – электронларни валент зона думидан ўтказувчанлик зонасига, $\alpha_2(\hbar\omega)$ – валент зона думидан ўтказувчанлик зонаси думига, $\alpha_3(\hbar\omega)$ – валент зонадан ўтказувчанлик зонаси думига оптик ўтишлари коэффициентларини спектрлари.

(3) формуладаги $\alpha_1(\hbar\omega)$ –, $\alpha_2(\hbar\omega)$ – ва $\alpha_3(\hbar\omega)$ – ларни аналитик ечимларини олиш учун валент ва ўтказувчанлик зонаси, ҳамда уларни экспоненциал думларидаги ҳолат зичликлари тақсимотларини билиш керак. Одатда аморф яримўтказгичларнинг рухсат этилган зоналаридаги локаллашмаган электрон ҳолатлари зичликларини тақсимоти параболик ёки чизиқли, бу зоналарни экспонциаль думларидаги локаллашган ҳолат зичликларини тақсимоти экспоненциал боғланишга эга бўлади деб олинади [3, 4, 5]. Шунинг учун биз бу ҳолат зичликларини қуйидаги кўринишларда танлаймиз:

Валент зона учун: $g_V(\varepsilon) = N(\varepsilon_V)\dfrac{\varepsilon-\varepsilon_C}{E_g}$. (4)

Ўтказувчанлик зонаси учун: $g_C(\varepsilon) = N(\varepsilon_C)\dfrac{\varepsilon-\varepsilon_V}{E_g}$. (5)

Валент зонани думи учун: $g_V(\varepsilon) = N(\varepsilon_V)\exp(-\beta_1(\varepsilon-\varepsilon_V))$. (6)

Ўтказувчанлик зонасини думи учун: $g_C(\varepsilon) = N(\varepsilon_C)\exp(\beta_2(\varepsilon-\varepsilon_C))$. (7)

(3) формуладаги ҳар бир ҳадни алоҳида-алоҳида ҳисоблаймиз:

$$\alpha_1(\hbar\omega) = A\int\limits_{\varepsilon_C-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} g_V(\varepsilon)g_C(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = A\int\limits_{\varepsilon_C-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} N(\varepsilon_V)\exp(-\beta_1(\varepsilon-\varepsilon_V))N(\varepsilon_C)\frac{\varepsilon+\hbar\omega-\varepsilon_V}{E_g}\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} =$$

$$= \frac{AN(\varepsilon_V)N(\varepsilon_C)}{\hbar\omega E_g}\exp(\beta_1\hbar\omega)\int\limits_{\varepsilon_C-\hbar\omega}^{\varepsilon_0}\exp(-\beta_1(\varepsilon+\hbar\omega-\varepsilon_V))(\varepsilon+\hbar\omega-\varepsilon_V)d(\varepsilon+\hbar\omega-\varepsilon_V)d(\varepsilon+\hbar\omega-\varepsilon_V) \tag{8}$$

[6] ишда (8) кўринишдаги интегралларни ҳисоблаш учун қуйидаги кўринишда ёзиш кераклиги кўрсатилган:

$$\int x\exp(ax)dx = \frac{\exp(ax)}{a^2}(ax-1)\,. \tag{9}$$

(9) дан фойдалансак, (8) қуйидаги кўринишга келади:

$$\alpha_1(\hbar\omega) = \frac{B}{\hbar\omega E_g\beta_1^{\,2}}\exp(\beta_1\hbar\omega)\left[\exp(-\beta_1(\varepsilon+\hbar\omega-\varepsilon_V))(-\beta_1(\varepsilon+\hbar\omega-\varepsilon_V)-1)\right]_{\varepsilon_C-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} =$$

$$= \frac{B}{\hbar\omega E_g\beta_1^{\,2}}\exp(\beta_1\hbar\omega)(\exp(-\beta_1(\varepsilon_0+\hbar\omega-\varepsilon_V))(-\beta_1(\varepsilon_0+\hbar\omega-\varepsilon_V)-1)-$$

$$-\exp(-\beta_1(\varepsilon_C-\varepsilon_V))(-\beta_1(\varepsilon_C-\varepsilon_V)-1))$$

Бу формулада $B=AN(\varepsilon_V)N(\varepsilon_C)$ ва $\varepsilon_C-\varepsilon_V = E_g$ бўлганлигидан қуйидаги кўринишда ёзамиз:

$$\alpha_1(\hbar\omega) = \frac{B}{\hbar\omega E_g\beta_1^{\,2}}\exp(\beta_1\hbar\omega)(\exp(-\beta_1(\varepsilon_0+\hbar\omega-\varepsilon_V))(-\beta_1(\varepsilon_0+\hbar\omega-\varepsilon_V)-1)-$$

$$-\exp(-\beta_1E_g)(-\beta_1E_g-1)) = \frac{B}{\hbar\omega E_g\beta_1^{\,2}}(\exp(-\beta_1(\varepsilon_0-\varepsilon_V))(-\beta_1(\varepsilon_0+\hbar\omega-\varepsilon_V)-1)-$$

$$-\exp(-\beta_1E_g-\hbar\omega)(-\beta_1E_g-1))$$

$$\alpha_1(\hbar\omega) = \frac{B}{\hbar\omega E_g\beta_1^{\,2}}(\exp(-\beta_1(\varepsilon_0-\varepsilon_V))(-\beta_1(\varepsilon_0+\hbar\omega-\varepsilon_V)-1)- \tag{10}$$

$$-\exp(-\beta_1(E_g-\hbar\omega))(-\beta_1E_g-1))$$

Энди электронларни валент зона думидан ўтказувчанлик зонаси думига оптик ютилиш коэффициенти спектрини ҳисоблашни қараб чиқамиз:

$$\alpha_2(\hbar\omega) = A\int\limits_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_C-\hbar\omega} g_V(\varepsilon)g_C(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}$$

$$\alpha_2(\hbar\omega) = A\int\limits_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_C-\hbar\omega} N(\varepsilon_V)\exp(-\beta_1(\varepsilon-\varepsilon_V))N(\varepsilon_C)\exp(\beta_2(\varepsilon+\hbar\omega-\varepsilon_C))\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} =$$

$$= \frac{AN(\varepsilon_V)N(\varepsilon_C)}{\hbar\omega}\int\limits_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_C-\hbar\omega}\exp(-\beta_1(\varepsilon-\varepsilon_V))\exp(\beta_2(\varepsilon+\hbar\omega-\varepsilon_C))d\varepsilon = \frac{B}{\hbar\omega}\times$$

$$\times\int\limits_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_C-\hbar\omega}\exp(\beta_1\varepsilon_V)\exp(-\beta_1\varepsilon)\exp(\beta_2(\hbar\omega-\varepsilon_C))\exp(\beta_2\varepsilon)d\varepsilon =$$

$$= \frac{B}{\hbar\omega}\exp(\beta_1\varepsilon_V)\exp(\beta_2(\hbar\omega-\varepsilon_C))\int\limits_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_C-\hbar\omega}\exp((\beta_2-\beta_1)\varepsilon)d\varepsilon$$

$$\alpha_2(\hbar\omega)=\frac{B}{\hbar\omega(\beta_2-\beta_1)}\exp(\beta_1\varepsilon_V)\exp(\beta_2(\hbar\omega-\varepsilon_C))(\exp((\beta_2-\beta_1)\varepsilon))\Big|_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_C-\hbar\omega}=$$

$$=\frac{B}{\hbar\omega(\beta_2-\beta_1)}\exp(\beta_1\varepsilon_V)\exp(\beta_2(\hbar\omega-\varepsilon_C))(\exp((\beta_2-\beta_1)(\varepsilon_C-\hbar\omega)-\exp((\beta_2-\beta_1)\varepsilon_V))=$$

$$=\frac{B}{\hbar\omega(\beta_2-\beta_1)}(\exp(-\beta_1(\varepsilon_C-\hbar\omega-\varepsilon_V))-\exp(\beta_2(\varepsilon_V+\hbar\omega-\varepsilon_C)))=$$

$$=\frac{B}{\hbar\omega(\beta_2-\beta_1)}(\exp(-\beta_1(E_g-\hbar\omega))-\exp(-\beta_2(E_g-\hbar\omega)))$$

$$\alpha_2(\hbar\omega)=\frac{B}{\hbar\omega(\beta_2-\beta_1)}(\exp(-\beta_1(E_g-\hbar\omega))-\exp(-\beta_2(E_g-\hbar\omega))) \quad (11)$$

(3) формуладаги учинчи ҳадни ҳисоблашни қараб чиқамиз:

$$\alpha_3(\hbar\omega)=A\int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_V}g_V(\varepsilon)g_C(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}=\frac{A}{\hbar\omega}\int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_V}N(\varepsilon_V)\frac{\varepsilon-\varepsilon_C}{E_g}N(\varepsilon_C)\exp(\beta_2(\varepsilon+\hbar\omega-\varepsilon_C))d\varepsilon=$$

$$=\frac{AN(\varepsilon_V)N(\varepsilon_C)}{E_g\hbar\omega}\int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_V}(\varepsilon-\varepsilon_C)\exp(\beta_2(\varepsilon+\hbar\omega-\varepsilon_C))d\varepsilon=$$

$$=\frac{B}{E_g\hbar\omega}\exp(\beta_2\hbar\omega)\int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_V}(\varepsilon-\varepsilon_C)\exp(\beta_2(\varepsilon-\varepsilon_C))d(\varepsilon-\varepsilon_C)=$$

$$=\frac{B}{E_g\hbar\omega\beta_2^{\,2}}\exp(\beta_2\hbar\omega)(\exp(\beta_2(\varepsilon-\varepsilon_C))(\beta_2(\varepsilon-\varepsilon_C)-1)\Big|_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_V}=$$

$$=\frac{B}{E_g\hbar\omega\beta_2^{\,2}}\exp(\beta_2\hbar\omega)(\exp(\beta_2(\varepsilon_V-\varepsilon_C))(\beta_2(\varepsilon_V-\varepsilon_C)-1)-$$

$$-\exp(\beta_2(\varepsilon_0-\hbar\omega-\varepsilon_C))(\beta_2(\varepsilon_0-\hbar\omega-\varepsilon_C)-1))=$$

$$=\frac{B}{E_g\hbar\omega\beta_2^{\,2}}(\exp(\beta_2(\hbar\omega-E_g))(-\beta_2E_g-1)-\exp(\beta_2(\varepsilon_0-\varepsilon_C))(\beta_2(\varepsilon_0-\hbar\omega-\varepsilon_C)-1))$$

$$\alpha_3(\hbar\omega)=\frac{B}{E_g\hbar\omega\beta_2^{\,2}}(\exp(\beta_2(\hbar\omega-E_g))(-\beta_2E_g-1)-\exp(\beta_2(\varepsilon_0-\varepsilon_C))(\beta_2(\varepsilon_0-\hbar\omega-\varepsilon_C)-1)) \quad (12)$$

Энди Кубо-Гринвуд формуласини иккинчи кўринишда ёзилишини қараб чиқамиз. Бу формула қуйидаги кўринишда ёзилади:

$$\alpha(\hbar\omega)=A\int g_V(\varepsilon-\hbar\omega)g_C(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}$$

Бу формуладаги интегрални ҳам аниқ интеграл кўринишида ёзамиз:

$$\alpha(\hbar\omega)=A\int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_0+\hbar\varepsilon\omega}g_V(\varepsilon-\hbar\omega)g_C(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} \quad (13)$$

(12) формулани ҳам, электронларни оптик ўтиш турларига мослаб учга ажратамиз:

$$\alpha(\hbar\omega)=A\int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_0+\hbar\omega}g_V(\varepsilon-\hbar\omega)g_C(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}=A\int_{\varepsilon_C}^{\varepsilon_0+\hbar\omega}g_V(\varepsilon-\hbar\omega)g_C(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}+$$

$$+A\int_{\varepsilon_V+\hbar\omega}^{\varepsilon_C}g_V(\varepsilon-\hbar\omega)g_C(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}+A\int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_V+\hbar\omega}g_V(\varepsilon-\hbar\omega)g_C(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}=\alpha_1(\hbar\omega)+\alpha_2(\hbar\omega)+\alpha_3(\hbar\omega)$$

(14)

Юқоридаги усулда (14) формуладаги ҳар бир ҳадни алоҳида – алоҳида ҳисоблаймиз:

$$\alpha_1(\hbar\omega) = A\int_{\varepsilon_C}^{\varepsilon_0+\hbar\omega} g_V(\varepsilon-\hbar\omega)g_C(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} == \frac{A}{\hbar\omega}\int_{\varepsilon_C}^{\varepsilon_0+\hbar\omega} N(\varepsilon_V)\exp(-\beta_1(\varepsilon-\hbar\omega-\varepsilon_V))N(\varepsilon_C)\frac{\varepsilon-\varepsilon_V}{E_g}d\varepsilon =$$

$$= \frac{AN(\varepsilon_V)N(\varepsilon_C)}{\hbar\omega E_g}\int_{\varepsilon_C}^{\varepsilon_0+\hbar\omega}\exp(-\beta_1(\varepsilon-\hbar\omega-\varepsilon_V))(\varepsilon-\varepsilon_V)d\varepsilon =$$

$$= \frac{B}{\hbar\omega E_g}\exp(\beta_1\hbar\omega)\int_{\varepsilon_C}^{\varepsilon_0+\hbar\omega}\exp(-\beta_1(\varepsilon-\varepsilon_V))(\varepsilon-\varepsilon_V)d(\varepsilon-\varepsilon_V) =$$

$$= \frac{B}{\hbar\omega E_g}\exp(\beta_1\hbar\omega)(\exp(-\beta_1(\varepsilon-\varepsilon_V))(-\beta_1(\varepsilon-\varepsilon_V)-1)\Big|_{\varepsilon_C}^{\varepsilon_0+\hbar\omega} =$$

$$= \frac{B}{\hbar\omega E_g\beta_1^{\,2}}\exp(\beta_1\hbar\omega)((\exp(-\beta_1(\varepsilon_0+\hbar\omega-\varepsilon_V))(-\beta_1(\varepsilon_0+\hbar\omega-\varepsilon_V)-1)-$$

$$-(\exp(-\beta_1(\varepsilon_C-\varepsilon_V))(-\beta_1(\varepsilon_C-\varepsilon_V)-1)) = \frac{B}{\hbar\omega E_g\beta_1^{\,2}}((\exp(-\beta_1(\varepsilon_0-\varepsilon_V))(-\beta_1(\varepsilon_0+\hbar\omega-\varepsilon_V)-1)-$$

$$-(\exp(-\beta_1(\varepsilon_C-\hbar\omega-\varepsilon_V))(-\beta_1(\varepsilon_C-\varepsilon_V)-1)) = \frac{B}{\hbar\omega E_g\beta_1^{\,2}}((\exp(-\beta_1(\varepsilon_0-\varepsilon_V))(-\beta_1(\varepsilon_0+\hbar\omega-\varepsilon_V)-1)-$$

$$-(\exp(-\beta_1(E_g-\hbar\omega))(-\beta_1E_g-1))$$

$$\alpha_1(\hbar\omega) = \frac{B}{\hbar\omega E_g\beta_1^{\,2}}((\exp(-\beta_1(\varepsilon_0-\varepsilon_V))(-\beta_1(\varepsilon_0+\hbar\omega-\varepsilon_V)-1)-(\exp(-\beta_1(E_g-\hbar\omega))(-\beta_1E_g-1)) \quad (15)$$

Энди иккинчи ҳадни ҳисоблашни қараб чиқамиз:

$$\alpha_2(\hbar\omega) = A\int_{\varepsilon_V+\hbar\omega}^{\varepsilon_C} g_V(\varepsilon-\hbar\omega)g_C(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \frac{A}{\hbar\omega}\int_{\varepsilon_V+\hbar\omega}^{\varepsilon_C} N(\varepsilon_V)\exp(-\beta_1(\varepsilon-\hbar\omega-\varepsilon_V)N(\varepsilon_C)\exp(\beta_2(\varepsilon-\varepsilon_C)d\varepsilon =$$

$$= \frac{AN(\varepsilon_V)N(\varepsilon_C)}{\hbar\omega}\int_{\varepsilon_V+\hbar\omega}^{\varepsilon_C}\exp(-\beta_1(\varepsilon-\hbar\omega-\varepsilon_V)\exp(\beta_2(\varepsilon-\varepsilon_C)d\varepsilon =$$

$$= \frac{B}{\hbar\omega}\exp(\beta_1(\varepsilon_V+\hbar\omega))\exp(-\beta_2\varepsilon_C)\int_{\varepsilon_V+\hbar\omega}^{\varepsilon_C}\exp((\beta_2-\beta_1)\varepsilon)d\varepsilon =$$

$$= \frac{B}{\hbar\omega(\beta_2-\beta_1)}\exp(\beta_1(\varepsilon_V+\hbar\omega))\exp(-\beta_2\varepsilon_C)(\exp((\beta_2-\beta_1)\varepsilon)\Big|_{\varepsilon_V+\hbar\omega}^{\varepsilon_C})$$

$$\alpha_2(\hbar\omega) == \frac{B}{\hbar\omega(\beta_2-\beta_1)}\exp(\beta_1(\varepsilon_V+\hbar\omega))\exp(-\beta_2\varepsilon_C)(\exp((\beta_2-\beta_1)\varepsilon_C)-\exp((\beta_2-\beta_1)(\varepsilon_V+\hbar\omega))) =$$

$$= \frac{B}{\hbar\omega(\beta_2-\beta_1)}(\exp(-\beta_1(\varepsilon_C-\varepsilon_V-\hbar\omega))-\exp(\beta_2(\varepsilon_V+\hbar\omega-\varepsilon_C))) =$$

$$\alpha_2(\hbar\omega) = \frac{B}{\hbar\omega(\beta_2-\beta_1)}(\exp(-\beta_1(E_g-\hbar\omega)-\exp(\beta_2(\hbar\omega-E_g)) \quad (16)$$

(13) формуладаги учинчи ҳадни ҳисоблаймиз:

$$\alpha_3(\hbar\omega) = A\int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_V+\hbar\omega} g_V(\varepsilon-\hbar\omega)g_C(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \frac{A}{\hbar\omega}\int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_V+\hbar\omega} N(\varepsilon_V)\frac{\varepsilon-\hbar\omega-\varepsilon_C}{E_g}N(\varepsilon_C)\exp(\beta_2(\varepsilon-\varepsilon_C))d\varepsilon =$$

$$= \frac{AN(\varepsilon_V)N(\varepsilon_C)}{E_g\hbar\omega}\exp(\beta_2\hbar\omega)\int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_V+\hbar\omega}(\varepsilon-\hbar\omega-\varepsilon_C)\exp(\beta_2(\varepsilon-\hbar\omega-\varepsilon_C))d(\varepsilon-\hbar\omega-\varepsilon_C) =$$

$$= \frac{B}{E_g\hbar\omega\beta_2^{\,2}}\exp(\beta_2\hbar\omega)((\exp(\beta_2(\varepsilon-\hbar\omega-\varepsilon_C))(\beta_2(\varepsilon-\hbar\omega-\varepsilon_C)-1))\Big|_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_V+\hbar\omega}) =$$

$$= \frac{B}{E_g\hbar\omega\beta_2^{\,2}}\exp(\beta_2\hbar\omega)((\exp(\beta_2(\varepsilon_V-\varepsilon_C))(\beta_2(\varepsilon_V-\varepsilon_C)-1)-$$

$$-\exp(\beta_2(\varepsilon_0-\hbar\omega-\varepsilon_C))(\beta_2(\varepsilon_0-\hbar\omega-\varepsilon_C)-1) =$$

$$= \frac{B}{E_g\hbar\omega\beta_2^{\,2}}(\exp(\beta_2(\hbar\omega-E_g))(-\beta_2E_g-1)-\exp(\beta_2(\varepsilon_0-\varepsilon_C))(\beta_2(\varepsilon_0-\hbar\omega-\varepsilon_C)-1))$$

$$\alpha_3(\hbar\omega) = \frac{B}{E_g\hbar\omega\beta_2^{\,2}}(\exp(\beta_2(\hbar\omega-E_g))(-\beta_2E_g-1)-\exp(\beta_2(\varepsilon_0-\varepsilon_C))(\beta_2(\varepsilon_0-\hbar\omega-\varepsilon_C)-1))$$

(17)

Бу формулалардан кўриш мумкинки, (10) ва (15), (11) ва (16) ҳамда (12) ва (17) формулалар бир хил кўринишга эга.

Хулоса. Булардан кўринадики, Дэвис – Моот яқинлашиш усулига кўра ёзиладиган Кубо – Гринвуд формуласини иккала кўринишидан экспоненциал оптик ютилиш коэффициенти спектрларини ҳисоблашда, бу формуладаги интегрални аниқ интеграл кўринишда ёзиш керак экан. Шу билан бирга Кубо –Гринвуд формуласини аморф яримўтказгичларда энергияси ҳаракатчанлик тирқишини (тақиқланган зона) энергетик кенглигидан кичик энергияли фотонлар ютилганда юз берадиган электронларни оптик ўтишларига мос ҳолда ажратиб ёзиш керак экан. Шунда Кубо – Гринвуд формуласини икки хил кўринишдаги ифодасидан олинадиган аналитик ечимлар бир хил кўринишга эга бўлар экан.

АДАБИЁТЛАР:

1. Зайнобидинов С., Икрамов Р.Г., Жалалов Р.М. Энергия Урбаха и плотность состояний аморфных полупроводников. // Журнал прикладной спектроскопии. 2011, Т. 78, Н.2, стр. 243-247.

2. Ikramov R.G., Mamaxanov A.A., Nuriddinova M.A., Jalalov R.M., Muminov Kh. M., Sultonov D.Q. Calculation of the interband absorption spectra of amorphous semiconductors using the Kubo-Greenwood formula. Journal of Applied Engineering. 2022 V.25, pp. 767-772.

3. Redfield D. Energy-band tails and optical absorption edge the case of a-Si:H. Solid State Communication. 2014, V.44, pp. 1347-1349.

4. O'Leary S.K. On The relationship between the distribution of electronic states and the optical absorption spectrum in amorphous semiconductors. Solid State Communications. 1999, V.109, pp. 589-594.

5. Моот Х., Девис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах - М., Мир, 1982, - 368 с.

6. *Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов. М., Наука, Гл. Ред. Физ. Мат. Лит., 1966, с. 544.*

UO‘K 621.373.8

MAGNIT MAYDON TA’SIRIDA MISNING LAZERLI ABLATSIYASI: PLAZMA-SIRT ISSIQLIK ALMASHINUVI VA ABLATSIYA CHUQURLIGI

Ibadullayev Navruzbek Atabayevich,
Urganch davlat universiteti Fizika kafedrasi o‘qituvchisi
navruzbekibadullayev84@gmail.com

Annotatsiya. *Mazkur ishda ikkinchi garmonikadagi nanosekundli lazer impulslari yordamida misning magnit maydon ko‘magidagi lazerli ablatsiyasi bo‘yicha sonli va eksperimental tadqiqotlar natijalari keltirilgan. Xususan, magnit maydon mavjud bo‘lmagan sharoitda hamda 0,2 T magnit maydon ta’sirida bug‘lanish va erigan moddaning otilib chiqishi natijasida yuzaga keladigan ablatsiya chuqurligiga asosiy e’tibor qaratildi. Har ikkala holatda ham inkubatsiya effekti kichik bo‘lib, magnit maydon mavjudligida u biroz yaqqolroq namoyon bo‘ldi. Magnit maydon ko‘magidagi lazerli ablatsiyada ablatsiya tezligi yuqoriroq ekanligi aniqlandi. Bu holat issiqlik uzatilishi hisobiga plazma-nishon o‘zaro ta’sirining kuchayishi bilan izohlanadi. Magnit maydon ablatsiyaga uchragan misning periferik sohasida hosil bo‘lgan CuO nanozarrachalarining fotolyuminessensiya cho‘qqilari intensivligini oshiradi. Plazma-sirt o‘rtasidagi energiya almashinuvini hisobga olgan holda olingan sonli modellashtirish natijalari eksperimental natijalar bilan juda yaxshi mos kelishi aniqlandi. Bundan tashqari, xuddi shu sonli hisoblash modeli yordamida yana ikkita metall - xrom va ruxning harorat profillari hamda termik kuchlanishlari o‘rganildi. Magnit maydon mavjudligidagi harorat va termik kuchlanish qiymatlari magnit maydonsiz holatdagiga nisbatan yuqori ekanligi aniqlandi. Shuningdek, magnit maydon mavjud va mavjud bo‘lmagan sharoitlarda sirt g‘adir-budurligining harorat profillariga ta’siri aniqlandi. Ushbu tadqiqot natijalari magnit maydon ta’sirida mis, xrom va rux kabi metallarning lazerli ablatsiya tezligini oshirish uchun foydali bo‘lishi mumkin.*

Kalit so‘zlar: *lazerli ablatsiya, magnit maydon, lazer plazmasi, plazma-sirt o‘zaro ta’siri, ablatsiya chuqurligi.*

ЛАЗЕРНАЯ АБЛЯЦИЯ МЕДИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ: ПЛАЗМЕННО-ПОВЕРХНОСТНЫЙ ТЕПЛООБМЕН И ГЛУБИНА АБЛЯЦИИ

Аннотация. *В данной работе представлены результаты численных и экспериментальных исследований лазерной абляции меди в присутствии магнитного поля с использованием наносекундных лазерных импульсов второй гармоники. Особое внимание уделено глубине абляции, обусловленной испарением и выбросом расплавленного материала, как в отсутствие магнитного поля, так и при воздействии магнитного поля с индукцией 0,2 Тл. В обоих случаях инкубационный эффект оказался незначительным, при этом в присутствии магнитного поля он проявлялся несколько более выраженно. Установлено, что при лазерной абляции в присутствии магнитного поля скорость абляции выше. Данный эффект объясняется усилением взаимодействия плазмы с мишенью вследствие интенсификации теплопередачи. Магнитное поле повышает интенсивность пиков фотолюминесценции наночастиц CuO, образующихся в периферийной области лазерно-аблированной поверхности меди. Установлено, что результаты численного моделирования, учитывающего энергетический обмен между плазмой и поверхностью, хорошо согласуются с экспериментальными данными. Кроме того, с использованием той же численной модели исследованы температурные профили и термические напряжения ещё для двух металлов - хрома и цинка. Установлено, что значения температуры и термических напряжений в присутствии магнитного поля выше, чем в его отсутствие. Также определено влияние шероховатости поверхности на температурные профили как при наличии, так и при отсутствии магнитного поля. Полученные результаты могут быть полезны для повышения скорости лазерной абляции таких металлов, как медь, хром и цинк, под воздействием магнитного поля.*

Ключевые слова: *лазерная абляция, магнитное поле, лазерная плазма, взаимодействие плазмы с поверхностью, глубина абляции.*

LASER ABLATION OF COPPER IN A MAGNETIC FIELD: PLASMA-SURFACE HEAT EXCHANGE AND ABLATION DEPTH

Abstract. *This study presents the results of numerical and experimental investigations of magnetic-field-assisted laser ablation of copper using second-harmonic nanosecond laser pulses. Particular attention was paid to the ablation depth resulting from evaporation and the ejection of molten material, both in the*

absence of a magnetic field and under a magnetic field of 0.2 T. In both cases, the incubation effect was small, although it was slightly more pronounced in the presence of the magnetic field. A higher ablation rate was observed during magnetic-field-assisted laser ablation. This enhancement is attributed to intensified plasma–target interaction resulting from increased heat transfer. The magnetic field also increases the intensity of the photoluminescence peaks of CuO nanoparticles formed in the peripheral region of the laser-ablated copper surface. The numerical simulation results, obtained by taking into account the energy exchange between the plasma and the surface, were found to be in very good agreement with the experimental results. In addition, the same numerical model was used to investigate the temperature profiles and thermal stresses of two other metals, chromium and zinc. The temperature and thermal stress values in the presence of the magnetic field were found to be higher than those obtained without the magnetic field. The influence of surface roughness on the temperature profiles was also determined both in the presence and absence of the magnetic field. The results of this study may be useful for enhancing the laser ablation rate of metals such as copper, chromium, and zinc under the influence of a magnetic field.

Keywords: *laser ablation, magnetic field, laser-induced plasma, plasma–surface interaction, ablation depth.*

Kirish. Qattiq materiallarning impulsli lazer yordamida ablatsiyasi hamda plazma-lazer o‘zaro ta’siri mikroishlov berish, nanozarrachalar sintezi, burg‘ilash va payvandlash hamda spektroskopiya kabi sohalarda qo‘llash imkoniyatlari nuqtayi nazaridan keng o‘rganilgan. Biroq lazer-modda va lazer-plazma o‘zaro ta’sirlari nihoyatda murakkab jarayonlar bo‘lganligi sababli, lazer yordamida hosil qilingan plazmani (LPP) tadqiq etishda sonli hisoblash usullaridan samarali foydalanib kelinmoqda. Nazariy model asosida Amoruso metall nishonlarning ultrabinafsha impulsli lazer yordamida ablatsiyasini fotonlarning yutilishi va ionlanish mexanizmlari, shuningdek, plazmadagi kinetik jarayonlarni hisobga olgan holda o‘rgangan va nazariy natijalarning eksperimental natijalar bilan mos kelishini ko‘rsatgan. Issiqlik o‘tkazuvchanlik tenglamasi asosida lazerli ablatsiya jarayonini modellashtirish uchun chekli elementlar usulidan (FEM) foydalanilgan. Plazmada lazer nurlanishining yutilishi hamda haroratga bog‘liq termofizik parametrlarni hisobga olgan FEM modeli qoniqarli natijalarni ko‘rsatgan [1-6].

So‘nggi yillarda ko‘plab tadqiqotchilar magnit maydondan turli maqsadlarda, jumladan, lazer ta’sirida material massasining olib tashlanish tezligini oshirish, lazer yordamida hosil qilingan mikrokanallar sirtini silliqlash, lazerli burg‘ilash chuqurligini oshirish, plazma oqimlarini boshqarish, kavitatsion pufakchalar o‘lchamini kattalashtirish hamda optik emissiya intensivligini kuchaytirish uchun foydalanib kelmoqdalar. Kremniyning magnit maydon ko‘magidagi nanosekundli lazer ablatsiyasini o‘rganishda ablatsiya chuqurligining sezilarli darajada ortishi kuzatilgan va bu hodisa nurlanishning magnito-yutilishi bilan izohlangan. Magnit maydon ko‘magidagi lazerli mikroishlov berishda kanalning tomonlar nisbatini ham oshirish mumkin [7-16].

Shu bilan birga, magnit maydon kuchlanganligi, lazer quvvati va chastotasi kabi ishlov berish parametrlarini optimallashtirish zarurligi qayd etilgan bo‘lib, buni sonli hisoblash usullari yordamida ham amalga oshirish mumkin. Magnit maydon mavjudligidagi lazer plazmasida plazmaning fazoviy cheklanishi kuzatiladi va bu, o‘z navbatida, nishonga issiqlik uzatilishining ortishiga olib keladi. Issiqlik uzatilishining kuchayishi nishondan ko‘proq miqdorda material olib tashlanishiga sabab bo‘ladi. Bundan tashqari, bu jarayon nishon sirtiga zarrachalarning cho‘kishini ham kuchaytiradi. Magnit maydonlarda plazmaning evolyutsiyasini o‘rganish uchun sonli modellashtirish usullaridan ham foydalanilgan. Pathak va boshqalar nanozarrachalar sintezi maqsadida magnit maydondagi uglerod plazmasi oqimining dinamikasini sonli usullar yordamida tadqiq qilganlar. Biroq, bizga ma’lum bo‘lgan adabiyotlar doirasida, magnit maydon ko‘magidagi lazerli ablatsiya chuqurligi yoki material massasining olib tashlanish tezligini sonli modellashtirishga bag‘ishlangan tadqiqotlar yetarli darajada yoritilmagan[17-19]**.**

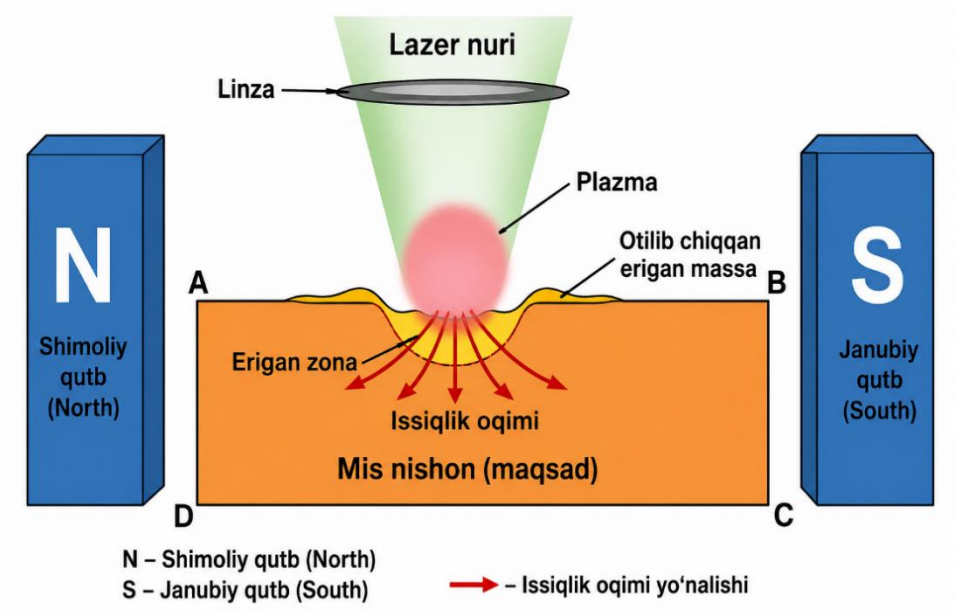
Bundan tashqari, lazerli ablatsiya chuqurligini modellashtirish bo‘yicha avvalgi tadqiqotlarning kamchiliklaridan biri plazmadan nishon sirtiga issiqlik uzatilishining hisobga olinmaganligi hisoblanadi. Mazkur ishda ablatsiya chuqurligining ortish mexanizmini tushuntirish maqsadida plazmadan issiqlik uzatilishi ta’sirlarini hisobga olgan holda chekli elementlar usuli (FEM) va COMSOL Multiphysics dasturiy ta’minoti yordamida magnit maydon ko‘magidagi lazerli ablatsiya jarayonini modellashtirishga harakat qilindi. Eksperimental tadqiqotlarda misning lazerli ablatsiyasi magnit maydon mavjud va mavjud bo‘lmagan sharoitlarda, nishon sirtiga turli miqdordagi lazer impulslarini N = 10, 30, 50, 70 va 90 yo‘naltirish orqali o‘rganildi. Mazkur natijalar mualliflarning avvalgi tadqiqotlarida keltirilmagan. Olingan eksperimental natijalar sonli hisoblash natijalari bilan yaxshi mos keladi.

Sonli model eksperimental natijalar asosida tasdiqlangandan so‘ng, xuddi shu hisoblashlar yana ikkita metall - xrom va rux uchun magnit maydon mavjud va mavjud bo‘lmagan sharoitlarda amalga oshirildi.

Ushbu metallarga qiziqishimizning asosiy sababi ularning gaz sensorlari, quyosh elementlari, himoya qoplamalari, katalitik tizimlar va optoelektronika kabi turli sohalarda yupqa plyonkalar sifatida keng qo‘llanilishidir. Shunday qilib, magnit maydon mavjud va mavjud bo‘lmagan sharoitlarda lazerli ablatsiya jarayonini o‘rganishga bag‘ishlangan mazkur tadqiqot yupqa plyonkalarni cho‘ktirish jarayonlarida ablatsiya tezligini optimallashtirishga xizmat qiladi [20-21].

Natijalar va muhokama. Misning eksperimental lazerli ablatsiyasi 1(a)-rasmda magnit maydon mavjudligida lazerli ablatsiya jarayonining sxematik tasviri keltirilgan. Nd:YAG lazerining magnit maydon mavjud va mavjud bo‘lmagan sharoitlarda yuqori tozalikdagi (99,99%) misni qanday ablatsiyalashini o‘rganish uchun to‘lqin uzunligi 532 nm, takrorlanish chastotasi 10 Hz va impuls davomiyligi 10 ns bo‘lgan lazer nurlanishidan foydalanildi. Lazer nuri fokus masofasi 15 cm bo‘lgan linza yordamida mis sirtiga normal yo‘nalishda fokuslandi. Mis sirtidagi lazer dog‘ining o‘lchami 0,6 mm ni tashkil etdi. Mis nishoni linzaning fokus nuqtasidan 5 mm yuqorida joylashtirildi. Eksperimental lazer dog‘ining diametri yuqori aniqlikdagi optik mikroskop yordamida bitta impuls ta’sirida fotog‘ozda hosil qilingan sirt profili asosida o‘lchandi. Tajriba davomida mis sirtidagi lazer energiyasi zichligi 14 J/cm² qiymatda o‘zgarmas saqlandi.

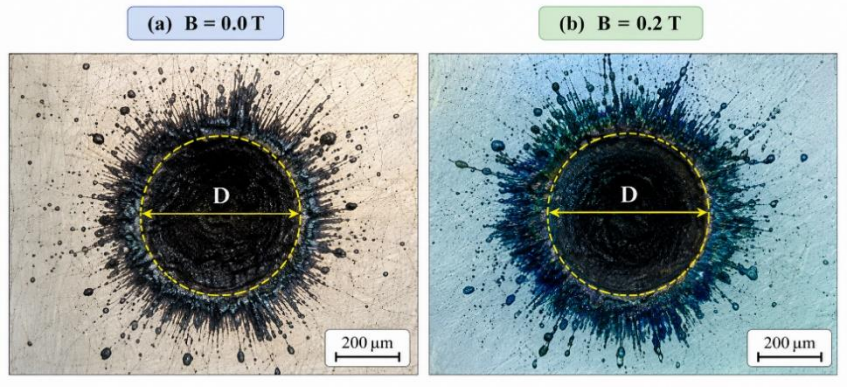
O‘lchami 20 × 20 mm² bo‘lgan mis namunasi ikkita elektromagnit qutbi orasidagi bo‘shliq markaziga joylashtirildi va ushbu bo‘shliqda 0,2 T induksiyali bir jinsli magnit maydon hosil qilindi. Avvalgi tadqiqotlarimizda boshqa manbada keltirilganidek, 14 J/cm² lazer energiyasi zichligi va 0,2 T magnit maydon induksiyasi optimal eksperimental parametrlar ekanligi aniqlangan. Shu sababli, mazkur ishda ushbu parametrlar o‘zgarmas saqlandi va magnit maydon mavjudligida impulslar soni (N) o‘zgarishining lazerli ablatsiya jarayoniga ta’siri o‘rganildi.



1-rasm. Magnit maydon mavjudligida lazerli ablatsiya jarayonining sxematik tasviri. Lazer nuri fokus masofasi 15 cm bo‘lgan qavariq linza yordamida mis nishon (ABCD) sirtiga fokuslangan

Mis namunasi turli sondagi lazer impulslari - N = 10, 30, 50, 70 va 90 bilan nurlantirildi. Magnit maydon mavjud va mavjud bo‘lmagan sharoitlarda ablatsiya natijasida hosil bo‘lgan kraterlarning chuqurligi va diametrlarini o‘lchash uchun yuqori aniqlikdagi sirt profilometri hamda optik mikroskopdan foydalanildi. 2(a) va 2(b)-rasmlarda, mos ravishda, B = 0 va B = 0,2 T sharoitlarda 70 ta lazer impulsi ta’sirida mis sirtida hosil bo‘lgan lazerli ablatsiya kraterlarining optik mikroskop tasvirlari keltirilgan.

Lazerli burg‘ilash teshigining tomonlar nisbatini (aspect ratio) miqdoriy baholash uchun lazer ablatsiyasi natijasida hosil bo‘lgan krater diametrini aniqlash zarur. Mazkur nisbat materialning ablatsiya chegaraviy energiya zichligiga bog‘liq. Biz ablatsiya chegaraviy energiya zichligini bir impuls uchun hamda inkubatsiya koeffitsiyentini bir vaqtning o‘zida aniqlash usulini taklif qildik. Adabiyotlarda keltirilgan avvalgi tadqiqotlarda D^2 usuli keng qo‘llanilgan. Mazkur ishda esa quyidagi



2-rasm. Mis sirtida lazerli ablatsiya natijasida hosil bo‘lgan kraterlarning diametrini ko‘rsatuvchi optik mikroskop tasvirlari: (a) B = 0,0 T va (b) B = 0,2 T. Kraterlar mis sirtiga 70 ta lazer impulsi ta’sir ettirish natijasida hosil qilingan

$$D^{*2} = \left(\frac{D}{\sqrt{2}\omega_0}\right)^2$$

usulidan foydalanildi. Lazer nurining fazoviy profili Gauss taqsimotiga ega deb qabul qilinganda, lazer ablatsiyasi natijasida hosil bo‘lgan krater diametrini quyidagi munosabat orqali aniqlash mumkin:[43]

$$D = \sqrt{2}\omega_0 \left[ln\left(\frac{F}{F_{th}(N)}\right)\right]^{1/2}$$

bu yerda D - krater diametri, ω_0 - fokuslangan lazer dog‘ining radiusi, F - lazer energiyasi zichligi , F_{th} esa ablatsiyaning chegaraviy energiya zichligidir.

Ablatsiyaning chegaraviy energiya zichligi ayni bir lazer dog‘iga tushayotgan impulslar soniga bog‘liq. Impulslar soni ortishi bilan ushbu chegaraviy qiymat kamayadi va bu hodisa inkubatsiya effekti deb ataladi. Bitta impuls uchun ablatsiyaning chegaraviy energiya zichligi ko‘p impulsli ablatsiya chegarasi bilan quyidagi munosabat orqali bog‘langan:

$$F_{th}(N) = F_{th}(1)N^{\xi-1}$$

bu yerda ξ - inkubatsiya koeffitsiyenti. Ushbu koeffitsiyent ablatsiyaga uchrayotgan nishonda inkubatsiya jarayonining xususiyatini belgilaydi. Agar $\xi = 0$ bo‘lsa, inkubatsiya jarayoni to‘liq kechadi; agar $\xi = 1$ bo‘lsa, inkubatsiya kuzatilmaydi. Inkubatsiya koeffitsiyenti $0 < \xi < 1$ oralig‘ida bo‘lganda materialda yumshash, $\xi > 1$ bo‘lganda esa qattiqlashish jarayoni yuz beradi. Metallarda odatda $0 < \xi < 1$ bo‘ladi.

(1) va (2) tenglamalardan:

$$D^{*2} = ln\left(\frac{F}{F_{th}(1)}\right) - (\xi - 1)lnN.$$

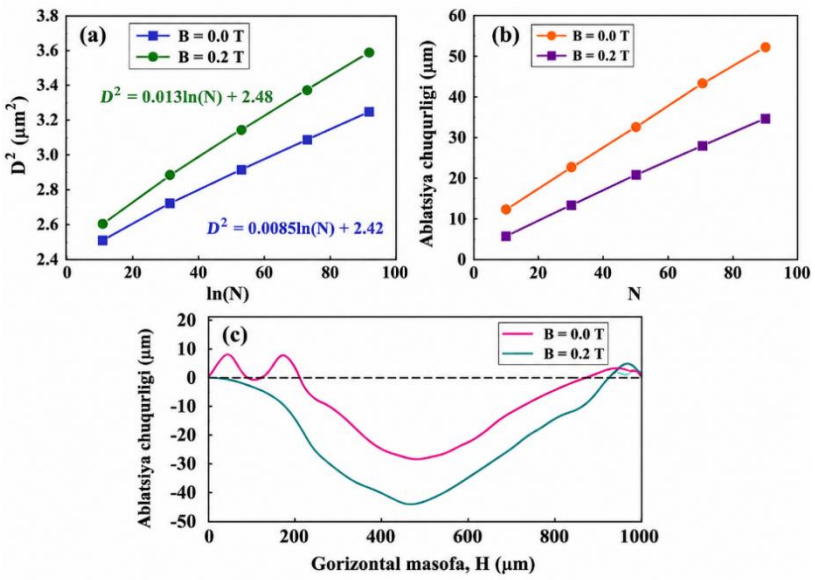
3(a)-rasmda D^{*2} kattaligining ln(N) ga bog‘liq ravishda o‘zgarishi magnit maydon mavjud bo‘lmagan (B=0,0 T) va B=0,2 T magnit maydon sharoitlarida keltirilgan. Hisoblashlarda N = 10, 30, 50, 70 va 90 impulslar soniga mos qiymatlar hisobga olindi. Magnit maydon mavjud bo‘lmagan holatda D^{*2} qiymati 2,50 dan 3,25 gacha, B=0,2 T magnit maydon ta’sirida esa 2,59 dan 3,60 gacha ortdi. Olingan natijalar D^{*2} kattaligining impulslar soni ortishi bilan deyarli chiziqli ravishda oshishini ko‘rsatdi.

3(b)-rasmga ko‘ra, impulslar soni N=10 dan N=90 gacha oshirilganda ablatsiya chuqurligi B=0,0 T sharoitida 5,5 μm dan 35,0 μm gacha, B=0,2 T magnit maydon ta’sirida esa 12,5 μm dan 52,0 μm gacha ortgan. Xususan, 70 ta impulsda ablatsiya chuqurligi magnit maydonsiz holatda 27,5 μm, B=0,2 T da esa 42,5 μm ni tashkil etgan. Bu magnit maydon qo‘llanilganda 70 impulsdagi ablatsiya chuqurligi taxminan 54,5% ga ortganini ko‘rsatadi.

Magnit maydon mavjud bo‘lmagan holatda olingan eksperimental ablatsiya chegaraviy energiya zichligi adabiyotlarda keltirilgan natijalar bilan yaxshi mos keladi.[45] Magnit maydon yoqilganda bitta impuls uchun misning ablatsiya chegaraviy energiya zichligi biroz kamayishi aniqlandi. Grafiklarning qiyalik koeffitsiyentlari inkubatsiya effektini tavsiflaydi. Magnit maydon mavjudligidagi inkubatsiya koeffitsiyenti (ξ=0,98) magnit maydonsiz holatdagiga (ξ=0,99) nisbatan biroz yuqoriroq ta’sirni ko‘rsatadi. Buning sababi shundaki, birinchi impuls ta’sirida hosil bo‘lgan g‘adir-budur sirt nurlanishning yutilishini kuchaytiradi. Harorat ortishi bilan yutilish ham ortadi. Magnit maydon mavjudligida sirtning yuqori harorati uzoqroq vaqt davomida saqlanadi. Natijada magnit maydon mavjudligida nurlanishning yutilishi yuqoriroq bo‘ladi va bu, o‘z navbatida, ablatsiya chegaraviy energiya zichligining kamayishiga olib keladi.

Biroq ushbu tadqiqotda inkubatsiya effekti avvalgi tadqiqot bilan taqqoslaganda nisbatan kichik. Tadqiqot mualliflari buni impuls davomiyligiga nisbatan issiqlik diffuziyasi vaqtining qisqaroq bo‘lishi bilan

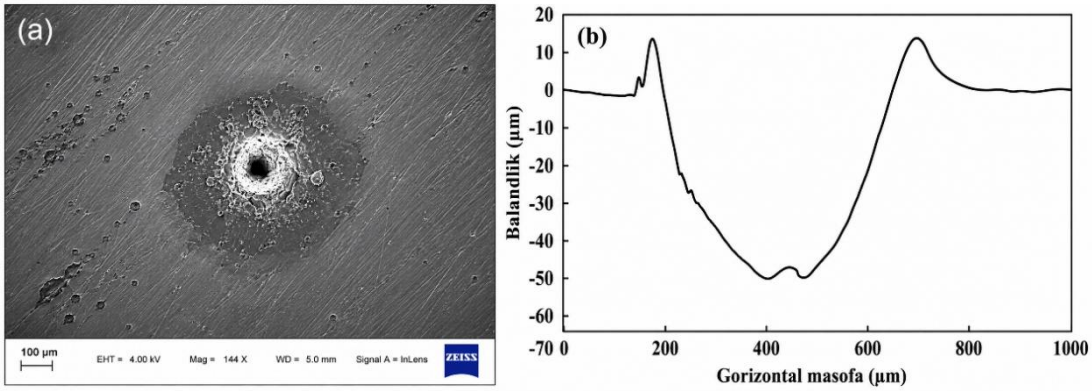
izohlaydilar. Buning yana bir sababi lazer impulslarining takrorlanish chastotasi past ekanligidir. (2)-tenglama N=10,30,50,70 va 90 uchun ablatsiya chegaraviy energiya zichligini aniqlash imkonini beradi. Masalan, N=90 bo‘lganda magnit maydon mavjud bo‘lmagan va mavjud bo‘lgan holatlar uchun ablatsiya chegaraviy energiya zichliklari mos ravishda 1,25 va 1,07 J/cm² ni tashkil qiladi. Magnit maydon mavjudligida ablatsiya chegaraviy energiya zichligi kamayadi va bu ablatsiya chuqurligining ortishiga sabab bo‘luvchi omillardan biri bo‘lishi mumkin.



3-rasm. (a) Magnit maydon mavjud va mavjud bo‘lmagan sharoitlarda (D^2) kattaligining ln(N) ga bog‘liq o‘zgarishi. (b) Magnit maydon mavjud va mavjud bo‘lmagan sharoitlarda ablatsiya chuqurligining impulslar soni ((N)) ga bog‘liq o‘zgarishi. (c) Magnit maydon mavjud va mavjud bo‘lmagan sharoitlarda 70 ta lazer impulsi ta’sirida hosil bo‘lgan sirt chuqurligi profilining tahlil qilingan ko‘rinishi

Ablatsiya chegaraviy energiya zichligi ($F_{th}(N)$) aniqlangandan so‘ng, krater diametri ham (1)-tenglama yordamida hisoblandi va eksperimental o‘lchangan diametrlar bilan taqqoslandi. Masalan, N=50 uchun magnit maydon mavjud bo‘lmaganda ablatsiya chegaraviy energiya zichligi 1,25 J/cm²

($F_{th}(50)=F_{th}(1)500,99-1$), $F_{th(}1)=1,3$ J/cm², $\xi=0,99$, lazer dog‘ining radiusi $\omega_0=300$μm va lazer energiyasi zichligi F=14 J/cm² ni tashkil qiladi. Lazer dog‘ining diametri sirt profilometri va optik mikroskop yordamida eksperimental ravishda o‘lchandi va $2\omega_0=600$μm ekanligi aniqlandi. Shunga ko‘ra, (1)-tenglama yordamida hisoblangan D qiymati 675 μm, eksperimental qiymati esa 690 μm ni tashkil etdi. Magnit maydon mavjud bo‘lmagan holatda hisoblangan krater diametri eksperimental o‘lchangan qiymatga juda yaqin bo‘lib, ular orasidagi farq taxminan 9% ni tashkil qiladi.



4-rasm. Magnit maydon mavjudligida 90 ta lazer impulsi ta’sirida hosil bo‘lgan lazerli ablatsiya kraterining (a) FESEM tasviri va **(b) unga mos chuqurlik profile**

Xuddi shu tarzda magnit maydon mavjudligidagi krater diametri ham hisoblandi va uning qiymati 675 μm, eksperimental qiymati esa 690 μm ekanligi aniqlandi. 4(a) va 4(b)-rasmlarda, mos ravishda, lazer ablatsiyasi natijasida hosil bo‘lgan kraterning FESEM tasviri hamda 0,2 T magnit maydon mavjudligidagi

unga mos chuqurlik profili keltirilgan. N=90 bo‘lganda kraterning ham diametri, ham chuqurligi kamaygan (4-rasm). N qiymati 70 dan 90 gacha oshirilganda chuqurlik ham 48 μm dan 45 μm gacha biroz kamaygan. N ortishi bilan erigan qatlamning qalinligi ham ortadi. Plazmadan keladigan issiqlik oqimining ta’siri magnit maydon mavjudligida erigan qatlam qalinligini yanada oshiradi. Otilib chiqayotgan massa natijasida yuzaga keladigan qaytish bosimi (recoil pressure) erigan qatlamni krater markazidan periferik sohaga siljitadi va natijada material krater devoriga cho‘kadi. Chuqurlikning ortishi massaning kraterdan to‘liq chiqarib tashlanishiga to‘sqinlik qiladi va keyinchalik uning krater devoriga cho‘kishiga olib keladi. Natijada N=90 bo‘lganda krater diametri va chuqurligining kamayishi kuzatildi. Biroq N<90 bo‘lganda ablatsiya chuqurligi impulslar soniga bog‘liq ravishda chiziqli ravishda ortgan [3(b)-rasm].

Xulosa. Mazkur tadqiqotda magnit maydon ta’sirida plazma-sirt issiqlik almashinuvining lazerli ablatsiya jarayoniga ta’siri eksperimental va sonli usullar asosida o‘rganildi. Olingan natijalar 0,2 T magnit maydon qo‘llanilganda lazer yordamida hosil qilingan plazmaning nishon bilan o‘zaro ta’siri kuchayishi va buning natijasida ablatsiya samaradorligi sezilarli darajada ortishini ko‘rsatdi. Xususan, lazer impulslari soni 10 tadan 90 tagacha oshirilganda mis sirtidagi ablatsiya chuqurligi magnit maydonsiz sharoitda 5,5 μm dan 35,0 μm gacha, 0,2 T magnit maydon ta’sirida esa 12,5 μm dan 52,0 μm gacha ortishi aniqlandi. 70 ta lazer impulsi ta’sirida magnit maydon qo‘llanilishi ablatsiya chuqurligini magnit maydonsiz holatga nisbatan taxminan 54,5% ga oshirdi.

Magnit maydon mavjudligida misning ablatsiya chegaraviy energiya zichligining kamayishi kuzatildi. Bu holat plazmaning fazoviy cheklanishi, plazmadan nishon sirtiga uzatiladigan issiqlik oqimining ortishi hamda yuqori sirt haroratining uzoqroq vaqt saqlanishi bilan izohlanadi. Shu bilan birga, inkubatsiya effektining nisbatan kichik ekanligi aniqlanib, magnit maydon mavjud va mavjud bo‘lmagan sharoitlarda inkubatsiya koeffitsiyentlari mos ravishda ξ=0,98 va ξ=0,99 qiymatlarni tashkil etdi. Tajriba natijalari asosida plazmadan nishon sirtiga issiqlik uzatilishini hisobga oluvchi sonli modelning qo‘llanilishi magnit maydon ko‘magidagi lazerli ablatsiya mexanizmini tavsiflash imkonini berdi. Hisoblangan natijalarning eksperimental ma’lumotlar bilan yaxshi mos kelishi taklif etilgan yondashuvning samaradorligini tasdiqlaydi. Shuningdek, yuqori impulslar sonida erigan qatlam qalinligining ortishi, qaytish bosimi ta’sirida materialning krater periferiyasiga ko‘chishi va qayta cho‘kishi ablatsiya chuqurligi hamda krater geometrik parametrlarining o‘zgarishida muhim rol o‘ynashi aniqlandi.

Umuman olganda, magnit maydon yordamida plazma-sirt energiya almashinuvini boshqarish metallarning lazerli ablatsiya samaradorligini oshirishning istiqbolli usuli ekanligi ko‘rsatildi. Olingan natijalar lazerli mikroishlov berish, yupqa plyonkalarni hosil qilish va materiallarga yuqori aniqlikda lazer yordamida ishlov berish jarayonlarining texnologik parametrlarini optimallashtirish uchun ilmiy asos bo‘lib xizmat qilishi mumkin.

ADABIYOTLAR:

1. Akhmedov, M., Sadullayev, J., Vapayev, M., Matnazarov, A., Davletov, I., & Rayimbaev, J. (2025). Picosecond-pulsed laser ablation of aluminum foils: crater morphology and plasma parameters. Engineering Research Express, 7(3), 035362.

2. K. S. Singh and A. K. Sharma, “Effect of magnetic field-dependent effective thermal conductivity of melted layer on nanosecond laser ablation of copper and formation of nanoparticles at atmospheric air pressure,” J. Appl. Phys., 130(4), 043302 (2021).

3. Y.-F. Tzeng, “Process characterization of pulsed Nd:YAG laser seam welding,” Int. J. Adv. Manuf. Technol., 16, 10-18 (2000).

4. K. S. Singh and A. K. Sharma, “Spatially resolved behavior of laser-produced copper plasma along expansion direction in the presence of static uniform magnetic field,” Phys. Plasmas, 30(12), 122104 (2016).

5. A. K. Aitoumeziane, A. Sari, B. Liani, and J.-D. Parisse, “Theoretical and numerical study of the interaction of a nanosecond laser pulse with a copper target for laser-induced breakdown spectroscopy applications,” J. Opt. Soc. Am. B, 31, 53-61 (2014).

6. N. A. Vasantgadkar, U. V. Bhandarkar, and S. S. Joshi, “A finite element model to predict the ablation depth in pulsed laser ablation,” Thin Solid Films, 519, 1421-1430 (2010).

7. C. Ye, G. J. Cheng, S. Tao, and B. X. Wu, “Magnetic field effects on laser drilling,” J. Manuf. Sci. Eng., 135(1-5), 061020 (2013).

8. Y. J. Chang, C. L. Kuo, and N. Y. Wang, “Magnetic assisted laser micromachining for highly reflective metals,” J. Laser Micro Nanoeng., 7(3), 254-259 (2012).

9. C.-C. Ho, G.-R. Tseng, Y.-J. Chang, J.-C. Hsu, and C.-L. Kuo, "Magnetic-field-assisted laser percussion drilling," Int. J. Adv. Manuf. Technol., 73, 329-340 (2014).

10.A. Dawood, A. Dawood, A. Dawood, A. Dawood, M. A. Khan, S. Bashir, S. Bashir, A. Ayub, A. Hayat, A. Hayat, J. H. Sanderson, N. A. Chishti, and N. A. Chishti, "Examining the role of magnetic fields in plasma behavior and surface evolution of a Mg alloy with varied irradiances in a femtosecond laser treatment," Appl. Opt., 63(13), 3585-3599 (2024).

11.A. Phukan and A. Nath, "Influence of an external magnetic field on laser-induced plasma and cavitation bubbles in submerged targets," J. Laser Appl., 35(1), 12011 (2023).

12.K. Shen, Y. F. Lu, T. Gebre, H. Ling, and Y. X. Han, "Optical emission in magnetically confined laser-induced breakdown spectroscopy," J. Appl. Phys., 100(1-7), 053303 (2006).

13.Y. Li, C. H. Hu, H. Z. Zhang, Z. K. Jiang, and Z. S. Li, "Optical emission enhancement of laser-produced copper plasma under a steady magnetic field," Appl. Opt., 48, B105-B110 (2009).

14.V. N. Rai, A. K. Rai, F. Y. Yueh, and J. P. Singh, "Optical emission from laser-induced breakdown plasma of solid and liquid samples in the presence of a magnetic field," Appl. Opt., 42, 2085-2093 (2003).

15.O. Ustyugov and S. D. Ustyugov, "Simulation of radiation expansion of laser plasma in an external magnetic field," Math. Models Comput. Simul., 2, 362-374 (2010).

16.K. Pathak and A. Povitsky, "Plume dynamics and shielding characteristics of nanosecond scale multiple pulse in carbon ablation," J. Appl. Phys., 104(11), 113108 (2008).

17.K. A. Pathak and A. J. Chandy, "Laser ablated carbon plume flow dynamics under magnetic field," J. Appl. Phys., 105(8), 084909 (2009).

18.A. H. Shukor, H. A. Alhattab, and I. Takano, "Electrical and optical properties of copper oxide thin films prepared by DC magnetron sputtering," J. Vac. Sci. Technol. B, 38(1), 012803 (2020).

19.M. F. Al-Kuhaili and S. M. A. Durrani, "Optical properties of chromium oxide thin films deposited by electron-beam evaporation," Opt. Mater., 29(6), 709-713 (2007).

20.K. S. Singh and A. K. Sharma, "Effect of variation of magnetic field on laser ablation depth of copper and aluminum targets in air atmosphere," J. Appl. Phys., 119(18), 183301 (2016).

21.C. S. B. Nathala, A. Ajami, A. Husinsky, B. Farooq, S. Kudryashov, A. Daskalova, I. Bliznakova, and A. Assion, "Ultrashort laser pulse ablation of copper, silicon and gelatin: Effect of the pulse duration on the ablation thresholds and the incubation coefficients," Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process., 122(2), 107 (2016).

UO‘K 53:538.9

CoSi VA $CoSi_2$ YUPQA PLYONKALARINING OPTIK YUTILISH SPEKTRLARI

Sharipov Mirzo Zokirovich,
Buxoro davlat universiteti Fizika-matematika va axborot texnologiyalari fakulteti Fizika kafedrasi professori
m.z.sharipov@rambler.ru
Ibrohimova Sabohat Shoyimovna,
Buxoro davlat universiteti Fizika-matematika va axborot texnologiyalari fakulteti Fizika kafedrasi izlanuvchisi
ibrohimovasabohat6@gmail.com

Annotatsiya. *Ushbu maqolada shisha substratlar ustiga DC-magnetron changlatish usulida cho‘ktirilgan CoSi va $CoSi_2$ yupqa plyonkalarining xona haroratidagi optik yutilish spektrlari 190–1100 nm to‘lqin uzunligi diapazonida tadqiq qilingan. Har ikkala spektrda kobalt–kremniy bog‘lanishi va metall xarakteridagi elektron tuzilmaga xos keng yutilish polosalari kuzatilgan, biroq xarakterli maksimumlarning holati va intensivligida sezilarli farqlar aniqlangan. Eksperimental spektrlardan ajratib olingan M1-M4 spektral xususiyatlarning fotonlar energiyasi hisoblab chiqilgan va ularning kristall tuzilma bilan bog‘liqligi muhokama qilingan. Olingan natijalar CoSi va $CoSi_2$ fazalarining o‘xshash kimyoviy tarkibiga qaramay, ularning optik xossalari fazaga bog‘liq ravishda sezilarli darajada farqlanishini ko‘rsatadi.*

Kalit so‘zlar: *kobalt monosilitsidi, kobalt disilitsidi, yupqa plyonka, optik yutilish spektri, magnetron changlatish, elektron tuzilma, o‘tish metall silitsidlari.*

СПЕКТРЫ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ТОНКИХ ПЛЁНОК CoSi И $CoSi_2$

Аннотация. *В данной статье исследованы спектры оптического поглощения при комнатной температуре тонких плёнок CoSi и CoSi2, полученных методом DC-магнетронного распыления на стеклянных подложках, в диапазоне длин волн 190–1100 нм. В обоих спектрах наблюдаются широкие полосы поглощения, характерные для связи Co–Si и электронной структуры металлического типа, однако положение и интенсивность характерных максимумов существенно различаются. Рассчитаны энергии фотонов, соответствующие спектральным особенностям M1–M4, выделенным из экспериментальных спектров, и обсуждена их связь с кристаллической структурой. Полученные результаты показывают, что, несмотря на сходный химический состав фаз CoSi и CoSi2, их оптические свойства существенно различаются в зависимости от фазы.*

Ключевые слова: *моносилицид кобальта, дисилицид кобальта, тонкая плёнка, спектр оптического поглощения, магнетронное распыление, электронная структура, силициды переходных металлов.*

OPTICAL ABSORPTION SPECTRA OF CoSi AND CoSi2 THIN FILMS

Abstract. *This paper investigates the room-temperature optical absorption spectra of CoSi and CoSi2 thin films deposited by DC magnetron sputtering onto glass substrates, in the 190–1100 nm wavelength range. Both spectra exhibit broad absorption bands characteristic of the Co–Si bond and the metallic-type electronic structure, while the positions and intensities of the characteristic maxima differ significantly. The photon energies corresponding to the M1–M4 spectral features extracted from the experimental spectra were calculated, and their relationship to the crystal structure is discussed. The obtained results show that, despite the similar chemical composition of the CoSi and CoSi2 phases, their optical properties differ substantially depending on the phase.*

Keywords: *cobalt monosilicide, cobalt disilicide, thin film, optical absorption spectrum, magnetron sputtering, electronic structure, transition metal silicides.*

Kirish. O‘tish metallari silitsidlari, xususan kobalt silitsidlari (CoSi va $CoSi_2$), yarimo‘tkazgichlar texnologiyasi va zamonaviy elektron qurilmalarni yaratishda muhim o‘rin egallaydi [1–3]. Kremniyga yaqin panjara parametri, yuqori termik barqarorlik va past elektr qarshiligi tufayli $CoSi_2$ uzoq vaqtdan beri ultra

katta integral sxemalarda (ULSI) kontakt va metallashtirish materiali sifatida qo‘llanilib kelinmoqda [2, 4]. $CoSi_2$ flyuorit (CaF_2) tipidagi kub panjaraga ega bo‘lib, uning kremniy bilan panjara mos kelmasligi taxminan 1,2% ni tashkil etadi, bu esa uning kremniy asosidagi qurilmalarda epitaksial o‘sishini osonlashtiradi; ikkala silitsid fazasining kristallografik va termodinamik parametrlari adabiyotlarda batafsil tizimlashtirilgan [6–9].

So‘nggi yillarda kobalt monosilitsidi (CoSi) fizikaviy xossalari yangi qirralari bilan qayta kashf etilmoqda. CoSi B_20 tipidagi markazsiz simmetriyaga ega kub panjarada kristallanadi va katta topologik zaryadga ega kiral fermionlarni, jumladan, Brillyuen zonasining Γ va R nuqtalarida joylashgan tugunlarni bog‘lovchi Fermi yoylarini o‘zida namoyon etuvchi topologik xiral yarimmetall sifatida burchak-bog‘langan fotoemissiya spektroskopiyasi (ARPES) usulida tasdiqlangan [10–12]. Bunday noan’anaviy elektron tuzilma CoSi ning optik javobini $CoSi_2$ nikidan tubdan farqli qiladi: ko‘p karrali (multifold) fermionlar hisobiga yuzaga keladigan o‘ziga xos optik signaturalar nazariy va eksperimental tadqiqotlarda alohida aniqlangan [16, 17].

CoSi va $CoSi_2$ ning optik xossalari ilgari ham bir qator ishlarda o‘rganilgan. Xususan, Kudryavtsev va boshqalar kobalt silitsidlarining optik xossalarini eksperiment va zichlik funksionali nazariyasi (DFT) uyg‘unligida tahlil qilgan [13], Vu va boshqalar epitaksial $CoSi_2$ plyonkalarining optik xossalarini 0,062-22,3 eV kabi keng energiya diapazonida o‘rgangan [14], van der Marel va boshqalar esa o‘tish metallari monosilitsidlaridagi spin, zaryad va bog‘lanish xususiyatlarini optik spektroskopiya asosida tahlil qilgan [15]. Shunga qaramay, CoSi va $CoSi_2$ fazalarining optik yutilish spektrlarini bir xil texnologik sharoitda tayyorlangan namunalarda to‘g‘ridan-to‘g‘ri taqqoslash borasidagi ma’lumotlar hozircha yetarli emas. Optik yutilish va Raman spektroskopiyasi usullarining shunga o‘xshash uslubiy yondashuvlari muallif tomonidan boshqa funksional kristall materiallar - Dy3Fe5O12 [18] va HoFe3(BO3)4 ferroborati [19] - misolida ham muvaffaqiyatli qo‘llanilgan.

Ushbu ishning maqsadi DC-magnetron changlatish usulida shisha substratlarga bir xil texnologik sharoitda cho‘ktirilgan CoSi va $CoSi_2$ yupqa plyonkalarining xona haroratidagi optik yutilish spektrlarini 190-1100 nm oralig‘ida eksperimental tadqiq qilish, ularning xarakterli spektral xususiyatlarini aniqlash va bu xususiyatlarni ikkala fazaning elektron tuzilmasidagi farqlar bilan bog‘liq holda tahlil qilishdan iborat.

Tadqiqot materiallari va metodikasi. Tadqiqot obyekti sifatida shisha substratlar ustiga DC-magnetron changlatish (fizik bug‘lanish cho‘ktirish, PVD) usulida cho‘ktirilgan CoSi va $CoSi_2$ yupqa plyonkalari olindi [5]. Plyonkalarning optik yutilish spektrlari xona haroratida 190-1100 nm to‘lqin uzunligi diapazonida spektrofotometrik usulda o‘lchandi. Olingan eksperimental spektrlardagi tasodifiy shovqinlarni kamaytirish va xarakterli maksimumlarni aniqroq ajratib olish maqsadida ikkinchi tartibli, 9 nuqtali oynaga ega Savitskiy-Golay siljituvchi filtridan foydalanilgan. Spektrlardagi lokal maksimumlarning to‘lqin uzunligi qiymatlari fotonning energiyasiga $E = hc/\lambda$ formulasi bo‘yicha qayta hisoblab chiqilgan.

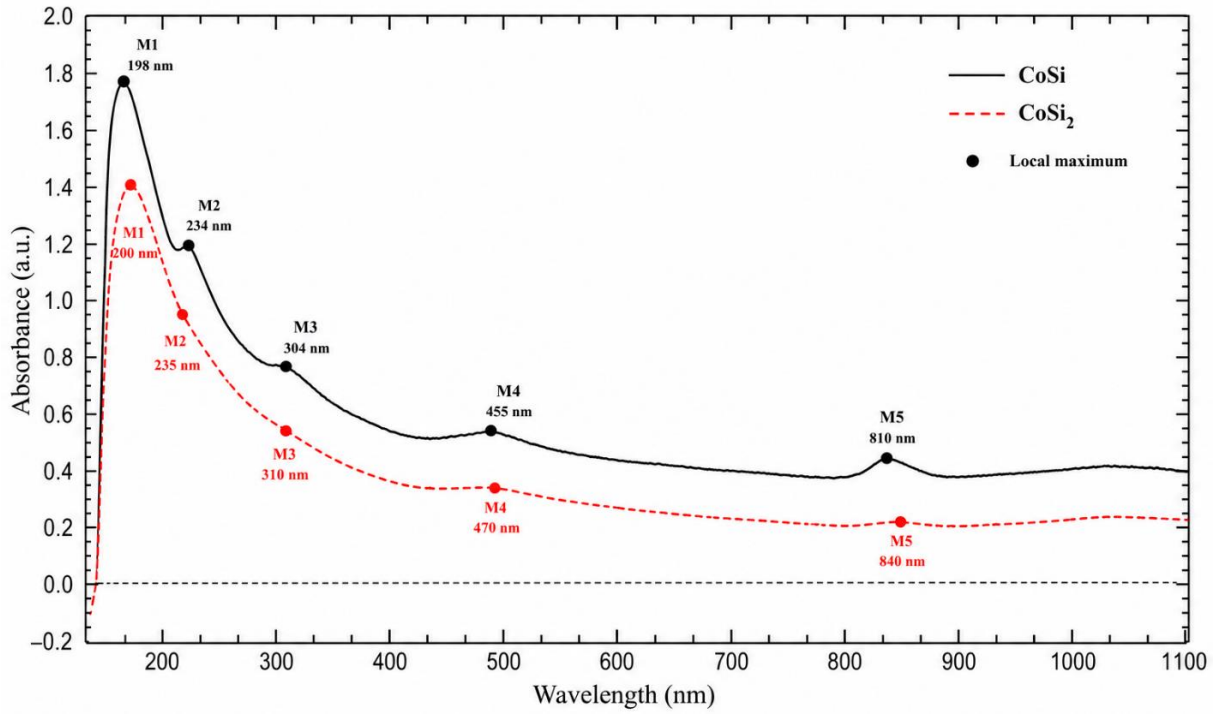
Natijalar va muhokama. Rasmda shisha substratlar ustiga DC-magnetron changlatish usulida cho‘ktirilgan CoSi va $CoSi_2$ yupqa plyonkalarining xona haroratidagi optik yutilish spektrlari keltirilgan. Ikkala spektr ham tadqiq qilingan 190-1100 nm oralig‘ining butun uzunligi bo‘yicha cho‘zilgan keng yutilish polosalarini namoyon etadi, bu esa tushayotgan elektromagnit nurlanishning kobalt silitsidi fazalarining elektron holatlari bilan kuchli o‘zaro ta’sirlashuvidan dalolat beradi. Spektrlarning umumiy profili sifat jihatidan o‘xshash bo‘lib, bu ikkala birikmada ham umumiy Co-Si bog‘lanishi va metall xarakteridagi elektron tuzilmaning mavjudligini aks ettiradi, biroq xarakterli yutilish xususiyatlarining joylashuvi va intensivligida sezilarli farqlar kuzatiladi. Bu farqlar optik javobning har bir kobalt silitsidi fazasining kristall tuzilmasiga kuchli bog‘liq ekanligini ko‘rsatadi.

Ikkala plyonka uchun eng kuchli optik yutilish ultrabinafsha sohasida kuzatiladi. Asosiy yutilish maksimumlari CoSi uchun ~280 nm, $CoSi_2$ uchun esa ~260 nm atrofida joylashgan bo‘lib, ularga mos eksperimental yutilish qiymatlari mos ravishda 2,238 va 2,216 ni tashkil etadi. Maksimal yutilish qiymatlari deyarli bir xil bo‘lsa-da, $CoSi_2$ ning ultrabinafsha maksimumi CoSi nikiga nisbatan qisqa to‘lqin uzunligi tomon taxminan 20 nm ga siljigan, bu esa foton energiyasining taxminan 0,34 eV ga oshishiga mos keladi. Bunday spektral siljish ikkala kobalt silitsidi fazasining elektron zonalar tuzilmasidagi farqlarni ko‘rsatadi va ularning turlicha kristallografik joylashuvi band va bo‘sh elektron holatlarning taqsimotiga ta’sir qilishini aks ettiradi.

Asosiy ultrabinafsha maksimumidan tashqari, ikkala spektr ham ko‘rinadigan soha tomon cho‘zilgan keng spektral xususiyatlarni namoyon etadi. CoSi da ~335 nm atrofida yelka shaklidagi xarakterli xususiyat kuzatilsa, $CoSi_2$ da unga mos xususiyat ~355 nm ga siljigan. Uzunroq to‘lqin uzunliklarida ikkala material o‘zini tubdan farqli tutadi: CoSi spektrida ~583 nm atrofida kuchsiz, biroq aniq ajraladigan spektral xususiyat saqlanib qoladi, $CoSi_2$ dagi unga mos uzun to‘lqinli xususiyat esa ~450 nm atrofida kuzatiladi. Bu

farqlar to‘lqin uzunligi ortishi bilan optik spektral og‘irlikning qayta taqsimlanishi ikkala silitsid fazasining kristall tuzilmasi va kimyoviy bog‘lanishiga sezilarli darajada bog‘liq ekanligini ko‘rsatadi.

CoSi yupqa plyonkasi tadqiq qilingan spektral diapazonning katta qismida $CoSi_2$ ga nisbatan yuqoriroq yutilishni namoyon etadi. Eng kuchli yutilish ultrabinafsha sohasida kuzatiladi, bunda ikkala material ham to‘lqin uzunligi qisqarishi bilan yutilishning tez ortishini ko‘rsatadi. Bunday xatti-harakat o‘tish metallari silitsidlarida keng tarqalgan bo‘lib, yuqori foton energiyalarida zonalararo optik o‘tishlar ehtimolining ortishi bilan bog‘liq. Ko‘rinadigan va yaqin infraqizil sohalarda esa yutilish intensivligining o‘zgarishi ancha silliq kechadi, bu esa mazkur spektral intervallarda optik javob alohida optik o‘tishlar emas, balki elektron holatlarning kengroq taqsimoti bilan boshqarilishidan dalolat beradi.



1-rasm. CoSi va $CoSi_2$ yupqa plyonkalarining har bir material uchun aniqlangan xarakterli spektral xususiyatlari (M1-M4) ko‘rsatilgan optik yutilish spektrlari

Eksperimental spektrlardan aniqlangan asosiy spektral xususiyatlarning miqdoriy taqqoslamasi 1-jadvalda keltirilgan. Har bir material uchun eksperimental ekstremumlar holati va spektral profildagi o‘zgarishlar asosida to‘rttadan xarakterli xususiyat ajratib olindi. CoSi plyonkasi uchun bu xususiyatlar taxminan 230, 280, 335 va 583 nm da joylashgan bo‘lib, ularga mos foton energiyalari mos ravishda 5,39, 4,43, 3,70 va 2,13 eV ni tashkil etadi. $CoSi_2$ spektrida esa taxminan 220, 260, 355 va 450 nm da mos keluvchi xarakterli xususiyatlar kuzatilib, ularga mos foton energiyalari 5,64, 4,77, 3,49 va 2,76 eV ga teng.

1-jadval. CoSi va $CoSi_2$ yupqa plyonkalarining xona haroratidagi optik yutilish spektrlaridan aniqlangan xarakterli spektral xususiyatlari

Xususiyat	CoSi: λ (nm)	CoSi: hν (eV)	CoSi: A	$CoSi_2$: λ (nm)	$CoSi_2$: hν (eV)	$CoSi_2$: A
M1	230	5,39	1,958	220	5,64	1,021
M2	280	4,43	2,238	260	4,77	2,216
M3	335	3,70	1,405	355	3,49	0,734
M4	583	2,13	1,906	450	2,76	1,220

Umuman olganda, eksperimental yutilish spektrlari CoSi va CoSi2 ning kimyoviy tarkibi o‘xshash bo‘lishiga qaramay, ultrabinafsha va ko‘rinadigan spektral sohalarda ularning optik javobi tubdan farq qilishini ko‘rsatadi. Xarakterli spektral xususiyatlarning tizimli siljishlari va yutilish qiymatlaridagi farqlar elektron tuzilmaning fazaga bog‘liq o‘zgarishi haqida aniq eksperimental dalil beradi. Bir-biriga yaqin joylashgan spektral xususiyatlarni yanada aniq ajratish va keng yutilish polosalari bilan bog‘liq noaniqlikni kamaytirish maqsadida eksperimental spektrlarni birinchi hosila spektroskopiyasi usulida qo‘shimcha tahlil qilish maqsadga muvofiqdir.

Xulosa. O‘tkazilgan tadqiqot natijasida DC-magnetron changlatish usulida shisha substratlarga cho‘ktirilgan CoSi va $CoSi_2$ yupqa plyonkalarining xona haroratidagi optik yutilish spektrlari 190-1100 nm diapazonida o‘rganildi va quyidagi asosiy xulosalarga kelindi:

- Ikkala plyonka ham tadqiq qilingan butun spektral diapazon bo‘yicha keng yutilish polosalarini namoyon etadi, bu Co-Si bog‘lanishiga xos umumiy metall xarakteridagi elektron tuzilmani tasdiqlaydi;
- Eng kuchli yutilish ultrabinafsha sohasida kuzatilib, $CoSi_2$ ning asosiy maksimumi CoSi nikiga nisbatan ~20 nm (~0,34 eV) qisqa to‘lqin uzunligi tomon siljigan;
- Har bir material uchun to‘rttadan (M1–M4) xarakterli spektral xususiyat aniqlandi, ularning holati va intensivligi ikki faza o‘rtasida sezilarli farq qiladi, xususan, uzun to‘lqinli xususiyat CoSi da ~583 nm da, $CoSi_2$ da esa ~450 nm da kuzatiladi;
- CoSi umumiy holda $CoSi_2$ ga nisbatan yuqoriroq yutilish darajasiga ega, bu ularning turli amaliy vazifalar masalan, optoelektron detektorlar va nurni himoya qiluvchi qoplamalar uchun tanlashda muhim ahamiyat kasb etadi.

Olingan natijalar shuni ko‘rsatadiki, CoSi va $CoSi_2$ ning o‘xshash kimyoviy tarkibiga qaramay, ularning kristall tuzilmasidagi farq elektron zonalar taqsimotiga va, natijada, optik xossalarga sezilarli ta’sir ko‘rsatadi. Kelgusi tadqiqotlarda spektrlarni birinchi hosila usulida tahlil qilish hamda Tauk (Tauc) usuli asosida optik taqiqlangan zona kengligini aniqlash orqali ikkala fazaning elektron tuzilmasi haqidagi tasavvurlarni yanada chuqurlashtirish mumkin.

ADABIYOTLAR:

1. Murarka S.P. Silicides for VLSI Applications. New York: Academic Press, 1983.

2. Rosser P.J., Tomkins G.J. Silicides for VLSI interconnects // Vacuum. 1985. Vol. 35. P. 419–434. https://doi.org/10.1016/0042-207X(85)90361-6

3. Murarka S.P., Gutmann R.J., Kaloyeros A.E., Lanford W.A. Silicides for Integrated Circuits and Microelectronics. Park Ridge, NJ: Noyes Publications, 1989.

4. Lavoie C., d’Heurle F.M., Detavernier C., Cabral C. Jr. Towards implementation of a nickel silicide process for CMOS technologies // Microelectronic Engineering. 2003. Vol. 70. P. 144–157. https://doi.org/10.1016/S0167-9317(03)00380-0

5. Mattox D.M. Handbook of Physical Vapor Deposition (PVD) Processing. 2nd ed. Norwich, NY: William Andrew, 2010. https://doi.org/10.1016/C2009-0-18800-1

6. Massalski T.B. (Ed.). Binary Alloy Phase Diagrams. 2nd ed. Materials Park, OH: ASM International, 1990.

7. Villars P. Pearson’s Handbook: Desk Edition Crystallographic Data for Intermetallic Phases. Materials Park, OH: ASM International, 1997.

8. Jain A., Ong S.P., Hautier G., Chen W., Richards W.D., Dacek S., Cholia S., Gunter D., Skinner D., Ceder G., Persson K.A. Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation // APL Materials. 2013. Vol. 1. Art. 011002. https://doi.org/10.1063/1.4812323

9. Toher C., Hicks D., Mehl M.J., Esters M., Oses C., Levy O., Hart G.L.W., Curtarolo S. The AFLOW Library of Crystallographic Prototypes: Part 3 // Computational Materials Science. 2021. Vol. 199. Art. 110450. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110450

10. Chang G., Wieder B.J., Schindler F., Sanchez D.S., Belopolski I., Huang S.-M., Singh B., Wu D., Neupert T., Chang T.-R., Xu S.-Y., Lin H., Hasan M.Z. Topological quantum properties of chiral crystals // Nature Materials. 2018. Vol. 17. P. 978–985. https://doi.org/10.1038/s41563-018-0169-3

11. Takane D., Wang Z., Souma S., Nakayama K., Nakamura T., Oinuma H., Nakata Y., Iwasawa H., Cacho C., Kim T., Horiba K., Kumigashira H., Takahashi T., Ando Y., Sato T. Observation of chiral fermions with a large topological charge and associated Fermi-arc surface states in CoSi // Physical Review Letters. 2019. Vol. 122. Art. 076402. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.076402

12. Rao Z., Li H., Zhang T., Tian S., Li C., Fu B., Tang C., Wang L., Li Z., Fan W., Li J., Huang Y., Liu Z., Long Y., Fang C., Weng H., Shi Y., Lei H., Sun Y., Qian T., Ding H. Observation of unconventional chiral fermions with long Fermi arcs in CoSi // Nature. 2019. Vol. 567. P. 496–499. https://doi.org/10.1038/s41586-019-1031-8

13. Kudryavtsev Y.V., Oksenenko V.A., Lee Y.P., Rhee J.Y., Kim Y.D. Optical properties of Co silicides: Experiment and density functional theory // Journal of Applied Physics. 2007. Vol. 102. Art. 103503. https://doi.org/10.1063/1.2812552

14. Wu Z.-C., Arakawa E.T., Olmstead M.A., Zanzucchi P.J., Garner C.M. Optical properties of epitaxial CoSi2 on Si from 0.062 to 22.3 eV // Physical Review B. 1993. Vol. 47. P. 4356–4362. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.4356

15. van der Marel D., Damascelli A., Schulte K., Menovsky A.A. Spin, charge, and bonding in transition metal mono-silicides // Physica B. 1998. Vol. 244. P. 138–147. https://doi.org/10.1016/S0921-4526(97)00476-6

16. Xu B., Fang Z., Sánchez-Martínez M.-Á., Venderbos J.W.F., Ni Z., Qiu T., Manna K., Wang K., Paglione J., Bernhard C., Felser C., Mele E.J., Grushin A.G., Rappe A.M., Wu L. Optical signatures of multifold fermions in the chiral topological semimetal CoSi // Proceedings of the National Academy of Sciences. 2020. Vol. 117. P. 27104–27110. https://doi.org/10.1073/pnas.2010752117

17. Sánchez-Martínez M.-Á., de Juan F., Grushin A.G. Linear optical conductivity of chiral multifold fermions // Physical Review B. 2019. Vol. 99. Art. 155145. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.155145

18. Sharipov M., Hayitov D., Fayziev S., Ahadov A., Dzhuraev D. Optical absorption, Raman spectroscopy, and surface morphology of Dy3Fe5O12 single crystals // Physics Open. 2026. Vol. 27. Art. 100420. https://doi.org/10.1016/j.physo.2026.100420

19. Sharipov M.Z., Nizomova Sh.K., Fayziyev Sh.Sh., Dzhuraev D.R. Optical absorption and Raman spectroscopy of HoFe3(BO3)4 ferroborate: Experimental study with thermodynamic analysis // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics. 2026. Vol. 17. — P. 304–310. https://doi.org/10.17586/2220-8054-2026-17-3-304-310

UO‘K 577.29, 577.352, 53.09, 536.7

UGLERODLI NANOSTRUKTURALARNING TABIIY (NORMAL) VA SARATON (OKSIDLANGAN) HUJAYRA MEMBRANALARI MODELLARI BILAN O‘ZARO TA’SIR MEXANIZMLARINI TADQIQ QILISH

Matnazarova Shaxrizoda Quvondiq qizi,
O‘zbekiston Respublikasi Fanlar Akademiyasi,
Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti tayanch doktoranti
shakhrizoda.matnazarova@outlook.com
Isakjanova Ma’rifat Baltayevna,
O‘zbekiston Respublikasi Fanlar Akademiyasi,
Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti muhandisi
maarifat.isakjanova@gmail.com
Xalilov Umedjon Boymamatovich,
O‘zbekiston Respublikasi Fanlar Akademiyasi,
Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti
laboratoriya mudiri, f.-m.f.d.
umedjon.khalilov@outlook.com
Yusupov Maksudbek Sultanmuratovich,
“TIQXMMI” Milliy tadqiqot university huzuridagi
Fundamental va amaliy tadqiqotlar
instituti laboratoriya mudiri, f.-m.f.d.
maksudbek.yusupov@outlook.com

Annotatsiya. *Uglerodli nanostrukturalar (UNS-lar) biotibbiyotda, xususan, diagnostika, dori yetkazib berish va terapiyada istiqbolli materiallar hisoblanadi. Ammo ularning hujayra membranalari bilan atomar darajadagi o‘zaro ta’sir mexanizmlari to‘liq o‘rganilmagan. Ushbu tadqiqotda molekular dinamika (MD) usuli yordamida (5,5) xirallikli uglerod nanonaychasi (UNN), C_{60} fullereni va C_{60}@UNN(10,10) pipodining suv qatlamidan membrana lipid qatlamiga kirib borishi, joylashuvi, barqarorlashuvi hamda ularning tabiiy (normal) va saraton (oksidlangan) fosfolipid qo‘shqavatlari bilan o‘zaro ta’siri o‘rganildi. Natijalar ushbu UNS-larning har ikkala lipid tizimda gidrofob qo‘shqatlamda barqaror holatda turishini ko‘rsatdi. Bundan tashqari, o‘rtacha o‘zaro ta’sir energiyasi normal membrana holatida oksidlangan membranaga qaraganda C_{60} va pipod holatlarida kuchliroq, UNN holatida esa deyarli o‘zgarmasligi aniqlandi.*

Kalit so‘zlar: *uglerod nanostrukturalari, uglerod nanonaychasi, fulleren, uglerod pipodi, tabiiy va saraton hujayra fosfolipid qo‘shqavatlari, molekulyar dinamika, o‘zaro ta’sir energiyasi.*

INVESTIGATION OF THE INTERACTION MECHANISMS OF CARBON NANOSTRUCTURES WITH MODELS OF NORMAL AND CANCER (OXIDIZED) CELL MEMBRANES

Abstract. *Carbon nanostructures (CNS) are promising materials for biomedical applications, particularly in diagnostics, drug delivery, and therapy. However, their interaction mechanisms with cell membranes at the atomic level remain poorly understood. In this study, molecular dynamics (MD) simulations were employed to investigate the penetration, localization, and stabilization of a (5,5) chiral carbon nanotube (CNT), C_{60} fullerene, and C_{60}@CNT(10,10) peapod from the aqueous phase into the membrane lipid layer, as well as their interactions with normal and cancer (oxidized) phospholipid bilayers. The results showed that all CNS remained stably embedded within the hydrophobic bilayer region in both lipid systems. Furthermore, the average interaction energies were stronger for C_{60} and the peapod in the normal membrane than in the oxidized membrane, whereas the interaction energy of the CNT remained nearly unchanged.*

Keywords: *carbon nanostructures, carbon nanotube, fullerene, carbon peapod, normal and cancer cell phospholipid bilayers, molecular dynamics, interaction energy.*

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР С МОДЕЛЯМИ НОРМАЛЬНЫХ И РАКОВЫХ (ОКИСЛЕННЫХ) КЛЕТОЧНЫХ МЕМБРАН

Аннотация. *Углеродные наноструктуры (УНС) являются перспективными материалами для применения в биомедицине, особенно в диагностике, доставке лекарственных препаратов и терапии.*

Однако механизмы их взаимодействия с клеточными мембранами на атомарном уровне остаются недостаточно изученными. В данном исследовании методом молекулярной динамики (МД) изучены проникновение, локализация и стабилизация хиральной углеродной нанотрубки (5,5), фуллерена C_{60} и пипода C_{60}@УНТ(10,10) из водной фазы в липидный слой мембраны, а также их взаимодействие с нормальными и опухолевыми (окисленными) фосфолипидными бислоями. Результаты показали, что все УНС стабильно располагаются в гидрофобной области бислоя в обеих липидных системах. Кроме того, средние энергии взаимодействия C_{60} и пипода с нормальной мембраной были выше по сравнению с окисленной мембраной, тогда как для УНТ существенных изменений не наблюдалось.

Ключевые слова: *углеродные наноструктуры, углеродная нанотрубка, фуллерен, углеродный пипод, нормальный и опухолевый фосфолипидные бислои клеточных мембран, молекулярная динамика, энергия взаимодействия.*

Kirish. Bugungi kunda uglerodli nanostrukturalar (UNS-lar) o‘ziga xos fizik, kimyoviy va biologik xususiyatlari tufayli istiqbolli materiallar sifatida qaralmoqda [1]. Jumladan, uglerod nanonaychalari (UNN-lar), fullerenlar va pipod nanostrukturalari elektronika, energetika hamda biotibbiyot kabi ko‘plab sohalarda keng tadqiq etilmoqda [2,3]. Biotibbiyotda UNN-lar yuqori mexanik mustahkamligi va elektr o‘tkazuvchanligi [4], fullerenlar kichik molekulyar o‘lchami hamda sferik tuzilishi [5], pipod nanostrukturalari esa UNN va fulleren strukturalari xususiyatlarini uyg‘unlashtiruvchi gibrid tizim sifatida afzalliklari bilan alohida ilmiy qiziqish uyg‘otmoqda [6].

UNN-lar xiralligi bilan bog‘liq o‘ziga xos elektr va optik xususiyatlarni namoyon etadi [7,8]. Bu esa ularning dori vositalarini maqsadli yetkazib berish, DNK tashish, diagnostika hamda saraton terapiyasida terapevtik samaradorlikni oshirish va sog‘lom to‘qimalarga zarar yetkazilishini kamaytirish imkoniyatlari bilan muhim ahamiyat kasb etmoqda [9-11]. Fullerenlar va ularning hosilalari dori vositalarini maqsadli yetkazib berish, nanosensorlar hamda antioksidantlar sifatida keng o‘rganilgan [12-14]. Ayniqsa, metallofullerenlar magnit-rezonans tomografiya (MRT) va rentgen kontrast agentlari, radioaktiv nishonlash, radioterapiya hamda kimyoterapiyada qo‘llanilishi, shuningdek, o‘simta o‘sishini sekinlashtirish (yoki to‘xtatish) va normal hujayralarni himoya qilish imkoniyatlari bilan ajralib turadi [15,16]. Pipod nanostrukturalari esa UNN-larning mexanik va elektr xususiyatlarini fullerenlarning elektron xossalari bilan uyg‘unlashtirgan gibrid tizim bo‘lib, transport jarayonlari, molekulalararo o‘zaro ta’sirlarni boshqarish hamda suvni tuzlardan tozalash kabi yo‘nalishlarda istiqbolli nanomaterial sifatida qaralmoqda [17].

Biologik tizimlarda nanomateriallarning samaradorligi, avvalo, ularning hujayra membranasi bilan o‘zaro ta’sir mexanizmiga bog‘liq [18]. Hujayra membranasi nanostrukturalarning hujayra ichiga kirishi, membranada adsorbsiyalanishi yoki lipid qo‘shqavatida barqarorlashishini belgilovchi asosiy biologik to‘siq struktura hisoblanadi [19]. Shu bois nanostruktura–membrana o‘zaro ta’sirini atomar darajada o‘rganish ularning biologik faolligi, biomoslashuvchanligi, toksikologik xususiyatlari hamda diagnostik imkoniyatlarini baholashda zarur bosqich hisoblanadi [18,20]. Mazkur nanostrukturalarning hujayra membranasi orqali o‘tish qobiliyati, hujayra ichida barqaror lokalizatsiyalanishi va turli biomolekulalar bilan selektiv o‘zaro ta’sirlashishi yangi avlod nanobiosensorlari va nanoterapevtik tizimlarni yaratishda muhim ahamiyat kasb etadi [21,22]. Ayniqsa, saraton hujayralarida kuzatiladigan kislorod turlarining ortishi natijasida membrana fosfolipidlarining peroksidlanishi sodir bo‘ladi [23,24]. Ushbu jarayon davomida aldegidli oksidlangan fosfoxolin (*inglizcha,* 1-palmitoyl-2-(9'-oxo-nonanoyl)-*sn*-glycero-3-phosphocholine – PoxnoPC) kabi oksidlangan fosfolipidlar hosil bo‘lib, ular membrananing lipid tarkibi, qalinligi, suyuqligi va boshqa fizik-kimyoviy xususiyatlarini sezilarli darajada o‘zgartiradi [25]. Natijada nanostrukturalarning membranaga kirishi, lipid qo‘shqavatida barqarorlashishi va membrana bilan o‘zaro ta’sir mexanizmlari ham o‘zgaradi. Shu sababli PoxnoPC saqlovchi lipid membranalari oksidlovchi stressga uchragan, saraton hujayralariga xos membrana muhitini modellashtirishda keng qo‘llaniladi. Bunday yondashuv saraton hujayralaridagi oksidlangan membrana mikromuhitini biomimetik tarzda ifodalab, nanomateriallarning diagnostik jihatdan muhim membrana bilan o‘zaro ta’sirini qiyosiy baholash imkonini beradi.

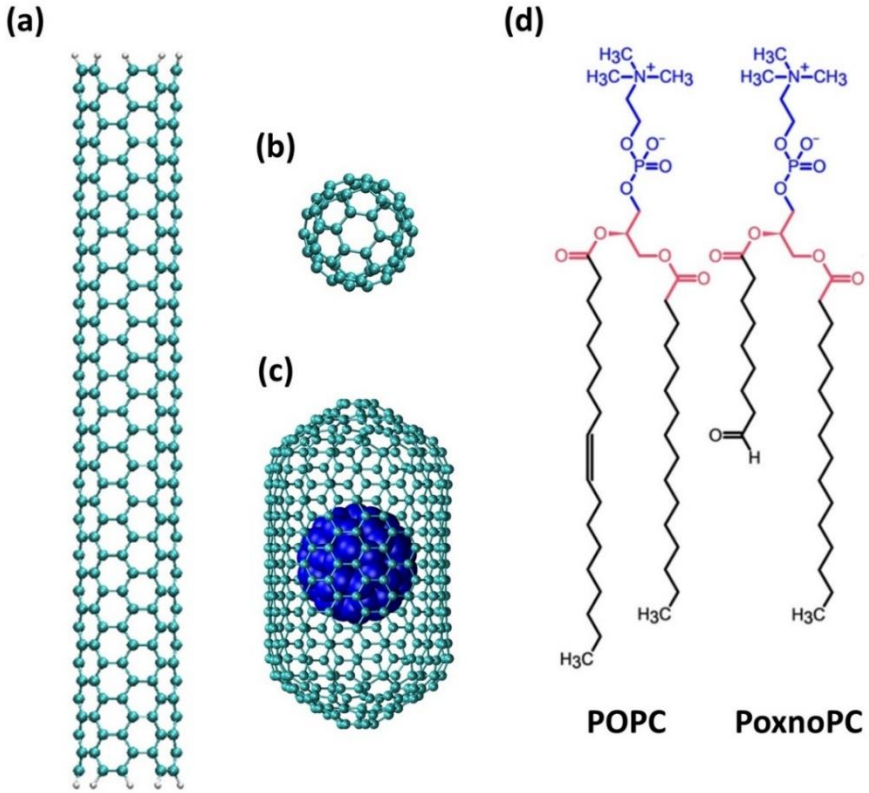
C_{60} fullerenining biologik membranalar bilan o‘zaro ta’siri bo‘yicha tadqiqotlar uning lipid qo‘shqavatiga kirib borishi, membrana ichida lokalizatsiyalanishi va lipid tartibiga ta’sir qilishini ko‘rsatgan [26]. Xususan, C_{60} fulleren molekulalari membrananing gidrofob qismida (ya’ni lipid qatlamda) erkin energiyasi minimal bo‘lgan energetik jihatdan qulay holatni egallashi aniqlangan [27,28]. UNN-lar ham biomembranalar bilan kuchli o‘zaro ta’sir qiluvchi nanostrukturalar qatoriga kirib, ularning xiralligi, diametri va uzunligi membrana bilan o‘zaro ta’sir yo‘nalishini, membranaga kirib borish shaklini hamda lokalizatsiya xususiyatlarini belgilovchi asosiy omillar hisoblanadi [29].

Shunga qaramay, mavjud tadqiqotlarning aksariyatida C_{60}, UNN yoki ularning hosilalari alohida shaklda o‘rganilgan bo‘lib, bir xil sharoitda turli UNS-larning normal va oksidlangan membranalarga

nisbatan tabiatini tizimli taqqoslash deyarli amalga oshirilmagan. Shu bilan birga, pipodlar (ya'ni fulleren bilan to'ldirilgan UNN-lar) fulleren va UNN xususiyatlarini uyg'unlashtiruvchi gibrid tizim bo'lib, ularning biologik membranalar bilan o'zaro ta'siri va lokalizatsiyasi bo'yicha tadqiqotlarni adabiyotlarda uchratish qiyin. Ayniqsa, (5,5) xirallikli UNN, C_{60} fullereni va C_{60}@UNN(10,10) pipodining 1-palmitoil-2-oleoyl-*sn*-glitsero-3-fosfoxolin (*inglizcha,* 1-palmitoyl-2-oleoyl-*sn*-glycero-3-phosphocholine – POPC) hamda POPC va PoxnoPC lipidlaridan tashkl topgan membranalariga kirib borishi, lipid qatlamda lokalizatsiyalanishi va o'zaro ta'sir energetikasi bo'yicha qiyosiy ma'lumotlar yetarli emas. Molekulyar dinamika (MD) simulyatsiya usullari eksperimental usullar bilan o'rganish qiyin bo'lgan ushbu jarayonlarni atomar darajada tadqiq etish imkonini berib, nanostrukturalarning membranaga kirishi, membrana ichida diffuziyasi va barqarorlashishini miqdoriy jihatdan tahlil qilish imkonini beradi.

Shu sababli mazkur tadqiqot ishida GROMACS dasturlash paketi yordamida (5,5) xirallikli UNN, C_{60} fullereni va uglerod pipodining normal tabiiy hujayra membranasini ifodalovchi sof POPC hamda oksidlangan saraton hujayra membranasi modeli sifatida tanlangan POPC/PoxnoPC lipid qo'shqavatlari bilan o'zaro ta'siri MD usuli yordamida atomar darajada tadqiq qilindi. Simulyatsiyalar davomida nanostrukturalarning membranaga kirishi, lipid qatlamida barqarorlashishi va membrana ichida egallagan holati tahlil qilindi. Shuningdek, lipid qatlamida joylashgandan so'ng nanostrukturalar bilan membrana orasidagi o'zaro ta'sir energiyalari hisoblanib, ularning normal va oksidlangan membranalarga moyilligi qiyosiy baholandi. Olingan natijalar UNS larning tabiiy (normal) hujayra membranasiga hamda saraton hujayra membranasi modeli sifatida ishlatilgan oksidlangan membranaga kirish mexanizmi va lokalizatsiya xususiyatlarini chuqurroq tushunishga yordam beradi. Undan tashqari, olib borilgan modellashtirish tadqiqotlari saraton diagnostikasi uchun nishonli nanoplatformalar ishlab chiqish bo'yicha nazariy asos bo'lib xizmat qilishi mumkin.

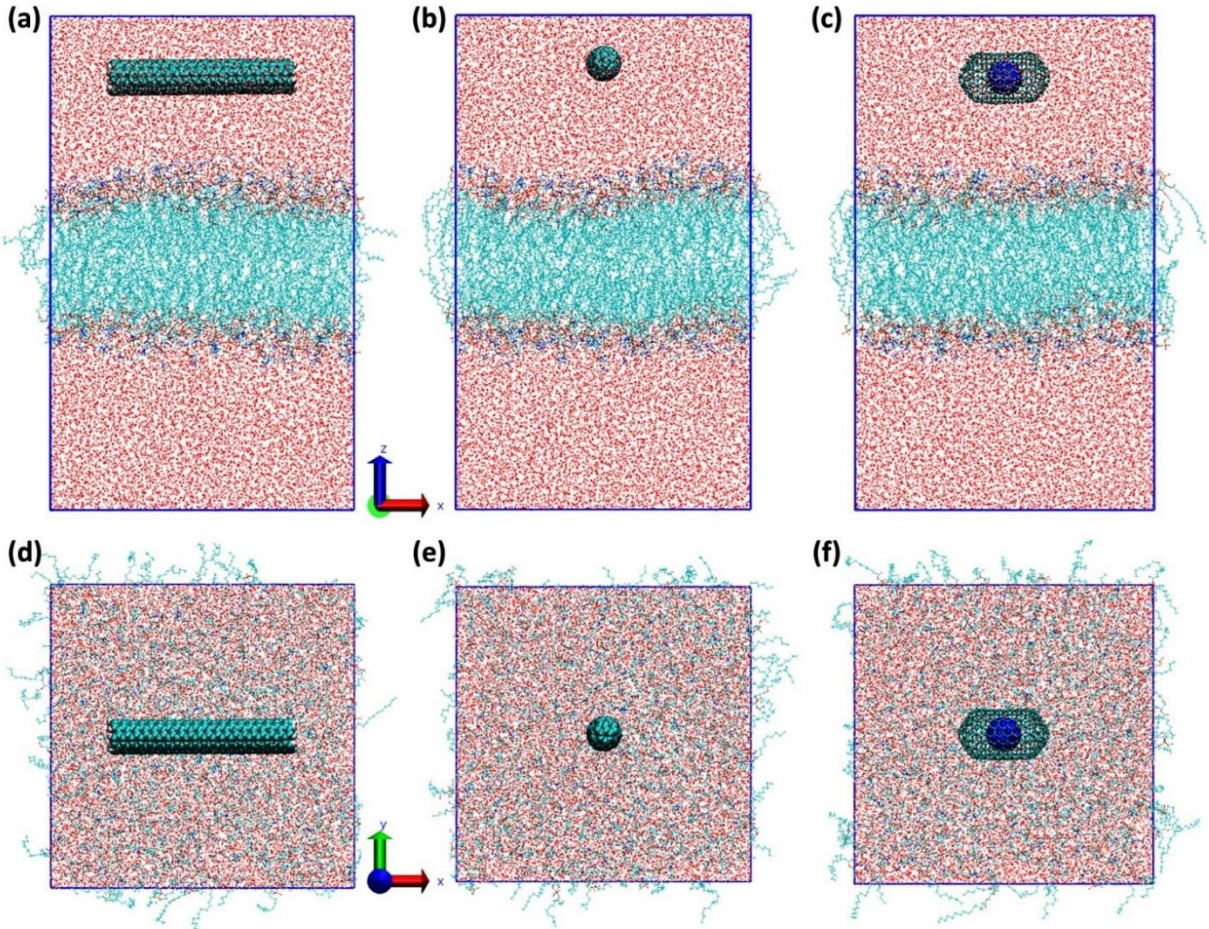
Modellashtirish tafsilotlari. UNN, C_{60} fullereni va uglerod pipodining tabiiy (normal) va saraton (oksidlangan) hujayra membranalari bilan o'zaro ta'sirini atomar darajada tadqiq qilish uchun GROMACS-2025.2 [30] dasturlash paketidan foydalanib MD simulyatsiyalari amalga oshirildi. Buning uchun, CHARMM-GUI [31] veb dasturi yordamida yuqorida keltirilgan strukturalar, ya'ni UNN, C_{60} fullereni va uglerod pipodi hamda tabiiy (normal) va saraton (oksidlangan) hujayra membranalari uchun model tizimlar hosil qilindi (1-rasm).



1-rasm. (a) UNN, (b) C_{60} fullereni va (c) uglerod pipodi nanostrukturalari hamda (d) POPC (chap) va PoxnoPC (o'ng) lipid molekulalarining sxematik ko'rinishi

Xususan, UNN modeli sifatida uzunligi ~5.0 nm va diametri ~0.7 nm bo'lgan (5,5) xirallikli UNN strukturasi tanlanib, nanonaychaning ochiq uchlaridagi uglerod atomlari vodorod atomlari bilan to'yintirildi

(1a-rasm). Pipod model strukturasini hosil qilish uchun diametri ~0.7 nm bo‘lgan C_{60} fullereni (1b-rasm) xiralligi (10,10) va diametri ~1.4 nm bo‘lgan ikkala tomoni yopiq UNN ichiga joylashtirildi (1c-rasm), ya’ni C_{60}@UNN(10,10) strukturasi hosil qilindi. Keyin, ushbu nanostrukturalarning har biri ~ $8 \times 8 \times 13$ nm^3 o‘lchamli simulyatsiya fazosiga joylashtirilgan tabiiy (normal) va saraton (oksidlangan) hujayra membranalari model tizimlarining tepa suv qatlamiga joylashtirildi (2-rasm).



2-rasm. **Tabiiy (normal) va saraton (oksidlangan) hujayra membranalari model tizimlarini hosil qilish uchun tanlangan POPC/PoxnoPC lipid molekulalaridan tashkil topgan fosfolipid qo‘shqavatlari hamda ularning tepasidagi suv qatlamida joylashgan UNN (chap), C_{60} fullereni (o‘rta) va uglerod pipodi (o‘ng) nanostrukturalari. (a–c) da ushbu model tizimlarning yon tomondan, (d–f) da esa tepadan ko‘rinishi keltirlgan. Nanostrukturalar, suv va fosfolopid qo‘shqavatlar mos ravishda, zangori, qizil va ko‘k ranglarda berilgan. Aniqlik uchun, suv qatlamlarida joylashgan natriy va xlor atomlari rasmda ko‘rsatilmagan.**

Tabiiy (normal) hujayra fosfolipid qo‘shqavatini hosil qilish uchun 200 ta (ya’ni 100 ta tepa va 100 ta quyi qavatda joylashgan) POPC lipid molekulalaridan foydalanildi. So‘ngra, ushbu lipid molekulalarining har ikkala tarafi suv molekulalari bilan qoplandi (jami 19350 ta suv molekulasi) va model tizim zaryadini neytrallash uchun tepa va quyi suv qatlamlariga natriy va xlor molekulalari 0.15 mol (fiziologik) miqdorda qo‘shildi (2-rasm). Bunda, har bitta lipidga ~97 ta TIP3P [32] suv molekulasi to‘g‘ri keldi. Saraton (oksidlangan) hujayra fosfolipid qo‘shqavatini hosil qilishda ham 200 ta lipid molekulalari ishlatildi; bunda tepa va quyi qavatlarning har birida mos ravishda, 75 ta POPC (normal fosfoxolin) va 25 ta PoxnoPC (aldegidli oksidlangan fosfoxolin) lipid molekulalaridan foydalanildi, ya’ni jami 150 ta POPC va 50 ta PoxnoPC lipid molekulalari ishlatildi (1-jadval).

Demak, saraton hujayra membranasi modelini hosil qilish uchun 25% oksidlangan fosfolipid qo‘shqavatdan foydalanildi. Shuni ta’kidlash joizki, ushbu model tizimda oksidlangan (PoxnoPC) lipid molekulalari lipid qo‘shqavatning har bir qatlamiga tasodifiy joylashtirish asosida POPC molekulalari atrofiga kiritildi. Yuqorida keltirilganidek, ushbu oksidlangan model tizimni suvlash uchun ham natriy va xlor molekulalari 0.15 mol (fiziologik) miqdorda qo‘shilgan jami 19350 ta TIP3P suv molekulalaridan foydalanildi (2-rasm). Shunday qilib, jami oltita model tizim, ya’ni uchta normal va uchta 25% oksidlangan

fosfolipid qo‘shqavat hosil qilindi; ularning har birida yo UNN, yo C_{60} fullereni, yoki pipod joylashgan (2-rasm). MD usuli bo‘yicha olingan natijalarni statistik jihatdan yaxshilash maqsadida ushbu oltita model tizimning har biri uchun 3 tadan replikalar hosil qilindi, ya’ni jami 18 ta model tizim. Barcha model tizimlar PACKMOL [33] dasturiy paketidan foydalanib hosil qilindi.

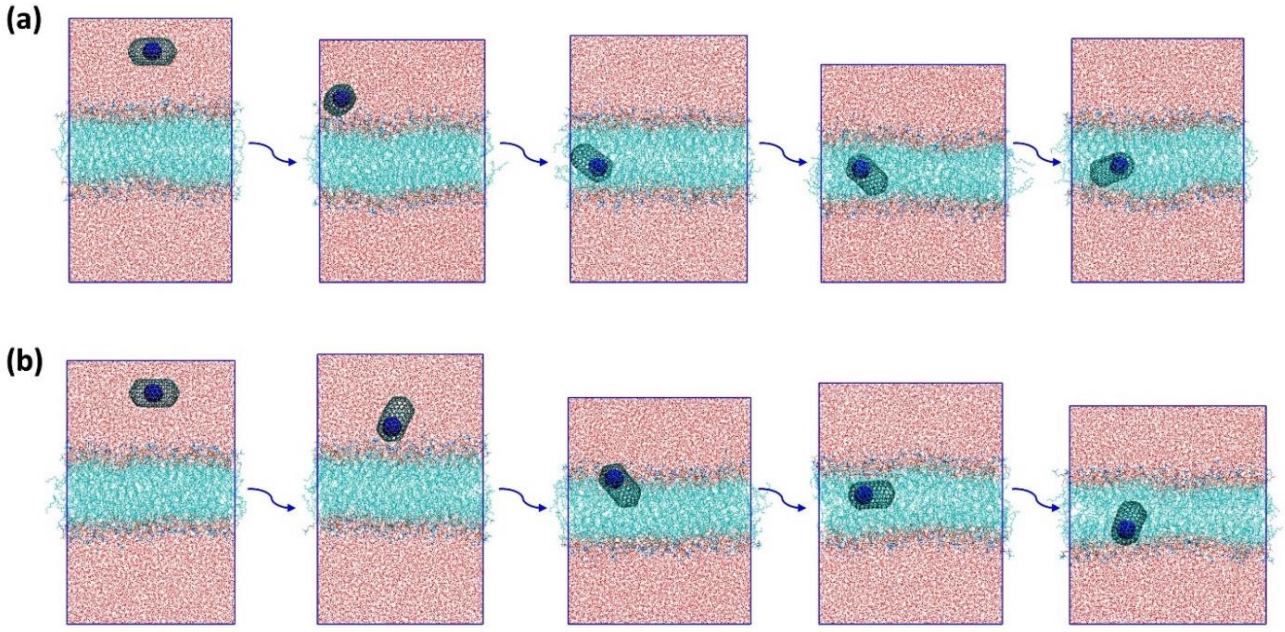
1-jadval. MD simulyatsiyalarida qo‘llanilgan tabiiy (normal) va saraton (oksidlangan) hujayra membranalari model tizimlarining lipid tarkibi

Fosfolipid qo‘shqavat	*ichki (2-rasmda quyi) lipid qatlam*		*tashqi (2-rasmda yuqori) lipid qatlam*	
	POPC	PoxnoPC	POPC	PoxnoPC
normal	100	0	100	0
oksidlangan	75	25	75	25

Hosil qilindan model tizimlar energiyasi dastlab keskin tushish (*inglizcha*, steepest descent) usuli yordamida minimallashtirildi. So‘ngra, model tizimlar izobarik-izotermik (NPT) ansambli yordamida 310 K harorat va 1 bar bosimga 400 ns vaqt davomida termalizatsiya qilindi, ya’ni muvozanat holatga keltirildi. Model tizimlar termodinamik parametrlari (*masalan,* temperatura va bosimi) ning vaqt bo‘yicha o‘zgarishini tekshirish orqali, ushbu tanlangan 400 ns termalizatsiya vaqti yaxshi muvozanatga keltirilgan tizimlarni hosil qilish uchun yetarli ekanligi aniqlandi.

Termalizatsiya davrida model tizimlarning haroratini nazorat qilish uchun V-rescale (modifikatsiyalangan Berendsen) termostatidan [34], ulanish davriyligini 0,1 ps qilib olish orqali foydalanildi. Tizimlar bosimini nazorat qilishda esa 2 ps ulanish davriyligi va $4{,}5 \times 10^{-5}$ bar^{-1} izotermik siqilish konstantasiga ega semiizotrop Parrinello-Rahman barostati [35] dan foydalanildi. Barcha MD simulyatsiyalarida vaqt qadami etib 2 fs tanlandi hamda atomlararo o‘zaro ta’sirlarni ifodalash uchun kuch maydoni sifatida CHARMM36 [36] ishlatildi. UNS-lar (ya’ni UNN, C_{60} va pipod) va hujayra membranasi model tizimlari orasidagi o‘zaro ta’sir energiyasini hisoblash uchun oxirgi 100 ns simulyatsiya vaqtidagi MD natijalaridan foydalanildi. Bunday qilish hisoblangan o‘rtacha qiymatlar bilan bog‘liq xatoliklarni aniqlash imkonini berib, natijalarning ishonchliligini ta’minlaydi.

Natijalar va ularning tahlili. UNN, C_{60} fullereni va uglerod pipodining tabiiy (normal) va saraton (oksidlangan) hujayra membrana model tizimlaridagi harakat trayektoriyasi hujayra tashqi muhiti, ya’ni suv qatlamidagi diffuziyasi bilan boshlandi. 3-rasmda namuna sifatida berilgan uglerod pipodining normal (3a-rasm) va oksidlangan (3b-rasm) hujayra membrana model tizimlaridagi dinamik harakat trayektoriyasi keltirilgan.



3-rasm. Uglerod pipodining normal (a) va oksidlangan (b) hujayra membrana qo‘shqavatlari ichiga kirib borishining MD simulyatsiyalardan olingan tasvirlari. Simulyatsiya davrida pipod kabi suv qatlamidan lipid qatlamga kirib borish holatlari UNN va C_{60} fullereni nanostrukturalarida ham kuzatildi.

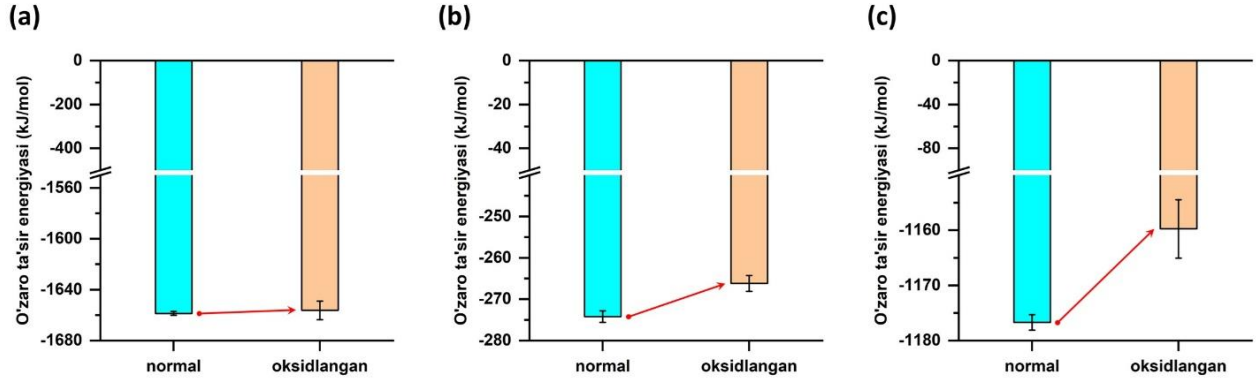
Simulyatsiya natijalariga ko‘ra, uglerod pipodi vaqt o‘tishi bilan fosfolipid qo‘shqavatiga yaqinlashib, o‘z-o‘zidan (ya’ni erkin holatda) membrananing gidrofobik qatlamiga kirib boradi. Normal va oksidlangan hujayra membranasi model tizimlarining har ikkala holatida ham uglerod pipodi fosfolipid qo‘shqavatining gidrofobik yadrosiga to‘liq kiradi va qulay gidrofobik o‘zaro ta’sirlar natijasida ushbu sohada barqaror joylashadi. Shuni ta’kidlash joizki, xuddi shunga o‘xshash xatti-harakat UNN va C_{60} fullereni nanostrukturalari uchun ham kuzatildi. Bu natijalar mazkur UNS-larning membranaga kirib borish jarayoni asosan gidrofobik o‘zaro ta’sirlar bilan boshqarilishini hamda membrananing gidrofobik yadrosi ularning energetik jihatdan eng qulay joylashish sohasi ekanligini ko‘rsatadi.

UNS-larning normal va saraton hujayra membranalari bilan o‘zaro ta’sir energiyasini hisoblash ushbu membranalarni farqlashning potensial diagnostik mezonlaridan biri sifatida baholandi. Mazkur energiya quyidagi formula orqali hisoblandi:

$$\Delta E = E_{UNS+membrana} - (E_{UNS} + E_{membrana}) \qquad (1)$$

bu yerda, $E_{UNS+membrana}$ – UNS va membrana tizimining, E_{UNS} va $E_{membrana}$ lar esa UNS va (normal yoki oksidlangan) membrananing alohida holatdagi potensial energiyalari (kJ/mol). Shunday qilib, UNS va membrana orasidagi o‘zaro ta’sir energiyasi UNS–membrana tizimining umumiy potensial energiyasidan UNS hamda membrananing alohida hisoblangan potensial energiyalari yig‘indisini ayirish orqali aniqlandi. Yuqorida ta’kidlanganidek, model tizimlarning barqarorlashgan vaqt momentlari, ya’ni umumiy simulyatsiya vaqtining oxirgi 100 ns davomida UNS-ning hujayra membrana model tizimlari bilan o‘zaro ta’sir energiyalari (1) formula yordamida aniqlandi va ushbu qiymatlar o‘rtachalanib, ularning standard xatoliklari hisoblandi. 4-rasmda normal (havo rang) va oksidlangan (zarg‘aldoq rang) hujayra membranalarining UNS-lar, ya’ni UNN (4a-rasm), C_{60} fullereni (4b-rasm) va pipod (4c-rasm), bilan o‘zaro ta’sir o‘rtacha energiyalarining grafigi keltirilgan. Natijalar shuni ko‘rsatadiki, tabiiy (normal) hujayra membranasi saraton (oksidlangan) hujayra membranasiga qaraganda UNN bilan deyarli bir xil, C_{60} fullereni bilan kuchliroq va pipod holatida esa eng kuchli o‘zaro ta’sirlashadi (4-rasm). Bu tendentsiya UNS turiga qarab normal va saraton membranalarni farqlash qobiliyati bir xil emasligini, balki nanostruktura geometriyasi va yuzasi bilan bog‘liq holda o‘zgarishini ko‘rsatadi. Xususan, C_{60} va pipod uchun kuzatilgan ancha yaqqol energetik farq ularni membrana holatiga sezgir «molekulyar sensor» sifatida ishlatish imkoniyatini oshirsa, UNN holatidagi farqning deyarli yo‘qligi uni ushbu ikki membrana turini farqlash uchun kamroq informativ mezon qilib qo‘yadi.

2-jadvaldan ko‘rish mumkinki, UNN holatida uning normal va oksidlangan membranalar bilan o‘zaro ta’sir energiyalari standard xatolik hisobga olinganda deyarli bir xil. C_{60} fullereni holatida esa ushbu nanostrukturaning normal va oksidlangan membranalar bilan o‘zaro ta’sir energiyalari bir-biridan 8 kJ/mol ga farq qiladi, ya’ni normal membrana bilan kuchliroq ta’sirlashadi. Qizig‘i shundaki, uglerod pipodi holatida ushbu energiyalar orasidagi farq eng katta bo‘lib ~17 kJ/mol ni tashkil etadi, ya’ni uglerod pipodi normal membrana bilan eng kuchli ta’sirlashadi.



4-rasm. (a) UNN, (b) C_{60} fullereni (b) va (c) uglerod pipodining normal va oksidlangan hujayra membranalari model tizimlari bilan o‘zaro ta’sir o‘rtacha energiyalari. Qizil ko‘rsatkich enegiyalardagi farqlarni ko‘rsatish uchun ishlatilgan. Ularning qiymatlari 2-jadvalda berilgan

Boshqacha qilib aytganda, standart xatoliklar hisobga olinganda, UNN holatidagi farq (2,4 ± 7,5 kJ/mol) statistik jihatdan ahamiyatsiz bo‘lib, bu uning normal va oksidlangan membranalarga deyarli bir xil moyillikka ega ekanligini tasdiqlaydi. C_{60} (8,0 ± 2,4 kJ/mol) va ayniqsa pipod (16,9 ± 5,5 kJ/mol) holatlarida esa farq xatolik chegarasidan tashqarida bo‘lib, statistik jihatdan ishonchli hisoblanadi.

2-jadval. UNN, C_{60} fullereni va uglerod pipodining normal va oksidlangan hujayra membranalari model tizimlari bilan o‘zaro ta’sir energiyalari

Fosfolipid qo‘shqavat	*O‘zaro ta’sir energiyasi, ΔE (kJ/mol)*		
	UNN	C_{60}	Pipod
normal	-1658,7 ± 1,5	-274,2 ± 1,4	-1176,7 ± 1,4
oksidlangan	-1656,3 ± 7,3	-266,2 ± 1,9	-1159,8 ± 5,3
$\Delta E_{oksidlangan} - \Delta E_{normal}$	2,4 ± 7,5	8,0 ± 2,4	16,9 ± 5,5

Ushbu UNS-lar o‘zaro ta’sir energiyalaridagi tafovutni quyidagicha tushuntirish mumkin. Avvalo, oksidlangan membrana holatida PoxnoPC lipid molekulalaridagi qisqa lipid dumlar aldegid guruhlarga ega bo‘lib (1d-rasm), o‘zining nisbatan gidrofil xususiyatini namoyon etadi. Natijada ushbu qisqa dumlar fosfolipid molekulalarining kuchli gidrofil bosh guruhlari (ya’ni zaryadlangan fosfat va xolin guruhlari) tomon kuchli tortishuvchi o‘zaro ta’sir tufayli buriladi. Bu esa o‘z navbatida lipid qo‘shqavat yuzasini oshiradi. Haqiqatan, hisoblangan bitta lipidga to‘g‘ri keluvchi o‘rtacha yuza normal membranada 0.63 nm^2 ga teng bo‘lsa, 25% oksidlangan membranada 0.66 nm^2 ni tashkil etadi. Bu esa o‘z navbatida UNS-larining membrana lipid qatlamiga kirib borishini yengillashtiradi. Shuni ta’kidlash joizki, UNS-larning oksidlangan membrana lipid qavatiga osonroq kirib borishi ularning o‘sha qatlamda energetik jihatdan qulay joylashishini anglatmaydi. Oksidlangan membranadagi qisqa lipid dumlar lipid bosh guruhlari tomoniga og‘ishi, gidrofob UNS-larining lipid qatlami markazidagi uglevodorod guruhlar bilan gidrofobik o‘zaro ta’sirini kamaytiradi. Shuning uchun, normal membrana markazida lipid molekulalarining ko‘proq bo‘lishi va nisbatan zich joylashuvi tufayli C_{60} fullereni va uglerod pipodi holatlarida ushbu nanostrukturalarning normal membrana bilan o‘zaro ta’siri oksidlangan membranaga qaraganda kuchliroq bo‘ladi. UNN bilan normal va oksidlangan hujayra membranalari orasidagi o‘zaro ta’sir energiyalaridagi farqning deyarli yo‘qligi uning membrana lipidlari bilan ta’sirlashib deyarli vertikal holatni egallashi va o‘zi orqali suv molekulalarini o‘tkazib, lipid qatlamda o‘ziga xos suv kanali vazifasini bajarishi bilan bog‘liq bo‘lsa kerak. Pipod holatida o‘zaro ta’sir energiyasidagi farqning boshqa UNS-larga nisbatan eng katta chiqishi uning kattaroq gidrofob ta’sirlashuvchi yuzaga ega bo‘lishi bilan bog‘liq bo‘lsa kerak. Qolaversa, uning ichki qismida joylashgan C_{60} fullerenining ushbu gidrofob ta’sirda bilvosita roli mavjud bo‘lishi mumkin. Buni tekshirish esa qo‘shimcha modellashtirish tadqiqotlari olib borilishini taqozo etadi.

Xulosalar. Ushbu tadqiqotda UNS-larning normal va saraton hujayra membranalari bilan o‘zaro ta’siri MD usuli yordamida atomar darajada baholandi; modelda eksplisit suv va ionlar, shuningdek POPC/PoxnoPC tarkibli realistik lipid kompozitsiyalar inobatga olindi. Natijalar tahlili shuni ko‘rsatdiki, ikkala membrana holatida ham UNS-lar suv muhitidan lipid qo‘shqavat sohasiga o‘z-o‘zidan (hech qanday energiya baryerisiz) kira oladi, gidrofob yadroning ichida barqarorlashadi va har ikkala tizimda orientatsiyasi vaqt bo‘yicha izchil saqlanadi. Undan tashqari, MD natijalari o‘zaro ta’sir energiyasining statistik o‘rtacha qiymati tabiiy (normal) hujayra membranasida saraton (oksidlangan) hujayra membranasiga qaraganda UNN holatida deyarli bir xil, C_{60} fullereni holatida kuchliroq va pipod holatida esa eng kuchli bo‘lishini ko‘rsatdi. Kuzatilgan energetik farqlar, asosan, oksidlangan membranada PoxnoPC lipidlarining qisqargan gidrofob dumlari bosh guruhlar tomon burilishi natijasida yuzaga keladigan lipid qatlam yuzasi va zichligi o‘zgarishi bilan izohlanadi. Pipod holatida kuzatilgan eng katta energetik farqning ichki C_{60} fullereniga bog‘liq bo‘lishi mumkinligini aniqroq tushunish uchun kelgusi tadqiqotlarda alohida modellashtirish (masalan, C_{60} ni pipod ichidan olib tashlash orqali qiyoslash) talab etiladi.

Shunday qilib, MD natijalari UNS–membrana o‘zaro ta’sir energetik profilining UNS turiga bog‘liq holda farqlanishi, xususan C_{60} va pipod holatlarida kuzatilgan sezilarli farqlar, ularni normal va saraton hujayra membranalarini selektiv farqlovchi barqaror diagnostik mezon sifatida qo‘llash imkoniyatini ko‘rsatadi.

ADABIYOTLAR:

1. Slepičková Kasálková N., Slepička P., Švorčík V. Carbon Nanostructures, Nanolayers, and Their Composites // Nanomaterials. – 2021. Vol. 11. – 2368.

2. Utko P., Ferone R., Krive I.V., Shekhter R.I., Jonson M., Monthioux M., Noé L., Nygård J. Nanoelectromechanical coupling in fullerene peapods probed by resonant electrical transport experiments // Nature Communications. – 2010. Vol. 1. – pp. 1–6.

3. Díez-Pascual A.M. Carbon-Based Nanomaterials // International Journal of Molecular Sciences. – 2021. Vol. 22. – 7726.

4. Huang B. Carbon nanotubes and their polymeric composites: the applications in tissue engineering // Biomanufacturing Reviews. – 2020. Vol. 5.

5. Rašović I. Water-soluble fullerenes for medical applications // Materials Science and Technology. – 2017. Vol. 33. – pp. 777–794.

6. Pichler T., Liu X., Knupfer M., Fink J. Electronic properties of intercalated single-wall carbon nanotubes and C60 peapods // New Journal of Physics. – 2003. Vol. 5. – pp. 156–156.

7. Durán-Valdeiglesias E., Zhang W., Alonso-Ramos C., Serna S., Le Roux X., Maris-Morini D., Caselli N., Biccari F., Gurioli M., Filoramo A., Cassan E., Vivien L. Tailoring carbon nanotubes optical properties through chirality-wise silicon ring resonators // Scientific Reports. – 2018. Vol. 8.

8. Su W., Li X., Li L., Yang D., Wang F., Wei X., Zhou W., Kataura H., Xie S., Liu H. Chirality-dependent electrical transport properties of carbon nanotubes obtained by experimental measurement // Nature Communications. – 2023. Vol. 14.

9. Sharma M., Alessandro P., Cheriyamundath S., Lopus M. Therapeutic and diagnostic applications of carbon nanotubes in cancer: recent advances and challenges // Journal of Drug Targeting. – 2024. Vol. 32. – pp. 287–299.

10. Liang L., Zhang Y., Kong Z., Liu F., Shen J.W., He Z., Wang H. DNA fragment translocation through the lipid membrane assisted by carbon nanotube // Int J Pharm. – 2020. Vol. 574. – 118921.

11. Kamel M., Raissi H., Morsali A., Shahabi M. Assessment of the adsorption mechanism of Flutamide anticancer drug on the functionalized single-walled carbon nanotube surface as a drug delivery vehicle: An alternative theoretical approach based on DFT and MD // Applied Surface Science. – 2018. Vol. 434. – pp. 492–503.

12. Sergeeva V., Kraevaya O., Ershova E., Kameneva L., Malinovskaya E., Dolgikh O., Konkova M., Voronov I., Zhilenkov A., Veiko N., Troshin P., Kutsev S., Kostyuk S. Antioxidant Properties of Fullerene Derivatives Depend on Their Chemical Structure: A Study of Two Fullerene Derivatives on HELFs // Oxidative Medicine and Cellular Longevity. – 2019. – pp. 1

13. Motlagh N.M., Rouhani M., Mirjafary Z. Aminated C20 fullerene as a promising nanosensor for detection of A-234 nerve agent // Computational and Theoretical Chemistry. – 2020. Vol. 1186. – 112907.

14. Flores Bautista M.C., Gómez Conde J.C., Rodríguez Juárez A., Chigo Anota E. B12N12 structures (pristine, isomer and doped with carbon) for drug delivery: the case of the acetylsalicylic acid // Nano Express. – 2025. Vol. 6. – 015015.

15. Grebowski J., Litwinienko G. Metallofullerenols in biomedical applications // European Journal of Medicinal Chemistry. – 2022. Vol. 238. – 114481.

16. Kopcha W.P., Biswas R., Sun Y., Chueng S.-T.D., Dorn H.C., Zhang J. Water-soluble endohedral metallofullerenes: new horizons for biomedical applications // Chemical Communications. – 2023. Vol. 59. – pp. 13551–13561.

17. Abbaspour M., Jorabchi M.N., Akbarzadeh H., Ahmadi N. Molecular dynamics simulation of carbon peapod-like nanomaterials in desalination process // Desalination. – 2021. Vol. 504. – 114975.

18. Kang Y., Liu J., Jiang Y., Yin S., Huang Z., Zhang Y., Wu J., Chen L., Shao L. Understanding the interactions between inorganic-based nanomaterials and biological membranes // Advanced Drug Delivery Reviews. – 2021. Vol. 175. – 113820.

19. Mandal P., Ghosh S.K. Graphene-Based Nanomaterials and Their Interactions with Lipid Membranes // Langmuir. – 2023. Vol. 39. – pp. 18713–18729.

20. Zhang X., Ma G., Wei W. Simulation of nanoparticles interacting with a cell membrane: probing the structural basis and potential biomedical application // NPG Asia Materials. – 2021. Vol. 13.

21. Nel A.E., Mädler L., Velegol D., Xia T., Hoek E.M.V., Somasundaran P., Klaessig F., Castranova V., Thompson M. Understanding biophysicochemical interactions at the nano–bio interface // Nature Materials. – 2009. Vol. 8. – pp. 543–557.

22. Kariuki R., Mirihana K.A., Penman R., Hung A., Meftahi N., Bryant G., Ramsland P.A., Voïtchovsky K., Conn C.E., Contini C., Bryant S.J., Christofferson A.J., Elbourne A. Interactions of nanoparticles with living and synthetic bio-membranes // Chemical Society Reviews. – 2025. Vol. 54. – pp. 10531–10615.

23. Barrera G. Oxidative Stress and Lipid Peroxidation Products in Cancer Progression and Therapy // ISRN Oncology. – 2012. – pp. 1–21.

24. Cheung E.C., Vousden K.H. The role of ROS in tumour development and progression // Nature Reviews Cancer. – 2022. Vol. 22. – pp. 280–297.

25. Bagheri B., Boonnoy P., Wong-Ekkabut J., Karttunen M. Effect of oxidation on POPC lipid bilayers: anionic carboxyl group plays a major role // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2023. Vol. 25. – pp. 18310–18321.

26. Kraszewski S., Tarek M., Ramseyer C. Uptake and Translocation Mechanisms of Cationic Amino Derivatives Functionalized on Pristine C60 by Lipid Membranes: A Molecular Dynamics Simulation Study // ACS Nano. – 2011. Vol. 5. – pp. 8571–8578.

27. Qiao R., Roberts A.P., Mount A.S., Klaine S.J., Ke P.C. Translocation of C60 and Its Derivatives Across a Lipid Bilayer // Nano Letters. – 2007. Vol. 7. – pp. 614–619.

28. Nisoh N., Jarerattanachat V., Dias C., Wong-Ekkabut J. Insight into the interactions of fullerenes with biological membranes through molecular dynamics simulations // Advances in Physics: X. – 2024. Vol. 9. – 2350160.

29. Baoukina S., Monticelli L., Tieleman D.P. Interaction of Pristine and Functionalized Carbon Nanotubes with Lipid Membranes // The Journal of Physical Chemistry B. – 2013. Vol. 117. – pp. 12113–12123.

30. Abraham M.J., Murtola T., Schulz R., Páll S., Smith J.C., Hess B., Lindahl E. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers // SoftwareX. – 2015. Vol. 1–2. – pp. 19–25.

31. Jo S., Kim T., Iyer V.G., Im W. CHARMM-GUI: A web-based graphical user interface for CHARMM // Journal of Computational Chemistry. – 2008. Vol. 29. – pp. 1859–1865.

32. Price D.J., Brooks C.L. III. A modified TIP3P water potential for simulation with Ewald summation // The Journal of Chemical Physics. – 2004. Vol. 121. – pp. 10096–10103.

33. Martínez L., Andrade R., Birgin E.G., Martínez J.M. PACKMOL: A package for building initial configurations for molecular dynamics simulations // Journal of Computational Chemistry. – 2009. Vol. 30. – pp. 2157–2164.

34. Bussi G., Donadio D., Parrinello M. Canonical sampling through velocity rescaling // The Journal of Chemical Physics. – 2007. Vol. 126. – 014101.

35. Parrinello M., Rahman A. Polymorphic transitions in single crystals: A new molecular dynamics method // Journal of Applied Physics. – 1981. Vol. 52. – pp. 7182–7190.

36. Lee J., Cheng X., Swails J.M., Yeom M.S., Eastman P.K., Lemkul J.A., Wei S., Buckner J., Jeong J.C., Qi Y., Jo S., Pande V.S., Case D.A., Brooks C.L. III, MacKerell A.D. Jr., Klauda J.B., Im W. CHARMM-GUI Input Generator for NAMD, GROMACS, AMBER, OpenMM, and CHARMM/OpenMM Simulations Using the CHARMM36 Additive Force Field // Journal of Chemical Theory and Computation. – 2015. Vol. 12. – pp. 405–413.

UDC 539.17

MODELING AND OPTIMIZATION OF THE ANGULAR DISTRIBUTION MEASUREMENT FOR THE ^{10}B(*n,d*)^{9}Be REACTION AT THE NG-150 NEUTRON GENERATOR

Ruziev Elbek Tulkinovich,
National University of Uzbekistan
named after M.Ulugbek,
Senior Lecturer at Institute of Nuclear
Physics AS RU, Senior Researcher, PhD
ruziev@inp.uz

Abstract. *This work details the modeling and geometric optimization of angular distribution measurements for the $^{10}B(n,d)^{9}Be$ reaction conducted with a laboratory neutron generator and a ΔE-E silicon telescope. The primary goal was to establish an optimal experimental window that ensures clean separation between the ^{9}Be ground and excited states while minimizing measurement time. A mathematical model for the total full width at half maximum (FWHM) was derived by combining detector resolution, target energy straggling, and angular-geometric broadening factors. Our simulation results identify the precise target thicknesses and detector distances needed to prevent peak distortion. The proposed methodology enhances both spectral resolution and counting throughput, providing practical guidelines for executing highly efficient differential cross-section experiments under restricted laboratory conditions.*

Keywords: *(n,d) nuclear reactions, scattering kinematics, NG-150 generator, silicon detector array, full width at half maximum (FWHM), energy resolution, peak separation.*

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ИЗМЕРЕНИЯ УГЛОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДЛЯ РЕАКЦИИ ^{10}B(*n,d*)^{9}Be НА НЕЙТРОННОМ ГЕНЕРАТОРЕ НГ-150

Аннотация. *В данной работе подробно описаны моделирование и геометрическая оптимизация измерений углового распределения для реакции $^{10}B(n,d)^{9}Be$, проведённых с использованием лабораторного нейтронного генератора и $\Delta E - E$ кремниевого телескопа. Основная цель заключалась в установлении оптимального экспериментального окна, обеспечивающего чёткое разделение основного и возбуждённых состояний ядра ^{9}Be при минимизации времени измерений. Математическая модель для полной ширины на полувысоте (FWHM) была получена путём объединения разрешения детектора, страгглинга энергии в мишени и угловых геометрических факторов уширения. Результаты моделирования определяют точные толщины мишеней и расстояния до детекторов, необходимые для предотвращения искажения пиков. Предложенная методология повышает как спектральное разрешение, так и скорость счёта, предоставляя практические рекомендации для проведения высокоэффективных экспериментов по дифференциальному сечению в ограниченных лабораторных условиях.*

Ключевые слова: *(n,d) ядерные реакции, кинематика рассеяния, генератор НГ-150, кремниевая детекторная система, полная ширина на полувысоте (FWHM), энергетическое разрешение, разделение пиков.*

NG-150 NEYTRON GENERATORIDA ^{10}B(*n,d*)^{9}Be REAKSIYASI UCHUN BURCHAK TAQSIMOTINI O‘LCHASHNI MODELLASHTIRISH VA OPTIMALLASHTIRISH

Annotatsiya. *Ushbu ishda laboratoriya neytron generatori hamda $\Delta E - E$ kremniy teleskopi yordamida o‘tkazilgan $^{10}B(n,d)^{9}Be$ reaksiyasining burchak taqsimoti o‘lchovlarini modellashtirish va geometrik optimallashtirish tafsilotlari keltirilgan. Asosiy maqsad o‘lchash vaqtini kamaytirish bilan birga, ^{9}Be yadrosining asosiy va uyg‘otilgan holatlarini aniq ajratishni ta’minlaydigan optimal eksperimental sharoitni belgilashdan iborat edi. Umumiy yarim kenglik (FWHM) uchun matematik model detektor rezolyutsiyasi, nishondagi energiya stragglingi hamda burchak-geometrik kengayish omillarini birlashtirish orqali ishlab chiqildi. Simulyatsiya natijalarimiz spektral cho‘qqilarning buzilishini oldini olish uchun zarur bo‘lgan nishon qalinligi va detektorgacha bo‘lgan masofalarni aniq belgilab berdi. Taklif etilayotgan metodologiya spektral rezolyutsiya va sanoq samaradorligini oshirib, cheklangan laboratoriya sharoitida yuqori effektivlikka ega differensial kesim eksperimentlarini o‘tkazish bo'yicha amaliy tavsiyalar beradi.*

Kalit so'zlar: *(n,d) yadro reaksiyalari, sochilish kinematikasi, NG-150 generatori, kremniy detektorlar sistemasi, yarim kenglik (FWHM), energiya rezolyutsiyasi, cho'qqilarni ajratish.*

Introduction. Neutron-induced (*n,d*) nuclear reactions serve as a cornerstone for both fundamental nuclear physics and practical fields like radiation dosimetry, material analysis, and neutron diagnostics [1]. Reactions tracking boron isotopes are of particular significance due to their substantial cross-sections at low energy thresholds and their widespread utilization in modern neutron detection systems. Specifically, investigating the ^{10}B(*n,d*)^{9}Be reaction yields critical insights into underlying reaction mechanisms and angular distributions, both of which are essential for refining computational models of neutron-matter interactions.

While laboratory-scale neutron generators offer an accessible alternative [1,6] and operationally straightforward alternative for differential cross-section measurements, they introduce notable experimental constraints. Neutrons generated via deuteron-induced reactions are inherently non-monoenergetic and carry an angular dispersion that directly degrades the energy resolution of outgoing charged particles. Furthermore, the finite geometry of both targets and detectors induces additional spectral broadening. These combined factors frequently culminate in peak overlap, severely complicating the isolation of closely spaced reaction channels, such as the ground and first excited states of the residual ^{9}Be nucleus.

In standard Δ*E*–*E* silicon telescope configurations [2,4,7], the overall energy resolution is governed by a combination of independent physical mechanisms: intrinsic detector noise, energy straggling within the boron target, primary neutron beam dispersion, and geometric solid-angle acceptance. Poor management of these components leads to distorted particle identification and prolonged acquisition times due to low signal-to-background ratios. Long measurement cycles are highly undesirable as they exacerbate electronic drift, beam fluctuations, and background accumulation. Thus, establishing an analytical optimization framework before executing the experiment is essential to balance data-taking speed with adequate spectral resolution.

Although numerical modeling has previously been used to forecast spectral distortion, systematic studies that unify resolution modeling, explicit peak separation thresholds, and beam-time efficiency for the ^{10}B(*n,d*)^{9}Be process remain remarkably scarce [5]. Furthermore, the interplay between two-body kinematics and detector positioning has not been adequately explored for experiments localized at the NG-150 neutron generator facility.

The present work addresses this gap by establishing a comprehensive, multi-component energy resolution model. The total full width at half maximum (FWHM) is evaluated via the quadratic summation of all individual broadening sources. Using these criteria, we evaluate the precise conditions under which adjacent ^{9}Be states can be cleanly resolved. It is important to emphasize that this paper does not present raw experimental data; rather, it provides a comprehensive theoretical feasibility study utilizing kinematic calculations and LISE++ assisted modeling to deliver practical, optimized guidelines for upcoming laboratory cross-section campaigns [3].

Experimental Concept and Reaction Kinematics. The configured experimental framework is engineered to efficiently generate fast neutrons, induce the (*n,d*) reaction within the boron matrix, and record the trajectory of emitted deuterons with superior energy resolution. The operational core of this configuration relies on the following sub-systems: Deuterons are accelerated to an energy of 100 keV using the NG-150 facility to bombard a titanium–tritium (TiT) target. Through the standard T(*d,n*)^{4}He reaction dynamic, fast neutrons are extracted. Due to the geometric constraints and energy variations within the tritium layer, these neutrons span a finite energy spread rather than being strictly monoenergetic. The neutrons are directed onto a thin ^{10}B target, where the (*n,d*) reaction occurs. The thickness of the boron target is optimized to achieve a balance between reaction yield and minimization of energy straggling effects. The emitted deuterons are detected using a Δ*E*–*E* silicon telescope system. The thin Δ*E* detector measures the initial energy loss of the particle, while the thicker E detector measures the residual energy, enabling accurate particle identification and precise energy determination. The detectors are positioned at specific laboratory scattering angles to measure the angular distribution of emitted deuterons. The distance between the boron target and the detector active area defines the solid angle, which affects both counting statistics and energy resolution.

Figure 1 illustrates the schematic configuration of the experimental setup. The experiment is performed using the NG-150 neutron generator, in which neutrons are produced in a TiT production target. The generated neutrons interact with a thin ^{10}B boron target, where the ^{10}B(*n,d*)^{9}Be reaction occurs. In this study, neutrons emitted at laboratory angles close to 90° with respect to the incident deuteron beam are used, since this region provides a relatively narrow neutron energy distribution, i.e., a more quasi-monoenergetic neutron beam.

The emitted deuterons are detected using a Δ*E*-*E* silicon telescope system positioned at predetermined laboratory scattering angles. The detector placement is defined by the target-to-detector distance L and the detector active diameter D, which together determine the solid-angle coverage, affecting both counting statistics and the overall energy resolution of the measurement.

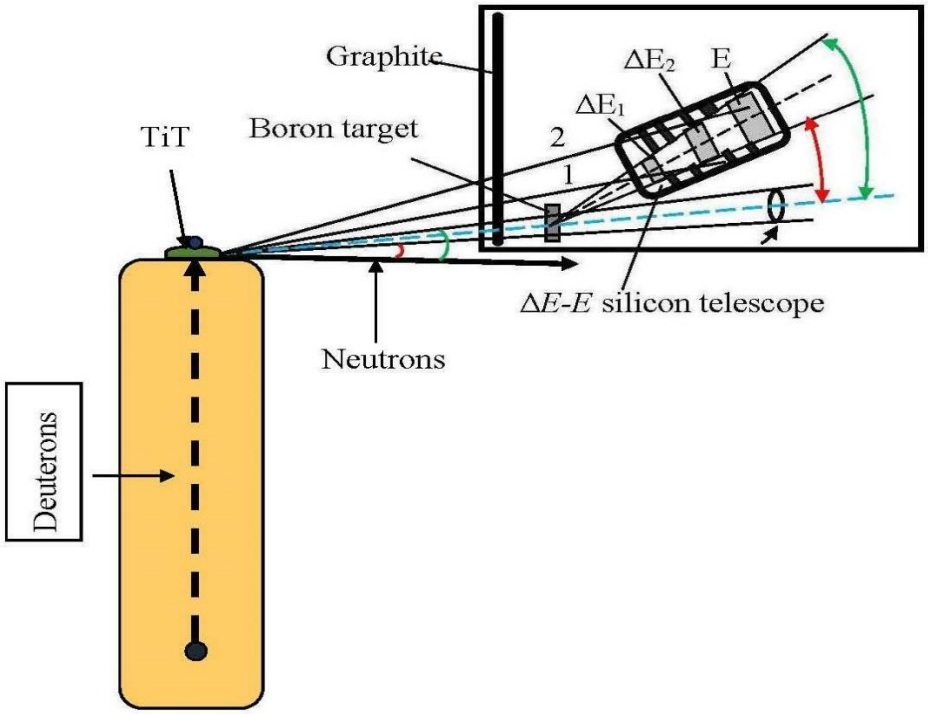


Figure 1. Schematic representation of the experimental setup used for the measurement of the ^{10}B(*n*,*d*)^{9}Be reaction, showing the NG-150 neutron generator, the TiT neutron production target, the ^{10}B target, and the Δ*E*-*E* silicon telescope.

Modeling of Energy Resolution. The accurate measurement of the differential cross-section for the ^{10}B(*n*,*d*)^{9}Be reaction strongly depends on the energy resolution of the detection system. The total energy resolution of the Δ*E*-*E* telescope is determined by several independent contributions combined in quadrature:

$$FWHM_{tot} = \sqrt{FWHM_{det}^2 + FWHM_{str}^2 + FWHM_{n,\theta}^2 + FWHM_{\theta_d}^2} \quad (1)$$

where $FWHM_{det}^2$ is the intrinsic detector resolution, $FWHM_{str}^2$ energy straggling in target material, $FWHM_{n,\theta}^2$ accounts for the energy spread from neutron angular distribution, $FWHM_{\theta_d}^2$ represents broadening caused by detector geometry and solid angle.

Detector Resolution Contribution ($FWHM_{det}^2$). The intrinsic energy resolution of the silicon detectors is mainly determined by electronic noise and statistical fluctuations in the charge collection process. The detector contribution to the energy resolution can be characterized by the full width at half maximum ($FWHM_{det}$) of the spectral peaks.

To determine the intrinsic detector resolution, Gaussian fitting was applied to five well-resolved peaks in the ^{226}Ra alpha spectrum using Origin software, as illustrated in Figure 2. The $FWHM_{det}$ values obtained from the individual peaks were initially determined in channel units.

Subsequently, an energy calibration was performed using a linear calibration function relating channel number to energy. Using this calibration, the $FWHM_{det}$ values were converted from channels to energy units (keV). The average value of the converted $FWHM_{det}$ values was then used to estimate the intrinsic energy resolution of the detector.

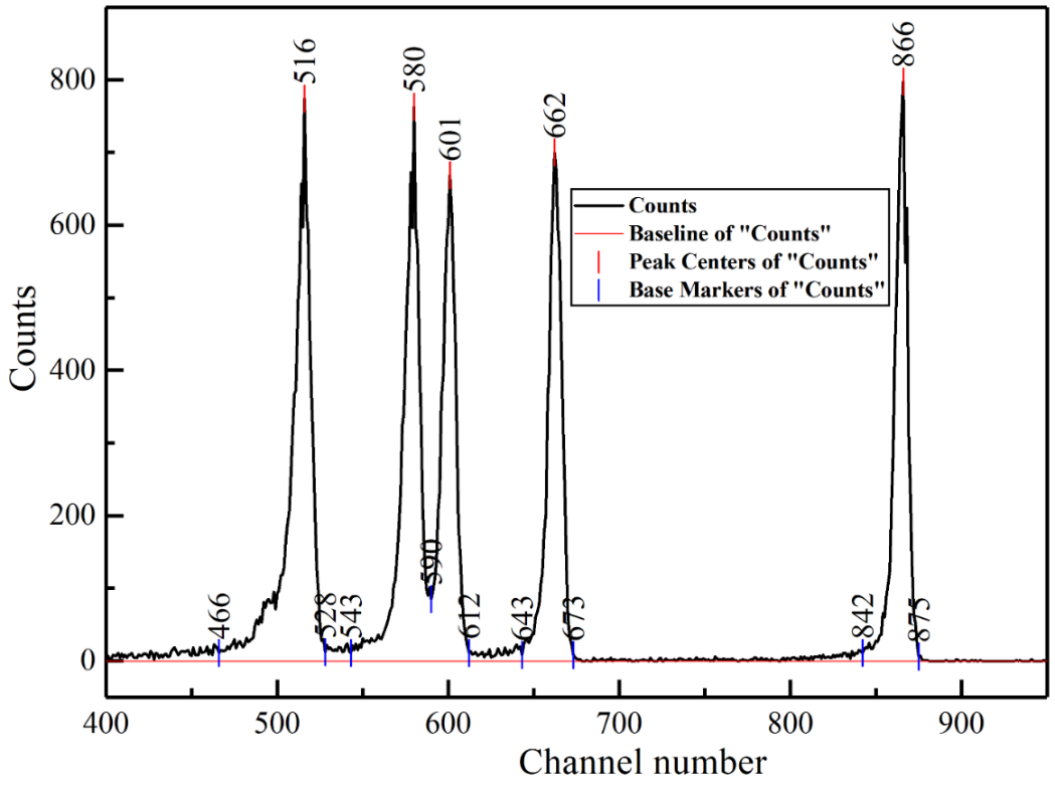


Figure 2. Vacuum spectrum of the ^{226}Ra source measured using the silicon *E*-detector. The peak used for intrinsic resolution determination is shown with Gaussian fitting.

Target Energy Straggling ($FWHM_{str}^2$). The target energy straggling contribution arises from statistical fluctuations in energy loss as deuterons traverse the boron target material. The straggling width was evaluated using stopping power calculations implemented in simulation packages such as LISE++, taking into account target thickness, material density, and particle transport effects [3,8]. The energy straggling contribution was obtained numerically using Monte Carlo based stopping power simulations. As deuterons traverse the boron target, they experience multiple small-angle collisions with target atoms, leading to statistical fluctuations in energy loss, known as energy straggling. The contribution of energy straggling to the total energy resolution can be expressed as:

$$FWHM_{str} = 2.355 \cdot \sigma_{str} \quad (2)$$

Where σ_{str} is typically obtained from simulation software such as LISE++. In this work, the straggling contribution was determined using simulation-based stopping power calculations. The energy loss and straggling parameters were evaluated using nuclear interaction simulation tools such as **LISE++**, which provide numerical estimates of particle energy distribution inside the boron target.

The dependence of the mean deuteron energy loss and the corresponding energy broadening in terms of $FWHM_{str}$ on the boron target thickness was evaluated using SRIM-based simulations. As shown in Figure 3, both the average energy loss and the spectral broadening increase with increasing target thickness. While a thicker target improves reaction yield, it also significantly degrades the spectral resolution due to enhanced energy straggling. Therefore, an optimal target thickness was selected to ensure a balance between sufficient counting statistics and acceptable energy resolution for the Δ*E*-*E* telescope measurements. Increasing target thickness enhances reaction yield but leads to additional spectral broadening. The selected thickness represents a compromise between counting statistics and energy resolution.

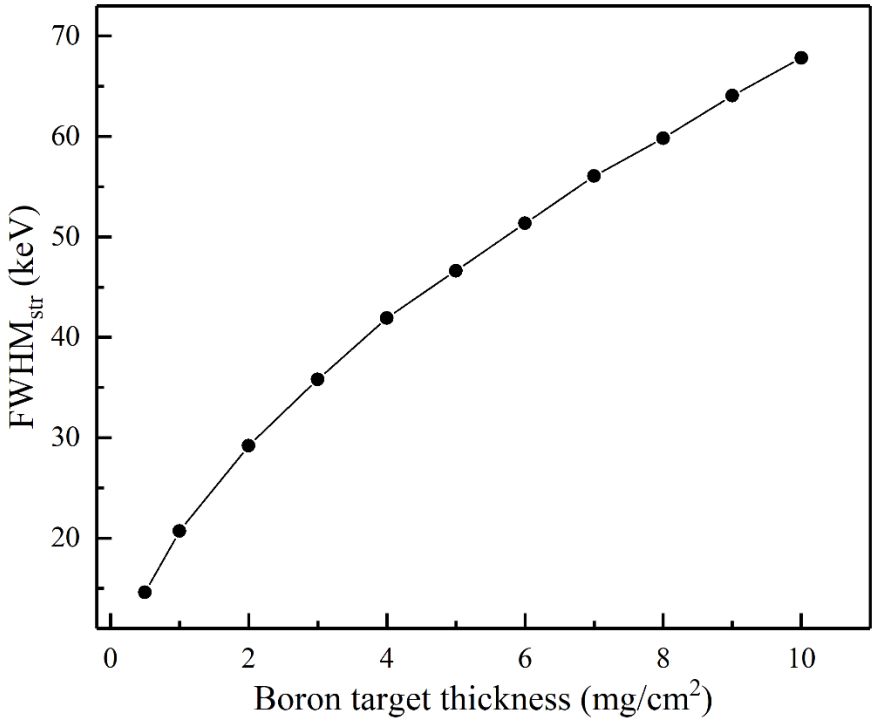


Figure 3. Simulated mean energy loss and energy broadening (expressed as $FWHM_{str}$) of deuterons in the boron target as a function of target thickness.

Neutron Angular Spread Contribution ($FWHM^2_{n,\theta}$). Neutrons produced in the TiT production target of the NG-150 generator are emitted with a finite energy and angular distribution due to the intrinsic deuteron beam energy spread and the geometrical thickness of the tritium target. As a consequence, the incident neutron energy at the boron target is not strictly monoenergetic. Since the detected deuteron energy depends on the neutron energy through reaction kinematics,

$$E_d = f(E_n, \theta_{lab}) \quad (3)$$

variations in neutron energy lead directly to a spread in the measured deuteron energy at a fixed laboratory angle [9]. The corresponding contribution to the energy resolution can be evaluated using standard error propagation:

$$\mathrm{FWHM_{n,\theta}} = \left|\frac{\partial \mathrm{E_d}}{\partial \mathrm{E_n}}\right| \cdot \mathrm{FWHM_{E_n}} \quad (4)$$

$\mathrm{FWHM_{E_n}}$ is the neutron energy spread and $\frac{\partial \mathrm{E_d}}{\partial \mathrm{E_n}}$ represents the kinematic sensitivity factor calculated at the selected laboratory angle. The derivative $\frac{\partial \mathrm{E_d}}{\partial \mathrm{E_n}}$ was determined numerically from reaction kinematics by varying the neutron energy around its nominal value and evaluating the corresponding change in deuteron energy at each measurement angle. The neutron energy distribution was obtained from the known kinematics of neutron production in the TiT target and the specified deuteron beam energy spread of the NG-150 generator. The neutron angular spread contribution was evaluated using reaction kinematics. The sensitivity of the detected deuteron energy to neutron energy variation was estimated as the derivative $\frac{\partial \mathrm{E_d}}{\partial \mathrm{E_n}}$, and the neutron energy spread $\mathrm{FWHM_{E_n}}$ was calculated analytically without relying on pre-tabulated simulation data.

The neutron energy is expressed as a function of the incident deuteron energy and neutron emission angle:

$$E_n = f(E_d, \theta_n) \quad (5)$$

where E_d is the deuteron beam energy, and $\theta_n$is the neutron emission angle in the laboratory frame.

The neutron energy resolution contribution was evaluated using the error propagation method. The corresponding full width at half maximum is given by:

$$FWHM^2_{E_n} = \left(\frac{\partial E_n}{\partial E_d}\right)^2 \cdot \left(FWHM^2_{beam} + FWHM^2_{str,T}\right) + \left(\frac{\partial E_n}{\partial \theta_n}\right)^2 \cdot (\Delta\theta_n)^2 \quad (6)$$

Beam energy and target straggling term: $FWHM^2_{beam} + FWHM^2_{str,T}$ represents the effective deuteron energy spread arising from accelerator beam energy dispersion and energy straggling inside the titanium–tritium target. $FWHM^2_{beam} = 2.355 \cdot \sigma_{beam}$, $FWHM^2_{str,T} = 2.355 \cdot \sigma_{str,T}$

Kinematic sensitivity factor: $\left(\frac{\partial E_n}{\partial E_d}\right)$ describes the dependence of neutron energy on the incident deuteron energy based on reaction kinematics.

Angular dispersion contribution: $\frac{\partial E_n}{\partial \theta_n}$ accounts for neutron energy variation due to angular emission distribution. $\Delta\theta_n$ represents the angular acceptance range determined by the production target geometry. The neutron energy resolution contribution was calculated analytically without relying on pre-tabulated simulation data, ensuring transparency of the modeling procedure.

To quantify the neutron angular spread contribution, the reaction kinematics of the ^{10}B(n,d)^{9}Be process was evaluated. The dependence of the detected deuteron energy on the incident neutron energy was calculated analytically, and the sensitivity factor $\frac{\partial E_d}{\partial E_n}$ was determined at each laboratory angle.

As shown in Figure 4, the deuteron energy varies nearly linearly with the incident neutron energy in the energy range relevant for the NG-150 generator. The relationship is illustrated for several laboratory scattering angles: 0°, 15°, 30°, 45°, and 60°. The slope of each curve corresponds to the kinematic amplification factor, which defines how the neutron energy broadening propagates into the measured deuteron spectrum and is used in calculating the $FWHM_{n,\theta}$ contribution.

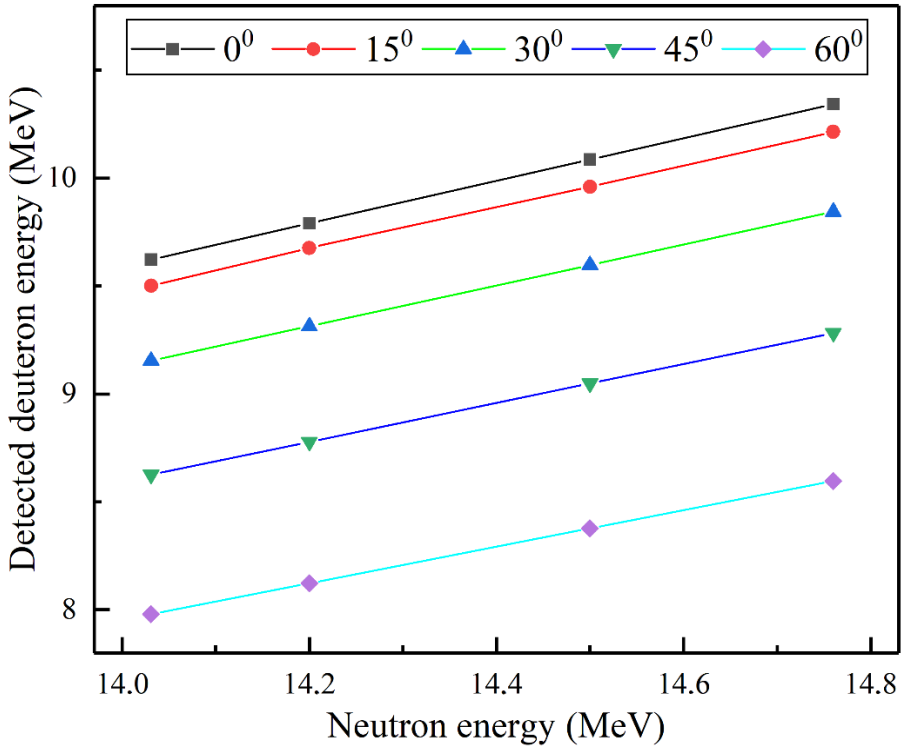


Figure 4. Deuteron energy as a function of incident neutron energy for the ^{10}B(n,d)^{9}Be reaction at different laboratory scattering angles (0°, 15°, 30°, 45°, and 60°).

Detector Solid Angle Contribution ($FWHM^2_{\theta_d}$). Even if the incident neutron beam were perfectly collimated and monoenergetic, the finite size of the detector introduces an additional source of energy broadening. Because the detector subtends a finite solid angle, particles emitted within a small angular interval $\Delta\theta_d$ are detected simultaneously. Since the reaction kinematics depends on the laboratory angle, this angular acceptance results in a spread of detected deuteron energies.

The corresponding contribution to the total energy resolution is obtained by propagating the angular uncertainty through the reaction kinematics:

$$FWHM_{\theta_d} = \left|\frac{\partial E_d}{\partial \theta_d}\right| \cdot \Delta\theta_d \quad (7)$$

Determination of angular acceptance. For a circular detector of active diameter D placed at a distance L from the target, the angular acceptance can be approximated as:

$$\Delta\theta_d \approx 2\arctan\left(\frac{D}{2L}\right) \quad (8)$$

Where, D is the detector active diameter, and L is the target-to-detector distance.

The influence of detector angular acceptance on the measured energy resolution was evaluated using reaction kinematics. Because the detector subtends a finite angular interval $\Delta\theta_d$, particles emitted at slightly different laboratory angles are recorded simultaneously. Since the deuteron energy depends on emission angle, this effect introduces additional spectral broadening.

The influence of the detector solid angle on the measured energy resolution was evaluated for a detector of active diameter D = 1 cm at various target-to-detector distances (L = 10, 20, 30, 40, 50, and 60 cm). As shown in Figure 5, the geometrical broadening contribution ($FWHM_{\theta_d}$) decreases with increasing L, while the effect becomes more pronounced at larger laboratory scattering angles due to kinematic sensitivity. These results provide guidance for optimizing detector placement to minimize angular broadening without compromising counting statistics.

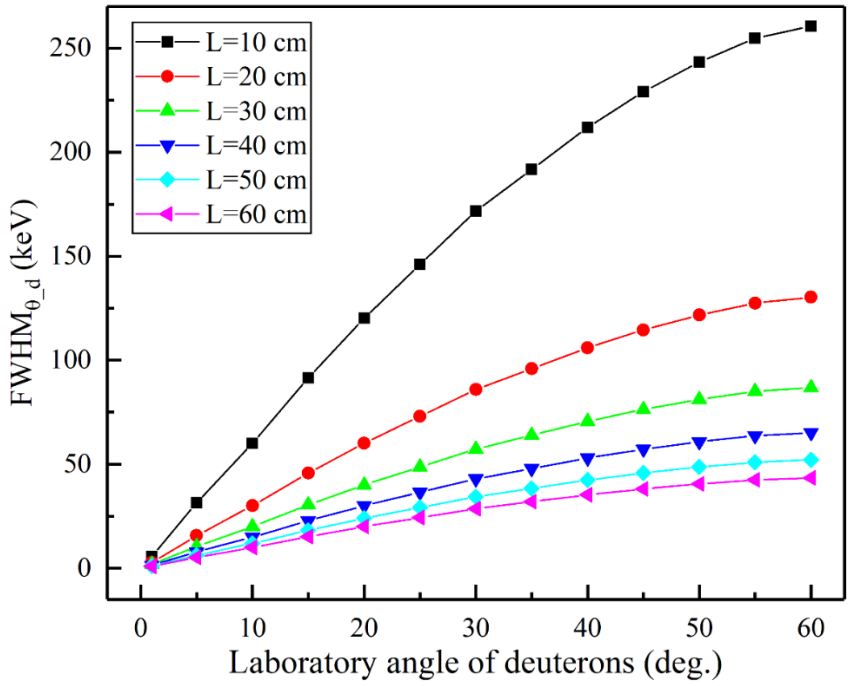


Figure 5. Contribution of the detector solid angle ($FWHM_{\theta_d}$) to the total energy resolution as a function of laboratory scattering angle for a detector of diameter D = 1 cm at various target-to-detector distances (L = 10, 20, 30, 40, 50, and 60 cm).

Total Resolution and Optimization. The total energy resolution obtained by combining all independent contributions can be used to evaluate the separation of reaction peaks corresponding to the ground and excited states of ^{9}Be. To ensure reliable peak discrimination, a commonly adopted separation criterion requires that the distance between adjacent peaks be at least $1.5 \cdot FWHM_{tot}$ [11].

Based on the resolution model developed in this work, the following experimental parameters were optimized: Boron target thickness, Detector-target distance and detector active area, Laboratory observation angles.

Through analytical modeling, these parameters can be adjusted to achieve minimal spectral broadening while preserving sufficient counting statistics for reliable measurement. The proposed optimization framework provides a practical approach for improving energy resolution and measurement efficiency in differential cross section studies using neutron generator based experimental systems.

The total energy resolution ($FWHM_{tot}$) was evaluated by combining all independent contributions, including intrinsic detector resolution, target energy straggling, neutron angular spread, and detector solid angle effects. For Figure 6, calculations were performed assuming a boron target thickness of 20 μm and a target-to-detector distance of L = 12 cm. The results show that the total FWHM exhibits a clear angular dependence due to kinematic sensitivity and geometric broadening, with better spectral resolution at forward angles compared to larger scattering angles. This provides guidance for selecting optimal detector placement and target parameters to ensure reliable peak separation of the ^{9}Be ground and excited states.

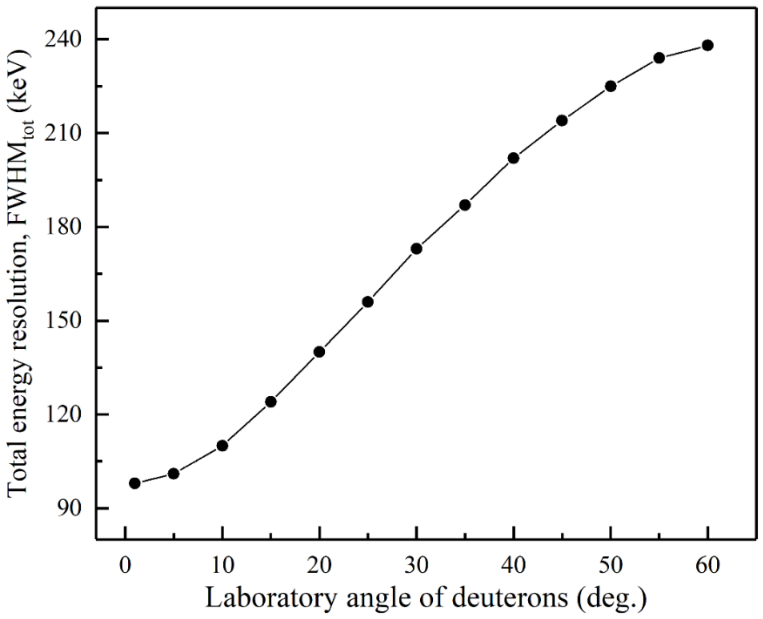


Figure 6. Total energy resolution ($FWHM_{tot}$) as a function of laboratory scattering angle for the ^{10}B(n,d)^{9}Be reaction.

Peak Separation Criteria and Optimization. Accurate separation of the ^{9}Be ground and excited state peaks is essential for reliable differential cross section measurements of the ^{10}B(n,d)^{9}Be reaction. The energy levels of the ^{9}Be residual nucleus, including the ground state and first few excited states, were obtained from evaluated nuclear data [10], which provide excitation energies and corresponding deuteron group energies used in peak identification (see evaluated nuclear level compilations). To ensure sufficient resolution of adjacent states, a commonly adopted separation criterion is:

$$|E_1 - E_2| > 1.5 \cdot FWHM_{tot} \quad (9)$$

where E_1 and E_2 are the deuteron energies associated with the ground and first excited states of ^{9}Be, respectively, and $FWHM_{tot}$ is the total energy resolution defined in Section 3. The fulfillment of this criterion strongly depends on observation angle, target thickness, and detector geometry. Therefore, systematic parameter variation was performed to identify the optimal experimental region. This criterion helps prevent artificial overlap of peaks in the measured spectrum and thus reduces systematic errors in cross section extraction.

Several key experimental parameters influence the ability to meet this peak separation criterion and must be carefully optimized:

While thicker targets increase reaction yield, they also enhance energy straggling, which broadens peaks. Conversely, thinner targets reduce straggling but may lead to lower counting statistics.

Increasing the distance between the target and detector reduces geometric broadening ($FWHM_{\theta_d}$) by decreasing the angular acceptance. However, this also reduces the solid angle and, therefore, the count rate. Due to two-body reaction kinematics, certain laboratory angles provide larger separation between deuteron energy peaks corresponding to different ^{9}Be states. Modeling using kinematic relations or simulation tools such as LISE++ can help identify optimal angles for detector placement [3].

By adjusting these parameters according to the separation criterion, the total FWHM can be minimized while ensuring that the ground and excited state peaks remain resolvable. Optimization of these factors also contributes to reducing the total measurement time without compromising energy resolution or statistical accuracy. The developed resolution model was applied to evaluate the expected experimental performance for the ^{10}B(n,d)^{9}Be reaction under realistic geometric and target conditions.

Individual broadening contributions, including intrinsic detector resolution, target straggling, neutron angular spread, and detector solid angle effects, were calculated for representative laboratory angles and target thicknesses. The total energy resolution was obtained by quadratic summation of these independent terms. The present study represents a theoretical evaluation of the expected experimental performance for the ^{10}B(n,d)^{9}Be reaction using a compact neutron generator. The results are based on kinematic calculations and LISE++ simulations aimed at assessing peak separation capability prior to experimental implementation [3].

For typical experimental parameters, the dominant contributions arise from target energy straggling and intrinsic detector resolution, while geometrical effects become significant at larger laboratory angles. For

the optimized configuration, the separation condition $|E_1 - E_2| > 1.5 \cdot FWHM_{tot}$ is satisfied across a broad range of laboratory angles. The separation margin decreases for thicker targets due to increased straggling but improves at forward angles where kinematic sensitivity is reduced.

The modeling results suggest the following practical recommendations: Select boron target thickness to balance reaction yield and energy straggling. Position detectors at laboratory angles that maximize peak separation according to two-body kinematics. Increase detector distance where feasible to reduce geometrical broadening while maintaining acceptable count rates. These findings demonstrate that careful analytical modeling enables optimization of spectral quality while minimizing total measurement time.

Conclusion. In this work, a comprehensive analytical model for the total energy resolution of the Δ*E*-*E* detection system was developed and applied to the ^{10}B(*n*,*d*)^{9}Be reaction using a neutron generator. All major broadening mechanisms including intrinsic detector resolution, energy straggling in the boron target, neutron angular spread, and detector geometrical acceptance—were systematically evaluated.

The combined resolution model enabled quantitative prediction of peak separation between the ground and first excited states of ^{9}Be. By applying a well-defined separation criterion, optimal experimental parameters were identified, including boron target thickness, detector distance, and laboratory observation angles, ensuring reliable peak discrimination while maintaining sufficient counting statistics.

The results demonstrate that careful modeling of resolution contributions allows efficient optimization of experimental conditions, leading to improved spectral quality and reduced acquisition time. This methodology provides a practical framework for differential cross section measurements using neutron generator-based systems and can be extended to other neutron-induced charged-particle reactions. The study defines a realistic parameter window in which separation of the ^{9}Be ground and excited states becomes experimentally feasible using compact neutron generator facilities.

Acknowledgements. "This work was supported by the Ministry of Higher Education, Science and Innovations of the Republic of Uzbekistan (Grant No. FL-9024094149, *"Study of nucleon or cluster transfer nuclear reactions to solve problems in nuclear astrophysics and thermonuclear reactions"*)."

REFERENCES:

1. Generatory Neytronov. Metod izmereniya potoka bystrykh neytronov [Neutron Generators. Method for Measuring Fast Neutron Flux]. GOST 22751-77, IPK Izdatel'stvo Standartov, Moscow, USSR, 1977. (in Russian)

2. Artemov, S. V., et al. "Metody izmereniy spektrov bystrykh neytronov na neytronnom generatore NG-150 IYaF AN RUz" [Methods for measuring fast neutron spectra at the NG-150 neutron generator of INP AS RU]. Vestnik Molodykh Uchenykh [Bulletin of Young Scientists], pp. 27–31, 2019. (in Russian)

3. Tarasov, O. B., and Bazin, D. "LISE++: Radioactive beam production with in-flight separators." Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, vol. 266, no. 19-20, pp. 4657–4664, 2008.

4. Artemov, S. V., et al. "Method for measuring the energy of fast neutrons by the recoil deuterons using a telescope of semiconductor Si detectors." Proceedings of the II International Scientific Forum "Nuclear Science and Technologies", Almaty, Kazakhstan, June 24–27, 2017, pp. 213–214.

5. Aripov, G. A., Kurbanov, B. I., and Zinovyev, V. G. "Opredeleniye soderzhaniya azota i bora metodom spektrometrii gamma-izlucheniya zakhvata neytronov" [Determination of nitrogen and boron content by neutron-capture gamma-ray spectrometry]. Gornyy Vestnik Uzbekistana [Mining Bulletin of Uzbekistan], no. 28, issue 1, p. 102, 2007. (in Russian)

6. Valkovic, V. Neutron Generators for Technical Applications. CRC Press, 2016.

7. Knoll, G. F. Radiation Detection and Measurement. 4th ed., John Wiley & Sons, 2010.

8. Ziegler, J. F., Ziegler, M. D., and Biersack, J. P. "SRIM – The stopping and range of ions in matter." Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B, vol. 268, no. 11-12, pp. 1818-1823, 2010.

9. Marion, J. B., and Young, F. C. Nuclear Reaction Analysis: Graphs and Tables. North-Holland Publishing Company, 1968.

10.Brown, D. A., et al. "ENDF/B-VIII.0: The 8^{th} Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with ENDF/B-VIII.0." Nuclear Data Sheets, vol. 148, pp. 1-142, 2018.

11.Leo, W. R. Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments. 2nd ed., Springer-Verlag, 1994.

UO‘K 620.3:535.21:546.26

3D O‘LCHAMLI GRAFEN NANOSTRUKTURALAR SINTEZIGA LAZER VA MATERIAL PARAMETRLARINING TA’SIRI

Sadullayev Jo‘rabek Oybekovich,
Urganch davlat universiteti Elektrotexnika va energetika kafedrasi o‘qituvchisi
Sotimova Mahbuba Kadamovna,
Urganch davlat universiteti Fizika kafedrasi o‘qituvchisi
**jurabek.s@urdu.uz*

Annotatsiya. *Ushbu ishda polimid (PI) substratida lazer-induksiyalangan 3D grafen nanostrukturalarining shakllanishiga lazer va material parametrlarining ta’siri nazariy, sonli va eksperimental yondashuvlar asosida tahlil qilinadi. Lazer-polimid o‘zaro ta’siri COMSOL Multiphysics muhitida chekli elementlar usuli (FEM) asosida modellashtirilib, lazer energiyasining yutilishi, issiqlik tarqalishi va sirt haroratining fazoviy-vaqt bo‘yicha evolyutsiyasi baholandi. Modelda polimidning issiqlik o‘tkazuvchanligi, issiqlik sig‘imi, zichligi va optik yutilish koeffitsiyentining haroratga bog‘liqligi hisobga olindi. Femtosoniyali lazer uchun skanerlash tezligi 0,05-0,20 m/s oralig‘ida o‘rganilib, tezlik kamayishi bilan issiqlik to‘planishi va maksimal sirt harorati 2400 K dan 2600 K gacha ortishi aniqlandi. Shuningdek, yutilish koeffitsiyentining A = 0,7; 0,8; 0,9 qiymatlaridagi rejimlari taqqoslanib, A ≈ 0,8 holati grafen hosil bo‘lish sifati, g‘ovaklik va termik barqarorlik nuqtayi nazaridan maqbul rejim sifatida belgilandi. Olingan sonli natijalar SEM va Raman tahlillari, shuningdek, LIG ning elektr qarshiligini o‘lchash natijalari bilan bog‘lanib, lazer parametrlarini boshqarish orqali 3D grafen strukturasini maqsadli shakllantirish imkoniyati ko‘rsatildi.*

Kalit so‘zlar: *lazer-induksiyalangan grafen, 3D grafen, polimid, femtosekundali lazer, COMSOL Multiphysics, FEM, issiqlik uzatish, lazer yutilishi, skanerlash tezligi, Raman spektroskopiyasi, SEM*

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЛАЗЕРА И МАТЕРИАЛА НА СИНТЕЗ 3D ГРАФЕНОВЫХ НАНОСТРУКТУР

Аннотация. *В данной работе на основе теоретического, численного и экспериментального подходов проанализировано влияние параметров лазера и материала на формирование индуцированных лазером 3D графеновых наноструктур на полиимидной (ПИ) подложке. Взаимодействие лазера с полиимидом моделировалось в среде COMSOL Multiphysics методом конечных элементов (МКЭ), с помощью которого были оценены поглощение лазерной энергии, распространение тепла и пространственно-временная эволюция температуры поверхности. В модели учтена температурная зависимость теплопроводности, теплоёмкости, плотности и коэффициента оптического поглощения полиимида. Для режима фемтосекундного лазера скорость сканирования исследовалась в диапазоне 0,05–0,20 м/с, при этом установлено, что снижение скорости сканирования приводит к накоплению тепла и повышению максимальной температуры поверхности с 2400 К до 2600 К. Также были сопоставлены режимы с коэффициентом поглощения A = 0,7; 0,8 и 0,9, при этом значение A ≈ 0,8 определено как оптимальный режим с точки зрения качества формирования графена, пористости и термической стабильности. Полученные численные результаты были сопоставлены с данными SEM и рамановской спектроскопии, а также с результатами измерения электрического сопротивления индуцированного лазером графена (LIG), что показало возможность целенаправленного формирования структуры 3D графена посредством управления параметрами лазера.*

Ключевые слова: *индуцированный лазером графен, 3D графен, полиимид, фемтосекундный лазер, COMSOL Multiphysics, МКЭ, теплоперенос, поглощение лазерного излучения, скорость сканирования, рамановская спектроскопия, SEM.*

INFLUENCE OF LASER AND MATERIAL PARAMETERS ON THE SYNTHESIS OF 3D GRAPHENE NANOSTRUCTURES

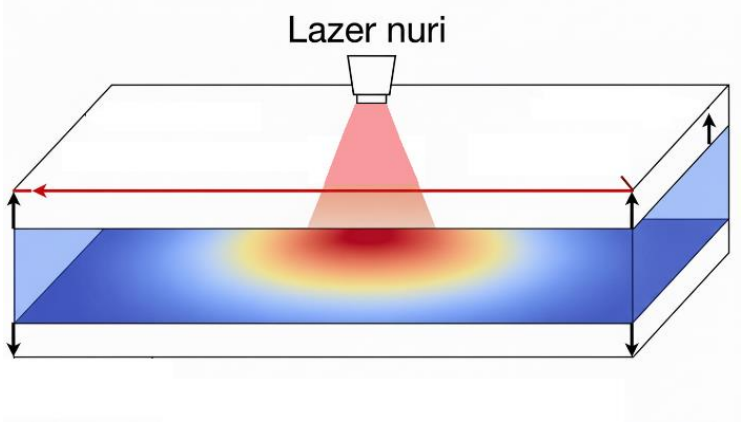
Abstract. *This study analyzes the influence of laser and material parameters on the formation of laser-induced 3D graphene nanostructures on a polyimide (PI) substrate, based on theoretical, numerical, and experimental approaches. The laser–polyimide interaction was modeled in the COMSOL Multiphysics environment using the finite element method (FEM), through which the absorption of laser energy, heat*

propagation, and the spatiotemporal evolution of the surface temperature were evaluated. The model accounted for the temperature dependence of the polyimide's thermal conductivity, heat capacity, density, and optical absorption coefficient. For the femtosecond laser regime, the scanning speed was investigated in the range of 0.05–0.20 m/s, and it was established that a decrease in scanning speed leads to heat accumulation and an increase in the maximum surface temperature from 2400 K to 2600 K. Furthermore, absorption coefficient regimes of A = 0.7, 0.8, and 0.9 were compared, and A ≈ 0.8 was identified as the optimal regime in terms of graphene formation quality, porosity, and thermal stability. The obtained numerical results were correlated with SEM and Raman analyses, as well as with electrical resistance measurements of the laser-induced graphene (LIG), demonstrating the possibility of purposefully controlling 3D graphene structure formation through laser parameters.

Keywords: *laser-induced graphene, 3D graphene, polyimide, femtosecond laser, COMSOL Multiphysics, FEM, heat transfer, laser absorption, scanning speed, Raman spectroscopy, SEM.*

Kirish. Grafen va uning uch o‘lchamli g‘ovakli nanostrukturalari yuqori elektr o‘tkazuvchanligi, katta solishtirma sirt maydoni, mexanik mustahkamligi va egiluvchanligi sababli energiya saqlash qurilmalari, sensorlar va egiluvchan elektronika uchun eng istiqbolli funksional materiallardan biri hisoblanadi. Lazer-induksiyalangan grafen (LIG) texnologiyasi polimer yuzasida grafensimon g‘ovakli strukturalarni bir bosqichda, maskasiz va to‘g‘ridan-to‘g‘ri hosil qilish imkonini beradi [1-3]. Biroq LIG sifati lazer quvvati, impuls davomiyligi, energiya zichligi, skanerlash tezligi va lazer nuri diametri bilan bir qatorda polimerning optik yutilishi va termofizik xossalariga ham kuchli bog‘liq. Bunday ko‘p parametrli, ko‘p fizikali jarayonni faqat tajriba yo‘li bilan optimallashtirish vaqt va resurs talab qiladi, shu sababli lazer-material tizimini sonli modellashtirish optimal texnologik rejimlarni oldindan aniqlashning samarali vositasiga aylanadi [4-6].

Tadqiqot usuli. Tadqiqotda polimid substratida lazer ta’sirida yuzaga keladigan termik jarayonlar COMSOL Multiphysics dasturida chekli elementlar usuli (FEM) asosida modellashtirildi. Lazer energiyasining materialda yutilishi Beer-Lambert qonuni bilan, issiqlik tarqalishi esa Furye issiqlik o‘tkazuvchanlik tenglamasi bilan tavsiflandi; lazer nurlanishi hajmiy (fs rejim) va sirt (ms rejim) issiqlik manbayi sifatida qaraldi. Modellashtirishda polimid qatlamining qalinligi 168 mkm, zichligi 1400 kg/m³ deb olindi, uning issiqlik o‘tkazuvchanligi, issiqlik sig‘imi va optik yutilish koeffitsiyentining haroratga bog‘liq empirik ifodalari (Ruan va boshqalar, 2018 asosida) hisobga olindi. Femtosoniyali lazer uchun 250 fs impuls davomiyligi, 10 kHz takrorlanish chastotasi va 100-150 mkm lazer dog‘i diametri, ayrim hisoblarda esa 100 mkJ impuls energiyasi va 0,2 m/s gacha skanerlash tezligi qo‘llanildi. Tadqiqotda SEM va Raman spektroskopiyasi, shuningdek, SMU asosidagi ikki nuqtali elektr qarshilikni o‘lchash usuli olingan sonli natijalarni eksperimental jihatdan baholash uchun qo‘llanildi.

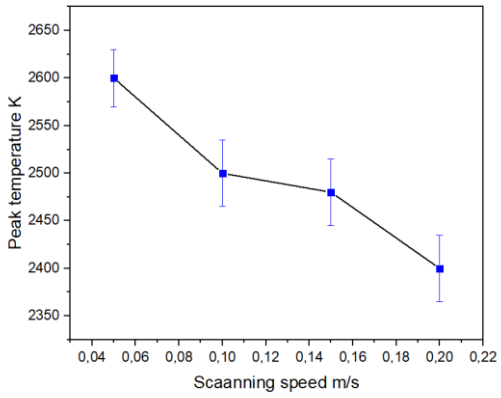


1-rasm. Lazer nurlanishining polimid sirtida issiqlik manbayi sifatida modellashtirilishining sxematik ko‘rinishi

Modelning asosiy g‘oyasi lazer energiyasini lokal issiqlik manbayi sifatida berish va uning material ichida tarqalishi natijasida yuzaga keladigan harorat maydonini aniqlashdan iborat. Bu yondashuv lazer quvvati, skanerlash tezligi va yutilish koeffitsiyentining termik ta’sir zonasiga ta’sirini miqdoriy baholash imkonini beradi.

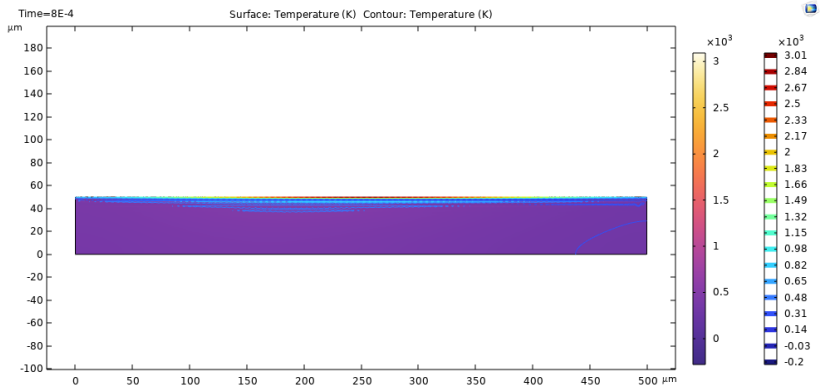
Asosiy natijalar. Vaqtga bog‘liq COMSOL simulyatsiyalari femtosoniyali lazer skanerlash tezligining harorat maydonining fazoviy va vaqtinchalik evolyutsiyasini qanday boshqarishini ko‘rsatdi: skanerlash tezligi 0,05 m/s dan 0,20 m/s gacha oshganda, yuzadagi maksimal harorat taxminan 2600 K dan 2400 K gacha muntazam ravishda pasaydi (2-rasm), oraliq nuqtalarda esa 0,10 m/s da ≈2500 K va 0,15 m/s da ≈2480 K qiymatlar qayd etildi. Bu tendensiya skanerlash tezligini LIG hosil bo‘lish jarayonining asosiy boshqaruvchi texnologik parametrlaridan biri sifatida ko‘rsatadi: past tezliklarda lazer-material o‘zaro ta’sir

vaqti uzayib, ketma-ket impulslar orasida material to‘liq sovib ulgurmaydi, natijada issiqlik kumulyativ ravishda to‘planadi va sirt harorati polimiddan olingan grafen uchun xarakterli 2500-3500 K grafitlanish oynasiga yaqinlashadi yoki unga tushadi. Yuqori skanerlash tezliklarida esa energiya to‘planishi kamayib, cho‘qqi harorat grafitlanish oynasining pastki chegarasidan pastda qoladi, bu esa nisbatan yupqaroq va nuqsonliroq grafen qatlami hosil bo‘lishiga olib keladi. Shu bilan birga, eng past tezlikda (0,05 m/s) issiqlik ta’sir zonasining kengayishi va mahalliy qizib ketish yoki ablyatsiya xavfining ortishi ham kuzatildi - demak, grafen sifati va substratning termik shikastlanishi o‘rtasida optimal texnologik oyna mavjud.



2-rasm. Skanerlash tezligining maksimal sirt haroratiga ta’siri: 0,05-0,20 m/s diapazonida Tmax ning monoton pasayish tendensiyasi

Polimidning lazer nurlanishini yutish koeffitsiyenti (A) ham alohida boshqaruvchi parametr sifatida o‘rganildi. A = 0,7 holatida yutilgan energiya miqdori ayrim zonalarda grafitlanish uchun yetarli bo‘lmay qoladi, struktura yetarlicha rivojlanmaydi. A = 0,8 da lazer energiyasining 80 foizi yutilib, karbonizatsiya va uch o‘lchamli g‘ovak grafen tarmog‘i shakllanishi uchun eng maqbul muvozanat kuzatiladi: polimer tarkibidan ajralayotgan CO, CO_2, H_2 va N_2 gazlari material ichida mikrokanallar hosil qilib, yuqori g‘ovaklikka ega, nisbatan kam nuqsonli struktura shakllanishiga xizmat qiladi. A = 0,9 da esa grafitlanish darajasi eng yuqori bo‘lsa-da, ortiqcha qizish tufayli lokal ablyatsiya va strukturaviy nuqsonlar ehtimoli oshadi. Shunga muvofiq, uzluksiz (millisekund) lazer rejimida ham 1,0 J/sm² energiya oqimida sirt harorati 2100-2200 K ga yetib, grafen hosil bo‘lishi uchun yetarli fizik sharoit yaratilishi ko‘rsatildi (3-rasm).

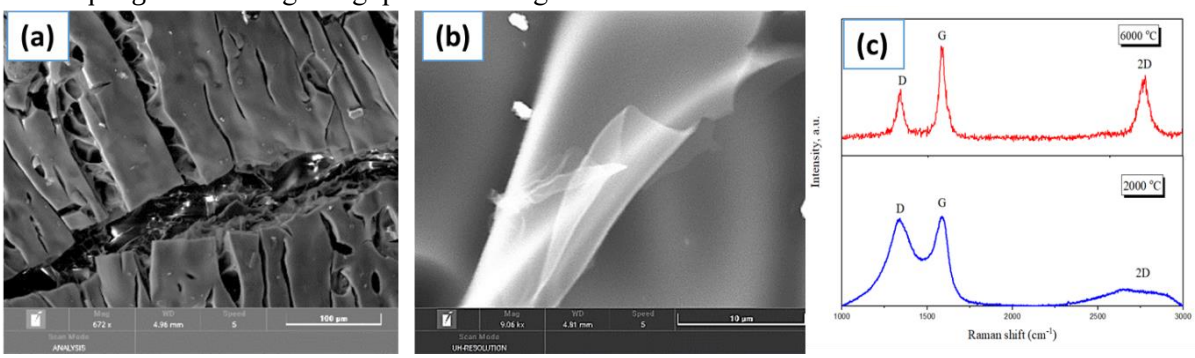


3-rasm. COMSOL Multiphysics hisoblashida lazer ta’siridagi polimid qatlamining harorat maydoni taqsimoti

Sonli modelda materialning issiqlik o‘tkazuvchanligi, issiqlik sig‘imi, zichligi va optik yutilish koeffitsiyentining haroratga bog‘liq o‘zgarishlarini hisobga olish harorat maydoni va issiqlik gradientlarini aniqroq tavsiflash imkonini berdi. Xususan, polimidning issiqlik sig‘imi harorat ~900-950 K ga yetganda maksimal qiymatga (~2080 J/(kg*K)) erishib, undan keyin pasayadi, bu esa polimidda fazaviy yoki strukturaviy o‘zgarishlarning sodir bo‘lishidan dalolat beradi. Bu esa lazer parametrlaridan kelib chiqib grafen hosil bo‘lish shartlarini oldindan baholash uchun modeldan foydalanish imkonini yaratadi.

Eksperimental tasdiq. Sonli modellashtirish natijalari SEM va Raman spektroskopiyasi bilan taqqoslangan. CO_2 va Yb:YAG lazer nurlari yordamida sintezlangan ko‘p qatlamli va bitta qatlamli LIG namunalarining SEM mikrofotosuratlarida o‘zaro bog‘langan, g‘ovakli uglerod skeleti kuzatildi, bu esa uch o‘lchamli grafen tarmog‘ining rivojlanganligini tasdiqladi. Raman spektrlarida D, G va 2D zonalarining mavjudligi grafensimon uglerod strukturasining shakllanishini tavsiqladi (4-rasm). Femtosoniyali lazer

plazmasining ~5000 K gacha yetadigan yuqori haroratiga qaramay, polimidning o‘zi bir necha yuz darajali haroratda qolishi past nuqsonli grafen qatlamini hosil qilish uchun yetarli emasligi aniqlandi; shu sababli nuqson zichligini kamaytirish uchun vakuumda (500 °C, 45 daqiqa, suyuq azot bug‘i muhitida) qo‘shimcha tavlash usuli qo‘llanildi, bu esa qiyosiy Raman tahlilida D/G nisbatining kamayishi va 2D cho‘qqisining kuchayishi orqali grafen tarmog‘ining qisman tiklanganini ko‘rsatdi.



4-rasm. CO_2 va Yb:YAG lazer nurlari yordamida sintezlangan ko‘p qatlamli (a) va bitta qatlamli (b) grafenning SEM mikrofotosurati hamda mos Raman spektrlari (c)

LIG ning elektr xossalari SMU asosidagi ikki nuqtali o‘lchash usuli (5 V ochiq zanjir kuchlanishida) yordamida baholandi. Olingan natijalarga ko‘ra, femtosoniyali lazer skanerlash sonining ortishi bilan LIG ning elektr qarshiligi izchil pasayish tendensiyasini namoyon qildi: ikki marta skanerlashda qarshilik taxminan 60 Om/sm ni tashkil etsa, to‘rt marta skanerlashda ~45 Om/sm, olti marta skanerlashda ~20 Om/sm gacha, o‘nta ketma-ket skanerlashda esa ~10 Om/sm gacha pasaydi. Bu natija qo‘shimcha skanerlashlar grafen qatlamlari orasidagi bog‘lanishni mustahkamlab, umumiy o‘tkazuvchanlikni oshirishini tasdiqlaydi. Shuningdek, 40 mm/s skanerlash tezligida ketma-ket ablyatsiyalangan chiziqlar orasidagi masofaning kamayishi ham qarshilikning pasayishiga ijobiy ta’sir ko‘rsatishi aniqlandi.

Xulosa. Lazer nurlanishi ta’sirida polimid substratida 3D grafen nanostrukturalarining shakllanishi lazer energiyasining yutilishi, issiqlik tarqalishi, piroliz, karbonizatsiya va grafitlanish bilan bog‘liq ko‘p fizikaviy jarayon ekanligi ko‘rsatildi. COMSOL Multiphysics asosida ishlab chiqilgan model lazer parametrlarini, xususan, skanerlash tezligi va optik yutilish koeffitsiyentini - harorat maydoni bilan bog‘lash imkonini berdi. 0,05-0,20 m/s skanerlash tezliklari uchun maksimal haroratning mos ravishda taxminan 2600-2400 K oralig‘ida o‘zgarishi aniqlandi. Yutilish koeffitsiyenti uchun A ≈ 0,8 rejimi grafen hosil bo‘lish sifati, g‘ovaklik va termik barqarorlik nuqtayi nazaridan maqbul deb baholandi. Natijalar SEM, Raman tahlillari hamda elektr qarshilikni o‘lchash natijalari bilan bog‘lanib (skanerlash soni 2 dan 10 gacha ortganda qarshilikning ~60 Om/sm dan ~10 Om/sm gacha pasayishi), lazer parametrlarini oldindan tanlash va 3D LIG sintezini boshqarish uchun ilmiy asos yaratdi.

ADABIYOTLAR:

1. H. Kumar, et al. Graphene Properties, Synthesis and Applications: A Review. AIMS Materials Science, 2022.

2. M. Romero, et al. Three-Dimensional (3D) Laser-Induced Graphene: Structure, Properties, and Application to Chemical Sensing. ACS Applied Materials & Interfaces, 2021.

3. S. Chen, et al. Laser-Induced Graphene for Bioelectronics and Soft Actuators. Advanced Functional Materials, 2021.

4. X. Liu, et al. Laser-Induced Graphene Structures: From Synthesis and Applications to Future Prospects. Materials Today, 2023.

5. R. Murray, et al. Design of Experiments and Optimization of Laser-Induced Graphene. ACS Omega, 2021.

6. X. Ruan, R. Wang, J. Luo, Y. Yao, T. Liu. Experimental and Theoretical Study of Thermal Properties of Polyimide. Materials & Design, 2018.

UO‘K 621.373.8

NANOSEKUNDLI IMPULSLI LAZER ABLATSIYASI YORDAMIDA METALL SIRTLARINI QORAYTIRISH

Shamuratov Shuhrat Baxtiyar o‘g‘li,
Abu Rayhon Beruniy nomidagi Urganch davlat universiteti
“Elektrotexnika va energetika” kafedrasi o‘qituvchisi
Shuhratbek7434@gmail.com
O‘rinov Bog‘ibek G‘ayrat o‘g‘li,
Abu Rayhon Beruniy nomidagi Urganch davlat universiteti
“Elektrotexnika va energetika” kafedrasi doktoranti
bogibek.o@urdu.uz

Annotatsiya. *Biz metall sirtlarining qaytaruvchanligini (reflektivligini) kamaytirish uchun nanosekundli impulsli lazer ablatsiyasidan foydalandik. Qaytaruvchanlikning o‘zgarishi turli lazer skanerlash qadamlarida (ya’ni turli impuls zichligi darajalarida) o‘rganildi, olingan tendensiyalar esa ablatsiya tufayli yuzaga kelgan morfologik va tarkibiy o‘zgarishlar bilan taqqoslandi. Mis namunalarida shu narsa aniqlandiki, sirtning qorayishiga lazer bilan bevosita o‘yish emas, balki sovuyotgan ablatsiya bulutida hosil bo‘lib, keyin sirtga qayta tushib qolgan nanoklasterlar va nanozarrachalar sabab bo‘lgan. Model hisob-kitoblarimiz mikro va nano-strukturalarning, shuningdek, mis oksidlarining ablatsiyalangan mis sirtining qaytaruvchanligini kamaytirishdagi rolini tasdiqladi.*

Kalit so‘zlar: *lazer ablatsiyasi, sirt modifikatsiyasi, lazer yordamida qoraytirish, nanostrukturalar, past qaytaruvchanlik, mis (II)-oksidi (CuO), nanozarrachalar, Nd:YAG lazer, sirt morfologiyasi, qaytaruvchanlik spektri.*

DARKENING OF METAL SURFACES BY NANOSECOND PULSED LASER ABLATION

Abstract. *Nanosecond pulsed laser ablation was applied to reduce the reflectivity of metal surfaces. Changes in reflectivity were studied for different laser scanning pitches (i.e., different pulse-density levels), and the observed trends were compared with the morphological and compositional changes induced by ablation. For copper samples, it was found that surface darkening was not caused by direct laser etching, but by nanoclusters and nanoparticles formed in the cooling ablation plume, which subsequently redeposited onto the surface. Model calculations confirmed the role of micro- and nanostructures, as well as copper oxides, in reducing the reflectivity of the ablated copper surface.*

Keywords: *laser ablation, surface modification, laser darkening, nanostructures, low reflectivity, copper (II) oxide (CuO), nanoparticles, Nd:YAG laser, surface morphology, reflectivity spectrum.*

ПОТЕМНЕНИЕ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛОВ ПРИ ПОМОЩИ НАНОСЕКУНДНОЙ ИМПУЛЬСНОЙ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ

Аннотация*. Для снижения отражательной способности металлических поверхностей была применена наносекундная импульсная лазерная абляция. Изменение отражательной способности изучалось при различных шагах лазерного сканирования (то есть при разных уровнях плотности импульсов), а полученные закономерности сопоставлялись с морфологическими и структурными изменениями, вызванными абляцией. Установлено, что на образцах меди потемнение поверхности вызвано не непосредственным лазерным травлением, а наночастицами и нанокластерами, образующимися в остывающем абляционном облаке и впоследствии оседающими на поверхность. Модельные расчёты подтвердили роль микро и наноструктур, а также оксидов меди, в снижении отражательной способности абляционной поверхности меди.*

Ключевые слова: *лазерная абляция, модификация поверхности, лазерное потемнение, наноструктуры, низкая отражательная способность, оксид меди (II) (CuO), наночастицы, Nd:YAG лазер, морфология поверхности, спектр отражения.*

Kirish. So‘nggi yillarda yorug‘lik yutilishini maksimal darajaga yetkazadigan sirt-modifikatsiyalangan materiallarga bo‘lgan talab sezilarli darajada oshdi. Bunday yuqori yutuvchanlikka ega, qoraytirilgan materiallar detektorlar samaradorligini oshirishdan tortib, quyosh batareyalari samaradorligini

yaxshilashgacha, harbiy kamuflyaj va hashamatli mahsulotlarda estetik maqsadlarda foydalanishgacha bo‘lgan turli sohalarda qo‘llanilmoqda. Talabning bunday o‘sishi sirtni qoraytirish texnikalari bo‘yicha keng qamrovli tadqiqotlarni va bu xususiyatlarga erishishning innovatsion usullarini ishlab chiqishni rag‘batlantirdi. Bundan tashqari, lazer ablatsiyasi orqali sirtni modifikatsiya qilish nafaqat aniq material olib tashlash uchun, balki issiqlik o‘tkazuvchanligi, optik va morfologik xususiyatlarni nozik sozlash uchun ham istiqbolli yondashuv bo‘lishi mumkin, xususan, tibbiy qurilmalar, energiya saqlash tizimlari va mikrostrukturalangan optik komponentlarni ishlab chiqishda ko’rish mumkin [1].

Bunday yondashuvlardan biri anodli oksidlash jarayoni bo‘lib, u po‘lat sirtlarini qoraytirish uchun qo‘llanilgan va natijada korroziyaga qarshi xususiyatlar hamda tashqi ko‘rinish yaxshilangan. Titan va uning qotishmalarini qoraytirishga ham e'tibor qaratilgan bo‘lib, bunda kerakli sirt xususiyatlariga erishish uchun kimyoviy usullar qo‘llanilgan [2]. Lazer aniqlik texnikalaridan foydalanish materiallar chidamliligini oshirishga yordam berishini ko‘rsatilgan, bu esa nanostrukturalarning qoplamalar shakllanishiga ta’sirini tushunish uchun ham dolzarbdir [8]. Plazma asosidagi texnikalardagi yutuqlar ham titan dioksidi plyonkalarini qoraytirish usullarini rivojlantirishga hissa qo‘shdi [3]. Bundan tashqari, alyuminiy plastinkalar ustidagi bir va ikki qatlamli interferensiya qoplamalaridan foydalanish yuqori yutuvchanlikka ega rangli bo‘yoq qoplamalarini yaratishga olib keldi [4]. Mis substrati ustida yuqori yutuvchanlikka ega CuO qatlamini o‘stirish uchun kimyoviy usulni ishlab chiqilgan, bu esa samarali qoraytirilishi mumkin bo‘lgan materiallar doirasini yanada kengaytirdi [5].

Yuqoridagi usullarning kamchiligi shundaki, ularning ko‘pchiligi material uchun o‘ziga xos bo‘lib, ekologik jihatdan har doim ham qulay emas. Lazerlar o‘zining ko‘p qirraliligi, foydalanishning qulayligi va kontaktsiz ishlash xususiyatlari tufayli sirtni qoraytirish uchun, ayniqsa, istiqbolli vosita sifatida qo‘llanilmoqda. Femtosekundli mikroishlov berish yuqori yutuvchanlikka ega sirt strukturalarini yaratish uchun qo‘llanilgan [9], nanosekundli lazer ablatsiya texnikasi esa nikel va zanglamaydigan po‘lat sirtlarida yutilishni kuchaytiruvchi strukturalar hosil qilish uchun ishlatilgan [6, 7]. Titan qotishmasini femtosekundli lazer bilan teksturalash uning mexanik yaxlitligini saqlagan holda, mikro-nano gibrid sirt strukturalarini hosil qilish orqali antirefleksion xususiyatlarini yaxshilashi mumkinligini ko‘rsatishgan [8]. Materiallar mikrostrukturasini nozik sozlash mexanik xususiyatlarga sezilarli ta’sir ko‘rsatishini, xuddi sirtni qoraytirish kabi ko‘rsatishgan. Tadqiqotlar dinamik sharoitlarda material xatti-harakatini modellashtirish misollar keltirib o‘tgan, bu esa lazer ablatsiyasi natijasida yuzaga keladigan mikrostruktura o‘zgarishlarini tahlil qilish uchun ahamiyatlidir.

Biroq nanosekundli impulslar yordamida metallarni qoraytirish hali dastlabki bosqichda bo‘lib, bu borada qaytaruvchanlikning kamayish mexanizmi va sirtdagi struktura shakllanish jarayoni haqida ochiq savollar mavjud. Femtosekundli lazer nurlanishi holatida optik xususiyatlarning o‘zgarishi va sirt morfologiyasining modifikatsiyasi o‘rtasidagi bog‘liqlikni tavsiflashga qaratilgan bir qator tadqiqotlar chop etilgan bo‘lsa-da, bu jarayonlar nanosekundli rejimda batafsil o‘rganilmagan. Nanosekundli lazer impulslarining sirt qaytaruvchanligiga qanday ta’sir qilishini tushunish tegishli mikro- va nanostrukturalarning rivojlanishi hamda qaytaruvchanlik kamayishi mexanizmiga oid ochiq savollarga javob berishga yordam beradi. Ushbu tadqiqotda biz nanosekundli lazer impulslarining metallar (mis, titan va alyuminiy) sirt optik xususiyatlarini qanday modifikatsiya qilishi haqidagi ba’zi dolzarb savollarga javob berishga harakat qilamiz [1].

Tadqiqot obyekti va qo‘llanilgan metodlar. Tadqiqot obyekti sifatida duralyumin, titan va mis plastinkalari tanlandi. Namunalarning lazer bilan nurlantirilishi Nd:YAG lazer tizimi (Q-smart450, Quantel, to‘lqin uzunligi: 1064 nm, takrorlanish chastotasi: 10 Hz, impuls davomiyligi: 10 ns) impulslari yordamida amalga oshirildi. Impuls energiyasi 35 dan 196 mJ gacha o‘zgartirildi. Lazer nuri diametri 900 mkm bo‘lgan nuqtaga fokuslandi va 3, 6, 12 va 24 J/sm² lazer fluenslari (energiya zichliklari) qo‘llanildi. 10 mm × 13 mm o‘lchamli to‘rtburchak maydon ikkita qadamli dvigatel yordamida namuna metall plastinkalarni x va y yo‘nalishlarida siljitish orqali nurlantirildi. Siljish tezligini 9 mm/s dan 0,6 mm/s gacha o‘zgartirish orqali birlik yuzaga to‘g‘ri keladigan o‘rtacha lazer impulslari soni o‘zgartirildi. X va y yo‘nalishlarida 900, 450, 180, 90 va 60 mkm skanerlash qadamlari (ya’ni ketma-ket nurlantirilgan nuqtalar orasidagi masofalar) qo‘llanildi, bu esa mos ravishda 0%, 50%, 80%, 90% va 93% lateral (yon) qoplanish darajalarini beradi.

Perpendikulyar tushayotgan yorug‘lik uchun qayta ishlangan maydonlarning umumiy qaytaruvchanligi (spekulyar va sochilgan) integrallovchi sfera bilan jihozlangan UB-ko‘rinadigan skanerlovchi spektrofotometr (Shimadzu UV-2101PC) yordamida 250–800 nm to‘lqin uzunligi diapazonida o‘lchandi. Namunalar morfologiyasi Hitachi-S4700 skanerlovchi elektron mikroskopi (SEM) va Thermo Scientific Scios 2 DualBeam fokuslangan ion nurli skanerlovchi elektron mikroskopi (FIB-SEM) yordamida o‘rganildi. Morfologik tadqiqotlar uchun elektron nur qo‘zg‘atishi natijasida chiqarilgan ikkilamchi elektronlar (Vacc.=10 kV, Ie=10 μA) Everhart–Thornley detektori bilan qayd etildi. Elementlar tahlili uchun Rontec

XFlash silikon dreyf detektori va QuanTax 1.6 dasturiy ta'minotiga ega signal qayta ishlash bloki bilan energodispersion rentgen spektroskopiyasi (EDX) qo'llanildi. Lazer bilan qayta ishlangan sirtlarning kimyoviy holati XR50 ikki anodli rentgen manbayi va Phoibos 150 yarim sferik analizatorga ega Specs XPS asbobi yordamida ham o'rganildi. Namunalar Al Kα nurlanishi bilan qo'zg'atildi. O'lchov davomida kamera bosimi $1 \cdot 10^{-8}$ mbardan past bo'ldi. Lazer bilan qayta ishlangan namunalar sirtining zaryadlanishini bartaraf etish uchun (mis namunalaridan tashqari) o'lchov paytida elektron neytrallovchi qurilma (flood gun) ishlatildi.

Natijalar va ularning tahlili. Nurlanish uchala metall plastinkaning ham sirtida ko'rinadigan o'zgarishlarga sabab bo'ldi. Biroq qorayish faqat mis plastinkalarida kuzatildi. Duralyumin kulrang tusga, titan esa och ko'k-yashil tusga kirdi.

Duralyumin

Elektron-mikroskopik tadqiqotlar shuni ko'rsatdiki, nuqtalar qoplanmagan va yarim qoplangan skanerlashlarda (450 mkm skanerlash qadami) lazer bilan ishlov berish nurlantirilgan nuqtalarning markaziy qismidagi sirt mikro-notekisligini silliqlagan. Skanerlash qadamini kamaytirish (ya'ni sirt impuls zichligini oshirish) orqali dastlab mikrostrukturali sirt hosil bo'lgan, keyin esa eng kichik qadamlarda mikrostrukturalar ustida nozik nanostrukturalar ham shakllangan. Qaytaruvchanlikdagi o'zgarishlar va sirt strukturasini taqqoslasak, silliqlangan sirtning qaytaruvchanligi ortishini, mikrostrukturali hamda mikro va nanostrukturali sirtlarning qaytaruvchanligi esa kamayishini ko'rish mumkin.

Titan

Titan namunalarida qaytaruvchanlikning ancha murakkab o'zgarishi kuzatildi. Lazer nuqtalari bir-biriga ustma-ust tushmagan holatda, nurlantirilgan maydonning qaytaruvchanligi asl sirt notekisligining silliqlanishi tufayli oshgan, xuddi duralyuminda kuzatilganidek. Skanerlash qadamini (450, 180 va 90 mkm gacha) kamaytirganimizda qaytaruvchanlik kamaydi, biroq eng yuqori impuls zichligida (ya'ni 60 mkm skanerlash qadamida) u yana oshdi. Qaytaruvchanlik spektrida 180, 90 va 60 mkm skanerlash qadamlari uchun 350–600 nm to'lqin uzunligi diapazonida ba'zi xarakterli cho'qqilar ham paydo bo'ldi. XPS va EDX o'lchovlariga asoslanib, biz bu cho'qqilar nurlantirilgan sirt qatlamida turli titan oksidlari (TiO_2, Ti_2O_3)) shakllanganligidan dalolat berishini aniqladik, bu esa avvalgi kuzatuvlar bilan mos keladi [2]. Cho'qqilarning joylashuvi va nisbatlari qo'llanilgan fluensga bog'liq bo'lib, bu turli titan oksidlarining miqdori qo'llanilgan fluensga bog'liqligini bildiradi.

Mis

Mis holatida nurlantirilgan sirtning qaytaruvchanligi o'rganilgan to'lqin uzunligi diapazonida keskin kamaydi. Elektron-mikroskopik tasvirlar qorayishga uchragan maydonlarda mikrostrukturalar ustida juda nozik nanostruktura hosil bo'lganini tasdiqladi. Bizning XPS va EDX o'lchovlarimiz sirtning yuqori qatlami (<1 mkm) deyarli faqat CuO dan iborat ekanligini isbotladi [5].

Misdagi qora qatlam shakllanishini o'rganish

Qora sirt qatlami shakllanishida qanday jarayonlar ishtirok etishini aniqlash uchun keyingi tajribada namuna plastinka nurlantirish davomida siljitilmadi, ya'ni faqat kichik, aniq bir maydon ablatsiyaga uchratildi. Qo'llanilgan fluens 24 J/sm² bo'lib, impulslar soni 1000 taga teng edi. Optik mikroskop tasviri shuni ko'rsatadiki, ablatsiyaga uchragan maydonning qaytaruvchanligi aslida oshgan, qorongi qism esa lazer nurlantirgan nuqta emas, balki uni o'rab turgan hudud ekan. Silliq va yaltiroq ablatsiya kraterini keng qora tasma bilan o'ralgan tor yorqin halqa qurshab olgan. SEM tasvirlari ablatsiya chuqurchasining markazi silliq ekanligini, yorqin halqa esa faqat mikrostrukturalashganligini ko'rsatadi, keng qora tasmada esa mikrostrukturalar to'liq nanostrukturalangan material bilan qoplangan.

52° burchak ostida olingan SEM tasvirlari qorongi hududda nanostrukturalangan sirtga ega tuxumsimon mikrostrukturalar borligini yanada aniqroq ko'rsatadi. Fokuslangan ion nuri (FIB) kesish usuli bilan olingan ko'ndalang kesim (FIB: Ga ion toki: 300 pA, kesim o'lchami: 5 mkm × 10 mkm × 5 mkm) tuxumsimon shakllanishlarning shoxlangan-g'ovaksimon strukturasini yanada yaqqolroq ochib berdi. Ushbu struktura xususiyatlarining qorongi sirtga sabab bo'lishi haqiqatan ham qayta tushib qolgan ablatsiyalangan zarrachalar tufayli ekanligini bilish uchun biz nurlantirishni namuna vertikal holatda turgan holda takrorladik. Bu holatda optik tasvirlarda sirtning qorayishi umuman kuzatilmadi. Faqat markazda o'yilgan chuqurcha, uni yorqin halqa va yorqin tasma o'rab turganligining kuzatilishi shuni ko'rsatadiki, ablatsiyalangan nanozarrachalar - bu holatda ular sirtga qaytib tusha olmagani sababli - sirtning qorayishida muhim rol o'ynaydi. SEM tadqiqotlari bu keng yorqin halqada faqat sachragan va qotib qolgan eritilgan sachramalar va tomchilarni ko'rsatdi, nanostrukturalar esa umuman topilmadi. Bu keng yorqin halqada qorayish va nanostrukturalarning yo'qligi sirtning qorayishi va nanostruktura qoplamasi bir-biri bilan bog'liq hodisalar ekanligini va ular ablatsiyalangan zarrachalarning qayta tushib qolishi bilan bog'liqligini ko'rsatadi.

Ta’sirlangan hududlardagi mis va kislorodning atom nisbati gorizontal holatda ablatsiyaga uchratilgan namunaning EDX tahlili orqali aniqlandi. Biz ablatsiya chuqurchasi va unga yaqin joydagi sirt asosan sof misdan iborat ekanligini, keng qora hududdagi sirt qatlami esa oksidlanganligini aniqladik. Olingan taxminan 1:1 bo‘lgan $Cu{:}O$ atom nisbati qorongi hududda qora birikma bo‘lgan CuO mavjudligidan dalolat beradi. Vertikal nurlantirilgan namuna uchun oksidlangan hudud torroq bo‘ldi, $Cu{:}O \approx 1{:}1$ nisbati esa faqat ablatsiya chuqurchasidan uzoqroqda aniqlandi.

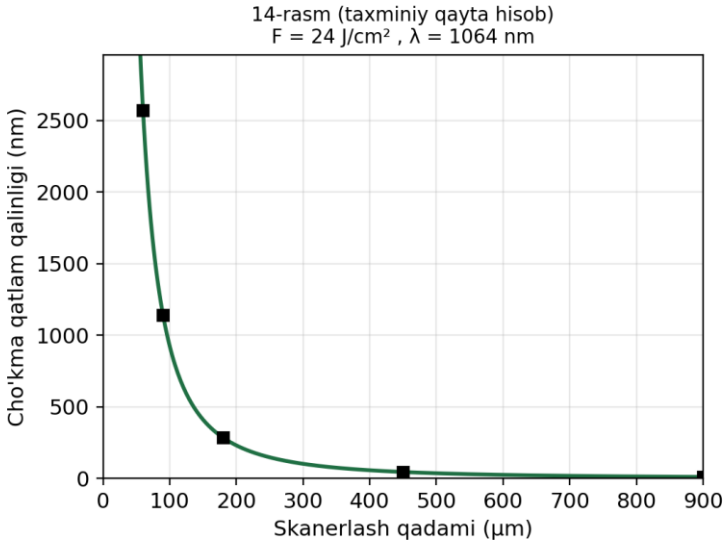
Dastlabki natijalar qorayish qayta tushib qolayotgan ablatsiyalangan zarrachalar tufayli ekanligini ko‘rsatgani sababli, biz ushbu zarrachalarni o‘rganishga qaror qildik. Mis namunasi bir nuqtada uzluksiz lazer impulslari bilan nurlantirildi, ablatsiyalangan zarrachalar esa Skanerlovchi Mobillik Zarracha Separatoriga (SMPS) yo‘naltirildi va ablatsiyalangan zarrachalarning o‘lchami taqsimoti o‘lchandi. Qo‘llanilgan energiya zichligi 24 J/sm² bo‘lib, oqim tezligi 0,32 L/min ni tashkil etdi. Zarrachalarning katta qismi taxminan 100 nm o‘lchamda edi. Biroq o‘lchov taqsimoti egri chizig‘ining boshlang‘ich qismidagi ozgina o‘sish shuni ko‘rsatadiki, ablatsiyalangan bulutda asbobning o‘lchash chegarasi (15 nm) tufayli aniqlanmagan sezilarli miqdordagi kichikroq zarrachalar. Klasterlar bo‘lgan bo‘lishi mumkin.

Muhokama. Yuqoridagi bir nuqtali lazer ablatsiya tajribalari shuni ko‘rsatdiki, lazer bilan ablatsiyalangan sirtda uchta konsentrik hudud ajratib ko‘rsatilishi mumkin: yorqin va silliq ablatsiya krateri, mikrostrukturalangan o‘tish hududi va nozik nanostrukturalarga ega keng va qora atrofdagi hudud. Shunday qilib, biz mis sirtining qorayishi bevosita lazer bilan o‘yish natijasi emas, balki olib tashlangan materialning qaytib tushishi natijasi ekanligini aniqladik. Bu hududlarning shakllanishini lazer ablatsiya jarayoni orqali tushuntirish mumkin. Ablatsiya davomida lazer ta’siri nishon sirtida mahalliy va tez harorat ko‘tarilishiga hamda bug‘lanuvchi atomlar va issiq nanozarrachalardan iborat ablatsiya bulutining portlashiga olib keladi. Nurlantirilgan hajmning bir qismi keyin eriydi va eritilgan tomchilarning ba’zilari fotomexanik effektlar tufayli sachrab chiqadi. Sovigan va qotgan tomchilarni ablatsiya krateri chetida va uning atrofida topish mumkin, ular mikrostrukturalangan hudud hosil qiladi. Ablatsiya plazmasi sovigan sari, atom klasterlari va nanozarrachalari agregatsiya orqali hosil bo‘ladi. Bu nanoklasterlar yoki nanozarrachalar oxir-oqibat sirtga tushadi va unga yopishib qoladi, mikrostrukturalarga nanostrukturali qoplama qo‘shadi. Nanozarrachalar eritilgan tomchilarga qaraganda ancha uzoqroq hududlarni ham qoplashi mumkin.

Nishon sirtini lazer nuri bilan skanerlashimizda ketma-ket lazer nuqtalari qisman ustma-ust tushishi mumkin, skanerlash yo‘nalishida esa keyingi zarba avvalgi hosil bo‘lgan strukturani yo‘q qiladi. Biroq boshqa yo‘nalishda (skanerlash orqasida) hosil bo‘lgan mikro va nanostruktura doimo saqlanib qoladi va nanostruktura qoplamasi kuchayib boradi. Ana shu tarzda sirt tobora qorayadi va qaytaruvchanligi kamayadi.

Hodisani modellashtirish uchun biz orqaga tushgan material tomonidan hosil qilingan qora qatlam qalinligini aniqlashga kirishdik. Misda lazer nurining kirish chuqurligini bilgan holda, Ber-Lambert qonuni va $E = c * m * dT$ tenglamasidan foydalanib hamda nishonning issiqlik o‘tkazuvchanligini hisobga olmagan holda, biz 24 J/sm² fluensda nurlantirilgan materialning harorati 34 nm chuqurlikkacha qaynash nuqtasidan (Tb, Cu =2835 K), 34–40 nm chuqurlikkacha esa erish nuqtasidan (Tm, Cu =1358 K) oshib ketishini hisobladik. Bu shuni anglatadiki, bir zarbada olib tashlangan materialning 85% bug‘lanadi, 25% esa eritilgan material sifatida sachraydi. Umuman olganda, bitta nurlantirish materialni 40 nm chuqurlikkacha olib tashlaydi. Hisoblangan 40 nm ablatsiya chuqurligi kraterlarning profilometriya o‘lchovlaridan chiqarilishi mumkin bo‘lgan natijadan 20–30 nm kamroq bo‘lib, bu 60–70 nm/impuls ablatsiya tezligini ko‘rsatgan edi. Bu farqni hisob-kitoblarda issiqlik o‘tkazuvchanligi hisobga olinmagani bilan tushuntirish mumkin. Bug‘dan metall ionlari, atomlari va nanozarrachalarining kichik klasterlari hosil bo‘ladi, ular sirtga qaytib tushadi va kuzatilgan nanostrukturalarni hosil qiladi. Erigan holda chiqarilgan material (tomchilar, sachramalar) kraterning atrofida joylashadi va qotadi. Ko‘p zarrachali modeli koalessensiya kinetikasini o‘rganildi, bu esa zarrachalarni qaytarib olish uchun ham qiziqarli hodisadir [12].

Olib tashlangan material hajmi profilometriya bilan o‘lchangan ablatsiya krateri o‘lchamlaridan aniqlandi. Qora hudud maydonini bilgan holda, biz orqaga tushgan zarrachalar tomonidan hosil qilingan qatlam qalinligi har bir lazer impulsi uchun taxminan 2,9 nm ekanligini aniqladik. Bu, albatta, yuqori baho hisoblanadi, chunki biz bug‘langan materialning barchasi nishon sirtiga qaytib tushadi va uning ustida bir tekis taqsimlanadi deb faraz qilamiz. Turli skanerlash qadamlarida berilgan sirt elementini ablatsiyaga uchratadigan lazer zarbalari sonini aniqlash uchun biz namunaning lazer bilan skanerlanishini raqamli modellashtirdik. Keyin biz qo‘llanilgan skanerlash qadamlari (ya’ni qo‘llanilgan impuls zichliklari) uchun cho‘kma qatlam qalinligini hisobladik (1-rasm).



1-rasm. Cho‘kma qatlam qalinligining skanerlash qadamiga bog‘liqligi, F=24 J/sm²

Xona haroratidan 900 °C gacha bo‘lgan havoda misning oksidlanishiga oid tadqiqotlarga e'tibor qaratilgan [11]. Ular 100–500 °C da korroziya mahsulotlari parda-parda bo‘lib, qalinligi 100 °C da 50 dan 500 °C da mikrometrlargacha o‘zgarishini aniqlashgan. 800 °C da to‘r-tola shaklidagi g‘ovak to‘qimalar hosil bo‘lgan. Oksidlanish mahsulotlari Cu_2O va CuO bo‘lgan. 800 °C da mis sirtida ikki qatlam rivojlangan: ichki Cu_2O qatlami va Cu_2O hamda CuO dan iborat tashqi qatlam. Shunga muvofiq va harorat hisob-kitoblarimiz hamda zarracha o‘lchami taqsimoti o‘lchovlarimizga asoslanib, ablatsiya bulutida bug‘langan mis atomlari va atom guruhlari yuqori harorat va atrofdagi havoning kislorod tarkibi tufayli yuqori darajada oksidlangan deb taxmin qilish mumkin. Birlik hajmdagi mis va kislorod atomlarining nisbati Cu_2O ustidan CuO ning ustunligiga olib keladi. Bu bizning EDX va XPS o‘lchovlarimiz bilan ham tasdiqlandi.

Shularga asoslanib, biz orqaga tushgan zarracha qatlamining shakllanishi va mis uchun kuzatilgan qaytaruvchanlik kamayishi o‘rtasidagi bog‘liqlikni tavsiflovchi ikkita model ishlab chiqdik. Birinchi modelda biz qorayishga javobgar sirt qatlamining nanostrukturalangan tabiatini emas, faqat uning qalinligini hisobga oldik. Qatlam shakllanishi uchun quyidagi farazlarni qabul qildik: Agar tushayotgan lazer impulsi allaqachon bir yoki bir necha qatlam qayta tushgan zarrachalar bilan qoplangan hududga tushsa, bu qatlam olib tashlanadi va atrofdagi halqasimon hududga qayta cho‘kadi. Bu shuni anglatadiki, skanerlash davomida ketma-ketlikdagi keyingi zarbadan kelayotgan zarrachalar avvalgi zarba joyidagi qoplanmagan hududga to‘planadi. Har bir lazer impulsidan so‘ng, ablatsiyalangan zarrachalar atrofdagi halqaga bir tekis cho‘kadi. Olib tashlangan material miqdorini hisoblashda sirt tarkibi mis (ya’ni asl holat) yoki mis (II)-oksidi (ya’ni allaqachon qoplangan) ekanligi farqlanmaydi, chunki qo‘llanilgan lazer to‘lqin uzunliklarida kirish chuqurligi ikkalasida ham taxminan bir xil. Olib tashlangan materialning 100% halqasimon hududga bir tekis qayta cho‘kadi va bir jinsli, zich qatlam hosil qiladi. Cho‘kma qatlam butun qalinligi bo‘yicha sof CuO dan iborat bo‘lib, mis substratni qoplaydi.

Qaytaruvchanlik hisob-kitoblari CuO qatlami yorug‘lik tutqichi (light trap) sifatida ishlaydi deb faraz qildi. Buni tasdiqlash uchun o‘lchangan qaytaruvchanlik egri chiziqlari model hisob-kitoblari bilan taqqoslandi. Hisob-kitoblar uchun biz qaytarish jarayonini quyidagi farazlar bilan to‘rtta bosqichga bo‘ldik: Perpendikulyar tushayotgan yorug‘likning CuO qatlamidan qaytishi nolga teng. CuO qatlami orqali o‘tgan yorug‘lik intensivligi Ber-Lambert qonuni yordamida hisoblanishi mumkin:

$$T_{layer} = e^{-\alpha * l}$$

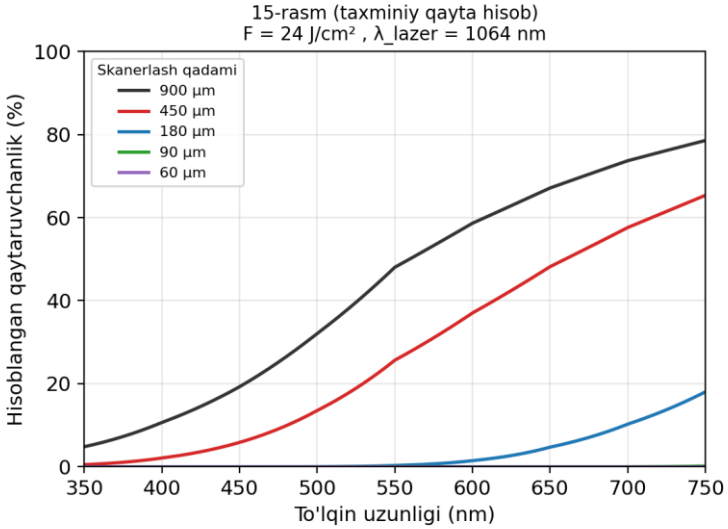
CuO qatlamining optik koeffitsiyentlari CuO qatlami/ Cu substrat interfeysida Frenel qaytishi sodir bo‘ladi:

$$R_{Cu-CuO} = \left|\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}\right|^2$$

Keyin qaytgan yorug‘lik yana CuO qatlamidan o‘tadi. Shunday qilib, nishondan olingan umumiy qaytish quyidagicha bo‘ladi:

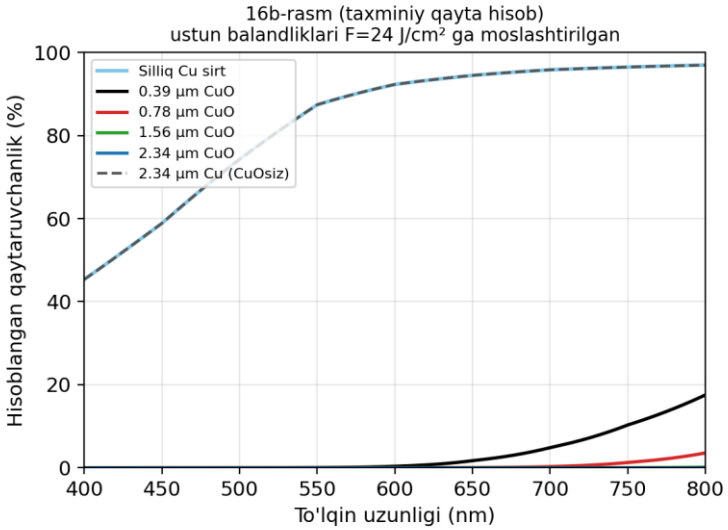
$$R_{umumiy} = e^{-\alpha * l} * \left|\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}\right|^2$$

Biz CuO – Cu tizimining qaytaruvchanligini turli skanerlash qadamlari (demak, turli CuO qatlam qalinliklari) uchun to‘lqin uzunligi funksiyasi sifatida hisobladik (2-rasm).



2-rasm. CuO– Cu tizimining hisoblangan qaytaruvchanlik spektri, λ(lazer)=1064 nm

Model va tajriba natijalari o‘rtasidagi juda yaxshi mos kelish mikro va nanostrukturalangan CuO sirtidan qaytish haqiqatan ham nolga yaqinligini tasdiqlaydi. Ikkinchi modelda biz qorayishga javobgar sirt qatlamining nanostrukturalangan tabiatini alohida hisobga oldik. Biz qaytaruvchanlikdagi o‘zgarishni Lumerical dasturiy ta’minotiga asoslangan chekli farqlar vaqt sohasi (FDTD) hisob-kitoblarini bajarish orqali kuzatdik; bu dastur materiallarning optik xususiyatlariga (sindirish ko‘rsatkichi, so‘nish koeffitsiyenti) asoslanib, strukturalangan sirtlarning qaytarish, yutish va sochilish parametrlarini aniqlashga mo‘ljallangan. FDTD usulida simulyatsiya hajmi kichik hajmlarga, ya’ni tarmoq hujayralariga (mesh cells) bo‘linadi. Simulyatsiya davomida qisqa yorug‘lik impulsining tarqalishi elektromagnit to‘lqinning vaqt evolyutsiyasini tarmoq hujayrasidan tarmoq hujayrasiga hisoblash orqali kuzatiladi. Buning uchun Maksvell tenglamalari har bir hujayrada yechiladi. Bu usul silliq sirtlarning qaytarish xususiyatlarini hisoblashga imkon beradi, natija Frenel qaytishiga mos keladi, biroq – agar simulyatsiya hududiga plazmonik xususiyatlarga ega metall struktura qo‘shilsa – usul tabiiy ravishda sirt plazmon rezonansini tavsiflaydi. Nurlantirilgan sirt Cu sirtida tasodifiy joylashtirilgan silindrlar bilan modellashtirildi. Silindrlar o‘rtacha diametri 200 nm bo‘lib, ikki qismdan iborat edi: o‘rtacha balandligi ~300 nm bo‘lgan pastki Cu qismi va balandligi 1–3 mkm oralig‘ida o‘zgaruvchan bo‘lgan yuqori CuO qismi. Simulyatsiya hajmi 10×10×7 mkm qilib saqlandi, va 45° chiziqli qutblanishga ega, nur beli radiusi 2 mkm bo‘lgan Gauss yorug‘lik manbayi qo‘llanildi. 400–800 nm spektral diapazon o‘rganildi. 3-rasm 0,5, 1, 2 va 3 mkm balandlikdagi CuO ustunlari uchun qaytaruvchanlikni to‘lqin uzunligi funksiyasi sifatida ko‘rsatadi.



3-rasm. CuO ustun balandligi bo‘yicha qaytaruvchanlik, F=24 J/sm²

Simulyatsiya natijalari mis sirtini CuO bilan qoplangan Cu silindrlar bilan qoplash sirt qaytaruvchanligini samarali kamaytirishini ko‘rsatadi. Bundan tashqari, tajriba kuzatuvlariga mos ravishda, natijalar taxminan 1 mkm qatlam qalinligida qaytaruvchanlik allaqachon nolga yaqin bo‘lib, qatlam qalinligi

ortishi bilan deyarli o‘zgarmasligini ko‘rsatadi. Nanostruktura tabiati va qora qatlamni hosil qiluvchi nanozarrachalarning kimyoviy tabiati (CuO qoplamasi) rolini ajratish maqsadida, biz sirtni faqat 3 mkm balandlikdagi sof mis ustunlari qoplagan holatni ham modellashtirdik. Bu holatda ham sirt qaytaruvchanligi sezilarli darajada kamaydi, biroq CuO ustunlarni qoplaganda kamayish yanada kattaroq bo‘ldi. Bu shuni ko‘rsatadiki, sirtni qoplovchi nanostruktura qaytaruvchanlikni kamaytirishda, shuningdek, nanostrukturani tashkil etuvchi materialning kimyoviy tarkibi ham muhim rol o‘ynaydi.

O‘lchangan va hisoblangan qaytarish spektrlarini (2 va 3-rasm) taqqoslaganda ular o‘rtasidagi moslik juda yaxshi bo‘lib, bu modellarning to‘g‘riligini isbotlaydi. Biroq har ikkala modelning cheklovi shundaki, ular SEM tasvirlarida ko‘ringan iyerarxik mikro va nanostrukturalar o‘rniga faraz qilingan geometriyadan foydalanadi (birinchi model silliq qattiq CuO dan, ikkinchisi CuO / Cu silindrlaridan foydalanadi).

Ikkita simulyatsiya modelining xulosasi shuni tasdiqlaydiki, qaytaruvchanlik kamayishining asosiy manbayi lazer bulutida hosil bo‘lgan va sirtga qayta tushib qolgan nano/mikrostrukturali CuO dir. Bizning natijalarimiz sirtning morfologiyasi (hosil bo‘lgan mikro- va nanostrukturalar) hamda kimyoviy tarkibi ikkalasi ham lazer bilan ishlov berilgan sirt qaytaruvchanligining kamayishida muhim rol o‘ynashi haqidagi umumiy kuzatuvni tasdiqlaydi. Bu, shuningdek, duralyumin va titanning qorayishi nima uchun kamroq sezilarli ekanligini ham tushuntiradi. SEM va XPS tadqiqotlari duralyumin va titan holatida hosil bo‘lgan sirt strukturasi, shuningdek, hosil bo‘lgan oksidlarning (TiO_2, Al_2O_3) optik xususiyatlari yorug‘likni tutib qolishga (light trapping) yordam bermasligini ko‘rsatdi. Ablatsiyaga uchragan, Ti va Al sirtlarida morfologik o‘zgarishlar kamroq sezilarli bo‘lib, bu metall sirtlarida ustida nanostrukturalarga ega mikrostrukturalar bilan qoplangan qorayib ketgan mis sirtida shu qadar aniq ko‘rinadigan narsani topa olmaymiz [9]. Iyerarxik mikro va nanostrukturalarning shakllanishi sirtning yorug‘likni tutib qolish xususiyatiga katta ta’sir ko‘rsatishi yaxshi ma’lum. Boshqa tomondan, Ti va Al sirtlarining kamroq sezilarli qorayishi bu metallarning ko‘zga ko‘rinadigan diapazondagi sirt oksidlarining (TiO_2, Al_2O_3) past yutish koeffitsiyentlari bilan ham bog‘liq. Kelajakda biz titan va alyuminiy sirtlarini qoraytirish uchun ishlatilishi mumkin bo‘lgan lazer tizimi va parametrlar to‘plamini izlashni davom ettirmoqchimiz.

Bizning kuzatuvlarimiz lazer nurlanishi ba’zi metallarning qaytaruvchanligini kamaytirish uchun (boshqa kimyoviy moddalar yoki qo‘shimcha ishlov berishsiz) tez va bevosita texnika bo‘lishi mumkinligini tasdiqladi. Sirtni qoraytirishga javobgar mikro va nanostrukturalar bu metall sirtlariga qo‘shimcha foydali xususiyatlarni ham berishi mumkin, masalan, suvni itarish (gidrofobiklik) va korroziyaga chidamlilik [10]. Sirt oksid qatlamining hosil bo‘lishi ham bu sirtlarning umumiy chidamliligini yaxshilashi mumkin. Quyosh kollektorlarini yoki lazer nur to‘sqichlarini ishlab chiqarish qoraytirilgan metall sirtlar uchun potensial qo‘llanilish sohalaridir. Biroq bu texnikaning bir qiyinchiligi shundaki, u barcha metallarga tatbiq etilmasligi yoki turli metallar sirtida turli strukturalar, demak turli xususiyatlar hosil qilishi mumkin.

Xulosa. Biz uchala metall sirtining (duralyumin, titan va mis) qaytaruvchanligini kamaytirish uchun nanosekundli lazer ablatsiyasini muvaffaqiyatli qo‘lladik, ammo qaytaruvchanlikning eng sezilarli kamayishiga misda erishildi. Biz qaytaruvchanlikning kamayishi lazer skanerlash parametrlariga qattiq bog‘liq ekanligini ko‘rsatdik. Ablatsiya davomida hosil bo‘lgan va sirtga qayta cho‘kkan atom, ion klasterlari va nanozarrachalari sirtning qorayishida asosiy rol o‘ynashi tasdiqlandi. Mis uchun, morfologik o‘zgarishlardan tashqari, sirtda mis (II)-oksidi hosil bo‘lishining ahamiyati ham ko‘rsatildi. Sirtning qorayish jarayoni bo‘yicha model hisob-kitoblarimiz tajriba kuzatuvlari bilan yaxshi mos keldi.

ADABIYOTLAR:

1. Hopp B., Mándity L., Homik Zs., Sámi M., Gera T., Kopniczky J., Budai J., Kondász B., Szamosvölgyi Á., Ajtai T., Hodovány Sz., Smausz T. Darkening of metal surfaces by nanosecond pulsed laser ablation // Applied Physics A. – 2025. – Vol. 131. – Art. 207. – DOI: 10.1007/s00339-025-08285-5.

2. Xie B., Gao K. Research progress of surface treatment technologies on titanium alloys: a mini review // Coatings. – 2023. – Vol. 13. – DOI: 10.3390/coatings13091486.

3. Chen X., Liu L., Liu Z., Marcus M.A., Wang W.C., Oyler N.A., Grass M.E., Mao B., Glans P.A., Yu P.Y., Guo J., Mao S.S. Properties of disorder-engineered black titanium dioxide nanoparticles through hydrogenation // Scientific Reports. – 2013. – Vol. 3. – P. 1–7. – DOI: 10.1038/srep01510.

4. Smith G.B., Gentle A., Swift P.D., Earp A., Mronga N. Coloured paints based on iron oxide and silicon oxide coated flakes of aluminium as the pigment, for energy efficient paint: optical and thermal experiments // Solar Energy Materials and Solar Cells. – 2003. – Vol. 79. – P. 179–197. – DOI: 10.1016/S0927-0248(02)00410-5.

5. Norrgard E.B., Sitaraman N., Barry J.F., McCarron D.J., Steinecker M.H., DeMille D. In-vacuum scattered light reduction with black cupric oxide surfaces for sensitive fluorescence detection // Review of Scientific Instruments. – 2016. – Vol. 87. – DOI: 10.1063/1.4949503.

6. Fu J., Zhang J., Liang H., Wang Y., Zhang Z., Liu Y., Lin X. High speed fabrication of absorbance-enhanced micro-nanostructures on nickel surface using hundred-nanosecond pulsed laser // Japanese Journal of Applied Physics. – 2017. – Vol. 56. – DOI: 10.7567/JJAP.56.010305.

7. Taher M.A., Naraharisetty S.R.G., Narayana Rao D. Super black stainless steel surface fabricated by nanosecond laser irradiation // CLEO: Applications and Technology, OSA Technical Digest. – 2020. – Paper JW2B.21. – DOI: 10.1364/CLEO_AT.2020.JW2B.21.

8. Zhou Y., Zhang Q., Li X., Wang Y., Guan Y. Mechanical performance of laser-textured metallic surface // Journal of Materials Research and Technology. – 2024. – Vol. 33. – P. 6084–6089. – DOI: 10.1016/j.jmrt.2024.10.224.

9. Du M., Sun Q., Jiao W., Shen L., Chen X., Xiao J., Xu J. Fabrication of antireflection micro/nanostructures on the surface of aluminum alloy by femtosecond laser // Micromachines. – 2021. – Vol. 12. – DOI: 10.3390/mi12111406.

10. Zhao Z., Luo G., Cheng M., Song L. Water-repellent coatings on corrosion resistance by femtosecond laser processing // Coatings. – 2022. – Vol. 12. – P. 1–14. – DOI: 10.3390/coatings12111736.

11. Wan Y., Wang X., Sun H., Li Y., Zhang K., Wu Y. Corrosion behavior of copper at elevated temperature // International Journal of Electrochemical Science. – 2012. – Vol. 7. – P. 7902–7914. – DOI: 10.1016/s1452-3981(23)17963-6.

12. Guo Q., Hou H., Wang K., Li M., Liaw P.K., Zhao Y. Coalescence of Al0.3CoCrFeNi polycrystalline high-entropy alloy in hot-pressed sintering: a molecular dynamics and phase-field study // npj Computational Materials. – 2023. – Vol. 9. – DOI: 10.1038/s41524-023-01139-9.

UO‘K 534.21;538.951

NANOSUYUQLIKLARDAN TOVUSH TO‘LQINLARI O‘TGANDA ENERGIYANING SO‘NISH MEXANIZMLARI VA ULARNING NAZARIY TAHLILI

Soliyeva Nilufar Mashrabboy qizi,
O‘zbekiston Respublikasi Fanlar Akademiyasi
Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti
stajor-tadqiqotchisi
nilufarsoliyeva90gmail.com

Annotatsiya. *Mazkur maqolada nanosuyuqliklardan ultratovush to‘lqinlari o‘tganda yuzaga keladigan energiyaning so‘nish mexanizmlari nazariy jihatdan o‘rganilgan. Zamonaviy ilmiy adabiyotlarni o‘rganish va mavjud nazariy yondashuvlarni qiyosiy tahlil qilish asosida Stoks-Kirxgofning klassik gidrodinamik so‘nishi, termal relaksatsiya, visko-inersion mexanizmlar hamda Reley sochilishi jarayonlari batafsil ko‘rib chiqilgan. Shuningdek, ularni tavsiflovchi asosiy matematik formulalar keltirilib, tizimning chastotaviy va struktura parametrlarga bog‘liqligi aniqlangan. Olingan nazariy natijalar nanosuyuqliklarning akustik xossalarini tahlil qilish va ularni zamonaviy texnologiyalarda qo‘llash imkoniyatlarini yanada kengaytirishda muhim ilmiy-amaliy ahamiyat kasb etadi.*

Kalit so‘zlar: *nanosuyuqlik, tovush to‘lqini, so‘nish koeffitsiyenti, termal relaksatsiya, viskozlik, Reley sochilishi, akustika.*

МЕХАНИЗМЫ ЗАТУХАНИЯ ЭНЕРГИИ ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ЗВУКОВЫХ ВОЛН ЧЕРЕЗ НАНОЖИДКОСТИ И ИХ ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

Аннотация. *В данной статье теоретически рассмотрены механизмы затухания энергии при прохождении ультразвуковых волн через наножидкости. На основе анализа современной научной литературы и сравнительного изучения существующих подходов подробно рассмотрены классическое гидродинамическое затухание Стокса-Кирхгофа, термическая релаксация, вязко-инерционные механизмы, а также процессы релеевского рассеяния. Приведены основные математические формулы, описывающие данные процессы, и определена зависимость характеристик системы от частотных и структурных параметров. Полученные теоретические результаты имеют важное научно-практическое значение для анализа акустических свойств наножидкостей и расширения возможностей их применения в современных технологиях.*

Ключевые слова: *наножидкость, звуковая волна, коэффициент затухания, термальная релаксация, вязкость, релеевское рассеяние, акустика.*

ENERGY ATTENUATION MECHANISMS OF SOUND WAVES PROPAGATING THROUGH NANOFLUIDS AND THEIR THEORETICAL ANALYSIS

Abstract. *This paper theoretically examines the energy attenuation mechanisms that occur when ultrasonic waves propagate through nanofluids. Based on a modern literature review and a comparative analysis of existing approaches, the classical Stokes-Kirchhoff hydrodynamic attenuation, thermal relaxation, visco-inertial mechanisms, and Rayleigh scattering processes are discussed in detail. The fundamental mathematical formulas describing these processes are presented, and the dependence of system characteristics on frequency and structural parameters is determined. The obtained theoretical results are of significant scientific and practical importance for analyzing the acoustic characteristics of nanofluids and expanding their application potential in modern technologies.*

Keywords: *nanofluid, sound wave, attenuation coefficient, thermal relaxation, viscosity, Rayleigh scattering, acoustics.*

Kirish. Nanosuyuqliklar – bu bazaviy suyuqlik (suv, etilen-glikol, moy va boshqalar) ichiga nanoo‘lchamdagi (1–100 nm) qattiq zarrachalar dispersiyalangan kolloid tizimlardir. So‘nggi yillarda nanosuyuqliklarning issiqlik fizikasi, gidrodinamikasi va akustik xususiyatlarini o‘rganishga bo‘lgan qiziqish keskin ortdi. Xususan, ulardan ultratovush to‘lqinlari o‘tganda to‘lqin energiyasining so‘nishi (absorbsiyasi va sochilishi) muhim ilmiy-amaliy masalalardan biridir. Hozirgi kunda issiqlik almashinuv jarayonlarini intensivlashtirish va zamonaviy texnologiyalarda yuqori termofizik xususiyatga ega nanosuyuqliklarni

qo‘llash jadal rivojlanmoqda. Shu bilan birga, ularning fizik-kimyoviy xossalarini buzmagan holda tezkor nazorat qilishda akustik va ultratovush diagnostika usullari eng ustuvor yo‘nalishlardan biri hisoblanadi.

Tovush to‘lqinlarining nanosuyuqliklarda so‘nishi faqat bazaviy suyuqlikning xususiyatlariga emas, balki nanozarrachalarning o‘lchami, shakli, konsentratsiyasi, shuningdek, zarracha bilan suyuqlik orasidagi termodinamik va mexanik o‘zaro ta’sirlarga bog‘liq. Akustik usullar nanosuyuqliklarning strukturasini buzmasdan ularning fizik-kimyoviy xossalarini tekshirish imkonini beradi. Tadqiqotning ilmiy yangiligi shundaki, unda nanosuyuqliklardagi energiyaning so‘nish jarayoni faqat bitta mexanizm doirasida emas, balki Stoks-Kirxgof, termal relaksatsiya, visko-inersion va Reley sochilishi mexanizmlarining o‘zaro qo‘shma ta’siri nuqtayi nazaridan kompleks qiyosiy tahlil qilingan. Nanosuyuqliklarda akustik to‘lqinlarning tarqalishi va energiyaning so‘nish qonuniyatlarini o‘rganish bo‘yicha so‘nggi yillarda ko‘plab ilmiy-tadqiqot ishlari olib borilgan bo‘lib, keng qamrovli adabiyotlar tahlili shuni ko‘rsatadiki, bu jarayon bir nechta raqobatdosh mexanizmlar majmuidan iborat. Ilmiy manbalarda asosan Stoks-Kirxgofning klassik gidrodinamik modeli, Epstein-Carstens va Allegra-Settii kabi termal-viskoz relaksatsiya nazariyalari hamda Reley sochilish qonuniyatlari keng o‘rganib chiqilgan. Mavjud adabiyotdagi yondashuvlarni o‘zaro taqqoslaganda quyidagi farqlar ko‘zga tashlanadi:

Klassik yondashuvlar faqat bir jinsli muhitlar uchun mos kelib, nanozarrachalarning o‘lchami va relaksatsiya effektlarini to‘liq qamrab ololmaydi.

Termal va visko-inersion modellar esa zarracha va suyuqlik orasidagi harorat hamda tezliklar gradiyentini hisobga olishi bilan ustunlik qiladi, biroq ular murakkab chastotaviy bog‘liqliklarga ega.

Ushbu obzorda tahlil qilingan adabiyotlar shuni ko‘rsatadiki, turli zarracha o‘lchamlari va konsentratsiyalarida qaysi so‘nish mexanizmi ustuvor kelishini aniqlashda yagona qiyosiy yondashuv zarur bo‘lib, quyida ana shu mexanizmlarning nazariy taqqosi keltiriladi.

Klassik gidrodinamik so‘nish (Stoks-Kirxgof mexanizmi). Oddiy suyuqliklarda tovush to‘lqinining so‘nishi asosan qovushqoqlik (viskozlik) va issiqlik o‘tkazuvchanlik jarayonlari bilan belgilanadi. Nanosuyuqliklar uchun bu ko‘rsatkichlar zarrachalar mavjudligi sababli o‘zgaradi va samarali qovushqoqlik (η_{eff}) hamda samarali issiqlik o‘tkazuvchanlik (k_{eff}) tushunchalari kiritiladi.

Klassik so‘nish koeffitsiyenti ($\alpha_{klassik}$) quyidagi Stoks-Kirxgof formulasi yordamida aniqlanadi:

$$\alpha_{klassik} = \frac{\omega^2}{2\rho_0 v_s^3}\left[\frac{4}{3}\eta_{eff} + (\gamma - 1)\frac{k_{eff}}{C_p}\right]$$

Bu yerda:

$\omega = 2\pi f$—siklik chastota (f — tovush chastotasi);

$2\rho_0$—nanosuyuqlikning zichligi;

v_s—tovush to‘lqinining fazaviy tezligi;

γ—adiabatik ko‘rsatkich (C_ρ / C_V);

C_p—solishtirma issiqlik sig‘imi.

Bu mexanizm to‘lqin tarqalishi paytida hosil bo‘ladigan siqilish va kengayish sikllarida mexanik energiyaning qovushqoq ish tufayli issiqlikka aylanishini ifodalaydi.

Termal relaksatsiya mexanizmi. Nanosuyuqliklarda tovush to‘lqini o‘tayotganda mahalliy bosim va harorat o‘zgarishlari ro‘y beradi. Nanozarrachaning issiqlik o‘tkazuvchanligi va issiqlik sig‘imi uni o‘rab turgan bazaviy suyuqliknikidan farq qilgani sababli, zarracha va suyuqlik chegarasida harorat gradiyenti yuzaga keladi. Natijada, issiqlik oqimi paydo bo‘lib, energiya yo‘qolishiga olib keladi.

Termal relaksatsiya vaqti (τ_T) quyidagi formula bilan belgilanadi:

$$\tau_T = \frac{R^2}{D_T}$$

Bu yerda:

R—nanozarrachaning radiusi;

D_T—zarrachaning termal diffuziya koeffitsiyenti ($D_T = k / (\rho C)_\rho$).

Termal so‘nish koeffitsiyenti (α_{therm}) chastotaning ortishi bilan keskin ortadi va zarracha o‘lchamining kvadratiga teskari proportsional ravishda o‘zgaradi.

Visko-inersion (mexanik relaksatsiya) mexanizmi. Tovush to‘lqini fronti o‘tayotganda suyuqlik muhiti tezlik bilan tebranadi. Zarrachaning massasi (inertligi) mavjud bo‘lgani sababli, uning tebranish tezligi suyuqlikning tebranish tezligidan farq qilishi mumkin (siljish effekti). Bu tezliklar farqi zarracha atrofida qovushqoq to‘lqinlarning tarqalishiga va qo‘shimcha energiya yo‘qolishiga sabab bo‘ladi.

Mexanik relaksatsiya vaqti (τ_v) quyidagicha ifodalanadi:

$$\tau_v = \frac{R^2}{9\nu_f}$$

Bu yerda:

ν_f—bazaviy suyuqlikning kinematik qovushqoqligi.

Bu mexanizm, ayniqsa, yuqori chastotali ultratovush diapazonida o‘ta sezilarli bo‘lib, nanozarrachalarning suyuqlik ichidagi harakatchanligini baholashda muhim rol o‘ynaydi.

Reley sochilishi (Rayleigh scattering). Agar nanozarrachalarning o‘lchami tovush to‘lqin uzunligidan (λ) sezilarli darajada kichik bo‘lsa (R≪λ), tovush to‘lqinlari zarrachalar tomonidan har tomonga tarqaladi (sochiladi). Sochilish jarayoni to‘lqin energiyasining asosiy yo‘nalishdan chetga chiqishiga va natijada to‘lqinning so‘nishiga olib keladi.

Reley sochilishi bo‘yicha so‘nish koeffitsiyenti (α_{scat}) quyidagi qonuniyatga bo‘ysunadi:

$$\alpha_{scat} \sim \phi \cdot k^4 R^3$$

Bu yerda:

Φ – nanozarrachalarning hajmiy konsentratsiyasi;

$k = \frac{\omega}{v_s}$—to‘lqin soni.

Ko‘rinib turibdiki, sochilish orqali so‘nish chastotaning to‘rtinchi darajasiga (ω^4) to‘g‘ridan-to‘g‘ri proporsionaldir.

Umumiy so‘nish koeffitsiyenti. Nanosuyuqliklardan tovush to‘lqinlari o‘tganda kuzatiladigan umumiy so‘nish koeffitsiyenti (α_{total}) yuqorida keltirilgan mustaqil mexanizmlarning hissalarini yig‘ish orqali aniqlanadi:

$$\alpha_{total} = \alpha_{klassik} + \alpha_{therm} + \alpha_{visco} + \alpha_{scat}$$

Ushbu yig‘indi tenglama eksperimental natijalarni nazariy jihatdan tushuntirishda asosiy poydevor hisoblanadi.

Nanosuyuqliklarda ultratovush to‘lqinlarining so‘nish jarayonini har tomonlama o‘rganish maqsadida asosiy mexanizmlarning qiyosiy xarakteristikalari jadvalda keltirilgan. Tahlillar shuni ko‘rsatadiki, har bir mexanizm o‘zining fizik tabiati, ta’sir etuvchi parametrlari hamda chastotaga bog‘liqligi bilan ajralib turadi.

Xususan, klassik Stoks-Kirxgof mexanizmi chastotaning kvadratiga proporsional holda umumiy fonni tashkil etsa, termal relaksatsiya va visko-inersion mexanizmlar nanozarracha va bazaviy suyuqlik orasidagi termodinamik hamda kinematik farqlarga bog‘liq holda yuqori chastotalarda yaqqol namoyon bo‘ladi. Reley sochilishi esa zarracha o‘lchamining to‘lqin uzunligidan kichik bo‘lgan sharoitda chastotaning to‘rtinchi darajasiga bog‘liqligi bilan ajralib turadi. Ushbu 1-jadval turli chastota diapazonlarida qaysi so‘nish mexanizmi ustuvor ekanligini aniqlash va nazariy modellarni tanlashda muhim qo‘llanma vazifasini bajaradi.

1-jadval. So‘nish mexanizmining ustvor yo‘nalishlari

Mexanizm nomi	**Asosiy fizik sababi**	**Asosiy ta’sir etuvchi parametrlar**	**Chastotaga bog‘liqligi**
Klassik gidrodinamik (Stoks-Kirxgof)	Suyuqlik qovushqoqligi va issiqlik o‘tkazuvchanligi	Samarali qovushqoqlik (η_{eff}), issiqlik sig‘imi (C_p)	Chastotaning kvadrati (ω^2)
Termal relaksatsiya	Zarracha va bazaviy suyuqlik orasidagi harorat farqi	Zarracha radiusi (R), termal diffuziya (D_T)	Yuqori chastotalarda kuchayadi ($\tilde{\approx}\omega^2$)
Visko-inersion mexanizm	Zarracha va suyuqlik tezliklarining fazaviy siljishi	Kinematik qovushqoqlik (ν_f), zarracha massasi	Chastotaga murakkab bog‘liq

Mexanizm nomi	Asosiy fizik sababi	Asosiy ta’sir etuvchi parametrlar	Chastotaga bog‘liqligi
Reley sochilishi	Zarracha o‘lchamining to‘lqin uzunligidan kichikligi ($R \ll \lambda$)	Hajmiy konsentratsiya (ϕ), to‘lqin soni (k)	Chastotaning 4-darajasi (ω^4)

Nanozarrachalar konsentratsiyasi va o‘lchamining so‘nishga ta’siri

Nanosuyuqliklarda akustik to‘lqinlarning tarqalishi va energiyaning so‘nish jarayoniga nanozarrachalarning hajmiy konsentratsiyasi (ϕ) hamda ularning geometrik o‘lchamlari (R) hal qiluvchi ta’sir ko‘rsatadi.

1. Konsentratsiyaning roli:

Zarrachalar konsentratsiyasi oshgani sayin muhitning zichligi, samarali qovushqoqligi va zarrachalararo gidrodinamik o‘zaro ta’sirlar ortib boradi. Bu o‘z navbatida klassik gidrodinamik so‘nish va Reley sochilishi koeffitsiyentlarining chiziqli yoki nochiziqli o‘sishiga olib keladi. Yuqori konsentratsiyali tizimlarda zarrachalarning aglomeratsiyalanish (to‘planish) ehtimoli yuqori bo‘lib, bu samarali zarracha radiusining o‘zgarishiga va akustik spektrning siljishiga sabab bo‘ladi.

2. Zarracha o‘lchamining ta’siri:

Nanozarrachalar o‘lchami (R) termal relaksatsiya va visko-inersion mexanizmlar uchun asosiy masshtab omili hisoblanadi. Zarracha hajmi kichik bo‘lgan sari (masalan, $R < 10$ nm) termal relaksatsiya vaqti keskin qisqaradi va issiqlik almashinuvi jarayoni yuqori chastota sohasiga ko‘chadi. Aksincha, zarrachalar kattalashgani sari visko-inersion yo‘qotishlar va zarrachaning inersion tebranishlari ustuvor ahamiyat kasb eta boshlaydi.

3. Akustik diagnostika imkoniyatlari:

Ushbu qonuniyatlar nanosuyuqliklarning akustik xossalarini o‘rganish orqali ularning disperslik darajasini, zarrachalar taqsimoti va konsentratsiyasini buzmasdan (non-destructive) aniqlash imkonini beradi. Ultratovush tezligi va so‘nish koeffitsiyentini o‘lchash usullari zamonaviy fizika va texnologiyada kolloid tizimlarning holatini tezkor nazorat qilishning eng samarali vositalaridan biri bo‘lib xizmat qiladi.

Xulosa. Nanosuyuqliklardan ultratovush to‘lqinlari o‘tganda yuzaga keladigan energiyaning so‘nish mexanizmlari ko‘p qirrali va murakkab fizik jarayon bo‘lib, u gidrodinamik, termodinamik hamda inersion omillarning o‘zaro ta’siriga asoslanadi. O‘tkazilgan nazariy tahlillar va mavjud adabiyotlar qiyoslashi shuni ko‘rsatadiki, Stoks-Kirxgofning klassik gidrodinamik so‘nishi, termal hamda visko-inersion relaksatsiyalar, shuningdek, Reley sochilishi mexanizmlari birgalikda geterogen tizimlarning akustik xossalarini to‘liq ochib berishda asosiy poydevor vazifasini bajaradi.

Xususan, aniqlanishicha, chastotaning ortishi va nanozarrachalarning o‘lchamlari o‘zgarishi turli so‘nish mexanizmlarining hissasiga sezilarli darajada ta’sir ko‘rsatadi. Olingan nazariy formulalar va umumiy so‘nish koeffitsiyentining yig‘indi tenglamasi kelgusida eksperimental natijalarni yuqori aniqlikda tushuntirish imkonini beradi. Mazkur tadqiqot natijalari nanosuyuqliklarning tuzilishini optimallashtirish, ularning disperslik darajasini akustik usullar yordamida buzmasdan nazorat qilish hamda ularni zamonaviy issiqlik almashinuv qurilmalari, optoelektronika va lazer texnikasida yuqori samaradorlik bilan qo‘llash imkoniyatlarini yanada kengaytiradi. Xususan, ishlab chiqilgan nazariy yondashuvlar issiqlik almashtirgichlardagi ishchi suyuqliklarning konsentratsiyasini buzmagan holda onlayn (real vaqt rejimida) akustik diagnostika qilish imkonini beradi.

ADABIYOTLAR:

1. Khattab, A., & Al-Taee, A. Acoustic properties and sound wave propagation in nanofluids: A review of attenuation mechanisms // Journal of Molecular Liquids. – 2021. – Vol. 335. – P. 116120.

2. Reshetnikov, A. V., et al. Ultrasonic wave propagation and relaxation phenomena in nanofluids containing metallic nanoparticles // Ultrasonics. – 2019. – Vol. 94. – pp. 112–119.

3. Bahrami, M., et al. A comprehensive review on the acoustic and thermophysical properties of nanofluids: Mechanisms and applications // Ultrasonics Sonochemistry. – 2020. – Vol. 64. – P. 104987.

4. Sundar, L. S., Singh, M. K., & Sousa, A. C. Investigation of thermal conductivity and viscosity of nanofluids: A review // Renewable and Sustainable Energy Reviews. – 2013. – Vol. 25. – pp. 307–323.

5. Kakaç, S., & Pramuanjaroenkij, A. Review of convective heat transfer enhancement with nanofluids // International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2012. – Vol. 55, № 11-12. – pp. 3187–3208.

6. Wang, L., & Fan, J. Research progress on acoustic attenuation and scattering characteristics in complex fluid-nanoparticle systems // Applied Acoustics. – 2022. – Vol. 193. – P. 108756.

7. Zhang, H., et al. Ultrasonic attenuation spectroscopy for particle size distribution and concentration in concentrated nanofluids // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. – 2018. – Vol. 538. – pp. 210–218.

UO‘K 534.21.

GAMMA NURI BILAN NURLANGAN LITIY FTORID KRISTALLARIDA AKUSTIK TO‘LQINLARNING SO‘NISH MEXANIZMI

Axmedjanov Farxad Rashidovich,
O‘zbekiston Respublikasi Fanlar Akademiyasi
Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti
Ko‘p fazali tizimlarda molekulyar va to‘lqinli
jarayonlar laboratoriyasi mudiri
Tashkent 100125, Durmon Yuli ko‘chasi 33
akhmedzhanov.f@gmail.com
Tugalov Feruz Baxtiyorovich,
O‘zbekiston Respublikasi Maktabgacha va maktab ta’lim vazirligi,
Oliy ta’lim, fan va innovatsiyalar vazirligi
Samarqand davlat pedagogika instituti Urgut fakulteti
o‘quv ishlari bo‘yicha dekan o‘rinbosari,
Samarqand viloyati Urgut tumani 141627, Vag‘ashti MFY 13-uy
tugalovferuz282@gmail.com

Annotatsiya. *Litiy ftorid kristallarida bo‘ylama akustik to‘lqinlarning so‘nish koeffitsiyenti va relaksatsiya vaqtining harorat va gamma nurlanish dozasiga bog‘liqligi birinchi marta o‘rganildi. Bo‘ylama akustik to‘lqinlar so‘nish koeffitsiyentining haroratga bog‘liqligida maksimum hosil bo‘lishi aniqlandi. Olingan natijalar akustik to‘lqinlar va nuqtaviy nuqsonlari o‘rtasidagi deformatsiya potensiali orqali o‘zaro ta’sirning akustoion mexanizmi bilan izohlanadi.*

Kalit so‘zlar: LiF kristali, akustik to‘lqin, to‘lqin tezligi, nurlanish dozasi, harorat, akustik xossalar, fonon, so‘nish koeffitsiyenti.

МЕХАНИЗМ ЗАТУХАНИЯ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В КРИСТАЛЛАХ ФТОРИДА ЛИТИЯ, ОБЛУЧЁННЫХ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЕМ

Аннотация. *Впервые исследована зависимость коэффициента затухания и времени релаксации продольных акустических волн от температуры и дозы гамма облучения в кристаллах фторида лития. Показано, что в температурной зависимости коэффициента затухания продольных акустических волн наблюдается максимум. Полученные результаты объясняются акусто-ионным механизмом взаимодействия акустических волн с точечными дефектами через деформационный потенциал.*

Ключевые слова: *кристалл LiF, акустическая волна, скорость распространения, доза облучения, температура, акустические свойства, фонон, коэффициент затухания.*

MECHANISM OF ACOUSTIC WAVE ATTENUATION IN LITHIUM FLUORIDE CRYSTALS IRRADIATED WITH GAMMA RADIATION

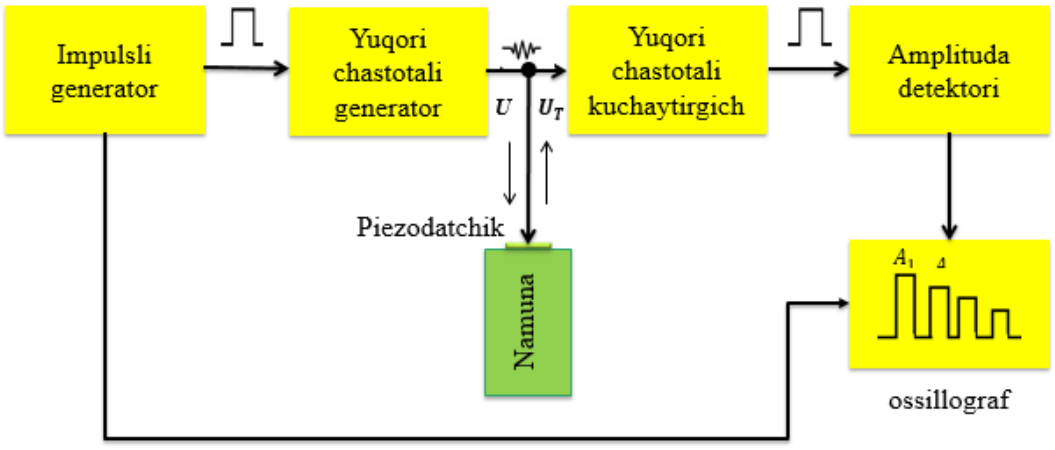
Abstract. *The dependence of the attenuation coefficient and relaxation time of longitudinal acoustic waves on temperature and gamma irradiation dose in lithium fluoride crystals was studied for the first time. It was shown that the temperature dependence of the attenuation coefficient of longitudinal acoustic waves exhibits a maximum. The obtained results are explained by the acousto-ionic mechanism of interaction between acoustic waves and point defects via deformation potential.*

Keywords: *LiF crystal, acoustic wave, wave velocity, irradiation dose, temperature, acoustic properties, phonon, attenuation coefficient.*

Kirish. Litiy ftorid kristallari markazlashgan kubik tuzilishga ega ishqoriy galogen kristallari ichida kation (**Li^+**) va anion (**F^-**) radiuslarining mos ravishda **0,76** Å va **1,33** Å hamda orasidagi masofasining (**2,013** Å**)** eng qisqaligi bilan ajralib turadi [1]. Shuning uchun bu kristallar ajoyib optik va akustik xossalarga ega bo‘lgan dielektrik material bo‘lib, 1200 – 60000 Å shaffoflik diopozoni va nisbatan past sindirish ko‘rsatkichiga ega [2]. Bu kristallarning ionlashtiruvchi nurlanishga sezgirligi rang markazlari deb nomlanuvchi birlamchi va agregat nuqtaviy nuqsonlarni hosil qilish imkonini beradi, ularning ba’zilari xona haroratida hamda ko‘rinadigan va yaqin infraqizil nurlarda lazer faolligi bilan ajralib turadi [3, 4]. Nurlanish ta’sirida LiF kristallarida hosil bo‘ladigan nuqtaviy nuqsonlar va rang markazlari kristallning akustik, elastik hamda optik xossalarini o‘zgartiradi. Bu xossalar radiatsiyaga chidamli optik elementlar, radiatsion dozimetriya, lazer texnologiyalari hamda fotonik qurilmalarni yaratishda muhim ahamiyat kasb etadi.

Shuningdek, bunday kristallarda radiatsiya ta'sirida akustik xossalarini o'zgarishi, xususan, akustik to'lqinlarning tezligi va so'nish koeffitsiyenti batafsil o'rganilmagan.

Namunalar va tajriba usullari. Litiy ftorid namunalar [100], [110] va [111] kristallografik yo'nalishlar bo'ylab 1 gradus aniqlik bilan yo'naltirildi. Namunalarning o'lchamlari mos ravishda 15×12×10 mm, 14×10×5 mm va 14×10×8 mm ni tashkil etadi. Akustik to'lqinlarni hosil qilish uchun qalinligi 30 - 40 mkm bo'lgan, rezonans chastotasi 10 - 30 MHz diapazonidagi X- yoki Y-kesimli kvartsdan tayyorlangan piezoelektrik o'zgartirgichlar orqali hosil qilindi. Namunalarni nurlatish havoda, 320 K haroratda, ^{60}Co radioizotop manbadan chiqadigan gamma-nurlanish yordamida amalga oshirildi. Nurlanish tezligi 510 R/s bo'lib, umumiy doza 10^6 - 10^8 R ni tashkil etdi [5, 612-616b; 6, 22-27b]. Nurlantirilgan litiy ftorid namunalarida bo'ylama akustik to'lqinlarning tezligi va so'nish koeffitsiyenti "Impuls-ultratovush" usuli yordamida 290 - 450 K harorat oralig'ida o'lchandi (1-rasim). O'lchovlar silindrsimon shakldagi pech o'rnatilgan namuna yacheykasida, shuningdek, havoda o'tkazildi. Harorat 0,1 – 0,3 K/min tezlikda bosqichma-bosqich ko'tarilib borildi. Haroratni o'lchash aniqligi 0,05 K bo'lib, o'lchovlar xromel-alumen va xromel-kopil termojuftlari yordamida o'lchab olindi [9; 105-118b].



1-rasm. Impuls-ultratovush o'lchash tizimining blok-sxemasi

Yuqori chastotali generatorlar yordamida uzluksiz elektromagnit tebranishlar hosil qilinadi. Impulsli generator tomonidan hosil qilingan sinxron impulslar yuqori chastotali elektromagnit to'lqinlarni modulyatsiyalash orqali impulsli video signal ko'rinishiga keltiriladi va tadqiq qilinayotgan namunaga o'rnatilgan pyezoelektrik plastinkaga uzatiladi. Pyezoelektrik plastinkaga kelib tushgan elektromagnit signal pyezoelektrik o'zgartkichning teskari pyezoelektrik effekti asosida mexanik tebranishlarga, ya'ni akustik to'lqinlarga aylantiriladi. Hosil bo'lgan akustik to'lqin namuna ichida tarqalib, uning qarama-qarshi yuzasiga yetib boradi va qisman qaytadi. Namunaning qarama-qarshi tomonidan qaytgan akustik to'lqinlarning juda kichik qismi yana pyezoelektrik plastinkaga yetib keladi. Ushbu to'lqin pyezoelektrik plastinkada to'g'ri pyezoelektrik effekt natijasida kuchsiz elektr, ya'ni exo-impuls ko'rinishidagi elektromagnit signalga aylantiriladi [7; 1-6 b, 8; 9-14 b]. Hosil bo'lgan kuchsiz signal namunadan tashqariga chiqarilib, keyinchalik kuchaytirgich yordamida 10^4 – 10^5 marta kuchaytiriladi. Kuchaytirilgan signal ossillograf yordamida qayd etiladi. Ossillografda qayd etilgan akustik impulslar amplitudalarining kamayishi namunada akustik to'lqin energiyasining so'nishini ifodalaydi. Shu sababli, akustik to'lqinlarning namunada so'nish koeffitsiyenti α ketma-ket qayd etilgan, bir-biriga qo'shni bo'lgan A_1 va A_2 impulslar amplitudalarini o'lchash asosida aniqlanadi. Bunda impuls amplitudalarining namunadan o'tish jarayonida kamayishi akustik to'lqinlarning so'nish koeffitsiyentini tavsiflaydi va α qiymatini (1) ifoda yordamida hisoblash imkonini beradi:

$$\alpha = \frac{1}{\Delta t} \cdot 20 \lg\left(\frac{A_1}{A_2}\right), \left[\frac{dB}{mks}\right] \quad (1)$$

Impuls amplitudalarining takroriy o'lchovlari va keyingi o'rtacha o'lchovlar tufayli so'nish koeffitsiyentini o'lchov aniqligi ~ 5% ni tashkil etdi. Akustik to'lqin tezligi, namuna uzunligini bilgan holda ketma – ket impulslar orasidagi Δt vaqtni o'lchash orqali (2) dan aniqlanadi [10; 465-500b]:

$$V = \frac{2L}{\Delta t}, \left[\frac{m}{s}\right] \quad (2)$$

Bu yerda L-namuna uzinligi, Δt – qarama – qarshi fazaga mos keladigan yuqori chastotali generatorning ikkita qo'shni amplitudalar orasidagi farq. Tezlikning o'lchov aniqligi ~ 1% ni tashkil qiladi [11; 1013-1015b].

Eksperimental natijalar va muhokama: Toza va gamma-nuri ta'sir qilgan litiy ftorid (LiF) kristallarida bo'ylama va ko'ndalang akustik to'lqinlarning tezligi va so'nish koeffitsiyentlari 30 MHz

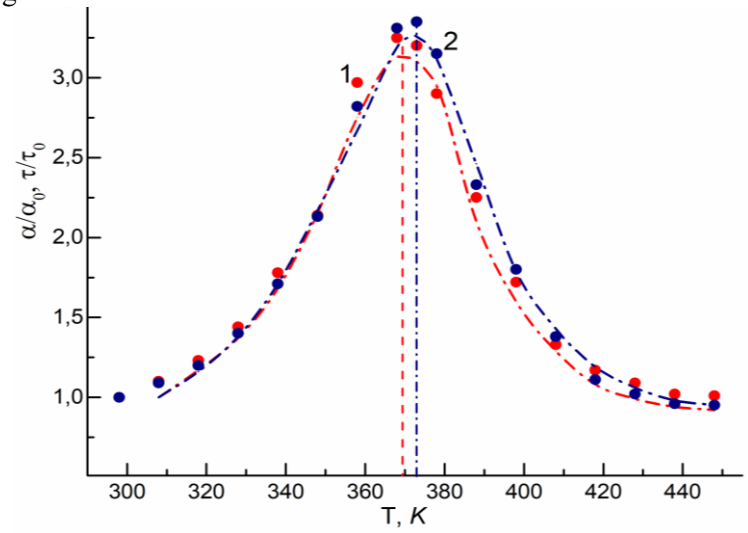
chastotada, xona haroratida o‘lchov natijalari 1-jadvalda keltirilgan. Bu jadvalda $\boldsymbol{q}$ akustik to‘lqin vektori va $\boldsymbol{\eta}$ akustik to‘lqin qutblanish (siljish) vektori yo‘nalishlarini ifodalaydi.

1-jadval.

Toza va gamma-nuri ta’sir qilgan LiF kristallarida bo‘ylama va ko‘ndalang akustik to‘lqinlar tezligi va so‘nish koeffitsiyenti

Kristall	Doza, R	$\boldsymbol{q}$	$\boldsymbol{\eta}$	V, 10^3 m/s	α, dB/μs
LiF	0	[100]	[100]	6.54	0.340
			[001]	4.90	0.035
	$1\cdot10^6$	[100]	[100]	6.52	0.097
			[001]	4.87	0.012
	$1\cdot10^7$	[100]	[100]	6.55	0.115
			[001]	4.91	0.014
	$8\cdot10^7$	[100]	[100]	6.55	0.124
			[001]	4.89	0.016
	$1\cdot10^8$	[100]	[100]	6.53	0.145
			[001]	4.88	0.019

Turli xil dozalarda nurlantirilgan LiF kristallari uchun [100] simmetriya o‘qida bo‘ylama akustik to‘lqinlar so‘nish koeffitsiyentlari 300-450 K temperatura oralig‘ida tadqiq qilindi (2-rasm). Tadqiqot natijalari shuni ko‘rsatdiki, temperaturaning ortishi bilan gamma-nuri ta’sir qilmagan litiy ftorid namunalaridan farqli ravishda gamma-nuri ta’sir qilgan namunalarda so‘nish maksimumlarining paydo bo‘lganligi kuzatildi. Bu so‘nish maksimumlari, nuqtaviy nuqsonlar mavjud ionli kristallarda (xususan, LiF) akustik to‘lqinlar so‘nishini tavsiflashda Akhiezer mexanizmi fonida **deformatsiya potensiali orqali** akustoion o‘zaro ta’sir mexanizmining ham mavjud ekanligi aniqlandi. Aynan ushbu mexanizm asosida so‘nish koeffitsiyentining temperaturaga bog‘liqligi orqali relaksatsion maksimumlar va aktivlanish energiyasini aniqlash imkonini beradi. Kristallda akustik to‘lqin tarqalganda panjara tugunlarida deformatsiyani vujudga keltiradi, natijada, gamma-nurlanish tufayli yuzaga keladigan nuqtaviy nuqsonlar atrofidagi harakatchan ionlar (Li^+) ning deformatsiya potensiali ta’sirida potensial to‘siqni yengib yangi vaziyatga o‘tishi uchun τ (relaksatsiya) vaqti talab etiladi. Bunda harakatchan ionlar akustik energiyaning ma’lum bir qismini issiqlik energiyasiga aylantiradi. Natijasida kristallda tarqaladigan akustik to‘lqinlarda so‘nish maksimumlarining hosil bo‘lishi kuzatiladi:



2-rasm. So‘nish koeffitsiyenti (nuqtalar) va ionlar harakatining relaksatsiya vaqti (uzlukli chiziq) ni temperaturaga bog‘liqligi. 1) - 10^7 R, 2) - $8\cdot10^7$ R

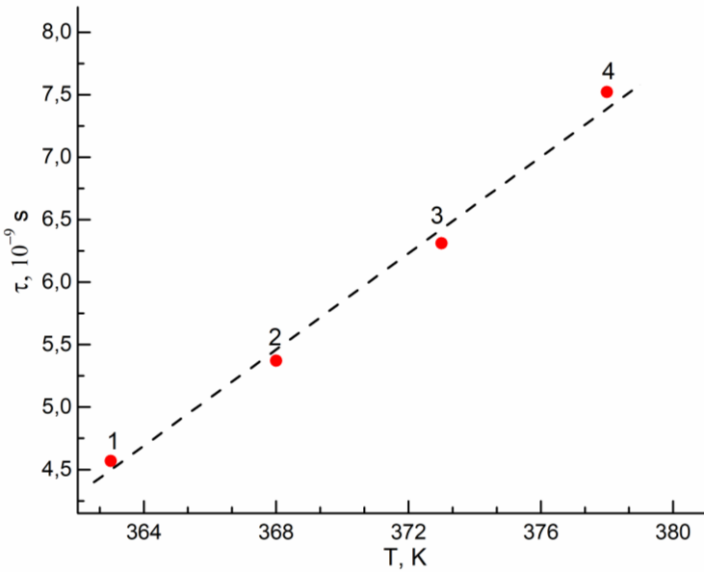
Bu jarayonni chuqurroq tahlil qilish maqsadida, akustik to‘lqinlarning so‘nish koeffitsiyentining temperaturaga bog‘liqligi hamda akustoion o‘zaro ta’sir mexanizmi (3) orqali harakatchan ionlarning relaksatsiya maksimumlari hisoblab topildi. Tadqiqot natijalari shuni ko‘rsatdiki, dielektrik kristallarda Axiezir so‘nish mexanizmiga qaraganda, deformatsiya potensiali orqali akustoion o‘zari ta’sir mexanizmining akustik to‘lqinlarlarning so‘nishiga ta’siri ko‘roq ekanligi aniqlandi va so‘nish koeffitsiyentida kuzatiladigan maksimumlar reloksatsiya mexanizmi yordamida tushuntirildi:

$$\Delta\alpha = \frac{NB^2}{2\rho V^3 k_B T}\frac{\omega^2\tau}{(1+\omega^2\tau^2)} = \frac{A}{T}\frac{\omega^2\tau}{(1+\omega^2\tau^2)} \quad (3)$$

$$A = \frac{NB^2}{2\rho V^3 k_B} \quad (4)$$

Bu yerda N - berilgan relaksatsiya jarayonda ishtirok etayotgan harakatchan ionlar soni, B - deformatsiya potensialining doimiysi, ρ - kristall zichligi, k_B - Boltsman doimiysi, V - akustik to‘lqin tezligi, τ – fononlar ketma-ket ikki marta sakrash oralig‘idagi vaqt. Tadqiqotlar jarayonida hisoblash uchun zarur bo‘lgan harakatchan ionlar soni va deformatsiya potensial konstantasining qiymatlari [7; 1-6, 12-13] dan olingan. N - harakatchan ionlar soni nurlanish dozasiga bog‘liq holda, $3{,}6\cdot10^{17}$ sm^{-3} dan $9{,}5\cdot10^{18}$ sm^{-3} gacha o‘zgaradi, B - deformatsiya potensial konstantasining qiymati 2,5 eV deb olindi, burchak tezlik $\omega = 1{,}88\cdot10^{8}$ s^{-1} ga teng. Olib borilgan tadqiqotlarga ko‘ra, so‘nish maksimumlari harakatchan ionlarning relaksatsiya vaqtining o‘zgarishi orqali yaxshi tavsiflanadi. (3) va (4) ifodalar ionlarning delokalizatsiyalangan harakati (ya’ni to‘liq ion o‘tkazuvchanlik holati) da ham lokalizatsiyalangan harakati (ya’ni polyarizatsion o‘tkazuvchanlik holati) da ham o‘rinlidir.

Nurlanish dozasining ortishi bilan so‘nish maksimumlari yuqori temperaturalar tomon siljiganligini ko‘rishimiz mumkin (2-rasim). Ushbu jarayonni tushuntirish uchun bizga qushimcha tadqiqotlar zarur bo‘lgani uchun 3-rasmda harakatchan ionlar relaksatsiya maksimumlarining temperaturaga bog‘liqligi o‘rganildi.

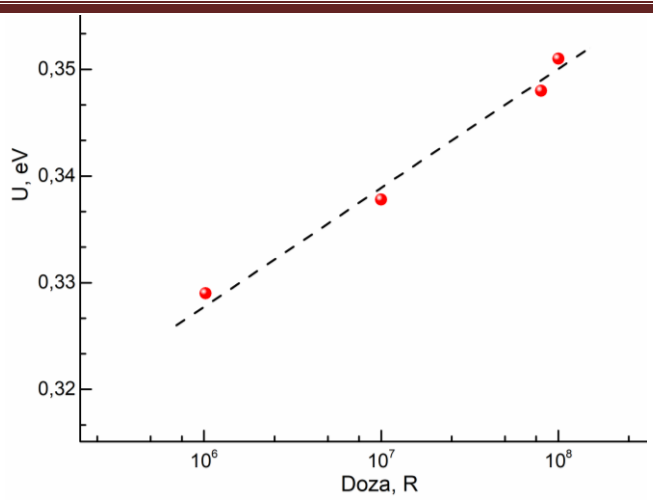


3-rasm. Harakatchan ionlar relaksatsiya vaqtining temperaturaga bog‘liqligi
(1;-10^6, 2; - 10^7, 3; - $8\cdot10^7$, 4; - 10^8) R

Turli dozalarda nurlantirilgan litiy ftorid kristallarida relaksatsiya vaqti dozaning ortishi bilan temperaturaga chiziqli holda o‘zgarishini ko‘rishimiz mumkin. Aakustoion o‘zari ta’sir mexanizmidan ko‘rinib turibdiki, akustik to‘lqinlarning so‘nishida relaksatsiya maksimumlari kuzatiladi, uning joylashuvi esa relaksatsiyalangan ionlar harakatining aktivlanish energiyasiga bog‘liq bo‘ladi. Agar bo‘ylama akustik to‘lqinlarning so‘nish koeffitsiyenti Axiezer va akustoion ta’sirlarning yig‘indisi deb qabul qilinsa va Axiezer ta’siri maksimumlar yaqinida harorat va nurlanish dozasiga chiziqli bog‘liqlik bilan o‘zgarsa, unda (5) ifodani 3-rasmdan T_{max} va relaksatsiya vaqti τ ni aniqlash orqali turli dozalarda nurlantirilgan kristallarda ion harakatining asosiy parametrini, jumladan ion harakatining aktivlanish energiyasi U ni hisoblash mumkin:

$$\tau^{-1} = \nu_0 e^{-U/k_B T} \quad (5)$$

Bu yerda $\nu = \tau^{-1}$ - potensial to‘siqni yengish uchun urinishlarning samarali chastotasi, ν_0 - relaksatsiyalanayotgan zarra (ion)ning muvozanat tebranish chastotasi, U - ion harakatining aktivlanish energiyasi. 3-rasmda gamma-nuri ta’sir qilgan LiF kristallarida aktivlanish energiyasini nurlanish dozasiga bog‘liqligi keltirilgan. Nuqsonlar konsentratsiyasining ortishi, harakatchan ionlar soninig ortishiga olib keladi, bu esa, o‘z navbatida, aktivlanish energiyasining qiymatlarini 0,33 dan 0,36 eV gacha o‘zgartiradi.



4-rasm. Ion harakatining aktivlanish energiyasini nurlanish dozalarid bog‘liqligi

Natijada, so‘nish koeffitsiyentining temperaturaga bog‘liqlik grafigida kuzatiladigan maksimumlarning yuqori temperaturalar sohasi tomon siljishi yuzaga keladi. Bunday siljish kristall tarkibidagi nuqsonlar konsentratsiyasining ortishi natijasida akustik to‘lqinlarning so‘nishda ishtirok etuvchi relaksatsion mexanizmlarning o‘zgarishi bilan bog‘liq bo‘ladi.

Xulosa. O‘tkazilgan tadqiqotlar natijasida gamma-nurlanish ta’siriga uchragan LiF kristallarida [100] simmetriya o‘qida bo‘ylama akustik to‘lqinlarning so‘nish koeffitsiyentida kuzatilgan maksimumlar Axiezer mexanizmidan tashqari, deformatsiya potensiali orqali akustoion o‘zaro ta’sir bilan bog‘liq qo‘shimcha relaksatsion so‘nish mexanizmi mavjudligini ko‘rsatdi. Nuqtaviy nuqsonlar konsentratsiyasining ortishi bilan so‘nish maksimumlarining yuqori temperaturalar tomon siljishi ionlar harakatining aktivlanish energiyasi gamma-nurlanish dozasi ortishi bilan chiziqli ravishda oshishi bilan izohlandi. Olingan natijalar fonon-nuqson o‘zaro ta’sirining akustik to‘lqinlar so‘nishidagi muhim rolini ko‘rsatdi.

ADABIYOTLAR:

1. Rosa Maria Montereali, Valentina Mussi, Enrico Nichelatti., Photonics in wide-band-gap materials: The challenge of color-center waveguides in lithium fluoride. Optical Materials. 160(2025) 116719.

2. Palik E.D., Handbook of Optical Constants of Solids, Academic Press, New York, 1997, 98. ISBN 0125444230.

3. Dieulesan E., Royer D., “Elastic Waves in Solids”. Masson & Cie, Paris (1974). Distributed by Wiley, New York, 1980.

4. Шаскольской М. П., Акустические кристаллы. Справочник /Под ред. - М. Наука, 1982, 632 с.

5. М.А. Муссаева, Э.М. Ибрагимова, Ш.Н. Бузриков., “Оптические спектры гамма-облучённых кристаллов LiF с анизотропными наночастицами лития”. Оптика и спектроскопия, 2018, том 124, вып. 5, С. 612-616.

6. М.А. Муссаева, В.Н. Сандалов, Э.М. Ибрагимова, “Транспорт носителей заряда в облучённых LiF с наночастицами Li” Докл. АН РУз. 2013. №2. С. 22-27.

7. Vincenti M. A., Baldacchini G., Kalinov V. S., Montereali R.M. and Voitovich A. P. Spectroscopic investigation of F, F_2 and F_3^+ color centers in gamma irradiated lithium fluoride crystals. // (EURODIM 2010) 8. P. 1-6. doi:10.1088/1757-899X/15/1/012053

Izerrouken M., Guerbous L., Meftah A. Thermal annealing study of F center clusters in LiF single crystals. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. 2010. A613. P. 9-14.

9. L.E. Jones., “High-temperature behaviour of the elastic moduli of LiF and NaF: Comparison with MgO and CaO”. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 13 (1976) P.105-118.

10. В. И. Леманов, Г. А. Смоленский, “гиперзвуковые волны в кристаллах” 1972 г. Том 108, вып. 3. С. 465-500.

11. В.В. Леманов, Б.С. Ким, А.Н. Насыров. “Поверхности акустического затухания в кубических кристаллах”. ФТТ Том 26, в. 4, 1984г. С 1013-1015.

12. F.R. Akhmedzhanov, J.O. Kurbanov. “Attenuation of acoustic waves and Grüneisen tensor in lithium fluoride crystals”. The Journal of the Acoustical Society of America. – Acoustical Society of America (USA), 2022. Vol. 151. – P. A273-A275

13. Ф.Р. Ахмеджанов, Ж.О. Курбанов, Н.М Махаров., “Затухание акустических волн в кубических кристаллах фторида лития”. Доклады Академии наук Республики Узбекистан. 2021. – № 5. – С. 11-15.

UO‘K 538.975:621.793.7

$Co/SiO_2/n-Si\langle P,Zn\rangle$ MOY STRUKTURALARINI TAYYORLASHDA KIMYOVIY TOZALASH VA MAGNETRON CHANGLATISH TEXNOLOGIYASI

Usanov Rustam Muxiddinovich,
Sharof Rashidov nomidagi
Samarqand davlat universiteti
Qattiq jismlar fizikasi kafedrasi assistenti,
Samarqand, O‘zbekiston
usanov.rustam1989@gmail.com

Annotatsiya. *Ushbu maqolada kompensirlangan kremniy taglikda $Co/SiO_2/n-Si\langle P,Zn\rangle$ metall-oksid-yarimo‘tkazgich (MOY) strukturasini shakllantirish uchun ishlab chiqilgan ko‘p bosqichli texnologik jarayon batafsil bayon etilgan. Kremniy sirtini tayyorlash uch bosqichda amalga oshirildi: erituvchilar (aseton, metanol) yordamida dastlabki tozalash, RCA-1 standart tozalash (5:1:1 hajmiy nisbatda $H_2O:NH_4OH:H_2O_2, 70\pm5°C$) hamda gidroflusor kislota (2% HF) eritmasida tabiiy va kimyoviy oksid qatlamini olib tashlash; sirt sifati namlanish (gidrofoblik) testi orqali nazorat qilindi. SiO_2 dielektrik qatlami HNO_3 da termik oksidlash usulida hosil qilindi, Co metall qatlami esa magnetron changlatish usulida (Ar oqim zichligi 80 sccm, ishchi bosim 4 Pa, quvvat 100 Vt, target kuchlanishi 276 V, tok kuchi 363 mA, cho‘kish tezligi 0,17 Å/s) DXZD-400 qurilmasida cho‘ktirildi. Tayyorlangan strukturaning ko‘ndalang kesimi Thermo Fisher Scientific Apreo ChemiSEM (EDS detektori bilan jihozlangan) skanerlovchi elektron mikroskopi yordamida tasvirga olindi, qatlamlar chegarasining uzluksizligi tasdiqlandi. MOY strukturaning to‘g‘rilovchi xususiyatga ega ekanligi, ya’ni tuzilmaning fizik jihatdan shakllanganligi, taglik solishtirma qarshiligiga bog‘liq holda hisoblangan potensial to‘siq balandligi ($\varphi_B = 0{,}4722 - 0{,}4798\ eV$) qiymatlari orqali tasdiqlandi.*

Kalit so‘zlar: *MOY struktura, kimyoviy tozalash, RCA-1, magnetron changlatish, SEM, potensial to‘siq balandligi, kompensirlangan kremniy, volt-amper xarakteristika.*

ТЕХНОЛОГИЯ ХИМИЧЕСКОЙ ОЧИСТКИ И МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ МОП-СТРУКТУР $Co/SiO_2/n-Si\langle P,Zn\rangle$

Аннотация. *В данной статье подробно описан разработанный многостадийный технологический процесс формирования металл–окисел–полупроводниковых (МОП) структур $Co/SiO_2/n-Si\langle P,Zn\rangle$ на компенсированной кремниевой подложке. Подготовка поверхности кремния осуществлялась в три этапа: предварительная очистка с использованием органических растворителей (ацетон, метанол), стандартная очистка RCA-1 ($H_2O:NH_4OH:H_2O_2$ в объёмном соотношении 5:1:1 при температуре 70 ± 5^0C), а также удаление естественного и химически сформированного оксидного слоя в растворе плавиковой кислоты (2% HF). Качество поверхности контролировалось с помощью теста на смачиваемость (гидрофобность). Диэлектрический слой SiO_2 был сформирован методом термического окисления в HNO_3, а металлический слой Co нанесён методом магнетронного распыления на установке DXZD-400 при следующих параметрах: расход Ar — 80 sccm, рабочее давление — 4 Па, мощность — 100 Вт, напряжение на мишени — 276 В, ток — 363 мА, скорость осаждения — 0,17 Å/с. Поперечное сечение изготовленной структуры было исследовано с использованием сканирующего электронного микроскопа Thermo Fisher Scientific Apreo ChemiSEM, оснащённого EDS-детектором, что подтвердило непрерывность границ между слоями. Выпрямляющие свойства МОП-структуры, свидетельствующие о физически сформированной структуре, были подтверждены значениями высоты потенциального барьера, рассчитанными в зависимости от удельного сопротивления подложки ($\varphi_B = 0{,}4722 - 0{,}4798$ эВ).*

Ключевые слова: *МОП-структура, химическая очистка, RCA-1, магнетронное распыление, СЭМ, высота потенциального барьера, компенсированный кремний, вольт-амперная характеристика.*

CHEMICAL CLEANING AND MAGNETRON SPUTTERING TECHNOLOGY FOR THE FABRICATION OF $Co/SiO_2/n-Si\langle P,Zn\rangle$ MOS STRUCTURES

Abstract. *This paper presents a detailed description of a developed multistage technological process for the fabrication of $Co/SiO_2/n-Si\langle P,Zn\rangle$ metal–oxide–semiconductor (MOS) structures on compensated silicon substrates. The silicon surface preparation was carried out in three stages: preliminary cleaning using organic solvents (acetone and methanol), RCA-1 standard cleaning ($H_2O:NH_4OH:H_2O_2$ in a volume ratio of 5:1:1 at 70±5°C), and removal of the native and chemically formed oxide layers by treatment in a hydrofluoric acid (2% HF) solution. The surface quality was monitored using a wettability (hydrophobicity) test. The SiO_2 dielectric layer was formed by thermal oxidation in HNO_3, while the Co metal layer was deposited by magnetron sputtering using a DXZD-400 system under the following parameters: Ar flow rate of 80 sccm, working pressure of 4 Pa, power of 100 W, target voltage of 276 V, current of 363 mA, and deposition rate of 0.17 Å/s. The cross-sectional image of the fabricated structure was obtained using a Thermo Fisher Scientific Apreo ChemiSEM scanning electron microscope equipped with an EDS detector, confirming the continuity of the interfaces between the layers. The rectifying properties of the MOS structure, indicating the successful physical formation of the structure, were confirmed by the calculated potential barrier height values depending on the substrate resistivity ($\varphi_B = 0{,}4722 - 0{,}4798\ eV$).*

Keywords: *MOS structure, chemical cleaning, RCA-1, magnetron sputtering, SEM, potential barrier height, compensated silicon, current–voltage characteristic.*

Kirish. Mikro- va nanoelektronikaning tinimsiz rivojlanishi sensorlar, diskret qurilmalar hamda magnit xotira tizimlarining elementi sifatida ishlay oladigan gibrid metall-dielektrik-yarimo‘tkazgich (MDY) va metall-oksid-yarimo‘tkazgich (MOY) strukturalariga bo‘lgan ehtiyojni sezilarli darajada oshirdi [1, 2]. Bunday strukturalarning funksional ishonchliligi ko‘p jihatdan dielektrik-yarimo‘tkazgich chegarasidagi interfeys holatlar zichligiga va cho‘ktirilgan metall qatlamning strukturaviy sifatiga bog‘liq bo‘lib, bular esa o‘z navbatida taglikni tayyorlash va qatlam cho‘ktirish uchun qo‘llaniladigan texnologik yo‘lga bog‘liqdir [3, 4]. Shu sababli gibrid strukturalarning elektrofizik xossalarini o‘rganish bilan bir qatorda, ularni tayyorlash texnologiyasini batafsil va takrorlanuvchan tarzda tavsiflash hozirgi kunda ham dolzarb ilmiy-amaliy vazifa bo‘lib qolmoqda.

Ma’lumki, oksidlash va metallashtirishdan oldin kremniy sirtining tozaligi tayyor strukturaning elektr xossalariga hal qiluvchi ta’sir ko‘rsatadi. Kern va uning hamkasblari tomonidan taklif etilgan hamda hozirgacha kremniy plastinalarini tayyorlashning sanoat standarti hisoblanuvchi RCA tozalash ketma-ketligi kremniy sirtidagi organik, ion va zarrachali ifloslanishlarni olib tashlashning eng keng tarqalgan usuli bo‘lib qolmoqda [5]. Suyultirilgan gidroflusor kislotada ishlov berish orqali tabiiy va kimyoviy hosil bo‘lgan oksid qatlamini to‘liq olib tashlash vodorod bilan passivlangan, gidrofob kremniy sirtini hosil qiladi, bu esa bir jinsli, defekt zichligi past dielektrik qatlamni o‘stirish uchun zarur shart hisoblanadi [6, 7]. HF bilan ishlov berilgan sirtning gidrofobligini namlanish (suv bilan ho‘llanish burchagi) testi orqali sifat jihatdan tekshirish oddiy va ishonchli jarayon nazorati vositasi bo‘lib xizmat qiladi [8].

Bizning oldingi tadqiqotlarimizda kuchli Zn bilan kompensirlangan kremniy taglikda tayyorlangan $Co/SiO_2/n\text{-}Si\langle P\rangle$ va $Co/SiO_2/n\text{-}Si\langle P,Zn\rangle$ MDY strukturalarining volt-amper xarakteristikalari (VAX) va ularda lateral fotoeffekt (LFE) hodisasi o‘rganilgan edi [9, 10]. Ushbu nashrlarning hajmiy cheklovlari sababli, kremniy sirtini ko‘p bosqichli kimyoviy tozalash hamda kobalt qatlamini cho‘ktirish uchun qo‘llanilgan magnetron changlatish jarayonining texnologik tafsilotlari faqat qisqacha keltirilgan edi. Shu sababli ushbu ish aynan mana shu tayyorlash texnologiyasi – kremniy sirtini ko‘p bosqichli kimyoviy tozalash va kobalt qatlamini magnetron changlatish usulida cho‘ktirishni batafsil bayon etishga, shuningdek, olingan $Co/SiO_2/Si$ strukturasining ko‘ndalang kesimini skanerlovchi elektron mikroskopiyasi (SEM) yordamida tahlil qilishga va MOY strukturaning muvaffaqiyatli shakllanganligini fizik jihatdan tasdiqlash uchun volt-amper xarakteristikasidan foydalanishga bag‘ishlangan.

Tajriba metodikasi.

Boshlang‘ich namunalar

Boshlang‘ich taglik sifatida o‘sish jarayonida fosfor atomlari bilan legirlangan, sanoat KEF-1 markali, geometrik o‘lchamlari $8 \times 4 \times 1\ mm^3$ bo‘lgan, xona haroratida solishtirma qarshiligi $\rho \approx 1{,}05\ \Omega\cdot cm$ ga teng va kristallografik yo‘nalishi [111] bo‘lgan monokristall $n\text{-}Si\langle P\rangle$ plastinalaridan foydalanildi. Boshlang‘ich namunalarning bir qismi Zn atomlari kiritilmagan holda, faqat Zn diffuziyasi sharoyitida termik ishlov berildi (natijada solishtirma qarshilik $\rho \approx 1{,}07\ \Omega\cdot cm$ ga teng bo‘ldi) — bu termik ishlov ta’sirini Zn legirlash ta’siridan ajratib olish maqsadida amalga oshirildi. Xona haroratida solishtirma qarshiligi $\rho \approx 1800\ \Omega\cdot cm$ bo‘lgan kuchli kompensirlangan $n\text{-}Si\langle P,Zn\rangle$ namunalari esa diffuzant gazining elastik bosimini hisobga oluvchi usul yordamida, Zn atomlarini yuqori haroratli diffuziya qilish orqali, bizning oldingi ishlarimizda

[11, 12] batafsil tavsiflangan metodika bo‘yicha olindi. Qurilma tayyorlashdan oldin Xoll effekti o‘lchovlari orqali aniqlangan tagliklarning asosiy elektrofizik parametrlari 1-jadvalda keltirilgan.

1-jadval. Kremniy tagliklarning elektrofizik parametrlari [9]

Namuna	ρ, Ω·cm	μ, sm²/(V·s)	n, sm⁻³	Fermi sathi, eV
n–Si⟨P⟩, boshlang‘ich namuna	1,05	1188,43	$5{,}01\times10^{15}$	0,254541
n–Si⟨P⟩ (termik ishlov berilgan boshlang‘ich namuna)	1,07	1167,32	$4{,}99\times10^{15}$	0,254659
n–Si⟨P,Zn⟩	1800	808	$4{,}28\times10^{12}$	0,39504

Kremniy sirtini ko‘p bosqichli kimyoviy tozalash

Oksidlash va metallashtirishdan oldin barcha kremniy namunalari organik va noorganik ifloslanishlarni yo‘qotish hamda takrorlanuvchan, aniq boshlang‘ich sirtni hosil qilish maqsadida uch bosqichli kimyoviy tozalash jarayonidan o‘tkazildi.

1-bosqich – erituvchilar bilan tozalash. Namuna sirtidagi yog‘simon va organik qoldiqlarni olib tashlash uchun namunalar 55°C haroratgacha qizdirilgan asetonga 10 daqiqa davomida botirildi. Keyin aseton qoldiqlarini yo‘qotish maqsadida namunalar 2–5 daqiqa davomida metanol eritmasiga joylashtirildi. So‘ngra namunalar deionizatsiyalangan (DI) suv bilan chayilib, azot oqimida quritildi [5].

2-bosqich – RCA-1 (Standart tozalash 1) ishlovi. Tozalovchi eritma $H_2O:NH_4OH:H_2O_2 = 5:1:1$ hajmiy nisbatda, 325 ml deionizatsiyalangan suv, 65 ml 27% li ammoniy gidroksidi va 65 ml 30% li vodorod peroksididan tayyorlandi. Eritma 70±5°C haroratda ushlab turildi, kremniy namunalari unda 15 daqiqa davomida ishlov berildi. Ushbu bosqichda organik ifloslanishlar oksidlanib parchalanadi [5]. Shundan so‘ng namunalar deionizatsiyalangan suvda bir necha marta chayildi.

3-bosqich – HF bilan ishlov berish. RCA-1 bosqichida hosil bo‘lgan kimyoviy oksid bilan birgalikda tabiiy oksid qatlamini ham olib tashlash uchun namunalar 2% li HF eritmasida (480 ml H_2O + 20 ml 49% li HF) 2 daqiqa davomida ushlab turildi. Natijada ham tabiiy, ham RCA jarayonida hosil bo‘lgan SiO_2 qatlami eritib yuborildi va vodorod bilan passivlangan kremniy sirti hosil bo‘ldi [6]. Namunalar so‘ngra deionizatsiyalangan suvda yaxshilab chayilib, azot oqimida quritildi.

Tozalash sifati namlanish testi yordamida nazorat qilindi: namuna sirtiga deionizatsiyalangan suv tomchisi tomizilib, uning xatti-harakati kuzatildi. Suv tomchisining sirtda yoyilmasdan saqlanib qolishi (dumaloqlanishi) sirtning gidrofob holatga o‘tganligini, ya’ni oksid qatlamining muvaffaqiyatli olib tashlanganligi va vodorod bilan passivlangan sirt hosil bo‘lganligini tasdiqladi [7, 8]. Namlanish testidan muvaffaqiyatli o‘tgan kremniy namunalari keying – dielektrik qatlamni hosil qilish bosqichi uchun tayyor deb hisoblandi.

SiO_2 dielektrik qatlamini hosil qilish

Kimyoviy tozalangan sirtda kerakli qalinlikdagi kremniy dioksidi qatlami nam termik oksidlash usulida o‘stirildi: namunalar 121°C haroratdagi azot kislotasi (HNO_3) ga 15 daqiqa davomida botirildi, natijada qalinligi 2–5 nm bo‘lgan SiO_2 qatlami hosil bo‘ldi, bu [13, 9] ishlarda tavsiflangan protsedura bilan mos keladi. Hosil bo‘lgan oksid qatlamining qalinligi spektroskopik ellipsometriya usulida tajribaviy tekshirildi.

Co metall qatlamini magnetron changlatish usulida cho‘ktirish

Kobalt metall qatlami SiO_2/Si sirtiga DXZD-400 yuqori vakuumli qoplash qurilmasida doimiy tok (DC) magnetron changlatish usulida cho‘ktirildi. Cho‘ktirishdan oldin ishchi kamera 5×10^{-5} Pa bosimgacha so‘rib olindi. So‘ngra ishchi gaz sifatida yuqori tozalikdagi argon 80 sccm oqim tezligida kiritilib, kamerada 4 Pa ishchi bosim hosil qilindi. Kobalt target changlatilishi 100 Vt DC quvvatda amalga oshirildi, bu esa target kuchlanishi 276 V va razryad tok kuchi 363 mA ga mos keladi. Ushbu sharoitlarda kobaltning cho‘kish tezligi 0,17 Å/s ni tashkil etdi. Cho‘ktirish jarayonida qatlam bir jinsliligini ta’minlash uchun taglik ushlagichi 5–20 rpm oralig‘ida aylantirildi, target-taglik masofasi esa qurilmaning 240–340 mm sozlanuvchi oralig‘ida o‘rnatildi. O‘sib borayotgan qatlam qalinligi real vaqt rejimida INFICON SQC310 kvarts-kristall qalinlik monitori (aniqligi 0,01 Å/s) yordamida nazorat qilindi; cho‘ktirish jarayoni kobaltning nominal qalinligi 10–15 nm ga yetgach to‘xtatildi, bu qiymat keyinchalik spektroskopik ellipsometriya orqali ham tasdiqlandi [9].

Kobalt qatlamini cho‘ktirish uchun qo‘llanilgan magnetron changlatish jarayonining asosiy texnologik parametrlari 2-jadvalda umumlashtirilgan.

2-jadval. Kobalt qatlamini cho‘ktirish uchun qo‘llanilgan magnetron changlatish jarayonining texnologik parametrlari

Parametr	Qiymat
Kamerada bazaviy bosim	$< 6\times10^{-5}$ Pa
Ishchi gaz	Ar
Ar oqim tezligi	80 sccm
Ishchi (Ar) bosim	4 Pa
Changlatish quvvati (DC)	100 Vt
Target kuchlanishi	276 V
Razryad tok kuchi	363 mA
Cho‘kish tezligi	0,17 Å/s
Taglik aylanish tezligi	5–20 rpm
Target-taglik masofasi	240–340 mm
Co qatlamining nominal qalinligi	10–15 nm

Kobalt qatlamini cho'ktirish uchun qo'llanilgan DXZD-400 yuqori vakuumli magnetron changlatish qurilmasining umumiy ko'rinishi 1-rasmda keltirilgan.



1-rasm. Co metall qatlamini cho'ktirish uchun qo'llanilgan DXZD-400 yuqori vakuumli magnetron changlatish qurilmasining umumiy ko'rinishi.

Kontaktlarni hosil qilish va VAX o‘lchash tartibi

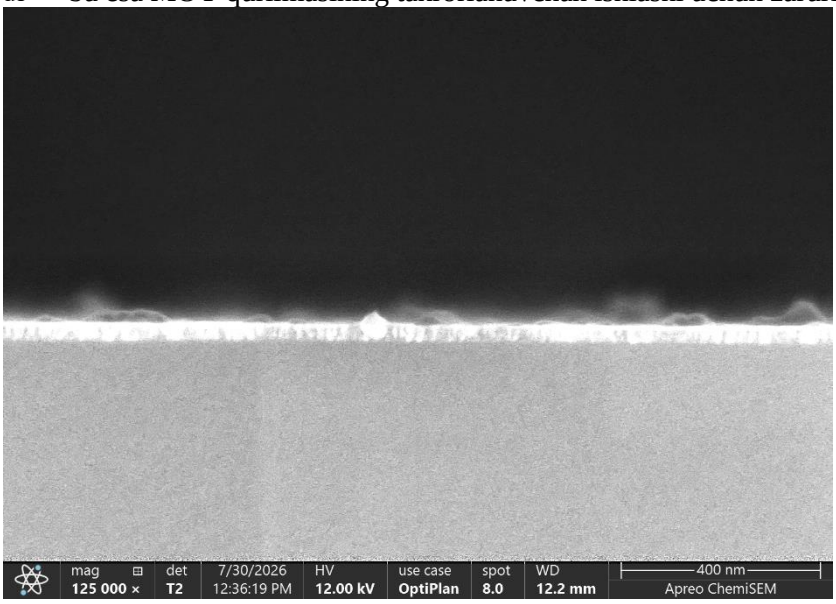
Elektr o‘lchovlarini amalga oshirish uchun yuqori metall (Co) sirtida va yarimo‘tkazgich taglikning orqa tomonida o‘tkazuvchan kumush pastasi yordamida omik kontaktlar hosil qilindi. Kumush pasta bilan hosil qilingan kontakt maydonchasiga qalinligi 50 μm bo‘lgan mis sim qo‘yildi, uning ustiga yana bir qatlam kumush pasta surtildi va butun yig‘ma xona haroratida 6 soat davomida quritildi. Kumush pasta qotgach, mexanik mustahkamlik va ishonchlilikni ta’minlash maqsadida kontaktlar Micro SET M RA lazer payvandlash qurilmasi yordamida payvandlandi. Tayyorlangan $Co/SiO_2/n-Si\langle P\rangle$ va $Co/SiO_2/n-Si\langle P,Zn\rangle$ strukturalarining volt-amper xarakteristikalari xona haroratida [9, 14] ishlarda tavsiflangan standart metodika bo‘yicha o‘lchandi, potensial to‘siq balandligi φ_B esa VAX ning to‘g‘ri tarmog‘idan Cheung va Cheung usuli [14] yordamida hisoblandi.

Natijalar va muhokama.

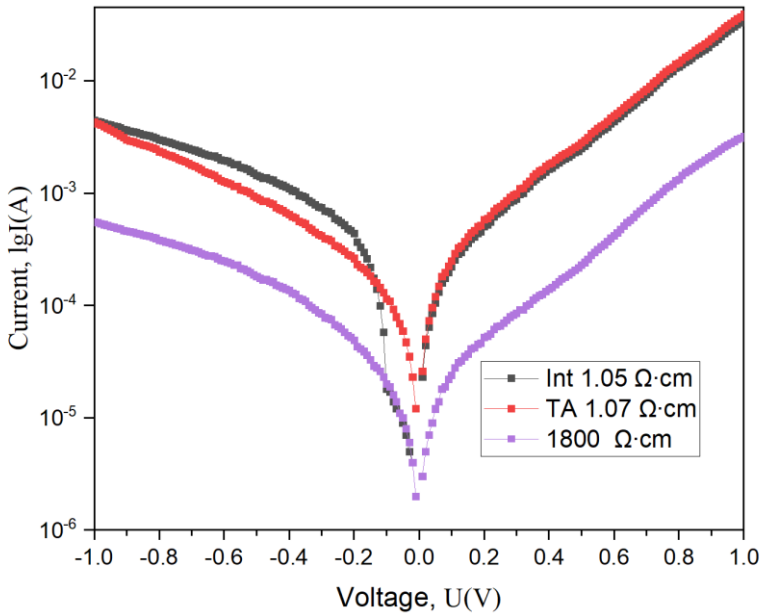
Co/SiO₂/Si strukturasining ko‘ndalang kesimini SEM tahlili

2-rasmda tayyorlangan $Co/SiO_2/n-Si$ strukturasining ko‘ndalang kesimining SEM tasviri keltirilgan, u Thermo Fisher Scientific Apreo ChemiSEM (integrallashgan energiya-dispersiv rentgen spektroskopiyasi – EDS detektori bilan jihozlangan) skanerlovchi elektron mikroskopi yordamida, 125 000× kattalashtirishda (tezlashtiruvchi kuchlanish 12,00 kV, T2 detektor, ishchi masofa 12,2 mm) olindi. Tasvirning pastki qismi kremniy taglikning asosiy qismiga to‘g‘ri keladi va yuqori aniqlikdagi tasvirlashda monokristall kremniyga xos bo‘lgan donador kontrastni namoyon qiladi. Taglik ustida aniq ko‘rinuvchi, uzluksiz yorqin qatlam kuzatiladi – bu yupqa SiO_2 dielektrik qatlami va kobalt metall qatlamining birgalikdagi tasviri hisoblanadi; ushbu qatlam bilan kremniy taglik orasidagi chegara butun tasvirlangan hudud bo‘ylab keskin va uzluksiz bo‘lib, qavatlanish (delaminatsiya) yoki makroskopik bo‘shliqlarning izlari kuzatilmadi. Yorqin qatlam qalinligida kichik mahalliy tebranishlar ko‘zga tashlanadi, bu esa bizning oldingi

atom-kuch mikroskopiyasi (AFM) tadqiqotimizda [9] yupqa kobalt plyonkalari uchun qayd etilgan orolsimon (Volmer–Weber) o‘sish mexanizmiga mos keladi. Yorqin qatlam ustidagi qorong‘i hudud esa metall qatlam ustidagi namuna sirti hududiga to‘g‘ri keladi. Umuman olganda, SEM tasviri 1.2-bo‘limda tavsiflangan ko‘p bosqichli kimyoviy ishlov, undan keyingi SiO_2 hosil qilish va magnetron changlatish usulida Co cho‘ktirish jarayonlari natijasida strukturaviy jihatdan uzluksiz $Co/SiO_2/Si$ qatlamlar tizimi hosil bo‘lganligini tasdiqlaydi — bu esa MOY qurilmasining takrorlanuvchan ishlashi uchun zaruriy shartdir.



2-rasm. $Co/SiO_2/n$-Si strukturasining Thermo Fisher Scientific Apreo ChemiSEM (EDS detektori bilan) yordamida olingan ko‘ndalang kesim SEM tasviri (125 000× kattalashtirish, 12,00 kV, T2 detektor, WD 12,2 mm, masshtab chizig‘i 400 nm)



3-rasm. $Co/SiO_2/n-Si\langle P\rangle$ (boshlang‘ich, Int, ρ = 1,05 Ω·cm), $Co/SiO_2/n-Si\langle P\rangle$ (termik ishlov berilgan, TA, ρ = 1,07 Ω·cm) va $Co/SiO_2/n-Si\langle P,Zn\rangle$ (ρ = 1800 Ω·cm) strukturalarining xona haroratidagi volt-amper xarakteristikasi (yarim-logarifmik |I|–U grafigi) [9]

MOY strukturaning shakllanganligini tasdiqlovchi volt-amper xarakteristika

Tavsiflangan texnologik ketma-ketlik natijasida funksional metall-oksid-yarimo‘tkazgich o‘tishi hosil bo‘lganligini fizik jihatdan tasdiqlash maqsadida, yuqorida tavsiflangan bir xil tozalash va cho‘ktirish texnologiyasi bo‘yicha tayyorlangan $Co/SiO_2/n-Si\langle P\rangle$ va $Co/SiO_2/n-Si\langle P,Zn\rangle$ strukturalarining xona haroratidagi volt-amper xarakteristikalari tahlil qilindi (3-rasm). Ushbu VAX o‘lchovlari bizning oldingi ishimizda [9] batafsil keltirilgan bo‘lib, bu yerda ular aynan MOY strukturaga xos potensial to‘siqning

muvaffaqiyatli fizik shakllanganligining isboti sifatida qo‘llaniladi. 3-rasmdan ko‘rinib turibdiki, tekshirilgan barcha strukturalarda aniq ifodalangan to‘g‘rilovchi (diodsimon) xatti-harakat kuzatildi, bunda |U| = 1 V da to‘g‘ri tok teskari tokdan bir necha marta katta bo‘ldi; taglikning solishtirma qarshiligi 1,05–1,07 Ω·cm dan 1800 Ω·cm gacha oshishi bilan teskari tarmoqdagi tok qiymati izchil ravishda kamayadi, bu esa kuchli Zn bilan kompensirlangan taglikning yuqori ketma-ket qarshiligi va past erkin zaryad tashuvchilar konsentratsiyasiga mos keladi.

VAX ning to‘g‘ri tarmog‘idan Cheung va Cheung usuli [14] yordamida hisoblangan potensial to‘siq balandligi φ_B qiymatlari turli solishtirma qarshilikka ega tagliklar uchun 3-jadvalda umumlashtirilgan.

3-jadval. Turli solishtirma qarshilikka ega tagliklarda tayyorlangan strukturalarning potensial to‘siq balandligi qiymatlari

№	Struktura	Taglikning solishtirma qarshiligi, Ω·cm	Potensial to‘siq balandligi φ_B, eV
1	$Co/SiO_2/n-Si\langle P\rangle$ (boshlang‘ich namuna)	1,05	0,4734
2	$Co/SiO_2/n-Si\langle P\rangle$ (1150°C da termik ishlov berilgan)	1,07	0,4722
3	$Co/SiO_2/n-Si\langle P,Zn\rangle$	1800	0,4798

3-jadvaldan ko‘rinib turibdiki, taglik solishtirma qarshiligidan qat’i nazar, tekshirilgan barcha strukturalarda aniq ifodalangan potensial to‘siq ($\varphi_B \approx$ 0,47–0,48 eV) hosil bo‘lgan, bu esa qo‘llanilgan texnologik ketma-ketlik – ko‘p bosqichli kimyoviy tozalash, nam termik oksidlash va magnetron changlatish usulida Co cho‘ktirish – kuchli Zn bilan kompensirlangan va boshlang’ich kremniy tagliklarida strukturaviy va elektrik jihatdan izchil MOY o‘tishlarini berishini so‘zsiz tasdiqlaydi. Namunalar orasida φ_B qiymatining nisbatan kichik o‘zgarishi (≈1,6% doirasida) 1-bo‘limda tavsiflangan ko‘p bosqichli tozalash va cho‘ktirish texnologiyasining takrorlanuvchanligini yana bir bor tasdiqlaydi, chunki potensial to‘siq balandligi nazoratsiz interfeys ifloslanishiga va cho‘ktirilgan metall qatlamning notekisligiga juda sezgir bo‘ladi [9, 14].

Xulosa. $Co/SiO_2/n-Si\langle P,Zn\rangle$ MOY strukturalarini tayyorlash uchun batafsil, takrorlanuvchan texnologik yo‘l taqdim etildi, u kremniy sirtining uch bosqichli kimyoviy tozalanishini (erituvchilar bilan tozalash, RCA-1 ishlovi va HF bilan etchlash, namlanish testi orqali nazorat qilingan), SiO_2 hosil qilish uchun nam termik oksidlashni va DXZD-400 qurilmasida kobaltni DC magnetron changlatish usulida cho‘ktirishni (Ar oqim tezligi 80 sccm, ishchi bosim 4 Pa, changlatish quvvati 100 Vt) o‘z ichiga oladi. Ko‘ndalang kesimning SEM tahlili makroskopik nuqsonlarsiz, uzluksiz va aniq chegaraga ega $Co/SiO_2/Si$ qatlamlar tizimi shakllanganligini tasdiqladi. Funksional MOY o‘tishining fizik jihatdan shakllanganligi tayyorlangan strukturalarning volt-amper xarakteristikalari orqali tasdiqlandi – ular keng diapazondagi (1,05–1800 Ω·cm) solishtirma qarshilikka ega tagliklarda barqaror $\varphi_B \approx$ 0,47–0,48 eV qiymatiga ega aniq to‘g‘rilovchi xususiyatni namoyon qildi. Shu tariqa, taqdim etilgan texnologiya kelgusida sensor va pozitsion-sezgir qurilmalar uchun mo‘ljallangan $Co/SiO_2/Si\langle P,Zn\rangle$ gibrid strukturalarni tayyorlashning ishonchli va takrorlanuvchan asosi sifatida qaralishi mumkin.

ADABIYOTLAR:

1. Liang, Z.; Wu, W.; Fang, Z.; Deng, Z.; Fu, X.; Ning, H.; Luo, D.; Zhu, Z.; Yao, R.; Peng, J. A Review of Doped Metal Oxide Semiconductors in the Stability of Thin Film Transistors. J. Alloys Compd. 2025, 1010, 177434, doi:10.1016/j.jallcom.2024.177434.

2. Theka, T.J.; Swart, H.C.; Motaung, D.E. Recent Trends, Advances, and Challenges in MOF-Derived Metal Oxide Semiconductor-Based Sensors for BTEX Detection: A Review. Inorg. Chem. Commun. 2024, 168, 112884, doi:10.1016/j.inoche.2024.112884.

3. Gao, S.-L.; Qiu, L.-P.; Zhang, J.; Han, W.-P.; Ramakrishna, S.; Long, Y.-Z. Persistent Photoconductivity of Metal Oxide Semiconductors. ACS Appl. Electron. Mater. 2024, 6, 1542–1561, doi:10.1021/acsaelm.3c01549.

4. Bakhadyrkhanov, M.K.; Isamov, S.B.; Kenzhaev, Z.T.; Melebaev, D.; Zikrillayev, Kh.F.; Ikhtiyarova, G.A. Silicon Photovoltaic Cells with Deep p–n-Junction. Appl. Sol. Energy 2020, 56, 13–17, doi:10.3103/S0003701X2001003X.

5. Kern, W. The Evolution of Silicon Wafer Cleaning Technology. J. Electrochem. Soc. 1990, 137, 1887–1892, doi:10.1149/1.2086825.

6. Ishizaka, A.; Shiraki, Y. Low Temperature Surface Cleaning of Silicon and Its Application to Silicon MBE. J. Electrochem. Soc. 1986, 133, 666–671, doi:10.1149/1.2108651.

7. Chen, L.; Ngo, D.; Luo, J.; Gong, Y.; Xiao, C.; He, X.; Yu, B.; Qian, L.; Kim, S.H. Dependence of Water Adsorption on the Surface Structure of Silicon Wafers Aged under Different Environmental Conditions. Phys. Chem. Chem. Phys. 2019, 21, 26041–26048, doi:10.1039/C9CP04776J.

8. Angermann, H. Conditioning of Si-Interfaces by Wet-Chemical Oxidation: Electronic Interface Properties Study by Surface Photovoltage Measurements. Appl. Surf. Sci. 2014, 312, 3–16, doi:10.1016/j.apsusc.2014.05.087.

9. Arzikulov, E.U.; Usanov, R.M.; Lu, Shaowei; Liu, Teng; Nong, Zhisheng; Zoirov, S.X. The Co/SiO_2/n-Si⟨P,Zn⟩ Hybrid Structure as a Smart Material in Modern Nanoelectronics. Chop etish jarayonida.

10. Arzikulov, E.U.; Usanov, R.M.; Quvondiqov, Sh.J.; Lui, Teng; Bobonov, D.T.; Sattarov, S.A. Lateral Photoeffect in Metal–Oxide–Semiconductor Structures Based on Monocrystalline Silicon. Chop etish jarayonida.

11. Bakhadyrkhanov, M.K.; Zikrillaev, N.F.; Arzikulov, E.U. Влияние упругости паров диффузанта на концентрацию электроактивных атомов и степень компенсации образцов Si⟨Zn⟩. Письма в ЖТФ 1991, 17 (12), 1–4, https://journals.ioffe.ru/articles/25973.

12. Usanov, R.; Ashirov, U.; Sharafova, T.; Nurimov, A. Co/SiO_2/Si⟨P,Zn⟩ gibrid strukturasi uchun kuchli kompensirlangan Si⟨P,Zn⟩ tagliklarning elektrik xossalari va energetik diagrammasi. O‘zMU xabarlari — Вестник НУУз — Acta NUUz, Fizika, 2025, 3/1/1, 455–458.

13. Bondarev, I.A.; Rautskii, M.V.; Yakovlev, I.A.; Volochaev, M.N.; Lukyanenko, A.V.; Tarasov, A.S.; Volkov, N.V. Study of the Photovoltage in Mn/SiO_2/n-Si MOS Structure at Cryogenic Temperatures. Semiconductors 2019, 53, 1954–1958, doi:10.1134/S1063782619140045.

14. Cheung, S.K.; Cheung, N.W. Extraction of Schottky Diode Parameters from Forward Current–Voltage Characteristics. Appl. Phys. Lett. 1986, 49, 85–87, doi:10.1063/1.97359.

UDC 535.34.546.26

SKYRMION DYNAMICS IN MAGNETO-OPTICAL TRACKS OF ULTRA-THIN Si(111)/CoFeB/MgO/CoFeB JUNCTIONS

Yuldashev Ozodbek Yuldosh ugli,
Nanotechnology Development Center, National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek, Tashkent, Uzbekistan
ozodbekyoldoshev997@gmail.com
Ochilov Odil,
Nanotechnology Development Center, National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek, Tashkent, Uzbekistan
Ochilovodil@mail.ru
Malikov Komiljon Kholmuratovich,
Nanotechnology Development Center, National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek, Tashkent, Uzbekistan
komiljonmalikov1995@gmail.com
Daminov Rakhimjon Shokir ugli,
Nanotechnology Development Center, National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek, Tashkent, Uzbekistan
daminov_r@nuu.uz
Qarshiyev Zarnigor Alisher kizi,
Nanotechnology Development Center, National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek, Tashkent, Uzbekistan
zarnigorkarshieva806@mail.com
Toshboyev Nurbek Utkir ugli,
Nanotechnology Development Center, National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek, Tashkent, Uzbekistan
nurbekjontoshboyev001@gmail.com

Abstract. *Topologically protected spin textures, such as magnetic skyrmions, have shown the potential for high-density data storage and energy-efficient computing applications owing to their particle-like behavior, small size, and low driving current requirements. Evaluating the writing and reading of the skyrmion's magnetic and electrical characteristics is crucial to implementing these devices. In this paper, we present the magnetic heterostructure Hall bar device and study the anomalous Hall and topological Hall signals in these devices. Using different measurement techniques, we investigate the magnetic and electrical characteristics of the magnetic structure. We measure the skyrmion topological resistivity and the magnetic field at different temperatures. MFM imaging and micromagnetic simulations further explain the anomalous Hall and topological Hall resistivity characteristics at various magnetic fields and temperatures. The study is extended to propose a skyrmion-based synaptic device showing spin-orbit torquecontrolled plasticity. The resistance states are read using the anomalous Hall measurement technique. The device integration in a neuromorphic circuit is simulated in a 3-layer feedforward artificial neural network ANN. Based on the proposed synapses, the neural network is trained and tested on the MNIST data set, where a recognition accuracy performance of about 90% is achieved. Considering the nanosecond reading/writing time scale and a good system level performance, these devices exhibit a substantial prospect for energy-efficient neuromorphic computing.*

Keywords: *CoFeB, Magnetron Sputtering, Skyrmion, Racetrack, Thin films, MTJs.*

O‘TA YUPQA Si(111)/CoFeB/MgO/CoFeB O‘TISHLARINING MAGNETO-OPTIK YO‘LAKCHALARIDA SKIRMIONLAR DINAMIKASI

Annotatsiya. *Topologik jihatdan himoyalangan spinik teksturalar, masalan, magnit skirmionlar, zarrachasimon xatti-harakati, kichik o‘lchami va kam tok talab qilishi tufayli yuqori zichlikdagi ma’lumotlarni saqlash hamda energiya tejamkor hisoblash ilovalarida katta potensialni ko‘rsatdi. Ushbu qurilmalarni amalda qo‘llash uchun skirmionning magnit va elektr xarakteristikalarini yozish va o‘qish jarayonlarini baholash juda muhimdir. Ushbu maqolada biz magnit geterostrukturali Xoll sterjen qurilmasini taqdim etamiz va ushbu qurilmalarda anomal Xoll hamda topologik Xoll signallarini o‘rganamiz. Turli o‘lchov usullaridan foydalanib, biz magnit strukturaning magnit va elektr xarakteristikalarini tadqiq qilamiz. Biz turli haroratlarda skirmionning topologik solishtirma qarshiligini va magnit maydonini o‘lchaymiz. MFM tasvirlari va mikromagnit simulyatsiyalar turli magnit maydonlari va haroratlardagi anomal Xoll hamda topologik Xoll solishtirma qarshilik xarakteristikalarini yanada aniqroq tushuntirib beradi. Tadqiqot spin-orbital moment bilan boshqariladigan plastiklikni ko‘rsatadigan skirmionga asoslangan sinaptik qurilmani taklif qilish orqali kengaytirildi. Qarshilik holatlari anomal Xoll o‘lchash usuli yordamida o‘qiladi. Qurilmaning neyromorfik mikrosxemaga integratsiyasi 3 qatlamli to‘g‘ri uzatuvchi sun’iy neyron tarmog‘ida (ANN) simulyatsiya qilingan. Taklif etilgan sinapslar hisobiga neyron tarmog‘i MNIST ma’lumotlar to‘plamida o‘qitildi va sinovdan o‘tkazildi, u yerda taxminan 90% aniqlikdagi tanib olish samaradorligiga erishildi. Nanosaniyali o‘qish/yozish vaqti miqyosini va tizim darajasidagi yaxshi samaradorlikni hisobga olgan holda, ushbu qurilmalar energiya tejamkor neyromorfik hisoblash uchun sezilarli istiqbolni namoyish etadi.*

Kalit so‘zlar: *CoFeB, magnetronli purkash, skirmion, poyga yo‘li, yupqa pardalar, magnit tunnel o‘tishlari.*

ДИНАМИКА СКИРМИОНОВ НА МАГНИТООПТИЧЕСКИХ ТРЕКАХ УЛЬТРАТОНКИХ ПЕРЕХОДОВ Si(111)/CoFeB/MgO/CoFeB

Аннотация. *Топологически защищённые спиновые текстуры, такие как магнитные скирмионы, продемонстрировали потенциал для высокоплотного хранения данных и энергоэффективных вычислительных приложений благодаря своему частицеподобному проведению, малому размеру и низким требованиям к току управления. Оценка записи и чтения магнитных и электрических характеристик скирмиона имеет решающее значение для реализации этих устройств. В этой статье мы представляем устройство на основе магнитной гетероструктурной перемычки Холла и исследуем сигналы аномального эффекта Холла и топологического эффекта Холла в этих устройствах. Используя различные методы измерений, мы исследуем магнитные и электрические характеристики магнитной структуры. Мы измеряем топологическое удельное сопротивление скирмиона и магнитное поле при различных температурах. MFM-изображения и микромагнитное моделирование дополнительно объясняют характеристики удельного сопротивления аномального эффекта Холла и топологического эффекта Холла при различных магнитных полях и температурах. Исследование расширено предложением синаптического устройства на основе скирмиона, демонстрирующего пластичность, управляемую спин-орбитальным моментом. Состояния сопротивления считываются с использованием метода измерения аномального эффекта Холла. Интеграция устройства в нейроморфную схему смоделирована в 3-слойной искусственной нейронной сети прямого распространения (ANN). На основе предложенных синапсов нейронная сеть была обучена и протестирована на наборе данных MNIST, где была достигнута эффективность распознавания с точностью около 90%. Учитывая наносекундный временной масштаб чтения/записи и хорошую производительность на системном уровне, эти устройства демонстрируют значительные перспективы для энергоэффективных нейроморфных вычислений.*

Ключевые слова: *CoFeB, магнетронное распыление, скирмион, трек, тонкие плёнки, магнитные туннельные переходы.*

Introduction. Digital electronics has been driven for several decades by continuous hardware scaling and Moore’s law. However, with the recent slowdown in Complementary Metal Oxide Semiconductor (CMOS) technology[4-7], the rapid growth of software, and the shift from cloud computing toward edge devices, there is a strong motivation to re-examine the fundamental limits of computing. In the conventional

Von Neumann architecture, a digital processor must access data stored in separate memory units to perform logic operations. Unfortunately, memory scaling has not kept pace with the dramatic increase in processor speed. This so-called “memory wall” problem is one of the primary bottlenecks limiting further improvements in computing performance. To mitigate this issue, a multi-level memory hierarchy is employed, where frequently accessed instructions and data are stored in a high-speed on-chip cache, enabling efficient processing. This cache is typically implemented using Static Random Access Memory (SRAM). However, SRAM requires at least six transistors per bit, making it costly and limiting its density. As a result, systems rely heavily on off-chip Dynamic Random Access Memory (DRAM). Each DRAM cell consists of a compact capacitor–transistor pair, offering high density but at the cost of speed and energy efficiency. DRAM requires periodic refresh operations to compensate for charge leakage, which increases access latency and energy consumption.

Consequently, there is significant research interest in developing memory technologies that combine the speed of SRAM with the density of DRAM. Magnet-based nonvolatile memory has emerged as a promising candidate to address this challenge. Magnetic memory[2] technologies have a long history, with Magnetic Random Access Memory (MRAM) and Spin Transfer Torque RAM (STT-RAM) now reaching commercialization. MRAM faces scaling challenges because its operation requires increasing current densities, leading to higher energy dissipation. In contrast, STT-RAM exhibits better scalability, as switching is achieved through spin-polarized currents injected across a magnetic tunnel junction. Since the discovery of Giant Magnetoresistance in the late 1980s, STT-RAM has evolved from a theoretical concept to a strong candidate for on-chip cache memory. STT-RAM combines DRAM-like density with performance comparable to SRAM. It also offers additional advantages such as CMOS compatibility, zero standby leakage, high endurance, long retention time, and overall reliability.

In particular, its higher density compared to transistor-based SRAM makes it attractive for implementing large-capacity nonvolatile last-level caches, potentially reducing the need for off-chip DRAM accesses. Despite these advantages, several challenges hinder the widespread adoption of STT-RAM. These include high write energy and relatively slow read speeds compared to CMOS-based cache. These limitations can be mitigated by reducing the energy barrier between binary states, but this leads to increased error rates, resulting in an inherent energy–delay–error trade-off. Although error rates can be reduced using advanced circuit-level techniques, such approaches often limit the full benefits of STT-RAM. Moreover, scaling further exacerbates reliability issues, requiring stronger error correction mechanisms and reducing energy efficiency. Additional challenges include bidirectional write currents, asymmetry in critical switching currents, shared read/write paths, and single-ended sensing schemes.

A significant portion of the write energy in STT-RAM arises from the need to pass current through a high-resistance tunnel barrier. To address this, alternative designs such as Spin Orbit Torque RAM (SOT-RAM) have been proposed, where write and read paths are separated, improving efficiency.This brings attention to information encoding using topological (solitonic) excitations in thin magnetic films, such as domain walls and skyrmions. These excitations enable information storage in ultra-small volumes, even below the thermal superparamagnetic limit that constrains conventional magnetic systems. Solitons can be driven at high speeds by relatively small currents along magnetic racetracks, resulting in low energy dissipation and enabling novel device concepts.

In particular, the high density of ultra-small skyrmions, their topological stability, and their quasi-bllistic, tunable dynamics make them highly promising for a wide range of computing applications.The aim of this Perspective is to examine the factors governing the size, dynamics, lifetime, and switching behavior of isolated skyrmions, as well as the material systems that support them. Furthermore, their potential applications in both conventional and unconventional computing paradigms are explored.The paper is structured as follows: first, the current memory landscape is reviewed; next, the fundamental physical and material constraints of skyrmions and domain walls are discussed, along with their experimental characterization; then, skyrmion-based device concepts are proposed; and finally, the challenges and future opportunities for skyrmionics technology are outlined.

Object of investigation and methods applied. Thin nanostructured Si(111)/CoFeB/MgO/CoFeB thin films were fabricated using the magnetron sputtering (MS) technique. This method is characterized by its low cost, simplicity, and precise control over thin-film growth. In this study, Si (111) single-crystal silicon substrates were used. Before deposition, the substrates were subjected to a sequential cleaning process: first rinsed in deionized (DI) water, then treated with ethanol and acetone, and finally rinsed again with DI water. In addition, the substrates were cleaned using argon plasma inside the magnetron sputtering system. This multistep cleaning procedure was carried out to completely remove organic and inorganic contaminants, as

well as to ensure good adhesion and the formation of uniform thin films. After cleaning, the substrates were dried under a nitrogen flow and stored under vacuum inside the sputtering system.

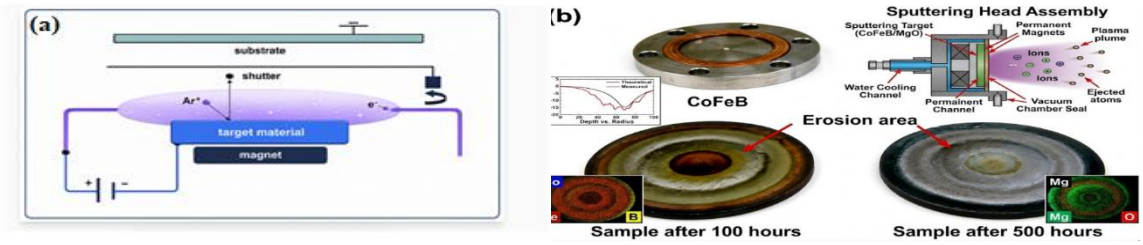


Figure 1. Schematic illustration of (a) the magnetron sputtering deposition setup/structure, and (b) the target configuration used for thin film growth

The schematic structure of the fabricated skyrmion device is shown in Figure 1. The device consists of a Si(111)/CoFeB/MgO/CoFeB nanostructure deposited on a Si(111) single-crystal silicon substrate. This vertical "sandwich-like" configuration enables skyrmion transport through magnetic tunnel junctions (MTJs) across the MgO layer under the influence of a magnetic field. The applied multistep cleaning process reduces surface contamination, thereby improving film uniformity and adhesion, and enhancing the stability and reproducibility of MTJ characteristics in skyrmionic devices.

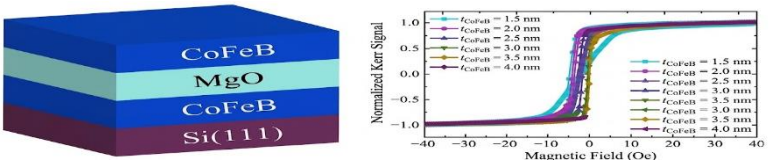


Figure 2. Schematic illustration of the multilayer CoFeB/MgO/CoFeB heterostructure deposited on a Si(111) substrate for skyrmion device applications

The deposition process was carried out under high-vacuum conditions on a heated substrate. The deposition temperature was maintained at 200 °C and continuously monitored via a control display. First, the CoFeB layer was deposited onto the Si(111) substrate, followed by the deposition of the MgO layer with controlled thickness, and then another CoFeB layer was deposited with varying thicknesses as a function of time CoFeB(t) as demonstrated in the experiment. The sequentially grown thin films were subsequently annealed at 800 °C under high-vacuum conditions, which improved the crystalline structure and stabilized the interfaces.

Results.

AFM Characterization Results

The AFM (Atomic Force Microscopy) analysis of the fabricated CoFeB nanoporous thin film reveals that the resulting layer, shown in both the amorphous state at 200 °C and the crystalline state at 800 °C, exhibits a highly homogeneous surface morphology and is formed through a stable growth mechanism. Topographic images clearly demonstrate a continuous morphology, indicating that the deposition process occurred under near-equilibrium conditions where interatomic diffusion and surface energy minimization were effectively balanced. The AFM scans further reveal that the CoFeB film possesses a distinct granular (nanogranular) surface texture. Significantly, the coexistence of amorphous and nanocrystalline phases is also reflected in the surface topography, where atomically smooth amorphous regions transition into clearly defined nanogranular crystalline domains. The grain size and height distribution appear relatively uniform, suggesting that the material possesses either a nanocrystalline structure or a partially amorphous phase with well-controlled surface roughness. These structural and morphological characteristics are typical for CoFeB-based systems and are particularly significant for magnetic properties, spin polarization phenomena, and electron tunneling processes.

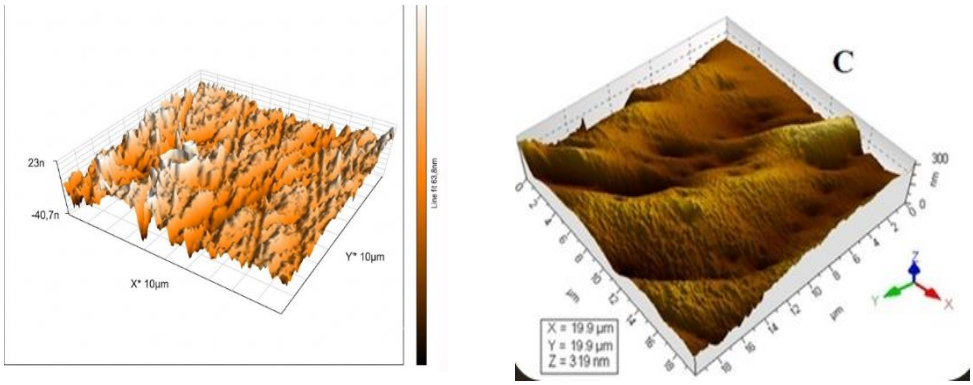


Figure 3. (a) amorf (b) kristall

Furthermore, the absence of pronounced surface defects, microcracks, or large agglomerates confirms the high-quality growth of the film. The grain boundaries are relatively well-defined on the surface, indicating that kinetic parameters during deposition—such as substrate temperature, deposition rate, and plasma energy—were optimally controlled. Additionally, the observed surface nanostructure exhibits low root-mean-square (RMS) roughness; this value is further reduced due to the amorphous matrix filling the intergranular voids of the crystalline phase, thereby providing exceptionally flat and uniform interfaces. This morphological feature contributes to soft magnetic behavior, low coercivity, and enhanced magnetic susceptibility by minimizing pinning sites. Overall, the fabricated CoFeB nanoporous thin film demonstrates a high-quality, structurally stable, and functionally promising surface topography. The obtained results suggest that this material is a strong candidate for applications in spintronics, magnetic tunnel junctions (MTJs), and advanced nanoelectronic devices.

MOKE Characterization Results

Magnetometry based on the magneto-optical Kerr effect (MOKE) was utilized to acquire local magnetization hysteresis loops. To precisely identify the coordinates of the transition region from perpendicular magnetic anisotropy (PMA) to in-plane (IM) magnetization within the samples and to perform a preliminary assessment of the magnetic properties, images were captured using a large-view MOKE microscope. For the visualization of skyrmion characteristics, high-resolution MOKE microscopy was employed, featuring the capability to apply variable and combined in-plane (IP) and out-of-plane (OOP) magnetic fields.

At the same time, the non-symmetric response of magnetization under opposite field directions may indicate intrinsic anisotropy in the system as well as pinning effects of domain walls.

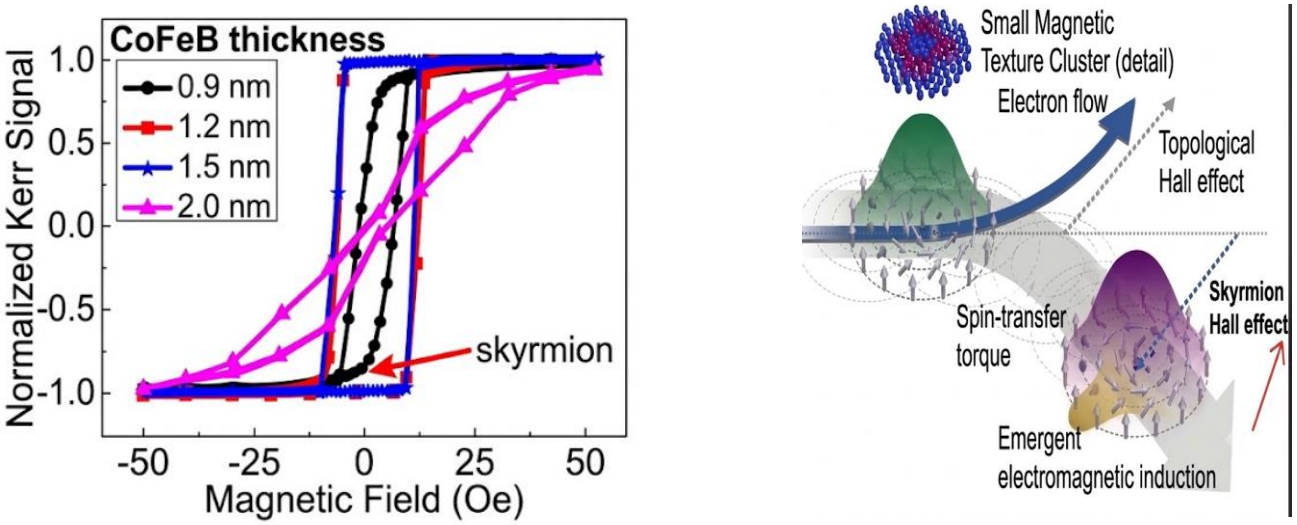


Figure 4. Hysteresis curve 36a obtained by MOKE. The magnetic phase image corresponds to an external magnetic field value of 6 mT. Both scans are 65 μm across. (b) Hysteresis curve produced by the sample using the MOKE microscope with applied field from -50 mT to +50 mT.

The magneto-optical Kerr effect (MOKE) results were recorded during the reduction of the external magnetic field. During this process, reorganization of magnetic domains and a transition of the magnetic state into metastable configurations were observed. A corresponding observation was noted when the reverse magnetic field was reduced from −50 mT to 50 mT, displaying a distinctly asymmetrical magnetization response relative to the field direction. This enables the analysis of the spatial distribution of magnetic domains at the nanometer scale.

The presence of skyrmion-like structures on the surface, with an estimated diameter of approximately 300 nm, is hypothesized. However, due to the limited contrast of the optical system and an effective spatial resolution of approximately 500 nm*, distinguishing these nanoscale features clearly and reliably poses a challenge. Nevertheless, literature reports indicate that skyrmions under ideal conditions typically possess diameters within the 1–100 nm range, further complicating their direct visualization using techniques with relatively low spatial resolution, such as MOKE.

The contrast variations observed during the magnetic field reduction process may be associated with the formation of complex domain structures resulting from the Dzyaloshinskii–Moriya interaction (DMI) and spin – orbit coupling within the material. Simultaneously, the asymmetrical response of the magnetization under opposite field directions indicates the intrinsic anisotropy of the system as well as domain wall pinning effects.

Conclusion. In this study, Si(111)/CoFeB/MgO/CoFeB thin films were successfully fabricated using the magnetron sputtering technique. Magneto-optical analysis of the device revealed clear magnetic tunnel junction (MTJ) transition behavior associated with skyrmion dynamics, which was also observed via AFM and MOKE measurements. The obtained results indicate that interface effects within the MgO layer play a crucial role in the MTJ-related switching process and the dynamics of skyrmion formation.These findings confirm that the Si(111)/CoFeB/MgO/CoFeB nanostructure serves as a promising platform for exploring low-cost, skyrmion-based memory devices. Future studies may focus on interface engineering, doping, or the introduction of buffer layers, which could further improve MRAM characteristics and enhance device scalability for neuromorphic and non-volatile memory applications, such as SOT-RAM.

REFERENCES:

1. Normuradov M.T, Ochilov O, Yuldashev O.Y, Karshieva Z.A, Toshboyev N.U., "Resistive switching behavior of Si/TiO Thin films for non-volatile Memory application "east European journals of pyhsics. 2. 275-279 (2026).https://doi:10.26565/2312-4334-2026-2-29

2. Turkmenov X.I.,Ochilov O.,Malikov K.H.,Yuldashev.O.Y., "Magneto-optical effects in the reflection and transmission of light for the case of an equatorially magnetized plate," III International Confrence on Advances in Applied Physics and Mathematics for Energy, Environment and Earth Science EPJ Web of Conferences 318,2025, pp. 05008(1-6). https://doi:10.1051/epjconf/202531805008

3. Odil Ochilov, Husan Turkmenov, Gulzada Kulmatova, Komiljon Malikov, Ozodbek Yuldashev. "International Conference on Physical Research & Engineering Technology Problems," AIP Conf.Proc.3304,020005-1-020005-6; https://doi.org/10.1063/5.0269344

4. Khusan I. Turkmenova , Odil Ochilova, Gulzoda A. Qulmatova , Komiljon Kh. Malikova , Nargiza O. Abdulhkafizova. "Reflection Matrices in the Air-Magnetic Layer-Semiconductor System. Int J Drug Deliv Technol. https://impactfactor.org/PDF/IJDDT/16/IJDDT,Vol16,Issue50s,Article69.pdf*

5. Weiwei Zhang, Zhanghua Chen, Vladimir I. Belotelov and Yujun Song . "Longitudinal Magneto-Optical Kerr Effect of Nanoporous CoFeB and W/CoFeB/W Thin Films" Coatings 2022, 12, 115. https://doi.org/10.3390/coatings12020115

6. Guoqiang Yu, Pramey Upadhyaya, Qiming Shao, Hao Wu, Gen Yin,Xiang Li, Congli He, Wanjun Jiang, Xiufeng Han, Pedram Khalili Amiri, and Kang L. Wang. "Room-Temperature Skyrmion Shift Device for Memory Application" pubs.acs.org/NanoLet https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b04010

7. Sheng Yang; Yuelei Zhao; Xichao Zhang; Xiangjun Xing; Haifeng Du; Xiaoguang Li; Masahito Mochizuki; Xiaohong Xu; Johan Åkerman; Yan Zhou. "Fundamentals and applications of the skyrmion Hall effect" Appl. Phys. Rev. 11, 041335 (2024) https://doi.org/10.1063/5.021828

8. Jiang, W.; Upadhyaya, P.; Zhang, W.; Yu, G.; Jungfleisch, M.B.; Fradin, F.Y.; Pearson, J.E.; Tserkovnyak, Y.; Wang, K.L.; Heinonen, O.; te Velthuis, S.G.E.; Hoffmann, A. "Blowing Magnetic Skyrmion Bubbles" Science 2015, 349, 283, https://doi.org/10.1126/science.aaa1442

9. Woo, S.; Litzius, K.; Kruger, B.; Im, M.-Y.; Caretta, L.; Richter, K.; Mann, M.; Krone, A.; Reeve, R. M.; Weigand, M.; Agrawal, P.; Lemesh, I.; Mawass, M.-A.; Fischer, P.; Kläui, M.; Beach, G.S.D. "Observation of Room-Temperature Magnetic Skyrmions and Their Current-Driven Dynamics in Ultrathin Metallic Ferromagnets" Nat. Mater. 2016, 15, 501, https://doi.org/10.1038/nmat4593

10. Boulle, O.; Vogel, J.; Yang, H.X.; Pizzini, S.; de Souza Chaves, D.; Locatelli, A.; Mentes, T.O.; Sala, A.; Buda-Prejbeanu, L.D.; Klein, O.; Belmeguenai, M.; Roussigné, Y.; Stashkevich, A.; Chérif, S.M.; Aballe, L.; Foerster, M.; Chshiev, M.; Auffret, S.; Miron, I.M.; Gaudin, G. "Room-Temperature Chiral Magnetic Skyrmions in Ultrathin Magnetic Nanostructures" Nat. Nanotechnol. 2016 11, 449, https://doi.org/10.1038/nnano.2015.315

11. Roßler, U.K.; Bogdanov, A.N.; Pfleiderer, C. "Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals" Nature 2006 442, 797, https://doi.org/10.1038/nature05056

12. Nagaosa, N.; Tokura, Y. "Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions" Nature Nanotech. 2013 8, 899-911, https://doi.org/10.1038/nnano.2013.

13. Hsu, P.-J.; Kubetzka, A.; Finco, A.; Romming, N.; von Bergmann, K.; Wiesendanger, R. "Electric-Field-Driven Switching of Individual Magnetic Skyrmions" Nat. Nanotechnol. 2016, 12, 123, https://doi.org/10.1038/nnano.2016.

14. Schott M.; Bernand-Mantel, A.; Ranno, L.; Pizzini, S.; Vogel, J.; Béa, H.; Baraduc, C.; Auffret, S.; Gaudin, G.; Givord, D. The Skyrmion Switch: "Turning Magnetic Skyrmion Bubbles on and off with an Electric Field"NanoLett., 2017, 17, 3006, https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b00328

15. Tsymbal E. Y., "Spintronics:electrical toggling of magnets" Nat. Mater., 2012, 11, 12-13, https://doi.org/10.1038/nmat3205

16. Matsukura F.; Tokura, Y.; Ohno H. "Control of magnetism by electric fields" Nat. Nanotech., 2015,10, 209-2020, https://doi.org/10.1038/nnano.2015.22

17. Bauer U.; Yao L.; Tan A.J.; Agrawal P.; Emori S.; Tuller H.L.; van Dijken S.; Beach G.S.D. "Magneto-ionic control of interfacial magnetism" Nat. Mater., 2015 14, 174, https://doi.org/10.1038/nmat4134

18. Dieny B.; Chshiev M., "Perpendicular magnetic anisotropy at transition metal/oxide interfaces and applications" Rev. Mod. Phys., 2017, 89, 025008, https://doi.org/10.1103/RevModPhys.89.025008

19. Upadhyaya, P.; Yu, G.; Amiri, P. K.; Wang, K. L. "Electric-Field Guiding of Magnetic Skyrmions" Phys. Rev. B 2015, 92, 134411, https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.134411

20. Nakatani, Y.; Hayashi, M.; Kanai, S.; Fukami, S.; Ohno, H. "Electric Field Con15 trol of Skyrmions in Magnetic Nanodisks" Appl. Phys. Lett. 2016, 108, 152403, https://doi.org/10.1063/1.4945738

21. Nawaoka K.; Miwa, S.; Shiota, Y.; Mizuochi, N.; Suzuki, Y. "Voltage induction of interfacial Dzyaloshinskii-Moriya interaction in Au/Fe/MgO artificial multilayer" Appl. Phys. Express 2015, 8 8, 063004, https://doi.org/10.7567/APEX.8.063004

22. Nembach, H. T.; Shaw, J. M.; Weiler, M.; Jué, E.; Silva, T. J. "Linear relation between Heisenberg exchange and interfacial Dzyaloshinskii-Moriya interaction in metal films" Nat. Phys., 2015, 11, 825-829, https://doi.org/10.1038/nphys3418

23. Di, K.; Zhang, V.L.; Lim, H. S.; Ng, S. C.; Kuok, M. H.; Yu, J.; Yoon, J.; Qiu, X.; Yang H. "Direct Observation of the Dzyaloshinskii-Moriya Interaction in a Pt/Co/Ni Film" Phys. Rev.Lett., 2015, 114, 047201, https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.047201

24. Ma, X.; Yu, G.; Li, X.; Wang, T.; Wu, D.; Olsson, K. S.; Chu, Z.; An, K.; Xiao, J. Q.; Wang, K. L.; Li, X. "Interfacial control of Dzyaloshinskii-Moriya interaction in heavy metal/ferromagnetic metal thin film heterostructures" Phys. Rev. B, 2016, 94, 180408(R), https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.180408

UO‘K 538.975:621.793.7

NI/SIO₂/n-SI<P> METALL-OKSID-YARIMO‘TKAZGICH STRUKTURALARINI SHAKLLANTIRISH TEXNOLOGIYASI VA UNING EKSPERIMENTAL-FIZIK ASOSLARI

Sharafova To‘lg‘anoy Sunnat qizi,
Sharof Rashidov nomidagi
Samarqand davlat universiteti
tulganoysharafova@gmail.com

Annotatsiya. *Ushbu maqolada Ni/SiO₂/n-Si<P> metall-oksid-yarimo‘tkazgich (MOY) strukturalarini shakllantirishning to‘liq texnologik jarayoni va uning eksperimental-fizik asoslari bayon etilgan. Kremniy taglik yuzasi ko‘p bosqichli kimyoviy tozalashdan (erituvchida tozalash, RCA-1 va HF botirish) o‘tkazilgach, tunnel-shaffof SiO₂ dielektrik qatlami azot kislotasida oksidlash (NAOS) usulida hosil qilingan, so‘ngra oksidlangan yuzaga Ni qatlami DC magnetron changlatish usulida, orqa tomondagi kontakt maydonchasiga esa Al termik bug’latish usulida cho‘ktirilgan. Hosil bo‘lgan qatlamli tuzilma spektroskopik ellipsometriya (SiO₂ qalinligi – 3,74 nm, Cauchy modeli) va skanerlovchi elektron mikroskopiya (SEM, 125 000× kattalashtirish) yordamida tasdiqlangan, tuzilmaning yarimo‘tkazgichlik xossasi esa voltamper xarakteristikasi (VAX) asosida aniqlangan Shottki to‘siq balandligi (φ_B = 0,388–0,417 eV, [110] yo‘nalish) bilan isbotlangan. Olingan natijalar tavsiflangan texnologik jarayonning takrorlanuvchan va fizik jihatdan asoslanganligini ko‘rsatadi.*

Kalit so‘zlar. *Metall-oksid-yarimo‘tkazgich struktura, Ni/SiO₂/Si, ko‘p bosqichli kimyoviy tozalash, NAOS oksidlash, DC magnetron changlatish, spektroskopik ellipsometriya, SEM, Shottki to‘sig‘i, VAX.*

ТЕХНОЛОГИЯ ФОРМИРОВАНИЯ МЕТАЛЛ–ОКСИД –ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР Ni/SiO₂/n-Si<P> И ИХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

Аннотация. *В данной статье представлена полная технологическая последовательность формирования металл–окисел–полупроводниковых (МОП) структур Ni/SiO₂/n-Si<P> и рассмотрены их экспериментально-физические основы. После многостадийной химической очистки поверхности кремниевой подложки (очистка в растворителе, обработка RCA-1 и травление в растворе HF) методом окисления в азотной кислоте (NAOS) был сформирован туннельно-прозрачный диэлектрический слой SiO₂. Затем на окисленную поверхность методом DC-магнетронного распыления был нанесён слой Ni, а на тыльную сторону подложки методом термического испарения был сформирован контактный слой Al. Полученная слоистая структура была подтверждена методами спектроскопической эллипсометрии (толщина слоя SiO₂ – 3,74 нм, в рамках модели Коши) и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ, увеличение 125 000×). Полупроводниковые свойства структуры были подтверждены на основе вольт-амперных характеристик (ВАХ) посредством определения высоты барьера Шоттки (φ = 0,388–0,417 эВ, направление [110]). Полученные результаты показывают, что разработанный технологический процесс формирования структуры является воспроизводимым и имеет физически обоснованный характер.*

Ключевые слова. *Металл – окисел – полупроводниковая структура, Ni/SiO₂/Si, многостадийная химическая очистка, окисление NAOS, DC-магнетронное распыление, спектроскопическая эллипсометрия, СЭМ, барьер Шоттки, вольт-амперная характеристика.*

TECHNOLOGY OF FABRICATION OF Ni/SiO₂/n-Si<P> METAL–OXIDE–SEMICONDUCTOR STRUCTURES AND THEIR EXPERIMENTAL–PHYSICAL FOUNDATIONS

Abstract. *This paper presents the complete technological process for the fabrication of Ni/SiO₂/n-Si<P> metal–oxide–semiconductor (MOS) structures and describes their experimental and physical foundations. After multistage chemical cleaning of the silicon substrate surface (solvent cleaning, RCA-1 treatment, and HF dipping), a tunnel-transparent SiO₂ dielectric layer was formed by nitric acid oxidation (NAOS) method. Subsequently, a Ni layer was deposited onto the oxidized surface using the DC magnetron sputtering technique, while an Al contact pad was formed on the backside by thermal evaporation. The fabricated multilayer structure was characterized by spectroscopic ellipsometry (SiO₂ thickness of 3.74 nm using the Cauchy model) and scanning electron microscopy (SEM, magnification of 125,000×). The semiconductor properties of the structure were confirmed based on current–voltage characteristics (I–V*

characteristics) through the determination of the Schottky barrier height (φ_B = 0.388–0.417 eV, along the [110] crystallographic direction). The obtained results demonstrate that the developed fabrication process is reproducible and physically justified.

Keywords. *Metal–oxide–semiconductor structure, Ni/SiO₂/Si, multistage chemical cleaning, NAOS oxidation, DC magnetron sputtering, spectroscopic ellipsometry, SEM, Schottky barrier, current–voltage characteristics.*

Kirish. Planar texnologiyaning rivojlanishi metall-oksid-yarimo‘tkazgich (MOY) tizimlariga asoslangan yarimo‘tkazgich strukturalarining, shuningdek ular negizida qator diskret va integral qurilmalarning yaratilishiga olib keldi. Hozirgi kunda mikro- va nanoelektron sxemalarda, shuningdek diskret qurilmalarda oksid-yarimo'tkazgich (IY), metall-oksid-yarimo‘tkazgich (MOY) va metall-oksid-yarimo‘tkazgich (MOY) strukturalari keng qo‘llaniladi. Bunday strukturalarning nomuvozanat va fotoelektrik xossalari, xususan, yuqori chastotalarda ishlash qobiliyati, tashqi elektr maydon ta’sirida sirtda o‘ziga xos p-n o‘tish hosil bo‘lishi hisobiga turli nurlanish turlariga sezgirligi — alohida qiziqish uyg‘otadi va pozitsion-sezgir planar fotodetektorlar, yuqori tezlikli dinamik kondensatorlar hamda boshqa funksional elementlar yaratish imkonini beradi.

Monokristall kremniy asosidagi turli strukturalar, jumladan, $NiSi_2$/p-Si, Ni/n-Si, NiSi, Ni/SiO_2/n-Si, Ni/SiO_2/p-Si kabilar zamonaviy mikro - va nanoelektronika uchun faol elementlar sifatida ko‘rib chiqilmoqda. Xususan, o‘z-o‘zidan siljigan Ni/n-Si Shottki strukturalaridagi yuqori energiyali (issiq) zaryad tashuvchilar fotoemissiyasiga asoslangan infraqizil fotodetektorlar [1], impedans spektroskopiyasi yordamida Ni/n-Si Shottki to‘siqlarida elektron transporti xarakteristikalarini o‘rganish [2], hamda NiSi/n-Si asosidagi, xona haroratida ishlaydigan yaqin infraqizil detektorlar [3] bo‘yicha xalqaro tadqiqotlar olib borilgan. Shuningdek, elektron-nurli cho‘ktirish jarayonida Ni/SiO_2/Si tizimidagi sirt xossalarining haroratga bog‘liqligi [4], tashqi siljish kuchlanishi ostidagi Ni-SiO_2-Si strukturalaridagi lateral fotoelektrik effekt [5], p- va n-tur MOY strukturalarining lateral fotoeffekt bo‘yicha qiyosiy tahlili [6], hamda Ni/SiO_2/Si asosidagi vodorod sensorlarining elektr xossalari [7] kabi ishlar e’lon qilingan.

Ushbu adabiyotlar tahlili shuni ko‘rsatadiki, Ni/SiO_2/n-Si MIY strukturalarining elektrofizik xossalari haqida talaygina ma’lumot to‘plangan bo‘lsa-da, ularni shakllantirishning to‘liq texnologik jarayoni, xususan, kimyoviy sirt tayyorlash, tunnel-shaffof dielektrik qatlam hosil qilish va metall qatlamlarni cho‘ktirish bosqichlari – hamda bu jarayonning har bir bosqichi natijasini mustaqil fizik-analitik usullar (ellipsometriya, SEM) bilan tasdiqlash masalasi alohida va batafsil yoritilmagan. Ushbu maqolaning maqsadi Ni/SiO_2/n-Si<P> MOY strukturalarini shakllantirishning to‘liq texnologik zanjirini tavsiflash va uning har bir bosqichini mos fizik tahlil usullari bilan asoslashdan iborat bo‘lib, bu monokristall kremniy asosidagi metall-oksid-yarimo‘tkazgich tuzilmalarining elektrofizik va impedans xarakteristikalarini keyingi bosqichda tadqiq qilish uchun ishonchli texnologik negiz yaratadi.

Tajriba metodikasi.

A) Boshlang‘ich n-Si<P> tagligini tayyorlash

Tadqiqot uchun diametri 100 mm, qalinligi 300 mkm bo‘lgan, [110] kristallografik yo‘nalishga ega n-Si<P> monokristall plastinkalaridan lazerli kesish moslamasi yordamida 0,3×5×10 mm o‘lchamli parallelepiped shaklidagi namunalar tayyorlandi. Namunalarning fosfor bilan legirlash konsentratsiyasi $1{,}12\cdot10^{13}$ dan $7{,}99\cdot10^{16}$ sm^{-3} gacha oralig‘ida bo‘lib, ularning boshlang‘ich elektrofizik parametrlari (solishtirma qarshilik ρ, harakatchanlik μ, tashuvchilar konsentratsiyasi n) Van der Pau usulida T = 300 K haroratda o‘lchandi. Natijalar 1-jadvalda keltirilgan.

1-jadval. n-Si<P> taglik namunalarining T = 300 K dagi elektrofizik parametrlari

№	ρ, Ω·sm	Kristallografik yo‘nalish	μ, $sm^2/(V\cdot s)$	n, sm^{-3}
1	0,0593	[110]	1319	$7{,}99\cdot10^{16}$
2	1,25	[110]	1150	$4{,}35\cdot10^{15}$
3	68,9	[110]	1185	$8{,}15\cdot10^{13}$
4	460	[110]	1236	$1{,}22\cdot10^{13}$
5	4970	[110]	1256	$1{,}12\cdot10^{13}$

B) Sirtni ko‘p bosqichli kimyoviy tozalash

Namunalar sirtini dielektrik va metall qatlamlar cho‘ktirishga tayyorlash uch bosqichli kimyoviy tozalash jarayoni orqali amalga oshirildi.

Birinchi bosqichda namunalar erituvchilar yordamida tozalandi: dastlab aseton hammomi 55 °C dan oshmagan haroratgacha qizdirilib, plastinkalar unda 10 daqiqa saqlandi, so‘ngra metanolga 2–5 daqiqaga

ko‘chirildi. Bu ikki bosqichli erituvchi ishlov berish sirtdagi moy va organik iflosliklarni, shuningdek atsetonning o‘z qoldig‘ini bartaraf etish uchun zarur bo‘ldi.

Ikkinchi bosqichda RCA-1 eritmasidan foydalanildi: deionlangan suv, 27% li ammiak gidroksidi va 30% li vodorod peroksidi 5:1:1 hajmiy nisbatda (mos ravishda 325, 65 va 65 ml) aralashtirilib, aralashma 70±5 °C gacha qizdirildi, so‘ng namunalar unda 15 daqiqa ushlab turildi. Bu bosqichda organik va zarrali ifloslanishlar oksidlanib, kremniy sirtidan ajratib olindi.

Uchinchi, yakuniy bosqichda namunalar 2% li HF eritmasida (480 ml suv + 20 ml 49% li HF) 2 daqiqa davomida botirib turildi — bu tabiiy oksid qatlamini olib tashlash maqsadida amalga oshirildi. Har bir bosqichdan so‘ng namunalar bir necha marta deionlangan suvda chayilib, jarayon nazorati sifatida sirtning gidrofoblik darajasi (namlanish sinovi) tekshirildi: suv tomchilarining sirtdan sirg‘alib tushishi – oksidsiz, toza kremniy yuzasi hosil bo‘lganligidan dalolat berdi. Yakunda namunalar quruq azot oqimida quritildi.

C) NAOS usulida SiO_2 dielektrik qatlamini shakllantirish

Tozalangan va gidrofob holatga keltirilgan kremniy yuzasida tunnel-shaffof dielektrik qatlam hosil qilish uchun azot kislotasida oksidlash (Nitric Acid Oxidation of Silicon – NAOS) usuli qo‘llanildi [8]. Ushbu usulda namunalar 120 °C gacha qizdirilgan konsentrlangan azot kislotasi (HNO_3) muhitida 20 daqiqa davomida ushlab turildi. Natijada kremniy yuzasida bir necha nanometr qalinlikdagi, tuzilishi bir jinsli SiO_2 qatlami hosil bo‘ldi.

D) Ni qatlamini magnetron changlatish usulida va Al kontaktini shakllantirish

SiO_2 qatlami hosil qilingan namunalar DXZD-400 vakuum-magnetron changlatish tizimining ishchi kamerasiga joylashtirildi, unda qoldiq bosim 10^{-5} mm sim.ust. darajasiga yetkazildi. Namunaning SiO_2 tomoniga yupqa nikel (Ni) qatlami DC magnetron changlatish usulida quyidagi rejimda cho‘ktirildi: argon gazi sarfi – 80 sccm, ishchi bosim – 4 Pa, magnetron quvvati – 100 Vt, nishon (target) kuchlanishi – 276 V, tok kuchi – 363 mA, cho‘ktirish tezligi – 0,17 Å/s. Kremniy tagligining qarama-qarshi (oksidlanmagan) tomonida esa, butun yuza emas, balki faqat omik kontakt hosil qilish uchun mo‘ljallangan kichik lokal maydoncha termik bug‘latish usulida yupqa alyuminiy (Al) qatlami bilan qoplandi. Ni qatlamining qalinligi cho‘ktirish rejimi (vaqt × tezlik) asosida nazorat qilinib, so‘ngra spektroskopik ellipsometriya usulida eksperimental tasdiqlandi (natijalar quyida, “Natijalar va muhokama” bo‘limida keltirilgan).

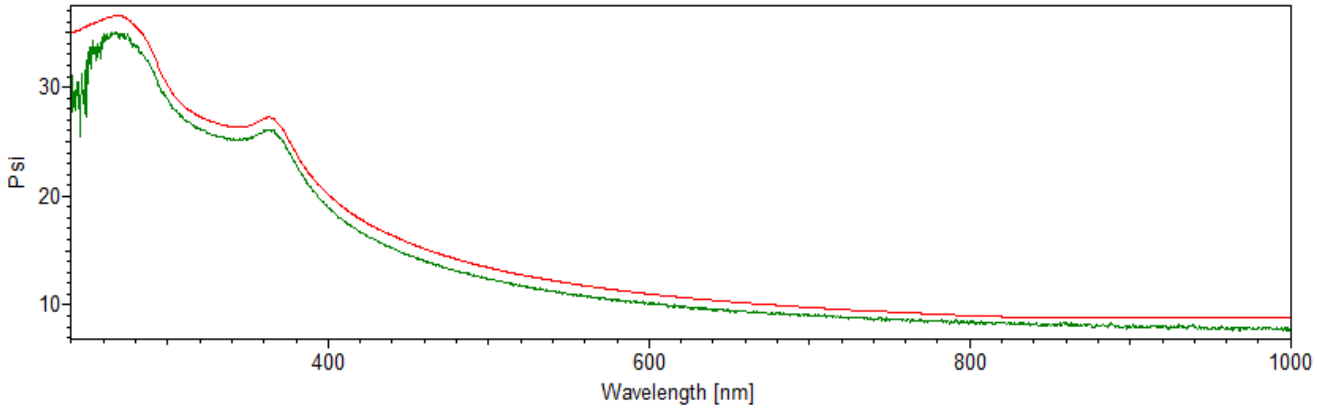
E) Omik kontaktlarni shakllantirish

Elektr o‘lchovlari uchun zarur sifatli omik kontaktlar hosil qilish maqsadida, Ni qatlami tushirilgan old yuzaga hamda orqa tomondagi Al kontakt maydonchasiga diametri taxminan 1 mm bo‘lgan ikkita simmetrik (ekvipotensial) doiraviy kontakt kumush pastasi yordamida tushirildi. Kontakt ustiga diametri ~50 mkm bo‘lgan mis sim joylashtirilib, ustidan yana kumush pastasi qo‘llanildi. Kontaktlar quruq havoda 6 soat davomida quritildi, natijada mexanik jihatdan barqaror omik kontaktlar hosil bo‘ldi.

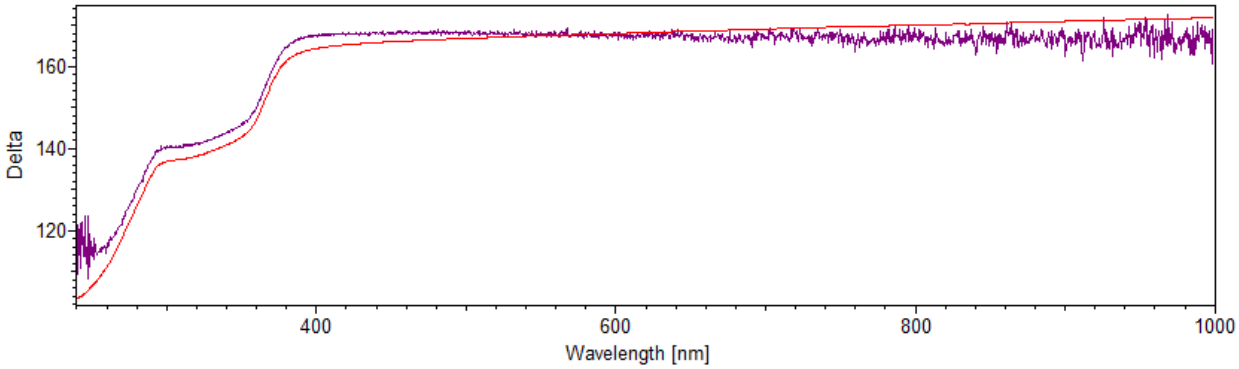
Asosiy natijalar.

1. Ellipsometrik o‘lchov natijalari

Hosil qilingan SiO_2 dielektrik qatlamining qalinligi spektroskopik ellipsometriya usulida, 632,8 nm to‘lqin uzunligida o‘lchandi. Psi (Ψ) va Delta (Δ) spektrlarining Cauchy modeli asosida moslashtirilishi (1- va 2-rasmlar) natijasida SiO_2 qatlamining qalinligi 3,74 nm deb aniqlandi (sindirish ko‘rsatkichi n = 1,4610), kremniy tagligi esa Jellison modeliga muvofiq n = 3,8661, k = 0,01579 parametrlari bilan tavsiflandi. Olingan qiymat NAOS usulida hosil bo‘ladigan tunnel-shaffof oksid qatlamlari uchun adabiyotda keltirilgan diapazonga mos keladi [8].



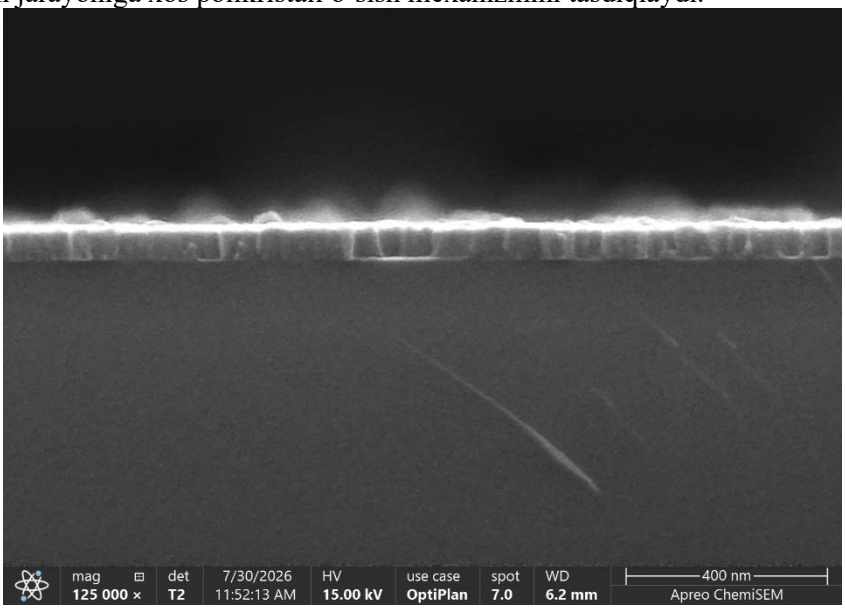
1-rasm. SiO_2/n-Si<P> namunasining ellipsometrik Psi (Ψ) spektri (qizil chiziq — Cauchy modeli, yashil chiziq – eksperimental egri chiziq)



2-rasm. Xuddi shu namunaning Delta (Δ) spektri (qizil chiziq – model, binafsha chiziq – eksperiment)

2. SEM tahlili natijalari

Shakllangan tuzilmaning qatlamli tuzilishi Thermo Fisher Scientific Apreo ChemiSEM skanerlovchi elektron mikroskopida (T2 detektori, tezlashtiruvchi kuchlanish HV = 15,00 kV, ishchi masofa WD = 6,2 mm) 125 000× kattalashtirishda olingan ko‘ndalang kesim tasviri orqali tasdiqlandi (3-rasm). Tasvirda vakuum/bo‘shliq zonasi ostida yorqin, notekis relyefli yupqa qatlam cho‘ktirilgan Ni metall plyonkasi va uning tagida bir jinsli, tekis kremniy taglik aniq farqlanadi. Ni qatlamining donador (granulyar) tuzilishi DC magnetron changlatish jarayoniga xos polikristall o‘sish mexanizmini tasdiqlaydi.



3-rasm. Ni/SiO_2/n-Si<P> strukturasining ko‘ndalang kesimi SEM tasviri (125 000×, HV = 15,00 kV, WD = 6,2 mm, Apreo ChemiSEM)

3. VAX asosida hisoblangan Shottki to‘siq parametrlari

Sintez qilingan Ni/SiO_2/n-Si<P> strukturalarining volt-amper xarakteristikalari (VAX) asosida, Cheung-Cheung usuli [9] yordamida Shottki to‘siq balandligi (φ_B), ideallik koeffitsiyenti (n) va diodning ketma-ket qarshiligi (R_K) hisoblandi [110]. Kristallografik yo‘nalishdagi besh namuna uchun olingan natijalar 2-jadvalda keltirilgan.

2-jadval. [110] yo‘nalishdagi Ni/SiO_2/n-Si<P> namunalarining VAX asosida hisoblangan asosiy parametrlari

№	ρ, Ω·sm	φ_B, eV	n	R_K, Ω
1	0,0593	0,417	9,20	29,31
2	1,25	0,409	9,53	30,37
3	68,9	0,400	8,40	26,76
4	460	0,395	4,05	12,90
5	4970	0,388	9,24	29,45

Muhokama. 2-jadvaldan ko‘rinib turibdiki, tekshirilgan barcha namunalarda ishonchli potensial to‘siq shakllangan. Taglikning solishtirma qarshiligi ortishi bilan φ_B qiymati sezilarli darajada kamayadi (0,417 eV dan 0,388 eV gacha) bu legirlash darajasining pasayishi natijasida Fermi sathining o‘tkazuvchanlik zonasi chekkasidan uzoqlashishi bilan izohlanadi. Olingan φ_B qiymatlari nikelning o‘rtacha chiqish ishi (4,76 eV) va kremniyning elektron affinligi (4,05 eV) asosida nazariy kutilgan qiymatlarga, shuningdek SiO_2/Si chegara holatlari zichligini hisobga olgan holda adabiyotda keltirilgan natijalarga [10] yaqin keladi.

Shunday qilib, ellipsometrik o‘lchovlar (SiO_2 qalinligi 3,74 nm), SEM tasviri (Ni qatlamining uzluksiz va bir jinsli shakllanganligi) hamda VAX asosidagi Shottki to‘siq tahlili (φ_B = 0,388–0,417 eV) birgalikda – tavsiflangan texnologik jarayon natijasida sifatli Ni/SiO_2/n-Si<P> MIY strukturasi shakllanganligining ishonchli, o‘zaro mustaqil fizik dalili bo‘lib xizmat qiladi.

Xulosa. Ushbu maqolada Ni/SiO_2/n-Si<P> MOY strukturalarini shakllantirishning to‘liq texnologik jarayoni – ko‘p bosqichli kimyoviy tozalash, NAOS usulida dielektrik qatlam hosil qilish va DC magnetron changlatish usulida Ni qatlamini cho‘ktirish bosqichma-bosqich tavsiflandi. Har bir texnologik bosqichning natijasi mustaqil fizik-analitik usullar bilan tasdiqlandi: SiO_2 qatlamining qalinligi spektroskopik ellipsometriya (3,74 nm) yordamida, qatlamlarning morfologik sifati SEM (125 000× kattalashtirish) yordamida, tuzilmaning yarimo‘tkazgichlik xossalari esa VAX asosida hisoblangan Shottki to‘siq balandligi (φ_B = 0,388–0,417 eV) yordamida aniqlandi. Olingan natijalar tavsiflangan texnologiyaning takrorlanuvchanligi va fizik jihatdan asoslanganligini tasdiqlaydi hamda monokristall kremniy asosidagi metall-oksid-yarimo‘tkazgich tuzilmalarining elektrofizik va impedans xarakteristikalarini tadqiq qilishga qaratilgan kelgusi ishlar uchun ishonchli texnologik negiz yaratadi.

ADABIYOTLAR:

1. D. Dudi, R. Prakash, S. Bhardwaj, K. Aïssa, B. Mitra. Ni/n–Si Schottky junction: Self-biased infrared photodetection via hot carrier photoemission. // Optik, 2024, 318, 172093. doi:10.1016/j.ijleo.2024.172093

2. G. Bhattacharya, N.V.P. Chaudhary, T. Adhikary, S. Aich, A. Venimadhav. Electron transport characteristics of FeGa, Ni/n–Si junctions by impedance spectroscopy. // Superlattices and Microstructures, 2021, 156, 106958. doi:10.1016/j.spmi.2021.106958

3. S. Roy, K. Midya, S. P. Duttagupta, D. Ramakrishnan. Nano-scale NiSi and n-type silicon based Schottky barrier diode as a near infra-red detector for room temperature operation. // Journal of Applied Physics, 2014, 116, 124507. doi:10.1063/1.4896365

4. A.A. Rakhimov, I. Kh. Khudaykulov, A.A. Ismatov, M.M. Adilov. Analysis of temperature dependent surface properties in the Ni/SiO2/Si system during electron beam deposition. // East European Journal of Physics, 2025, 3, 436–441. doi:10.26565/2312-4334-2025-3-47

5. L. Xiang, Z. Pengfei, Z. Kun, S. Pei, L. Xiong. Lateral photovoltaic effect in the Ni–SiO2–Si structure with bias. // Optoelectronics Letters, 2024, 20(5). doi:10.1007/s11801-024-3101-x

6. H. Xu, C. Mei, J. Hu, D. Zheng, Z. Gan, P. Zhou, H. Wang. Potential Superiority of p-Type Silicon-Based Metal–Oxide–Semiconductor Structures over n-Type for Lateral Photovoltaic Effects. // IEEE Electron Device Letters, 2016, 37, 1018–1021. doi:10.1109/LED.2016.2577700

7. G. Behzadi Pour. Electrical Properties of the MOS Capacitor Hydrogen Sensor Based on the Ni/SiO2/Si Structure. // Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics, 2017, 12(2), 130–135. doi:10.1166/jno.2017.1975

8. K. Imamura, S. Yokoyama, N. Hirashita, et al. Growth of ultrathin silicon oxide layers by nitric acid oxidation of silicon (NAOS) method. // Journal of Applied Physics, 2010, 107, 054503. doi:10.1063/1.3296395

9. S. K. Cheung, N. W. Cheung. Extraction of Schottky diode parameters from forward current–voltage characteristics. // Applied Physics Letters, 1986, 49(2), 85–87. doi:10.1063/1.97359

10. A. V. Sachenko, A. Ye. Belyayev, R. V. Konakova. On a New Mechanism for the Realization of Ohmic Contacts. // Semiconductors, 2018, 52, 131–135. doi:10.1134/S1063782618010190

11. E.U. Arzikulov, A.D. Nurimov, F.A. Salakhitdinov, U.A. Ashirov, T.S. Sharafova, A. Sh. Khujanov, R.M. Usanov. Lateral photoelectric effect in iron-silicon dioxide-compensated silicon hybrid structures. // East European Journal of Physics, 2023, 4, 159–166. doi:10.26565/2312-4334-2023-4-17

UO‘K 538.945:539.1

O‘TA O‘TKAZUVCHANLIKDAGI IZOTOP EFFEKTINI TAVSIFLOVCHI TURLI NAZARIYALAR

Djurayev Davron Rahmonovich,
Buxoro davlat universiteti
Fizika kafedrasi professori,
fizika-matematika fanlari doktori
Ahadov Abdullo Amrullojon o‘g‘li,
Buxoro davlat tibbiyot instituti
Biotibbiyot muhandisligi, biofizika va informatika
kafedrasi assistent o‘qituvchisi, fizika-matematika
fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD)
Abdujabborov Lazizbek Abdug‘affor o‘g‘li,
Abu Ali ibn Sino nomidagi
ITMA Buxoro filiali o‘qituvchisi

Annotatsiya. *Ushbu maqolada o‘ta o‘tkazuvchanlikdagi izotop effektini tavsiflash uchun taklif etilgan asosiy nazariy yondashuvlar tizimli ravishda tahlil qilinadi. Izotop effekti kritik temperatura T_c ning izotop massasiga M bog‘liqligi orqali $\alpha = -dlnT_c/dlnM$ ko‘rinishida ifodalanadi. An’anaviy Bardeen–Cooper–Schrieffer (BKSh) nazariyasining sodda chegarasida fonon chastotasining $M^{-1/2}$ ga bog‘liqligi $\alpha \approx 0{,}5$ natijani beradi. Biroq yuqori T_c li kupratlarda izotop koeffitsiyentining legirlanishga bog‘liq, kichik, nolga yaqin va ayrim hollarda manfiy qiymatlari kuzatilishi ushbu masalani oddiy fonon chastotasi bilan cheklangan model doirasidan kengroq ko‘rib chiqishni talab qiladi. Shu sababli maqolada BKSh va Migdal–Eliashberg, ikki-bozonli, nonadiabatik, Hubbard–Holstein, spin-fluktuatsion, polaron, bipolaron hamda qatlamlararo ta’sirlashuvga asoslangan yondashuvlar qiyosiy tahlil qilinadi. Shuningdek, izotop massasining fonon chastotasidan tashqari effektiv massa, juftlashish energiyasi, elektron korrelyatsiyasi, kogerentlik va psevdotirqish bilan bog‘liq kattaliklarga ta’siri ko‘rib chiqiladi. Tahlil natijalari kupratlardagi izotop effektini yagona mexanizm bilan emas, balki panjara dinamikasi, elektron korrelyatsiyasi va kollektiv o‘zaro ta’sirlarning o‘zaro bog‘langan majmuasi orqali tavsiflash maqsadga muvofiqligini ko‘rsatadi.*

Kalit so‘zlar: *izotop effekti, izotop koeffitsiyenti, kritik temperatura, BKSh nazariyasi, Migdal–Eliashberg nazariyasi, polaron, bipolaron, spin fluktuatsiyasi, Hubbard–Holstein modeli, kupratlar, psevdotirqish.*

VARIOUS THEORETICAL APPROACHES TO DESCRIBING THE ISOTOPE EFFECT IN SUPERCONDUCTIVITY

Abstract. *This paper presents a systematic analysis of theoretical approaches used to describe the isotope effect in superconductivity, with particular emphasis on high-T_c cuprates. The isotope effect is characterized by the isotope exponent $\alpha = -dlnT_c/dlnM$. In the simplest Bardeen–Cooper–Schrieffer (BCS) limit, the mass dependence of the characteristic phonon frequency leads to $\alpha \approx 0.5$. In cuprates, however, isotope exponents may be strongly doping dependent, reduced, close to zero, or even negative. The paper therefore compares BCS and Migdal–Eliashberg, two-boson-mode, nonadiabatic, Hubbard–Holstein, spin-fluctuation, polaronic, bipolaronic, and interlayer-coupling approaches. Particular attention is given to mechanisms in which isotope substitution modifies not only phonon frequencies but also effective carrier masses, pairing energies, electronic correlations, coherence, pseudogap characteristics, and interlayer coupling. The comparative analysis indicates that the isotope effect in cuprates is better understood as a consequence of interactions among the lattice, electronic, and collective degrees of freedom rather than as a single-parameter phonon-frequency effect.*

Keywords: *isotope effect, isotope exponent, critical temperature, BCS theory, Migdal–Eliashberg theory, polaron, bipolaron, spin fluctuations, Hubbard–Holstein model, cuprates, pseudogap.*

РАЗЛИЧНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ОПИСАНИЮ ИЗОТОПИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

Аннотация. *В статье представлен систематический анализ теоретических подходов, используемых для описания изотопического эффекта в сверхпроводимости, с особым акцентом на высокотемпературные купратные сверхпроводники. Изотопический эффект характеризуется изотопическим коэффициентом* $\alpha = -d\ln T_c/d\ln M$*, где* T_c *— критическая температура сверхпроводящего перехода, а M — изотопическая масса. В простейшем пределе теории Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) зависимость характерной фононной частоты от массы атомов приводит к значению* $\alpha \approx 0.5$*. Однако в купратных сверхпроводниках величина изотопического коэффициента может существенно зависеть от уровня легирования, значительно уменьшаться, приближаться к нулю или даже принимать отрицательные значения. В связи с этим в работе проводится сравнительный анализ теорий БКШ и Мигдала–Элиашберга, моделей с двумя бозонными модами, неадиабатических подходов, моделей Хаббарда–Холстейна, механизмов спиновых флуктуаций, поляронных и биполяронных моделей, а также подходов, учитывающих межслойное взаимодействие. Особое внимание уделено механизмам, в которых изотопическое замещение приводит к изменению не только фононных частот, но и эффективной массы носителей заряда, энергии спаривания, электронных корреляций, когерентности, характеристик псевдощели и межслойной связи. Проведённый сравнительный анализ показывает, что изотопический эффект в купратных сверхпроводниках целесообразно рассматривать как результат взаимосвязанного влияния решёточных, электронных и коллективных степеней свободы, а не как следствие изменения исключительно характерной фононной частоты.*

Ключевые слова: *изотопический эффект, изотопический коэффициент, критическая температура, теория БКШ, теория Мигдала–Элиашберга, полярон, биполярон, спиновые флуктуации, модель Хаббарда–Холстейна, купратные сверхпроводники, псевдощель.*

Kirish. O‘ta o‘tkazuvchanlikdagi izotop effekti kristall panjarasidagi atom yoki ion massasini o‘zgartirish natijasida o‘ta o‘tkazuvchanlikning, avvalo kritik temperatura T_c ning, o‘zgarishida namoyon bo‘ladi. Izotop almashtirishda kimyoviy tarkib va elektronlar soni ideal holda deyarli o‘zgarmaydi, biroq panjara dinamikasining massaviy parametri o‘zgaradi. Shu sababli izotop effekti elektron–panjara o‘zaro ta’sirining o‘ta o‘tkazuvchanlikdagi rolini baholash uchun muhim eksperimental mezon hisoblanadi [1].An’anaviy BKSh nazariyasida o‘ta o‘tkazuvchanlik elektron–fonon o‘zaro ta’siri natijasida hosil bo‘ladigan Kuper juftliklari bilan izohlanadi. Soddalashtirilgan modelda kritik temperatura xarakterli fonon chastotasiga bog‘liq bo‘lib, Debay chastotasining $\omega_D \propto M^{-1/2}$ ko‘rinishidagi massaviy bog‘liqligi izotop koeffitsiyentining $\alpha \approx 0{,}5$ qiymatini beradi [1,2]. Ushbu natija izotop effektining klassik mezoni sifatida qaraladi. Yuqori T_c li kupratlarda esa izotop effektining manzarasi ancha murakkab. Tajribaviy natijalar va nazariy hisoblar izotop koeffitsiyentining legirlanish darajasi, elektron tuzilma, psevdotirqish va kristall panjarasi xususiyatlariga sezgirligini ko‘rsatadi [3,4,5]. Ayrim holatlarda α ning 0,5 dan ancha kichik, nolga yaqin yoki manfiy bo‘lishi izotop massasining ta’sirini faqat fonon chastotasi bilan tushuntirish yetarli emasligini ko‘rsatadi.Shu nuqtai nazardan, kupratlardagi izotop effektini izohlash uchun fonon spektrining batafsil tuzilishi, elektron–fonon bog‘lanishining kuchi, elektron korrelyatsiyalari, spin fluktuatsiyalari, polaronik qayta normallashuv, bipolaronik juftlashish va qatlamlararo kogerentlik kabi omillarni birgalikda ko‘rib chiqish zarur. Mazkur ishning maqsadi - mavjud adabiyotlarda keltirilgan asosiy nazariy yondashuvlarni yagona tizimga keltirish, ularning izotop effektini shakllantirish mexanizmlarini qiyoslash va yuqori T_c li kupratlarda anomal izotop koeffitsiyentining mumkin bo‘lgan sabablarini tahlil qilishdir.

Adabiyotlar tahlili va tadqiqot metodologiyasi. Adabiyotlar tahlili guruhlash va qiyosiy tahlil tamoyillari asosida olib borildi. Avvalo an’anaviy BKSh hamda elektron mexanizmlari bilan bog‘liq yondashuvlar ko‘rib chiqildi [1,2]. Keyingi bosqichda kupratlardagi noan’anaviy izotop effektlarini tushuntirishga qaratilgan bipolaronik va umumiy elektron mexanizmlariga oid ishlar tahlil qilindi [3,4,5]. Shundan so‘ng ikki-bozonli, Migdal–Eliashberg va nonadiabatik modellar ko‘rib chiqildi [6,7,8,9,10,11].Keyingi guruhni spin-fluktuatsion, qatlamlararo ta’sirlashuv, polaron va bipolaron nazariyalari tashkil etdi [14,15,16,17,18,19,20,21,22]. Elektron korrelyatsiyalarini ifodalovchi Hubbard va Hubbard–Holstein modellarining izotop effektiga ta’siri alohida tahlil qilindi [23,24,25,26]. Shuningdek, umumiy nazariy kontekstni to‘ldiruvchi manbalar ham ko‘rib chiqildi [27,28,29,30,31].Har bir nazariy yondashuv uchta asosiy mezon bo‘yicha taqqoslandi: (i) izotop massasining modeldagi qaysi fizik kattaliklarga kirishi; (ii) T_c yoki psevdotirqish uchun izotop koeffitsiyentining qanday hosil bo‘lishi; (iii) kupratlarda kuzatiladigan kichik, legirlanishga bog‘liq yoki manfiy izotop effektlarini tushuntirish imkoniyati. Bunda $\alpha = -d\ln T_c/d\ln M$ asosiy qiyosiy parametr sifatida qabul qilindi [1].

Natijalar.

1. BKSh nazariyasida izotop effekti

BKSh nazariyasining sodda chegarasida kritik temperatura

$$T_c = 1.14\omega_D \exp\left[-\frac{1}{N(0)V}\right] \qquad (1)$$

ko‘rinishida ifodalanadi. Debay chastotasi panjara atomlari massasiga taxminan $\omega_D \propto M^{-1/2}$ qonun bo‘yicha bog‘langanligi sababli T_c ham izotop massasiga bog‘liq bo‘ladi va $\alpha \approx 0{,}5$ qiymat olinadi [1,2]. Demak, izotop massasi ortganda xarakterli fonon chastotasi kamayadi va boshqa parametrlar o‘zgarmagan holda T_c pasayishi kutiladi.Swihart BKSh va Bogolyubov nazariyalari doirasida izotop effektining mikroskopik kelib chiqishini tahlil qilgan. Ushbu yondashuv izotop effektining asosiy fizik manbasini aniq ko‘rsatib bersa-da, kupratlarda kuzatiladigan kuchli legirlanishga bog‘liqlik va anomal α qiymatlarini to‘liq izohlash uchun kengaytirilgan modellar talab qilinadi [1].

2. Migdal–Eliashberg va ikki-bozonli yondashuvlar

Bir nechta bozon holatlari mavjud bo‘lganda, T_c ni yagona Debay chastotasi orqali ifodalash yetarli bo‘lmaydi. Ikki-bozonli modelda kritik harorat (2) ko‘rinishida ifodalanadi, bunda Ω_1 va Ω_2 — ikki boson modining xarakterli chastotalari, λ_1 va λ_2— ularga mos juftlashish konstantalari, μ esa Kulon pseudopotensialidir [6]. Ushbu ifodadan ko‘rinadiki, T_c massaga faqat bitta fonon chastotasi orqali emas, balki bir nechta boson modlarining chastotalari va ularning elektronlar bilan bog‘lanish kuchlari orqali bog‘liq. Shu sababli izotop koeffitsiyenti standart BKSh qiymati (α =0.5) dan sezilarli farq qilishi, hatto ayrim hollarda manfiy qiymatga ega bo‘lishi mumkin [6]. Migdal–Eliashberg formalizmi esa kuchli elektron–fonon bog‘lanishi va fonon spektrining batafsil tuzilishini hisobga olib, ushbu massaga bog‘liqlikni yanada aniq tavsiflaydi:

$$T_c = k\Omega_1 exp\left[\frac{-1+(\mu-\lambda_2)ln(\Omega_2/\Omega_1)}{\lambda_1+\lambda_2-\mu+\lambda_1(\mu-\lambda_2)ln(\Omega_2/\Omega_1}\right] \qquad (2)$$

Masalan, YH_6 da T_c va kritik magnit maydonlarning izotopik o‘zgarishi [7], PdH(D) tizimida esa teskari izatop effekti hodisasi [8] shu yondashuvlar doirasida tahlil qilingan.

3. Nonadiabatik nazariya

Adiabatik yaqinlashuvda elektronlar panjara ionlariga nisbatan tezroq harakat qiladi va elektron hamda fonon energiya masshtablari orasidagi nisbat kichik deb qaraladi. Biroq elektron energiyasi va fonon energiyasi masshtablari bir-biriga yaqinlashganda ushbu yaqinlashuvning cheklanishlari yuzaga keladi. Nonadiabatik yondashuvlarda bunday effektlar izotop koeffitsiyentini sezilarli ravishda o‘zgartirishi mumkin [9,10,11]. Bill, Kresin va Wolf yuqori T_c li materiallarda nonadiabatiklik hamda magnit aralashmalarning izotop effektiga ta’sirini tahlil qilgan [10]. Paci va boshq. esa polaronik va nonadiabatik rejimlarning anomal izotop effektlari bilan bog‘liqligini ko‘rsatgan [9]. Shunday qilib, nonadiabatik yondashuv izotop almashtirishning elektron–fonon o‘zaro ta’siri va juftlashish mexanizmi parametrlariga bilvosita ta’sirini ham hisobga oladi. Nonadiabatik nazariyaning eng muhim fizik parametri — elektron va fonon energiya masshtablarining nisbati:

$$\tau = \frac{\omega_{ph}}{E_F} \qquad (3)$$

4. Hubbard va Hubbard–Holstein modellarida izotop effekti

Kuchli elektron korrelyatsiyalarini hisobga olish uchun kupratlarda Hubbard–Holstein modeli muhim nazariy asoslardan biri hisoblanadi. Ushbu model Hamiltoniani (4) ko‘rinishida yoziladi:

$$H=-t\sum_{(ij),\sigma}(c_{i\sigma}{}^{\dagger}c_{j\sigma}+h.c.)+U\sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}+\omega_0\sum_i b_i{}^{\dagger}b_i+g\sum_i n_i(b_i{}^{\dagger}+b_i) \qquad (4)$$

Bu yerda t elektronlarning panjara bo‘ylab harakatlanish amplitudasi, U esa Kulon itarilish energiyasi, ω_0 fononning xarakteristik chastotasi, g esa elektron–fonon o‘zaro ta’sir kuchini ifodalaydi [23–26]. Izotop almashtirilganda asosan $\omega_0\, M^{-1/2}$ o‘zgaradi, biroq T_c ning o‘zgarishi faqat ushbu chastota bilan belgilanmaydi: U, g va elektron korrelyatsiyalari bilan birgalikdagi ta’sir juftlashish mexanizmini va natijaviy izotop koeffitsiyentini qayta normallashtiradi. Shu sababli Hubbard–Holstein modeli doirasida standart BKSh qiymati (0.5) dan sezilarli og‘ishi mumkin [24–26]. Dahm va boshq. d-to‘lqinli o‘ta o‘tkazuvchanlik sharoitida izotop effekti va elektr qarshilikni Hubbard modeli asosida tahlil qilgan [24], Paci va boshq. esa dinamik o‘rtacha maydon nazariyasi yordamida elektron korrelyatsiyasi va elektron–fonon o‘zaro ta’sirining izotop koeffitsiyentiga birgalikdagi ta’sirini ko‘rsatgan [25,26].

5. Spin-fluktuatsion yondashuv

Spin-fluktuatsion modellarda elektron juftlashishining asosiy mexanizmi spin fluktuatsiyalari bilan bog‘lanadi va kritik harorat soddalashtirilgan holda (5) ko‘rinishida ifodalanadi:

$$T_c \sim \omega_{sf} exp(-\frac{1}{\lambda_{sf}}) \qquad (5)$$

bunda ω_{sf} spin fluktuatsiyalarining xarakteristik chastotasi, λ_{sf} esa spin-fluktuatsion juftlashish kuchini ifodalovchi samarali bog‘lanish o‘zgarmas kattalikdir. [12]. Ushbu ifodaga ko‘ra, agar juftlashish faqat spin fluktuatsiyalari orqali yuzaga kelsa, T_c ning izotop massasiga bog‘liqligi bevosita bo‘lishi shart

emas. Biroq spin fluktuatsiyalari fononlar bilan o‘zaro ta’sirlashganda ω_{sf} va λ_{sf} samarali ravishda o‘zgarishi mumkin, natijada izotop koeffitsiyenti nolga teng bo‘lmagan va standart BKSh qiymati (α =0.5) dan farq qiluvchi qiymatni qabul qilishi mumkin. Pao va Schüttler d-to‘lqinli spin-fluktuatsion modellar doirasida fononlarning qo‘shimcha hissasini hisobga olib, izotop koeffitsiyenti kupratlarda kuzatiladigan qiymatlardan kichik bo‘lishi mumkinligini ko‘rsatgan [12]. Demak, kuzatiladigan izotop effektini izohlashda spin fluktuatsiyalari bilan bir qatorda ularning panjara tebranishlari bilan o‘zaro ta’sirini ham hisobga olish zarur.

6. Polaron nazariyasi

Polaronik yondashuvda zaryad tashuvchisi kristall panjarasi bilan kuchli o‘zaro ta’sirlashib, uning atrofida lokal deformatsiya hosil qiladi. Izotop massasining o‘zgarishi fonon chastotasi bilan bir qatorda polaronning effektiv massasi va kogerent harakatiga ham ta’sir qilishi mumkin [15,16]:

$$T_c \propto \frac{n_s}{m_0^*} \qquad (6)$$

$$\alpha = -\frac{\partial lnT_s}{\partial lnM} = -\frac{\partial lnn_s}{\partial lnM} + \frac{\partial lnm_0^*}{\partial lnM} \qquad (7)$$

Shu sababli T_c ning izotop bog‘liqligi standart BKSh formulasidan sezilarli farq qilishi ehtimoli mavjud. Bussmann-Holder va Keller kupratlarda polaron hosil bo‘lishini noan’anaviy izotop effektlarining mumkin bo‘lgan manbalaridan biri sifatida ko‘rsatgan [15]. Weyeneth kislorod izotop effekti va polaronik o‘ta o‘tkazuvchanlik o‘rtasidagi bog‘liqlikni muhokama qilgan [16]. Kochelaev, Müller va Shengelaya esa kam legirlangan kupratlarda kislorod izotop effektini polaronik o‘ta o‘tkazuvchanlik bilan bog‘lab tahlil qilgan [22].

7. Bipolaron nazariyasi

Bipolaronik nazariyada ikkita zaryad tashuvchisi panjara deformatsiyasi vositasida bog‘langan juft holatni hosil qiladi. Bunday modelda izotop massasi fonon chastotasidan tashqari bipolaronning bog‘lanish energiyasi, effektiv massasi va kondensatsiya shartlariga ham ta’sir qilishi mumkin [3,17,18,19]:

$$k_B T_c \sim \frac{n_b}{m_b^*} \qquad (8)$$

Shu sababli izotop koeffitsiyentining kattaligi va hatto ishorasi standart BKSh natijasidan farq qilishi mumkin. Fung, Kwok va Lam bipolaron nazariyasi doirasida izotop effektining nazariy tahlilini amalga oshirgan [27]. Lakhno translation-invariant bipolaron modelida T_c va psevdotirqish haroratining izotop massasiga bog‘liqligini ko‘rib chiqib, izotop koeffitsiyentining manfiy bo‘lishi mumkinligini ko‘rsatgan [17,18]. Alexandrov va Zhao esa kupratlarda izotop effektining legirlanishga bog‘liqligini bipolaronik mexanizm nuqtayi nazaridan tahlil qilgan [3,19].

8. Psevdotirqish va izotop effekti

Kupratlarda psevdotirqish harorati T* va kritik temperatura T_c ning izotop massasiga bog‘liqligi bir xil bo‘lishi shart emas. Katta polaronlar modelida juftlashish psevdotirqishi uchun izotop effekti hisoblanib, $T^* > T_c$ bo‘lgan oldindan juftlashuv bosqichi ko‘rib chiqilgan [20]. Turli legirlanish sohalarida kichik, sezilarli va juda katta izotop effektlarining paydo bo‘lishi shu kabi modellar doirasida tahlil qilinadi. BKSh-tipidagi kuprat o‘ta o‘tkazuvchanligi uchun maxsus mezonlar hamda T_c ning noodatiy izotop effektlarini ham tahlil qilgan [5]. Keyingi ishlarda psevdotirqishdagi noodatiy izotop effekti T_c dan yuqoridagi oldindan juftlashuv va katta polaronlar mexanizmi bilan bog‘langan [21]. Bipolaronik psevdotirqish modelida esa manfiy izotop koeffitsiyentining fizik imkoniyati ko‘rsatilgan [17]:

$$T^* \propto \frac{n_p}{m_p^*} \qquad (9)$$

9. Qatlamlararo ta’sirlashuv

Kupratlarning qatlamli kristall tuzilishi sababli qatlamlararo elektron va panjara erkinlik darajalarining o‘zaro ta’siri izotop effektining kattaligiga ta’sir qilishi mumkin. Bilayer tizimlarda qatlamlararo bog‘lanish soddalashtirilgan holda (10) ko‘rinishida ifodalanadi:

$$H_\perp = -t_\perp \sum_{k,\sigma} (c_{1k\sigma}^\dagger c_{2k\sigma} + h.c.) - J_\perp \sum_i (b_{1i}^\dagger b_{2i} + h.c.) \qquad (10)$$

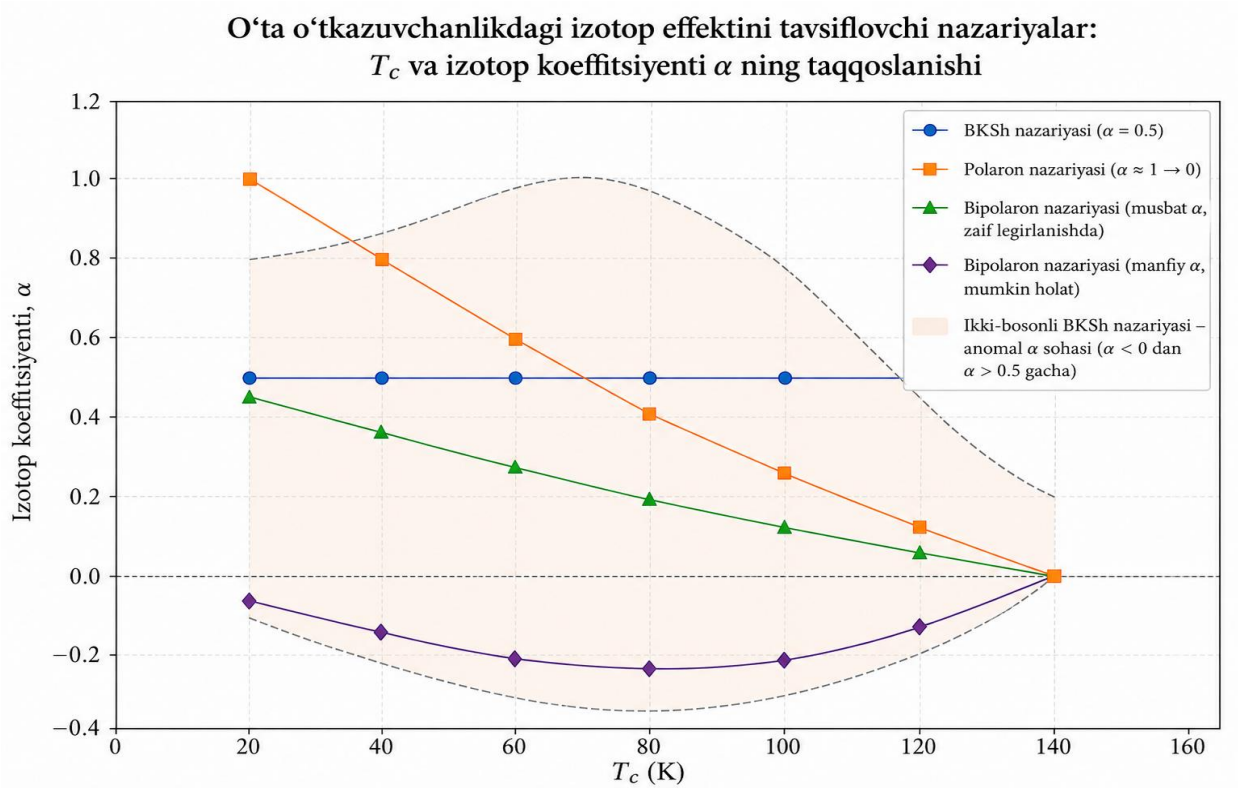
Bu yerda $t_\perp$ elektronlarning qo‘shni qatlamlar orasidagi tunnellanish amplitudasi, $J_\perp$ esa qatlamlararo fonon modlarining bog‘lanish kuchini ifodalaydi [13,14]. Izotop almashtirilishi fonon chastotalarini o‘zgartirishi orqali $J_\perp$bilan bog‘liq panjara dinamikasiga ta’sir qiladi, qatlamlararo elektron kogerentligi esa $t_\perp$ orqali tizimning samarali juftlashish xususiyatlarini o‘zgartiradi. Singh va boshq. qatlamlararo bog‘lanishning yuqori T_c kupratlardagi izotop effektiga ta’sirini tahlil qilgan [13], Tewari va boshq. esa psevdotirqish hamda qatlamlararo bog‘lanishning bilayer kupratlardagi izotop effektiga birgalikdagi ta’sirini ko‘rsatgan [14]. Shunday qilib, izotop effekti faqat bitta CuO_2 qatlamidagi lokal jarayon emas, balki qatlamlararo elektron kogerentligi, panjara dinamikasi va psevdotirqish bilan bog‘liq kollektiv hodisa sifatida qaralishi mumkin.

10. Nazariy yondashuvlarning qiyosiy tahlili

1-jadval. Izotop effektini tavsiflovchi asosiy nazariy yondashuvlarning qiyosiy taqqoslanishi

Nazariya	Izotop massasi ta’sir qilishi mumkin bo‘lgan asosiy kattaliklar	α	Asosiy manbalar
BKSh	Fonon chastotasi ω_D	Cheklangan; sodda holatda $\alpha \approx 0,5$	[1,2]
Migdal–Eliashberg	Fonon spektri va elektron–fonon bog‘lanishi	Kuchli bog‘lanish holatlarida	[7,8]
Ikki-bozonli BKSh	Bir nechta boson modlarining hissasi	standart qiymatdan og‘ish mumkin	[6]
Nonadiabatik	Elektron–fonon energiya masshtablari va uyurma tuzatishlari	Ayrim holatlarda sezilarli	[9–11]
Hubbard–Holstein	Fononlar va elektron korrelyatsiyasi	Mavjud	[23–26]
Spin fluktuatsiyasi	Spin va panjara fluktuatsiyalari	Oddiy modelda cheklangan	[12]
Polaron	Fonon chastotasi va effektiv massa	Mavjud	[15,16,22]
Bipolaron	Bog‘lanish energiyasi va effektiv massa	manfiy bo‘lishi ham mumkin	[3,17–19,27]
Qatlamlararo ta’sirlashuv	Qatlamlararo kogerentlik	Ikki qatlamli tizimlarda mumkin	[13,14]

Muhokama. Tahlil natijalari izotop effektining eng sodda fizik tasviri BKSh nazariyasida olinishi, ya’ni izotop massasining ortishi fonon chastotasini kamaytirib, boshqa parametrlar o‘zgarmaganda T_c ning pasayishiga olib kelishini ko‘rsatadi [1,2]. Biroq kupratlarda α ning legirlanishga bog‘liq o‘zgarishi, kichik yoki manfiy qiymatlarga ega bo‘lishi bu hodisaning faqat fonon chastotasi bilan cheklanmasligini ko‘rsatadi [3–5]. Migdal–Eliashberg, ikki-bozonli va nonadiabatik yondashuvlar kuchli elektron–fonon bog‘lanishi, turli boson modlari hamda elektron va fonon energiya masshtablarining nisbatini hisobga oladi [6–11]. Hubbard–Holstein, polaronik va bipolaronik modellar esa elektron korrelyatsiyasi, panjara deformatsiyasi, effektiv massa va juftlashish energiyasining izotop effektiga ta’sirini ko‘rib chiqadi [3,15–19,23–26].Shu bilan birga, mavjud natijalar biror modelni barcha eksperimental kuzatuvlarning universal izohi sifatida qabul qilishga yetarli emas. Izotop effektining kattaligi va ishorasi material, legirlanish va fizik sharoitga qarab o‘zgaradi. Shu sababli kupratlardagi izotop effektini elektron korrelyatsiyasi, panjara dinamikasi, spin fluktuatsiyalari, polaronik qayta normallashuv va qatlamlararo kogerentlikning o‘zaro ta’siri bilan bog‘liq ko‘p komponentli hodisa sifatida qarash maqsadga muvofiq [12–14,23–26]. Umuman, α ning o‘zi muayyan mexanizmni bir ma’noda aniqlamaydi; uning legirlanish, psevdotirqish va boshqa parametrlar bilan birgalikdagi o‘zgarishi nazariy modellarni baholashda muhim mezon hisoblanadi.



1-rasm. O‘ta o‘tkazuvchanlikdagi izotop effektini tavsiflovchi turli nazariyalar doirasida T_c va izotop koeffitsiyenti α ning taqqoslanishi

Grafik adabiyotlarda keltirilgan nazariy va hisoblash natijalarini umumlashtirish asosida tuzilgan bo‘lib, unda BKSh, ikki-bozonli, Migdal–Eliashberg, nonadiabatik, Hubbard–Holstein, spin-fluktuatsion, polaron, bipolaron va qatlamlararo bog‘lanish yondashuvlarining izotop effektini tavsiflash imkoniyatlari aks ettirilgan [1–27].

Xulosalar. Izotop effekti o‘ta o‘tkazuvchanlik mexanizmini baholashning muhim eksperimental mezoni bo‘lib, uning asosiy miqdoriy ko‘rsatkichi $\alpha = -d\ln T_c/d\ln M$ hisoblanadi [1]. Oddiy BKSh nazariyasida fonon chastotasining $M^{-1/2}$ ga bog‘liqligi $\alpha \approx 0{,}5$ natijani beradi, biroq kupratlardagi legirlanishga bog‘liq va anomal qiymatlarni bu yondashuv bilan to‘liq izohlab bo‘lmaydi [3–5]. Migdal–Eliashberg, ikki-bozonli va nonadiabatik modellar fonon spektri, kuchli elektron–fonon bog‘lanishi hamda elektron va fonon energiya masshtablarining nisbatini hisobga olib, izotop effektining murakkab xususiyatlarini tavsiflaydi [6–11]. Hubbard–Holstein va spin-fluktuatsion yondashuvlar esa elektron korrelyatsiyasi, spin fluktuatsiyalari va panjara erkinlik darajalarining o‘zaro ta’sirini hisobga olish zarurligini ko‘rsatadi [12,23–26]. Polaron va bipolaron nazariyalarda izotop massasi fonon chastotasidan tashqari effektiv massa, panjara deformatsiyasi va juftlashish energiyasiga ham ta’sir qilishi mumkinligi sababli kichik, legirlanishga bog‘liq va manfiy α qiymatlarini tushuntirish imkoniyati mavjud [3,15–19,22]. Psevdotirqish va qatlamlararo bog‘lanishni hisobga oluvchi modellar esa izotop effektining T_c bilan bir qatorda T* va boshqa fizik xususiyatlarda ham namoyon bo‘lishini ko‘rsatadi [13,14,17,20,21].Umuman, qiyosiy tahlil kupratlardagi izotop effektini faqat fonon chastotasining massa bilan bog‘liqligi orqali tushuntirish yetarli emasligini ko‘rsatadi. Elektron korrelyatsiyasi, polaron va bipolaron xossalar, spin fluktuatsiyalari, psevdotirqish hamda qatlamlararo kogerentlikni birgalikda hisobga oluvchi kompleks yondashuv izotop effektining turli anomal ko‘rinishlarini tushuntirish uchun istiqbolli hisoblanadi.

ADABIYOTLAR:

1 Swihart, J. C. Phys. Rev. 116(1) (1959) 45.
2 Carbotte, J. P., Nicol, E. J. Physica C 185 (1991) 162–167.
3 Alexandrov, A. S., Zhao, G. M. New J. Phys. 14(1) (2012) 013046.
4 Zhao, G. M., Keller, H., Conder, K. J. Phys.: Condens. Matter 13(29) (2001) R569–R587.
5 Dzhumanov, S., Oksengendler, B. L., Djumanov, S. S. Pramana 94(1) (2020) 8.
6 Sun, G., Lou, P. X., Lai, S. Q., Wang, D., Wang, Q. H. New J. Phys. 23(5) (2021) 053006.

7 Villa-Cortés, S., De la Peña-Seaman, O., Lawler, K. V., Salamat, A. Phys. Rev. B 108(2) (2023) L020506.

8 Villa-Cortés, S., Baquero, R. arXiv:1708.03916 (2017).

9 Paci, P., Capone, M., Cappelluti, E., Ciuchi, S., Grimaldi, C., Pietronero, L. Phys. Rev. Lett. 94(3) (2005) 036406.

10 Bill, A., Kresin, V. Z., Wolf, S. A. Z. Phys. B 104(4) (1997) 759–763.

11 Pietronero, L., Strässler, S. Europhys. Lett. 18(7) (1992) 627–633.

12 Pao, C. H., Schüttler, H. B. J. Phys. Chem. Solids 56(12) (1995) 1745–1746.

13 Singh, A., Pathak, P. K., Kishore, R. Physica C 415(3) (2004) 145–149.

14 Tewari, B. S., Ahlawat, M., Dhyani, A. Physica C 587 (2021) 1353895.

15 Bussmann-Holder, A., Keller, H. Eur. Phys. J. B 44(4) (2005) 487–490.

16 Weyeneth, S. High-Tc Copper Oxide Superconductors and Related Novel Materials, Springer (2017) 317–322.

17 Lakhno, V. D. Materials 14(17) (2021) 4973.

18 Lakhno, V. D. Condens. Matter 5(4) (2020) 80.

19 Alexandrov, A. S., Zhao, G. M. arXiv:1105.3124 (2011).

20 Dzhumanov, S., Ganiev, O. K., Djumanov, S. S. arXiv:1006.2892 (2010).

21 Dzhumanov, S., Baimatov, P. J., Djumanov, S. S. Physica C 513 (2015) 43–50.

22 Kochelaev, B. I., Müller, K. A., Shengelaya, A. J. Mod. Phys. 5(6) (2014) 473.

23 Kuhn, W., Wagner, M. Phys. Rev. B 23(2) (1981) 685.

24 Macridin, A., Jarrell, M. Phys. Rev. B 79(10) (2009) 104517.

25 Dahm, T., Manske, D., Fay, D., Tewordt, L. Phys. Rev. B 54(17) (1996) 12006.

26 Paci, P., Capone, M., Cappelluti, E., Ciuchi, S., Grimaldi, C. Phys. Rev. B 74(20) (2006) 205108.

27 Fung, P. C. W., Kwok, E. M. Y., Lam, C. C. Physica C 213(3–4) (1993) 359–369.

28 Nagaev, E. L. Phys. Lett. A 258(1) (1999) 65–73.

29 Kiefer, P. M., Hynes, J. T. J. Phys. Chem. A 108(52) (2004) 11793–11808.

30 Li, J., Xiong, S. J., Li, C., Jin, B., Zhang, Y. Q., Jiang, S. D., et al. CCS Chem. 3(9) (2021) 2548–2556.

31 Bruno, P. Phys. Rev. B 52(1) (1995) 411.

UO‘K 539.23

MAGNETRON CHANGITISH USULIDA OLINGAN MoO_3 YUPQA PARDALARINING ATOM TARKIBI VA ZARYAD HOLATLARINI RENTGEN FOTOELEKTRON SPEKTROSKOPIYASI YORDAMIDA TADQIQ ETISH

Sharopov Utkirjon Bahodirovich,
O‘zbekiston Fanlar akademiyasi
Fizika-texnika instituti,
fizika-matematika fanlari doktori (DSc)
Toshkent, O‘zbekiston
utkirstar@gmail.com
Kuryozov Furqat Odilbekovich,
Urganch RANCH texnologiya universiteti
o‘qituvchisi, mustaqil tadqiqotchi
Urganch, O‘zbekiston
kuryozovfurkat22@gmail.com

Annotatsiya. *Ushbu ishda kremniy taglik ustida magnetron changitish usulida shakllantirilgan molibden oksidi MoO_3 yupqa pardalarining atom tarkibi va molibden atomlarining zaryad holati rentgen fotoelektron spektroskopiyasi (RFES) usuli bilan o‘rganildi. $Mo3d_{5/2}$ cho‘qqisining bog‘lanish energiyasi 233,8 eV ekanligi ko‘rsatildi, bu Mo^{6+} oksidlanish darajasiga mos keladi; 233,2 eV da Mo^{5+} komponenti aniqlandi. O1s darajasining dekonvolyutsiyasi panjara (531,3 eV) va adsorbsion (532,3 eV) kislorodni ajratdi. 10 nm qalinlikdagi pardalar uchun O:Mo nisbati 2,6 ni, Mo^{5+} ulushi esa 6–8 % ni tashkil etdi; qalinlik ortishi bilan nisbat deyarli o‘zgarmadi, Mo^{5+} ulushi esa 1–2 % gacha kamaydi. Ar^+ ionlari bilan tozalashdan keyin O:Mo nisbati 2,9 gacha oshdi. Namunalarni tashishda vakuum mini-kamera qo‘llanilishi adsorbsion uglerod konsentratsiyasini kamaytirdi. Olingan natijalar organik elektronikaning kovak injeksiya qiluvchi kontaktlari sifatida foydalanishga yaroqli stexiometrik MoO_3 pardalari shakllanishini tasdiqlaydi.*

Kalit so‘zlar: *molibden oksidi, RFES, stexiometriya, zaryad holati, injeksiya kontakti, organik elektronika.*

ИССЛЕДОВАНИЕ АТОМНОГО СОСТАВА И ЗАРЯДОВЫХ СОСТОЯНИЙ ТОНКИХ ПЛЁНОК MoO_3, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО НАПЫЛЕНИЯ, С ПОМОЩЬЮ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Аннотация. *В работе методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) исследованы атомный состав и зарядовое состояние атомов молибдена в тонких плёнках оксида молибдена MoO_3, сформированных магнетронным распылением на кремниевой подложке. Показано, что энергия связи пика $Mo3d_{5/2}$ составляет 233,8 эВ, что соответствует степени окисления Mo^{6+}; выявлен минорный компонент Mo^{5+} при 233,2 эВ. Деконволюция уровня O1s обнаружила решёточный (531,3 эВ) и адсорбированный (532,3 эВ) кислород. Для плёнок толщиной 10 нм отношение O:Mo составило 2,6, а доля Mo^{5+} достигала 6–8 %; с ростом толщины отношение практически не изменялось, а доля Mo^{5+} снижалась до 1–2 %. После очистки поверхности ионами Ar^+ отношение O:Mo возрастало до 2,9. Применение вакуумной миникамеры при транспортировке образцов снизило концентрацию адсорбированного углерода. Полученные результаты подтверждают формирование стехиометрических плёнок MoO_3, пригодных в качестве дырочных инжектирующих контактов органической электроники.*

Ключевые слова: *оксид молибдена, РФЭС, стехиометрия, зарядовое состояние, инжектирующий контакт, органическая электроника.*

INVESTIGATION OF THE ATOMIC COMPOSITION AND CHARGE STATES OF MoO_3 THIN FILMS OBTAINED BY THE MAGNETRON SPUTTERING METHOD USING X-RAY PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY

Abstract. *In this work, the atomic composition and charge state of molybdenum atoms in molybdenum oxide MoO_3 thin films deposited by magnetron sputtering on a silicon substrate were studied by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS). The binding energy of the $Mo3d_{5/2}$ peak was found to be 233.8 eV,*

corresponding to the Mo^{6+} oxidation state; a minor Mo^{5+} component at 233.2 eV was identified. Deconvolution of the O1s level resolved lattice (531.3 eV) and adsorbed (532.3 eV) oxygen. For 10 nm films the O:Mo ratio was 2.6 and the Mo^{5+} fraction reached 6–8 %; with increasing thickness the ratio remained practically unchanged, while the Mo^{5+} fraction decreased to 1–2 %. After Ar^{+} ion cleaning the O:Mo ratio increased to 2.9. The use of a vacuum mini-chamber during sample transfer reduced the adsorbed carbon concentration. The results confirm the formation of stoichiometric MoO_3 films suitable as hole-injecting contacts for organic electronics.

Key words: *molybdenum oxide, XPS; stoichiometry, charge state, injecting contact, organic electronics.*

Kirish. So‘nggi o‘n yillikda organik elektronika – organik yorug‘lik chiqaruvchi diodlar (OLED), organik quyosh elementlari va organik maydon tranzistorlari – jadal rivojlanmoqda [1], [4]. Bunday qurilmalarning samaradorligini belgilovchi asosiy omillardan biri elektrod va organik qatlam orasidagi chegarada zaryad tashuvchilarning samarali injeksiyasidir. Kovaklarning (musbat zaryad tashuvchilar) samarali injeksiyasiga erishish uchun kontakt materialining chiqish ishi 5 eV dan yuqori bo‘lishi talab etiladi [5], [7]. An’anaviy metall va kremniy elektrodlarning chiqish ishi 4,8 eV dan past bo‘lib, bu energetik moslashuvni qiyinlashtiradi va injeksiya to‘sig‘ini oshiradi.

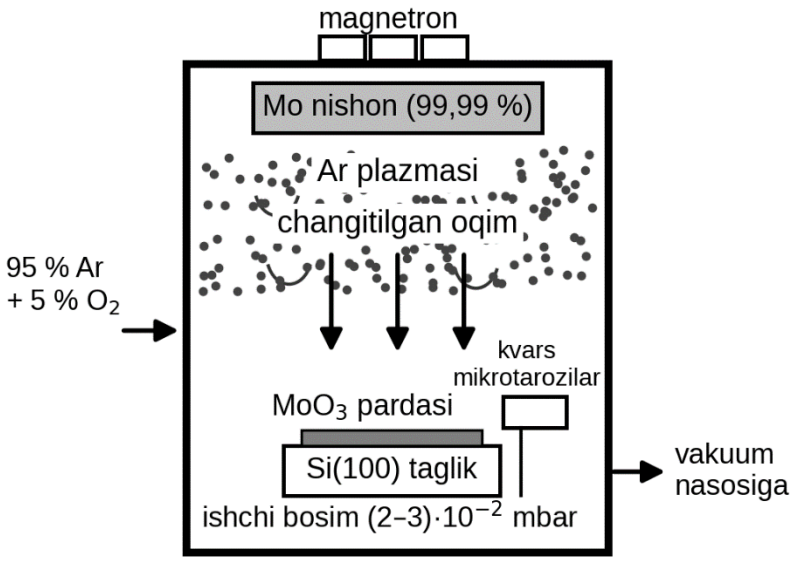
O‘tish metallari oksidlari, xususan, molibden oksidi MoO_3, ushbu muammoni hal qilishning istiqbolli yo‘nalishi hisoblanadi. MoO_3 ning chiqish ishi 6 eV gacha yetishi mumkin, bu uni kovak injeksiya qiluvchi qatlam sifatida foydalanishga imkon beradi [2], [5]. MoO_3 ning yuqori chiqish ishi uning chuqur joylashgan o‘tkazuvchanlik zonasi va Fermi sathining valent zona maksimumidan ancha pastda joylashishi bilan bog‘liq [5], [14]. Biroq qoplamaning samaradorligi bevosita uning atom tarkibi va stexiometriyasi bilan belgilanadi: molibden va kislorod konsentratsiyalari nisbati, shuningdek, Mo^{6+} va Mo^{5+} zaryad holatlarining nisbati pardaning elektron xususiyatlariga sezilarli ta’sir ko‘rsatadi [3], [13].

Adabiyotlarda MoO_3 pardalarini olishning turli usullari – termik bug‘latish, magnetron changitish, atom qatlamli o‘tkazish – muhokama qilingan [4], [6], [12]. Magnetron changitish usuli yuqori bir jinslilik, qatlam qalinligini aniq nazorat qilish va sanoat miqyosida kengaytirilish imkoniyati tufayli ajralib turadi. Shu bilan birga, changitish jarayonida kislorod yetishmasligi natijasida pardada Mo^{5+} holatlari va kislorod bo‘shliqlari hosil bo‘lishi mumkin, bu esa stexiometriyaning buzilishiga olib keladi [11], [13]. Shu sababli olingan pardalarning atom tarkibini va molibden atomlarining zaryad holatini aniq nazorat qilish dolzarb vazifa hisoblanadi.

Ushbu ishning maqsadi magnetron changitish usulida shakllantirilgan MoO_3 pardalarining atom tarkibini va molibden atomlarining zaryad holatini rentgen fotoelektron spektroskopiyasi (RFES) yordamida tadqiq etishdan iborat. Ishda Mo3d va O1s o‘zak darajalarining batafsil tahlili, O:Mo nisbatining va Mo^{5+} ulushining parda qalinligiga bog‘liqligi, shuningdek, namunalarni tashish sharoitlarining sirt ifloslanishiga ta’siri o‘rganildi.

RFES usuli yuza yaqinidagi (2–5 nm chuqurlikdagi) qatlamning kimyoviy tarkibi va elementlarning zaryad holati haqida bevosita ma’lumot beruvchi eng axborotli usullardan biri hisoblanadi. Molibdenning turli oksidlanish darajalari (Mo^{6+}, Mo^{5+}, Mo^{4+}) Mo3d o‘zak darajasining bog‘lanish energiyasida aniq farqlanadigan siljishlarga ega bo‘ladi, bu esa pardadagi qaytarilgan holatlar va kislorod bo‘shliqlari konsentratsiyasini miqdoriy baholashga imkon yaratadi [3], [11]. Shu sababli RFES MoO_3 pardalarining sifatini nazorat qilishda asosiy vosita hisoblanadi. Bundan tashqari, molibden oksidi MoO_3 dan tashqari MoO_2 va oraliq Mo_nO_{3n-1} fazalarini ham hosil qilishi mumkinligi sababli, faqat aniq tarkibni nazorat qilish kerakli elektron xususiyatlarga erishishni kafolatlaydi [13], [14].

Materiallar va eksperimental usullar. MoO_3 pardalari Kepler 450 qurilmasida molibden nishonini (tozaligi 99,99 %) magnetron changitish usuli bilan kremniy Si(100) taglik ustiga o‘tkazildi. Ishchi gaz sifatida 95 % Ar va 5 % O_2 aralashmasi $(2–3)\cdot10^{-2}$ mbar bosimda foydalanildi. Parda qalinligi 10 dan 150 nm gacha bo‘lib, o‘tkazish jarayonida kvars mikrotarozilar yordamida nazorat qilindi. Changitish jarayoni sxematik tarzda 1-rasmda keltirilgan.



1-rasm. Magnetron changitish jarayonining sxematik ko‘rinishi: Mo nishon, Ar^+ plazmasi, changitilgan oqim va Si taglik ustida MoO_3 pardasining shakllanishi

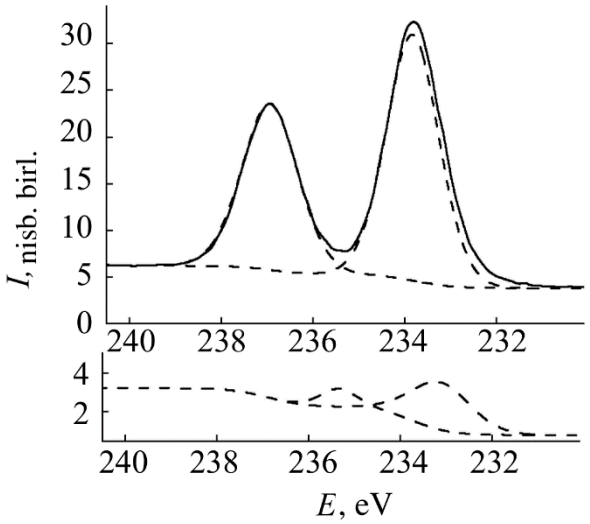
Atom tarkibi va zaryad holati Escalab 250Xi spektrometrida rentgen fotoelektron spektroskopiyasi (RFES) usuli bilan, monoxromatlashtirilgan Al Kα nurlanishi (1486,6 eV) yordamida o‘ta yuqori vakuum sharoitida o‘rganildi. O‘zak darajalarning dekonvolyutsiyasi Shirli foni va Foygt funksiyalarini hisobga olgan holda bajarildi. Namuna sirti energiyasi 500 eV bo‘lgan Ar^+ ionlari nuri bilan tozalandi. Adsorbsion uglerodning ta’sirini kamaytirish maqsadida namunalar o‘lchov kamerasiga ko‘chma vakuum mini-kamera (10^{-5} Torr) yordamida tashildi.

Bog‘lanish energiyasining shkalasini kalibrlash adventiv uglerodning C1s cho‘qqisi bo‘yicha (284,8 eV) amalga oshirildi. Atom konsentratsiyalari nisbati tegishli o‘zak darajalarning integral intensivligi va Skofild fotoionizatsiya kesimlarini hisobga olgan holda hisoblandi. Har bir qalinlik uchun kamida uchta nuqtada o‘lchovlar o‘tkazilib, o‘rtacha qiymatlar olindi. Namunalarni o‘tkazishning asosiy texnologik parametrlari 1-jadvalda keltirilgan.

1-jadval. MoO_3 pardalarini magnetron changitish parametrlari

Parametr	Qiymat
Nishon materiali (tozalik)	Mo, 99,99 %
Ishchi gaz	95 % Ar + 5 % O_2
Ishchi bosim	$(2–3)\cdot10^{-2}$ mbar
Taglik	Si(100)
Parda qalinligi	10–150 nm
Qalinlik nazorati	kvars mikrotarozilar
Tashish vakuumi	10^{-5} Torr (mini-kamera)

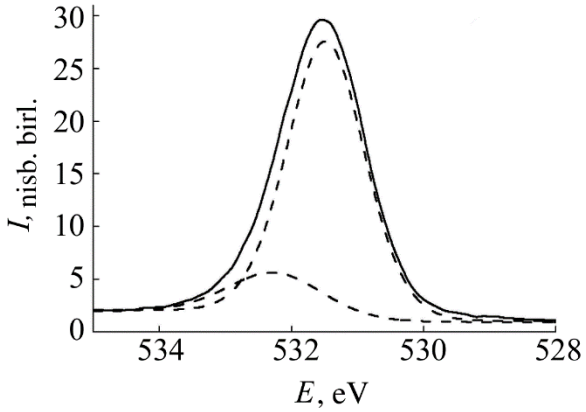
Natijalar va munozaralar. RFES umumiy spektrida asosiy komponentlar – O1s (531,3 eV), C1s (284,8 eV) va Mo3d (233,6 eV) – qayd etildi. Molibden atomlarining zaryad holati to‘g‘risidagi asosiy ma’lumot Mo3d o‘zak darajasining tahlilidan olindi. Mo3d spektri $Mo3d_{5/2}$ va $Mo3d_{3/2}$ dubletidan iborat bo‘lib, ular orasidagi spin-orbital ajralish 3,11 eV ni tashkil etdi (2-rasm).



2-rasm. MoO_3 pardasining Mo3d o‘zak darajasi RFES spektri va uning Mo^{6+} hamda Mo^{5+} komponentlariga dekonvolyutsiyasi

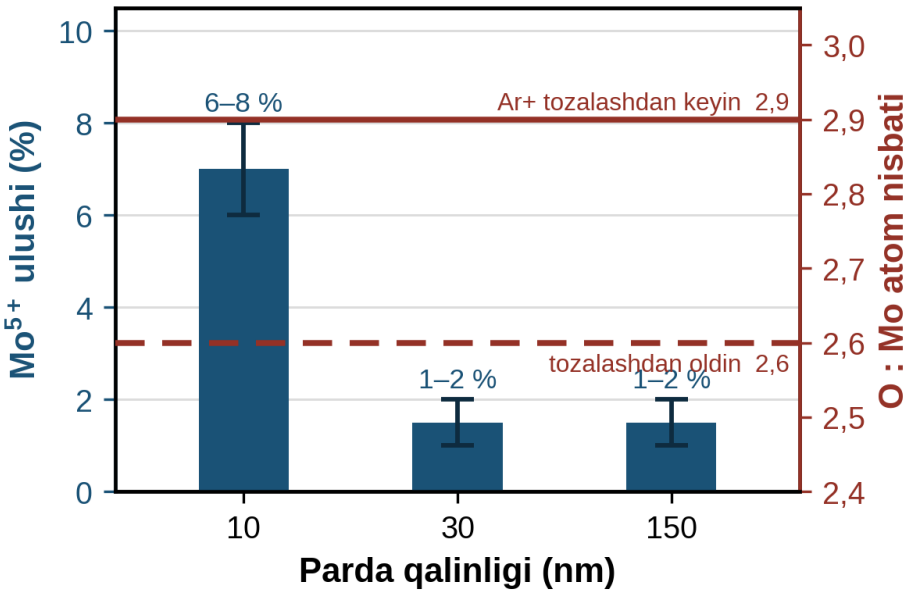
$Mo3d_{5/2}$ cho‘qqisining bog‘lanish energiyasi 233,8 eV ni tashkil etdi, bu molibdenning Mo^{6+} oksidlanish darajasiga, ya’ni stexiometrik MoO_3 ga mos keladi [3], [13]. 233,2 eV da kuzatilgan kamroq ifodalangan komponent Mo^{5+} holatiga tegishli bo‘lib, kislorod bo‘shliqlari bilan bog‘liq qisman qaytarilgan holatlarni aks ettiradi [11]. Mo^{5+} ning mavjudligi pardada kislorod yetishmovchiligi sodir bo‘lganligini ko‘rsatadi va uning ulushi changitish sharoitlariga sezilarli bog‘liqdir.

O1s o‘zak darajasining dekonvolyutsiyasi ikki komponentni ajratdi: 531,3 eV dagi panjara kislorodi (MoO_3 to‘rida Mo–O bog‘lanishlari) va 532,3 eV dagi adsorbsion kislorod (sirtdagi gidroksil guruhlari va adsorbsiyalangan suv) (3-rasm). Panjara kislorodi komponentining ustunligi pardaning yaxshi shakllangan oksid tuzilishiga ega ekanligini tasdiqlaydi.



3-rasm. MoO_3 pardasining O1s o‘zak darajasi spektri: panjara kislorodi (531,3 eV) va adsorbsion kislorod (532,3 eV)

Atom tarkibining parda qalinligiga bog‘liqligi muhim ahamiyatga ega. O‘rganilgan barcha qalinliklarda (10, 30 va 150 nm) O:Mo nisbati 2,6 ± 0,1 ni tashkil etdi va parda qalinligi ortishi bilan sezilarli o‘zgarmadi. Mo^{5+} ulushi esa qalinlikka sezilarli bog‘liq bo‘ldi: 10 nm qalinlikdagi pardalarda u 6–8 % ga yetdi, qalinlik ortganda esa o‘tkazilgan tahlil xatoligi chegarasiga yaqin bo‘lgan 1–2 % gacha kamaydi (4-rasm). Ar^+ ionlari bilan tozalashdan keyin O:Mo nisbati 2,9 ± 0,1 gacha oshdi, bu esa molibden atomlarining asosan Mo^{6+} holatida ekanligini tasdiqlaydi. Yupqa pardalardagi kislorod yetishmovchiligi, ehtimol, taglik bilan chegaradagi qatlamlararo ta’sir va boshlang‘ich o‘sish bosqichidagi notekis kislorodlanish bilan bog‘liqdir.



4-rasm. Mo^{5+} ulushining MoO_3 parda qalinligiga bog‘liqligi hamda Ar^+ ionlari bilan tozalashdan oldin va keyin O:Mo nisbati

2-jadval. MoO_3 pardalarining atom tarkibi va Mo^{5+} ulushining parda qalinligiga bog‘liqligi

Qalinlik (nm)	O:Mo nisbati	Mo^{5+} ulushi (%)
10	2,6 ± 0,1	6–8
30	2,6 ± 0,1	1–2
150	2,6 ± 0,1	1–2

Ko‘chma vakuum mini-kamerasini (10^{-5} Torr) namunalarni tashishda qo‘llash adsorbsion uglerodning nisbiy konsentratsiyasini atmosfera bilan kontaktdagi 20–25 % dan 10 % dan oshmaydigan darajagacha kamaytirishga imkon berdi. Bu sirt holatini o‘rganishda muhim ahamiyatga ega, chunki uglerod ifloslanishi chiqish ishini va atom tarkibini baholashda xatoliklarga olib kelishi mumkin. Ar^+ ionlari bilan tozalashdan keyin O:Mo nisbati 2,6 ± 0,1 dan 2,9 ± 0,1 gacha oshdi; bu sirtdagi adsorbsion qatlamning olib tashlanishi bilan bog‘liq. Pardaning hajmiy stexiometriyasi esa qalinlikka bog‘liq bo‘lmagan holda barqaror bo‘lib qoldi.

Olingan natijalarni boshqa mualliflarning ma’lumotlari bilan solishtirish shuni ko‘rsatadiki, $Mo3d_{5/2}$ ning 233,8 eV qiymati va Mo^{6+} ustunligi magnetron usulida olingan sifatli MoO_3 pardalari uchun xosdir [3], [6], [12]. Mo^{5+} ulushining qalinlik bilan kamayishi changitish jarayonida kislorod muvozanatining yaxshilanishi bilan izohlanadi. Stexiometrik MoO_3 pardalarining shakllanishi ularning yuqori chiqish ishini ta’minlaydi va organik elektronika qurilmalarida kovak injeksiya qiluvchi kontakt sifatida foydalanish uchun zaruriy shartdir [5], [18].

Shuni ta’kidlash kerakki, Mo^{5+} holatlari va ular bilan bog‘liq kislorod bo‘shliqlari MoO_3 ning elektron tuzilishiga ikki tomonlama ta’sir ko‘rsatadi. Bir tomondan, taqiqlangan zonada qo‘shimcha holatlar hosil bo‘lib, ular zaryad tashuvchilarning tutilish markazlari sifatida ishlashi va injeksiya samaradorligini pasaytirishi mumkin. Boshqa tomondan, me’yoriy konsentratsiyadagi kislorod bo‘shliqlari Fermi sathini siljitishi va o‘tkazuvchanlikni oshirishi mumkin [5], [14]. Shu sababli Mo^{5+} ulushini optimal darajada nazorat qilish amaliy ahamiyatga ega. Bizning natijalarimiz qalin (150 nm) pardalarda Mo^{5+} ulushi minimal (1–2 %) bo‘lib, bu deyarli ideal stexiometrik MoO_3 ga mos kelishini ko‘rsatadi.

Xulosalar. Magnetron changitish usulida kremniy taglik ustida shakllantirilgan MoO_3 yupqa pardalarining atom tarkibi va zaryad holati rentgen fotoelektron spektroskopiyasi yordamida o‘rganildi. $Mo3d_{5/2}$ cho‘qqisining bog‘lanish energiyasi 233,8 eV ekanligi aniqlandi, bu Mo^{6+} oksidlanish darajasiga mos keladi; 233,2 eV da Mo^{5+} minor komponenti qayd etildi. O1s darajasi panjara (531,3 eV) va adsorbsion (532,3 eV) kislorodga ajratildi.

O:Mo nisbati o‘rganilgan barcha qalinliklarda 2,6 ± 0,1 bo‘lib qolishi, Mo^{5+} ulushining esa 6–8 % dan 1–2 % gacha kamayishi aniqlandi. Ar^+ ionlari bilan tozalashdan keyin O:Mo nisbati 2,9 ± 0,1 gacha oshdi.

Vakuum mini-kamerasini qo‘llash adsorbsion uglerod konsentratsiyasini sezilarli kamaytirdi. Olingan natijalar magnetron changitish usuli organik elektronikaning kovak injeksiya qiluvchi kontaktlari sifatida foydalanishga yaroqli stexiometrik MoO_3 pardalarini shakllantirishni ta’minlashini ko‘rsatadi. Kelajakdagi tadqiqotlar changitish sharoitlarini optimallashtirish orqali yupqa pardalarda ham stexiometriyani yaxshilashga qaratiladi.

ADABIYOTLAR:

1. R. T. White, E. S. Thibau, Z. H. Lu, “Universal energy-level alignment of molecules at metal oxide interfaces,” Sci. Rep., vol. 6, p. 21109, 2016, doi: 10.1038/srep21109.

2. M. T. Greiner, Z. H. Lu, “Thin-film metal oxides in organic semiconductor devices: their electronic structures, work functions and interfaces,” NPG Asia Mater., vol. 5, p. e55, 2013, doi: 10.1038/am.2013.29.

3. C. V. Ramana, V. V. Atuchin, V. G. Kesler, et al., “Electronic structure and chemical bonding in molybdenum-oxide films,” Appl. Surf. Sci., vol. 253, no. 12, pp. 5368–5374, 2007, doi: 10.1016/j.apsusc.2006.12.012.

4. J. Meyer, S. Hamwi, M. Kröger, et al., “Transition metal oxides for organic electronics,” Adv. Mater., vol. 24, no. 40, pp. 5408–5427, 2012, doi: 10.1002/adma.201201630.

5. M. Kröger, S. Hamwi, J. Meyer, et al., “Role of the deep-lying electronic states of MoO3 in the enhancement of hole injection,” Appl. Phys. Lett., vol. 95, p. 123301, 2009, doi: 10.1063/1.3231928.

6. A. L. F. Cauduro, R. dos Reis, G. Chen, et al., “Crystalline molybdenum oxide thin-films for application as interfacial layers in optoelectronic devices,” ACS Appl. Mater. Interfaces, vol. 9, no. 8, pp. 7717–7724, 2017, doi: 10.1021/acsami.6b14228.

7. I. G. Hill, A. Kahn, J. Cornil, et al., “Charge-separation energy in films of conjugated organic molecules,” Chem. Phys. Lett., vol. 317, pp. 444–450, 2000, doi: 10.1016/S0009-2614(99)01384-6.

8. Z. Bin, H. Guo, Z. Liu, F. Li, et al., “Hole transporting materials for OLEDs,” ACS Appl. Mater. Interfaces, vol. 10, no. 5, pp. 4882–4886, 2018, doi: 10.1021/acsami.7b18261.

9. A. S. Komolov, E. F. Lazneva, N. B. Gerasimova, et al., “Conduction band electronic states of ultrathin layers of thiophene/phenylene co-oligomers,” J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., vol. 235, pp. 40–45, 2019, doi: 10.1016/j.elspec.2019.07.001.

10. U. B. Sharopov, K. Samiev, A. To‘raev, et al., “Surface defect formation studied by total current spectroscopy,” Vacuum, vol. 227, p. 113395, 2024, doi: 10.1016/j.vacuum.2024.113395.

11. R. Tokarz-Sobieraj, K. Hermann, M. Witko, et al., “Properties of oxygen sites at the MoO3(010) surface,” Surf. Sci., vol. 489, pp. 107–125, 2001, doi: 10.1016/S0039-6028(01)01169-4.

12. N. Sharma, R. Kumar, J. Jayabalan, “Optical and structural properties of magnetron-sputtered MoO3 thin films,” Curr. Appl. Phys., vol. 21, pp. 58–65, 2021, doi: 10.1016/j.cap.2020.10.004.

13. S. Tokito, K. Noda, Y. Taga, “Metal oxides as a hole-injecting layer for an organic electroluminescent device,” J. Phys. D: Appl. Phys., vol. 29, pp. 2750–2753, 1996, doi: 10.1088/0022-3727/29/11/004.

14. D. O. Scanlon, G. W. Watson, D. J. Payne, et al., “Theoretical and experimental study of the electronic structures of MoO3 and MoO2,” J. Phys. Chem. C, vol. 114, no. 10, pp. 4636–4645, 2010, doi: 10.1021/jp9093172.

15. U. B. Sharopov, B. G. Atabaev, R. Djabbarganov, “Defect formation on the surface of ZnO using low-energy electrons,” J. Surf. Investig., vol. 14, no. 1, pp. 101–104, 2020, doi: 10.1134/S1027451020010164.

16. K. Jacobi, G. Zwicker, A. Gutmann, “Work function, electron affinity and band bending of zinc oxide surfaces,” Surf. Sci., vol. 141, pp. 109–125, 1984, doi: 10.1016/0039-6028(84)90199-7.

17. A. S. Komolov, P. J. Møller, E. F. Lazneva, “A total current spectroscopy study of metal oxide surfaces,” J. Phys.: Condens. Matter, vol. 11, p. 9089, 1999.

18. H. Lee, S. W. Cho, K. Han, et al., “The origin of the hole injection improvements at indium tin oxide/MoO3 interfaces,” Appl. Phys. Lett., vol. 93, p. 043308, 2008, doi: 10.1063/1.2965120.

UO‘K 538.9:621.315.5

KATTA DOZALI ION IMPLANTATSIYASI TA’SIRIDA Si(111) SIRT VA HAJM PLAZMA TEBRANISHLARINING NAZARIY TAHLILI

Abrayeva Sevara Toshtemirovna,
Termiz iqtisodiyot va servis universiteti,
fizika-matematika fanlari falsafa doktori (PhD)
ORCID: 0009-0003-9401-8905
sevara_abrayeva@tues.uz

Annotatsiya. *Ushbu maqolada Ba hamda ishqoriy element ionlarining katta dozali ($D > 10^{16}$ sm^{-2}) implantatsiyasi jarayonida Si(111) valent elektronlarining sirt va hajm plazma tebranishlari qo‘zg‘alish energiyasining kamayishi bo‘yicha tajriba yo‘li bilan aniqlangan effektning nazariy talqini keltirilgan. Elektron gazining ikki suyuqlikli modeliga asoslangan holda, Si(111) plazmon energiyasining pasayishi Si(111) kristall tuzilishining to‘liq amorflanishigacha bo‘lgan tartibsizlanishi natijasida valent elektronlar tebranishlarining kuchli so‘nishi bilan izohlanadi.*

Kalit so‘zlar: *Past energiyali ion implantatsiyasi, valent elektronlarning sirt va hajm plazma tebranishlari qo‘zg‘alish energiyasi, sirtning amorflanishi, elektronlarning plazma tebranishlarining so‘nishi, dielektrik singdiruvchanlik, elektron gazining ikki suyuqlikli modeli.*

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПОВЕРХНОСТНЫХ И ОБЪЁМНЫХ ПЛАЗМЕННЫХ КОЛЕБАНИЙ Si(111) ПРИ ВЫСОКОДОЗНОЙ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ

Аннотация. *В данной статье представлено теоретическое обоснование экспериментально установленного эффекта снижения энергии возбуждения поверхностных и объемных плазменных колебаний валентных электронов Si(111) при высокодозной ($D > 10^{16}$ $см^{-2}$) ионной имплантации бария и щелочных элементов. На основе двухжидкостной модели электронного газа снижение энергии плазмонов Si(111) объясняется сильным затуханием колебаний валентных электронов вследствие разупорядочения кристаллической структуры Si(111) вплоть до её полного аморфизирования.*

Ключевые слова: *низкоэнергетическая ионная имплантация, энергия возбуждения поверхностных и объемных плазменных колебаний валентных электронов, аморфизация поверхности, затухание электронных плазменных колебаний, диэлектрические свойства, модель двухжидкостного электронного газа.*

THEORETICAL ANALYSIS OF SURFACE AND BULK PLASMA OSCILLATIONS IN Si(111) UNDER HIGH-DOSE ION IMPLANTATION

Abstract. *This paper provides a theoretical interpretation of the experimentally observed effect of a decrease in the excitation energy of surface and bulk plasma oscillations of valence electrons in Si(111) during high-dose ($D > 10^{16}$ cm^{-2}) ion implantation of barium and alkali elements. Based on the two-fluid model of the electron gas, the reduction in Si(111) plasmon energy is attributed to the strong damping of valence electron oscillations resulting from the disordering of the Si(111) crystal structure, leading up to its complete amorphization.*

Keywords: *low-energy ion implantation, excitation energy of surface and bulk plasma oscillations of valence electrons, surface amorphization, damping of electron plasma oscillations, dielectric properties, two-fluid electron gas model.*

Kirish. So‘nggi yillarda ilmiy dunyoda nanomateriallarga bo‘lgan e’tiborning keskin ortishi bejiz emas. Nanokristallarning an’anaviy materiallardan farqli o‘laroq, noyob xossalarga egaligi bu yo‘nalishdagi tadqiqotlar o‘sish sur’atlarini eksponensial darajaga olib chiqdi. Nanosistemalardagi o‘lcham-kvantlash effektlari, xususan, kvant nuqtalarining hosil bo‘lishi, eksitonlar lokalizatsiyasi oqibatida energetik zona kengligining modifikatsiyasi va plazmon rezonansi kabi hodisalar nanomateriallarning fundamental tadqiqotlardagi o‘rnini yanada mustahkamlamoqda [1, 2].

Ushbu tadqiqot o‘rta energiyali elektronlarning modda bilan o‘zaro ta’siri jarayonida yuz beradigan xarakterli energiya yo‘qotishlarini nazariy asoslashga qaratilgan. Bu jarayon elektronlarning muhitdagi

sochuvchi markazlar bilan noelastik to‘qnashuvi, shuningdek, elektronlarning plasmonlar emissiyasi hodisasiga asoslanadi.

Biroq yuqoridagi yondashuv faqat elektronlarning tashilishi jarayonidagi barcha dissipativ (energiya tarqalishi bilan bog‘liq) hodisalarni e’tibordan chetda qoldirish mumkin bo‘lgan hollardagina o‘z kuchini saqlaydi. Aslida esa muhitda tez harakatlanayotgan elektron uchun energiya va impulsning tarqalishi bilan bog‘liq yutilish jarayonlari mavjud [6].

O‘rta energiyali elektronlar uchun ushbu mavhum potensial asosan energiya va impuls dissipatsiyasining uchta jarayoni bilan belgilanadi:

1. Elektronning plasmon emissiyasi natijasida qo‘zg‘algan holatga o‘tishi;
2. Elektron-kovak (teshik) juftliklarining uyg‘onishi natijasidagi energiya yo‘qotishlari;
3. Atomlarda kichik burchaklar ostida sochilish.

“Optik” teoremaga muvofiq [6], Γ mavhum potensiali atomlar konsentratsiyasi n va elektronning nol darajali burchak ostida sochilish amplitudasi $Im\ f(0)$ ning mavhum qismiga proporsionaldir. Elektronning $E \approx$100-300 eV o‘rta energiyalari uchun $\Gamma/\hbar\omega_p \approx$7-1.0 nisbat o‘rinlidir. Binobarin, elektronning har bir noelastik sochilish hodisasida saqlanish qonunlarining bajarilish shartlaridan plazma energiyasi $h\omega_p$ bilan mutanosib bo‘lgan Γ qiymatiga og‘ish mavjud bo‘ladi.

Adabiyotlar tahlili va metodlar. Eksperimental o‘lchovlar tormozlovchi (sekinlashtiruvchi) maydonli sferik ko‘zgu tipidagi analizator bilan jihozlangan qurilmada o‘tkazildi; bu qurilma qoldiq gazlar bosimi ko‘pi bilan 10^{-7} Pa bo‘lganda sirtni: Oje-spektroskopiyasi (OES), elastik sochilgan elektronlar spektroskopiyasi (ESES), fotoelektron spektroskopiya (FES), elektronlarning energiya yo‘qotishi spektroskopiyasi (EEYO‘S) va sekin elektronlar difraksiyasi (SED) usullari yordamida tadqiq qilish imkonini berdi [11].

Tadqiqot obyekti sifatida solishtirma qarshiligi 6000 Ω·sm bo‘lgan n- va p-turdagi Si (111) monokristallari tanlandi. Namunalar ikki bosqichli termik qizdirish (1200 K haroratda 60 daqiqa davomida va 1500 K haroratda 1 daqiqa davomida) orqali, shuningdek, [12] mualliflari tomonidan ishlab chiqilgan Si sirtini vakuumda tozalashning yangi usuli bilan tozalandi. Ushbu usul sirt yaqinidagi sohada past energiyali (5 keV gacha) Ba yoki ishqoriy element ionlari implantatsiyasi yordamida ichki getterlovchi (yutuvchi) qatlam hosil qilishni va keyinchalik ushbu qatlamni qisqa muddatli yuqori haroratli qizdirish orqali olib tashlashni o‘z ichiga oladi.

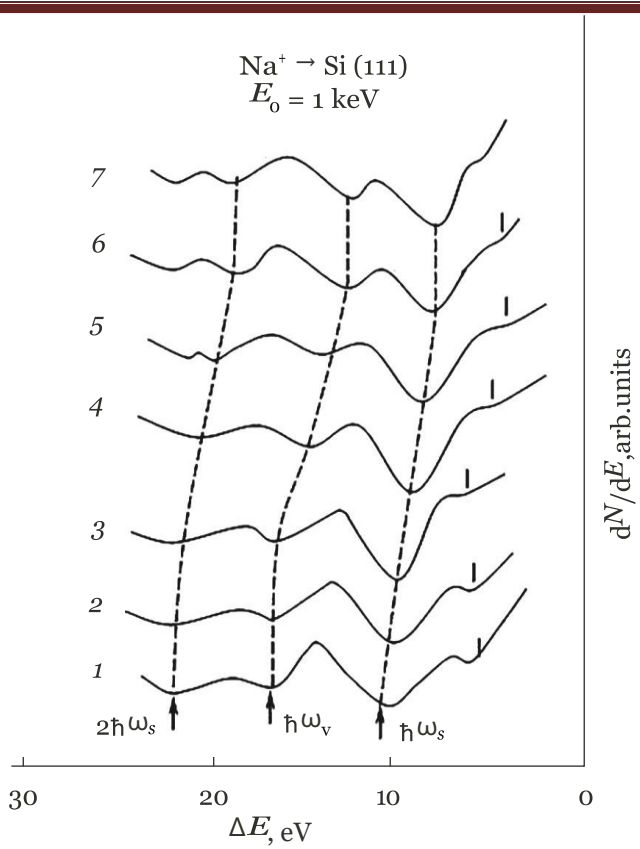
Eksperimental natijalar va muhokama. Maqolaning maqsadi – past energiyali Ba va ishqoriy ionlar implantatsiyasi jarayonida Si(111) va Si(100) da hajmiy va sirtqi plazma tebranishlari uyg‘onish energiyasining kamayishi bo‘yicha tajribada aniqlangan effektni nazariy jihatdan talqin qilishdan iborat.

1- va 2-rasmlarda Si(111) yuzasini Na^+ va Ba^+ ionlari bilan nurlatgandan so‘ng olingan elektron energiya yo‘qotish spektrlari (EEYO‘S) keltirilgan. Boshlang‘ich elektronlar energiyasi E_p = 100 eV ni, birlamchi ion nurlanish energiyasi esa E_0 = 1 keV ni tashkil qiladi. Nurlanish dozalari (D, sm^{-2}) quyidagicha: $5\cdot10^{13}$ (2-egri chiziq), $5\cdot10^{14}$ (3-egri chiziq), $7\cdot10^{15}$ (4-egri chiziq), $1\cdot10^{16}$ (5-egri chiziq), $8\cdot10^{16}$ (6-egri chiziq) va $2\cdot10^{17}$ (7-egri chiziq). Sof Si namunasining EEYO‘S spektrida (1-egri chiziq) 7, 11, 17 va 22 eV energiya qiymatlarida cho‘qqilar kuzatiladi. Ushbu cho‘qqilar quyidagi jarayonlar natijasidir: 7 eV: valent elektronlarning zonalararo o‘tishlari; 11 eV**:** sirt plazmonlarining qo‘zg‘alishi ($\hbar\omega_s$ = 11 eV); 17 eV: hajm plazmonlarining qo‘zg‘alishi ($\hbar\omega_s$ = 17 eV); 22 eV: sirt plazmonlarining ikkilamchi qo‘zg‘alishi ($2\hbar\omega_s$ = 22 eV).

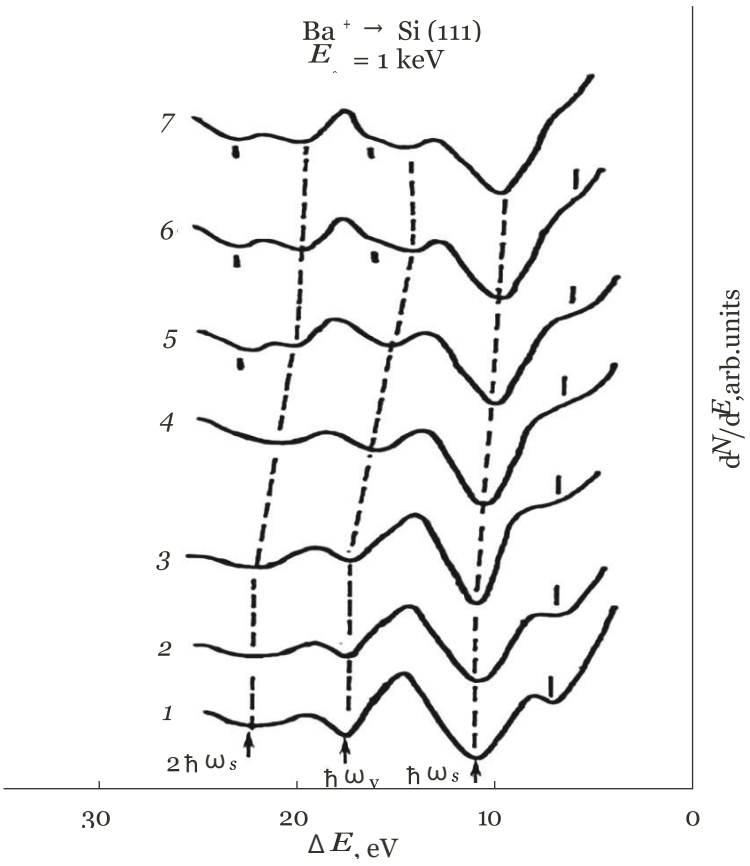
Sof Si(111) uchun eksperimental yo‘l bilan aniqlangan sirt va hajm plazma tebranishlari energiyalari Bohm-Pines nazariy formulasi asosida hisoblangan qiymatlar bilan yaxshi mos tushadi [7].

$D = 2\cdot10^{17}$ sm^{-2} doza bilan Na^+ ionlari implantatsiya qilingan Si uchun 7-spektrda 6; 9,2; 13,2; 18,5 va 25 eV energiyalarda EEYO‘ (elektronlarning energiya yo‘qotishi) piklari kuzatiladi. 6 eV dagi pik, ehtimol, NaSi valent zonasidan o‘tkazuvchanlik zonasiga elektronlarning zonalararo o‘tishining uyg‘onishi bilan bog‘liq.

E_p energiyasi 30 dan 300 eV gacha ortishi bilan 9,2 va 13,2 eV dagi piklar intensivligining o‘zgarish xarakteri, birinchi pik sirtqi plazmon uyg‘onishi, ikkinchisi esa ion-implantatsiya qilingan Si dagi hajmiy plazmon uyg‘onishi bilan bog‘liqligini taxmin qilish imkonini berdi. 1- va 2-rasmlarda keltirilgan EEYO‘ spektrlarining xarakterli xususiyati – implantatsiya qilingan Na va Ba ionlari dozasi ortishi bilan plazma elektron-energiya yo‘qotishlari piklarining mos ravishda past energiya sohasiga tomon siljishidir.



1-rasm. Toza Si (111) (1-egri chiziq) va E_0 = 1 keV energiyali Na^+ ionlari bilan turli D (sm^{-2}) dozalarda implantatsiya qilingan Si uchun EEYO‘ spektrlari: (2) $5\cdot10^{13}$, (3) $5\cdot10^{14}$, (4) $7\cdot10^{15}$, (5) $1\cdot10^{16}$, (6) $8\cdot10^{16}$ va (7) $2\cdot10^{17}sm^{-2}$.



2-rasm. Toza Si (111) (1-egri chiziq) va E_0 = 1 keV energiyali Ba^+ ionlari bilan turli D (sm^{-2}) dozalarda implantatsiya qilingan Si uchun EEYO‘ spektrlari: (2) $5\cdot10^{13}$, (3) $5\cdot10^{14}$, (4) $7\cdot10^{15}$, (5) $1\cdot10^{16}$, (6) $8\cdot10^{16}$ va (7) $2\cdot10^{17}sm^{-2}$.

Rasmlarda keltirilgan spektral xususiyatlar shuni ko‘rsatadiki, implantatsiya qilingan Na^+ va Ba^+ ionlarining dozasi ortishi bilan plazma elektronlarining energiya yo‘qotish cho‘qqilari past energiya sohasiga tomon siljiydi.

1-jadval.

1-keV energiyali Na^+ ionlari bilan nurlantirilganda Si kristalidagi hajmiy plazmon qo‘zg‘alish cho‘qqisi energiyasining bog‘liqligi

	D, sm^2	$C(z_{max})$	z_{max}, Å	$\varepsilon_s(z_{max})$	$\hbar\omega_{res}$, eV	
					exsperimental	hisoblangan
Na^+	0	-	-	0	17,0	17,1
	10^{14}	0,12	33	0,092	16,75	16,72
	10^{15}	0,18	27	0,079	16,0	16,4
	10^{16}	0,32	21	0,141	15,0	16,0
	10^{17}	0,42	20	0,234	14,0	14,1
Ba^+	0	-	-	0	17,0	17,1
	10^{14}	0,10	29	0,042	16,8	16,9
	10^{15}	0,16	25	0,84	16,6	16,7
	10^{16}	0,28	21	0,154	15,7	15,4
	10^{17}	0,45	21	0,273	13,8	13,4

Tajribada Si ning Na ionlari bilan nurlanish dozasi ortib borishi bilan hajmiy plazmon rezonansi cho‘qqisining energetik holati siljishini baholaymiz [15].

Shunday qilib, amorflangan qatlamdagi asosiy plazmon uchun EEL spektridagi xarakterli xususiyat valent elektronlari tizimida kuchli suspenziya sifatida namoyon bo‘ladi va u metall Ba, Na hamda sof Si dagi plazma chastotalarining nisbati bilan bir xil tartibda kuzatiladi.

Si ga Na ionlarini implantatsiya qilishda statsionar qutblanishga $L_{2,3}$ qobig‘ining to‘rtta elektroni ($Z_{L2,3}$ = 4, o‘tish energiyasi $\hbar\omega_{L2,3,s} \cong 31eV$) va L_1 qobig‘ining ikkita elektroni (Z_{L1} = 2, o‘tish energiyasi $\hbar\omega_{L1,s} \cong 62eV$) hissa qo‘shadi. $\varepsilon_s(z)$funksiyasini $\varepsilon_s(z) \cong 0{,}45C(z)$ ko‘rinishida yozish mumkin, bu yerda $C(z) = N_{imp}(z)/N_{Si}$ bo‘lib, N_{Si} — birlik katakchadagi Si atomlari konsentratsiyasi, ya'ni $N_{Si} = 5\cdot10^{22}sm^{-3}$. Si uchun dielektrik singdiruvchanlik $\varepsilon_0(\omega)$ ifodasi $\varepsilon_0(\omega) = 1 - \frac{\omega_{pv}^2}{\omega^2-\omega_g^2}$ ko‘rinishida olingan, bu yerda $\hbar\omega_{pv} = 16{,}6\ eV$ va $\hbar\omega_g \cong 4\ eV$.

Hajmiy plazmon energiya cho‘qqisining Na - ionlari bilan nurlanish dozasiga bog‘liqligini hisoblash uchun $N_{imp}(z)$ taqsimotlarini tahlil qilish orqali $E_0 = 0{,}5\ keV$ ion energiyasida $Na^+ \to Si$ uchun olingan $C(z_{max})$ qiymatlari bo‘yicha eksperimental ma'lumotlardan foydalanildi. Ushbu $C(z_{max})$ qiymatlari 1-jadvalda keltirilgan.

1-jadvalda $Na^+ \to Si$ va $Ba^+ \to Si$ strukturalarida elektronlar tomonidan hajmiy plazmonlarning uyg‘onishi natijasida kelib chiqadigan EEL spektrlarining cho‘qqi energiyalari bo‘yicha eksperimental va hisoblangan ma'lumotlar keltirilgan. Nurlanish dozasi ortishi bilan cho‘qqilarning siljishini solishtirganda, hisoblangan qiymatlar $10^{15}sm^{-2}$ doza uchun tajribada kuzatilgan hajmiy plazmon cho‘qqisi energiyalarining siljish qiymatlarining 99 foizini, $10^{16}sm^{-2}$ doza uchun esa 76 foizini tashkil etishi ko‘rinadi. Spektral cho‘qqilar siljishining hisoblangan va eksperimental qiymatlari o‘rtasidagi nomuvofiqlik sababi aralashma ionlarini implantatsiya qilish jarayonida panjara doimiysining ortishi bo‘lishi mumkin, bu esa, o‘z navbatida, valent elektronlarning plazma tebranishlari energiyasining kamayishiga olib keladi. Biroq, bunday effektni nazariy baholash murakkab muammo hisoblanadi.

Xulosa. Shunday qilib, taqdim etilgan nazariy model Ba va ishqoriy element ionlarining katta dozalari implantatsiya qilinganda Si plazmonlarining $\hbar\omega_V$ va $\hbar\omega_S$ energiyalari pasayishi bo‘yicha tajribada kuzatilgan effektni yetarlicha yaxshi izohlab berdi. Bu pasayish Si(111) kristall strukturasining to‘liq amorf holatga kelguniga qadar buzilishi natijasida valent elektronlar tebranishlarining kuchli so‘nishi bilan bog‘liqdir. Shu bilan birga, mazkur ish natijalari shuni ko‘rsatdiki, aralashma ionlarining ichki qobiq elektronlari statsionar qutblanishining ta’siri ion bilan legirlangan yarimo‘tkazgichda plazmonlarni

uyg‘otishga sarflanadigan yo‘qotish cho‘qqilari energiyalarining siljishiga sezilarli darajada ta’sir qilishi aniqlandi.

ADABIYOTLAR:

1. A.S.Rysbaev, J.B. Khujaniyozov, and S.T.Abraerva Theoretical Explanation of the Effect of a Decrease in the Si(111) Plasmon Energy during the Implantation of Ions with a Large Dose ISSN 1027-4510, Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2020, Vol. 14, No. 4, pp. 816–822.

2. A.A. Eliiseev and A.V. Lukashin, Functional Nanomaterials, Ed. by Yu. D. Tret’yakov (Fizmatilt, A.Moscow, 2010) [in Russian].

3. И. П. Суздалев. Нанотехнология: физическая химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. – Москва: Комкнига, 2006.

4. A. S. Rysbaev, S. S. Nasriddinov, M. T. Normuradov. Uzbek Physical Journal, 2(1), 33 (2000).

5. А. С. Рысбаев. Тонкие наноразмерные силицидные пленки: синтез и свойства. – Тверь: Тверской государственный технический университет, 2013.

6. Ж. Б. Хужаниезов, А. С. Рысбаев, И. Р. Бекпулатов. Особенности возбуждения электронных плазменных колебаний в неупорядоченных полупроводниках: монография. – Ташкент: Infinity Group, 2014.

7. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Курс теоретической физики. Том 3: Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – Москва: Физматлит, 1963; Оксфорд: Butterworth-Heinemann, 1991.

8. D. Pines. Elemental Excitations in Solids. – New York: Benjamin, 1963.

9. В. Д. Горбаченко, М. В. Жарников, Е. Г. Максимов, С. Н. Рашкеев. Журнал экспериментальной и теоретической физики (ЖЭТФ), 1985, т. 88, № 2, с. 677.

10. В. Д. Горбаченко, М. В. Жарников, Е. Г. Максимов, К. А. Молдосанов. Журнал экспериментальной и теоретической физики (ЖЭТФ), 1984, т. 86, № 2, с. 597.

11. M. Strum. Advances in Physics, 1982, t. 31, № 1, s. 64.

12. M. T. Normuradov, D. S. Rumi, A. S. Rysbaev. Izv. Akad. Nauk UzSSR, Ser. Fiz.-Mat. Nauk, 1986, № 4, s. 70.

13. A. S. Rysbaev, Zh. B. Khuzhaniyozov, A. M. Rakhimov, and I. R. Bekpulatov, Uzbekistan Patent No. IAP 05720, 30 November 2018.

14. N. Libenson and V. V. Rumyantsev, Sov. Phys. JETP, 59, 999 (1984).

15. V. V. Rumyantsev and B. N. Libenson, Sov. Phys. JETP 56 (1), 135 (1982).

16. A. S. Rysbaev, M. T. Normuradov, Zh. B. Khuzhaniyazov, I. R. Bekpulatov, and A. M. Rakhimov, in Proc.XXIV International Conf. on Radiation Physics of Solids (Sevastopol, 7–11 July 2014).

UO‘K 539.3:534.231.1

QOVUSHQOQ–ELASTIK MUHITDAGI TO‘LDIRUVCHILI SFERIK QOBIQDA GARMONIK VA NOSTATSIONAR TO‘LQINLAR DIFRAKSIYASI

Axmedov Nasriddin Baxodirovich,
Navoiy davlat konchilik va texnologiyalari universiteti “Sun’iy intellekt va matematika” kafedrasi katta o‘qituvchisi
nasriddinaxmedov@gmail.com
ORCID 0009-0003-1780-7476

Annotatsiya. *Maqolada cheksiz qovushqoq-elastik muhitga joylashtirilgan, izotrop elastik to‘ldiruvchiga ega sferik qobiq bilan bo‘ylama to‘lqinning o‘zaro ta’siri nazariy jihatdan o‘rganiladi. Qobiq uch o‘lchovli elastiklik nazariyasi, tashqi muhit esa hajmiy va siljish relaksatsiyasini hisobga oluvchi standart chiziqli qattiq jism modeli asosida tavsiflanadi. Ko‘chish potensiallarini sferik funksiyalar bo‘yicha yoyish yordamida chegaraviy masala har bir sferik garmonika uchun algebraik tenglamalar sistemasiga keltiriladi. Garmonik yechimdan nostatsionar javobga o‘tish Furye almashtirishi orqali ifodalanadi. Analitik natijalar sifatida relaksatsion yo‘qotish modulining chastotaga bog‘liqligi, sferik-simmetrik modada to‘ldiruvchining dinamik qattiqligi va modelning chegaraviy holatlari aniqlanadi. To‘ldiruvchi ta’sirini faqat qo‘shimcha massa bilan ifodalash yetarli emasligi ko‘rsatiladi. Ish nazariy-analitik xususiyatga ega; tajriba o‘lchovlari va muayyan konstruksiya uchun sonli difraksiya hisoblari keltirilmaydi.*

Kalit so‘zlar: *sferik qobiq, elastik to‘ldiruvchi, qovushqoq-elastik muhit, difraksiya, nostatsionar to‘lqin, relaksatsiya, sferik garmonikalar, dinamik qattiqlik.*

ДИФРАКЦИЯ ГАРМОНИЧЕСКИХ И НЕСТАЦИОНАРНЫХ ВОЛН В СФЕРИЧЕСКОЙ ОБОЛОЧКЕ С НАПОЛНИТЕЛЕМ В ВЯЗКОУПРУГОЙ СРЕДЕ

Аннотация. *В статье теоретически исследуется взаимодействие продольной волны со сферической оболочкой, имеющей изотропный упругий наполнитель и помещённой в бесконечную вязкоупругую среду. Оболочка описывается на основе трёхмерной теории упругости, а внешняя среда – моделью стандартного линейного твёрдого тела с учётом объёмной и сдвиговой релаксации. С помощью разложения потенциалов перемещений по сферическим функциям граничная задача сводится к системе алгебраических уравнений для каждой сферической гармоники. Переход от гармонического решения к нестационарному отклику осуществляется посредством преобразования Фурье. В качестве аналитических результатов определены частотная зависимость модуля релаксационных потерь, динамическая жёсткость наполнителя в сферически-симметричной моде и предельные случаи модели. Показано, что влияние наполнителя не может быть адекватно описано только введением дополнительной массы. Работа носит теоретико-аналитический характер; экспериментальные измерения и численные расчёты дифракции для конкретной конструкции не приводятся.*

Ключевые слова: *сферическая оболочка, упругий наполнитель, вязкоупругая среда, дифракция, нестационарная волна, релаксация, сферические гармоники, динамическая жёсткость.*

DIFFRACTION OF HARMONIC AND NON-STATIONARY WAVES IN A SPHERICAL SHELL WITH A FILLER IN A VISCOELASTIC MEDIUM

Abstract. *This paper presents a theoretical investigation of the interaction between a longitudinal wave and a spherical shell with an isotropic elastic filler embedded in an infinite viscoelastic medium. The shell is described within the framework of three-dimensional elasticity theory, whereas the surrounding medium is represented by the standard linear solid model, accounting for both volumetric and shear relaxation. By expanding the displacement potentials in terms of spherical functions, the boundary-value problem is reduced to a system of algebraic equations for each spherical harmonic. The transition from the harmonic solution to the transient response is performed using the Fourier transform. The analytical results include the frequency dependence of the relaxation loss modulus, the dynamic stiffness of the filler in the spherically symmetric mode, and the limiting cases of the model. It is shown that the effect of the filler*

cannot be adequately represented solely by an additional mass. The study is theoretical and analytical in nature; neither experimental measurements nor numerical diffraction calculations for a specific structure are presented.

Keywords: *spherical shell, elastic filler, viscoelastic medium, diffraction, transient wave, relaxation, spherical harmonics, dynamic stiffness.*

Kirish. Ichki to‘ldiruvchiga ega sferik qobiqlarning to‘lqin maydonidagi harakati qobiqning o‘z xossalari bilan birga uni o‘rab turgan muhit va ichki jismning mexanik qarshiligiga ham bog‘liq. Tushuvchi to‘lqin tashqi chegarada qaytadi va qobiq ichiga o‘tadi; ichki chegaradagi akslanishlar esa qobiqdagi maydon bilan o‘zaro ta’sirlashadi. Natijada sirt ko‘chishi va kuchlanishlarini alohida qobiq modeli asosida baholash tizimning to‘liq dinamik javobini bermasligi mumkin.

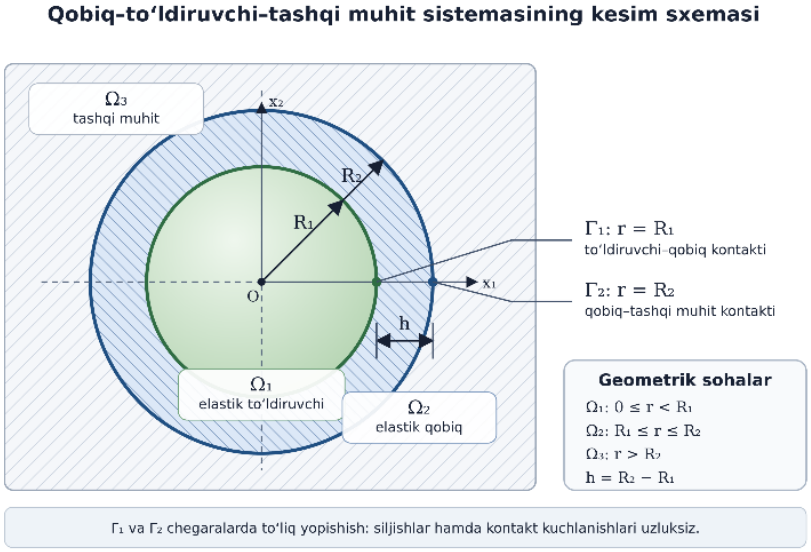
Sferik qo‘shilmada elastik to‘lqinlar sochilishining klassik yechimi Korneev va Johnson tomonidan ishlab chiqilgan [1]. Klaseboer va Sun elastik qobiqli sferik tizimda bo‘ylama va ko‘ndalang komponentlarning chastotaga sezgirligini hamda impulsli javobni spektral yechimdan tiklash imkoniyatini ko‘rsatgan [2]. Qovushqoq-elastik muhitdagi sferik qobiqlarning nostatsionar harakati Safarov va Teshaev ishida irsiy integral munosabat va Laplas almashtirishi yordamida o‘rganilgan [3]. Ushbu natijalar muhit xotirasi, qobiq va to‘ldiruvchi ta’sirini birgalikda ifodalash uchun metodik asos yaratadi.

Mazkur ishning maqsadi — elastik to‘ldiruvchili qobiq uchun garmonik va nostatsionar difraksiyani yagona chegaraviy model orqali tavsiflash, to‘ldiruvchining radial dinamik qarshiligini chiqarish va relaksatsiya parametrlarining fizik mazmunini aniqlashtirish. Tadqiqot mavjud potensiallar usuliga tayanib, e’tiborni ichki chegaraning dinamik qarshiligi va tashqi muhit relaksatsiyasini izchil bog‘lashga qaratadi. Bu yerda “nostatsionar” atamasi vaqt bo‘yicha o‘zgaruvchi, jumladan impulsli ta’sirni bildiradi; u dinamik noturg‘unlik bilan aynan bir tushuncha emas.

Tadqiqot metodlari.

Geometriya va fizik farazlar

Ichki radiusi a, tashqi radiusi b bo‘lgan qobiq $a < r < b$ sohani egallaydi. To‘ldiruvchi $0 \le r < a$, tashqi muhit $r > b$ da joylashadi. Ular mos ravishda f, s, e indekslari bilan belgilanadi; $h = b - a$ – qobiq qalinligi. Barcha qismlar bir jinsli va izotrop, deformatsiyalar kichik deb olinadi. Qobiq va to‘ldiruvchi elastik qattiq jismlardir. Ikki chegarada ham to‘liq yopishish, ya’ni siljishsiz va ajralishsiz kontakt qabul qilinadi. Suyuqlik yoki g‘ovak to‘ldiruvchi uchun alohida model talab etiladi.



1-rasm. Qobiq to‘ldiruvchi tashqi muhit sistemasining kesim sxemasi

Muhitning irsiy modeli va harakat tenglamalari

Nostatsionar masalada har bir nuqta to‘lqin kelishidan oldin tinch va deformatsiyasiz deb olinadi. Tashqi muhitdagi kuchlanish tenzori hajmiy deformatsiya $\vartheta = \mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon}$ va deviator $\mathbf{e} = \boldsymbol{\varepsilon} - \vartheta\mathbf{I}/3$ orqali yoziladi:

$$\boldsymbol{\sigma}_e(t) = \mathbf{I}\int_{-\infty}^{t} K_e\,(t-\xi)\dot{\vartheta}(\xi)\,d\xi + 2\int_{-\infty}^{t} G_e\,(t-\xi)\dot{\mathbf{e}}(\xi)\,d\xi. \qquad (1)$$

Bu yerda $K_e(t)$ va $G_e(t)$ — hajmiy va siljish relaksatsiya modullari; $\mathbf{I}$ — birlik tenzor. Nuqta vaqt bo‘yicha hosilani bildiradi. Har bir modul uchun bir relaksatsiya vaqtli model tanlanadi [4]:

$$M_e(t) = M_\infty + \Delta M e^{-t/\tau_M}, \quad \Delta M = M_0 - M_\infty \geq 0, \quad M \in \{K, G\}. \qquad (2)$$

$M_0 \geq M_\infty > 0$ va $\tau_M > 0$ shartlari qabul qilinadi. M_0 boshlang‘ich, M_∞ uzoq vaqtli modulni anglatadi; K va G uchun relaksatsiya vaqtlari turlicha bo‘lishi mumkin. $e^{-i\omega t}$ vaqt konvensiyasida (1) ning chastotaviy ko‘rinishi quyidagicha:

$$M_e^*(\omega) = M_\infty + \Delta M \frac{-i\omega\tau_M}{1 - i\omega\tau_M}, \qquad \lambda_e^* = K_e^* - \frac{2}{3}G_e^*. \qquad (3)$$

Shunday qilib, muhitning xotirasi kompleks modullar orqali hisobga olinadi. Qobiq va to‘ldiruvchida $K_j^* = K_j$, $G_j^* = G_j$ haqiqiy musbat o‘zgarmaslardir. $j \in \{e, s, f\}$ uchun amplituda tenglamalari:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_j + \rho_j \omega^2 \mathbf{u}_j = 0, \qquad \boldsymbol{\sigma}_j = \lambda_j^* (\nabla \cdot \mathbf{u}_j)\mathbf{I} + 2G_j^* \boldsymbol{\varepsilon}_j. \qquad (4)$$

Bu yerda ρ_j — zichlik, $\boldsymbol{\varepsilon}_j = (\nabla \mathbf{u}_j + \nabla \mathbf{u}_j^T)/2$, $\lambda_j^* = K_j^* - 2G_j^*/3$. Chastotaviy maydon belgilarida ustki qalpoqcha qisqalik uchun yozilmaydi. Impulsli masalada har bir mahkamlangan nuqtada $t \to -\infty$ da $\mathbf{u}_j, \dot{\mathbf{u}}_j \to 0$ sharti olinadi; tashqi sohada tushuvchi maydon oldindan beriladi.

Potensiallar va sferik yoyilmalar

Tushuvchi tekis bo‘ylama to‘lqin z o‘qi bo‘ylab tarqalsin. O‘qqa simmetrik maydon uchun $\mathbf{u} = \nabla\Phi + \nabla \times \nabla \times (\mathbf{r}\Psi)$ ajratishidan foydalanamiz. Bu yerda $\mathbf{r} = r\mathbf{e}_r$; Φ va Ψ mos ravishda bo‘ylama va sferoidal ko‘ndalang komponentlarni beradi. Potensiallar Gelmgolts tenglamalarini qanoatlantiradi:

$$(\nabla^2 + k_{Pj}^2)\Phi_j = 0, \quad (\nabla^2 + k_{Sj}^2)\Psi_j = 0, \quad k_{Pj}^2 = \frac{\rho_j \omega^2}{K_j^* + 4G_j^*/3}, \quad k_{Sj}^2 = \frac{\rho_j \omega^2}{G_j^*}. \qquad (5)$$

$\omega > 0$ uchun tashqi muhitda $\mathrm{Im}k_{Pe}, \mathrm{Im}k_{Se} \geq 0$ tarmoqlari tanlanadi. Bu tanlov tashqariga tarqaluvchi to‘lqinlarning masofa bo‘yicha so‘nishiga mos keladi. Tushuvchi potensialning Legendre qatori [5]:

$$\Phi^{\mathrm{inc}} = \Phi_0 e^{ik_{Pe} r\cos\theta} = \Phi_0 \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) j_n(k_{Pe} r) P_n(\cos\theta). \qquad (6)$$

Bu yerda P_n — Legendre polinomi, j_n — birinchi tur sferik Bessel funksiyasi, Φ_0 — potensial amplitudasi. Burchak θ tushuvchi to‘lqin yo‘nalishidan o‘lchanadi. Tushuvchi P-to‘lqin uchun torsion komponent uyg‘onmaydi, ammo sferoidal S-komponent umumiy holda hisobga olinishi kerak.

Chegaraviy shartlar va modal sistema

Har bir n uchun potensiallarning radial koeffitsiyentlarini $\phi_{jn}(r)$ va $\psi_{jn}(r)$ deb belgilaymiz. Tashqi muhitda sochilgan qism uchun $h_n^{(1)}$, qobiqda j_n va y_n, markazda chekli qoluvchi to‘ldiruvchi yechimida esa faqat j_n olinadi:

$$\begin{aligned} \phi_{en} &= \phi_n^{\mathrm{inc}} + A_n h_n^{(1)}(k_{Pe} r), & \psi_{en} &= B_n h_n^{(1)}(k_{Se} r), \\ \phi_{sn} &= C_n j_n(k_{Ps} r) + E_n y_n(k_{Ps} r), & \psi_{sn} &= D_n j_n(k_{Ss} r) + F_n y_n(k_{Ss} r), \\ \phi_{fn} &= G_n j_n(k_{Pf} r), & \psi_{fn} &= H_n j_n(k_{Sf} r). \end{aligned} \qquad (7)$$

y_n — ikkinchi tur sferik Bessel, $h_n^{(1)} = j_n + iy_n$ — birinchi tur sferik Hankel funksiyasi. G_n modal koeffitsiyent bo‘lib, G_j siljish moduli bilan aralashtirilmaydi. Har bir radial juftlikdan $u_r = U_n P_n$, $u_\theta = V_n \partial_\theta P_n$, $\sigma_{rr} = R_n P_n$ va $\sigma_{r\theta} = T_n \partial_\theta P_n$ aniqlanadi:

$$\begin{aligned} U_n &= \phi_n' + \frac{n(n+1)}{r}\psi_n, & V_n &= \frac{\phi_n}{r} + \psi_n' + \frac{\psi_n}{r}, \\ D_n^{\mathrm{div}} &= U_n' + \frac{2U_n}{r} - \frac{n(n+1)V_n}{r}, & R_n &= \lambda^* D_n^{\mathrm{div}} + 2G^* U_n', \\ T_n &= G^*\left(V_n' + \frac{U_n - V_n}{r}\right). \end{aligned} \qquad (8)$$

Shtrix r bo‘yicha hosilani bildiradi; D_n^{div} — divergensiya koeffitsiyenti. $r = a$ va $r = b$ da U_n, V_n, R_n, T_n uzluksiz. Kuchlanish komponentlari ikkala tomonda bir xil $\mathbf{e}_r$ yo‘nalishiga nisbatan olinadi. $\mathrm{B}_{jn}^q(r)$ ni (8) yordamida tuzilgan 4×2 matritsa deb belgilaymiz: birinchi ustun $(\phi, \psi) = \left(q_n(k_{Pj} r), 0\right)$, ikkinchisi $\left(0, q_n(k_{Sj} r)\right)$ ga mos. Noma’lumlar $\mathbf{x}_n = (A_n, B_n, C_n, D_n, E_n, F_n, G_n, H_n)^T$ tartibida joylashtirilsa, $n \geq 1$ uchun sakkiz noma’lumli sistema hosil bo‘ladi:

$$\begin{bmatrix} \mathrm{B}_{en}^h(b) & -\mathrm{B}_{sn}^j(b) & -\mathrm{B}_{sn}^y(b) & 0 \\ 0 & \mathrm{B}_{sn}^j(a) & \mathrm{B}_{sn}^y(a) & -\mathrm{B}_{fn}^j(a) \end{bmatrix} \mathbf{x}_n = \begin{bmatrix} -\mathbf{Y}_n^{\mathrm{inc}}(b) \\ 0 \end{bmatrix}. \qquad (9)$$

Sistema matritsasi $\mathsf{M}_n(\omega)$ bilan belgilanadi. Bu yerda h yuqori indeksi $h_n^{(1)}$ bazisini, $\mathbf{Y}_n^{\text{inc}} = \left(U_n^{\text{inc}}, V_n^{\text{inc}}, R_n^{\text{inc}}, T_n^{\text{inc}}\right)^T$ esa ma'lum tushuvchi holatni bildiradi. $n = 0$ da burchak hosilasi nol: ko'ndalang potensial maydonga hissa qo'shmaydi. Shuning uchun V_n, T_n qatorlari va S-ustunlari chiqarilib, 4×4 radial sistema yechiladi. Bu alohida ajratish sun'iy singulyarlikning oldini oladi.

Nostatsionar javobni tiklash

Tushuvchi potensialning koordinata boshiga ekstrapolyatsiya qilingan vaqt signali $s(t)$, uning spektri $\hat{s}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} s\,(t) e^{i\omega t} dt$ bo'lsin. Birlik tushuvchi potensialga javob $\mathcal{H}$ (9) orqali topilgach:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{H}\,(\mathbf{x}, \omega) \hat{s}(\omega) e^{-i\omega t}\, d\omega. \qquad (10)$$

Sababiy kirish va boshlang'ich tinch holat olinadi; manfiy chastotalar haqiqiy signalga mos kompleks qo'shma simmetriya bilan to'ldiriladi. Spektral tiklash g'oyasi [2] da ham qo'llangan. Amaliy hisobda qator kesimi va chastota qadami javobning yaqinlashuvi orqali tanlanishi lozim.

Natijalar.

Relaksatsion yo'qotishning chastotaviy qonuniyati

(3) ni haqiqiy va mavhum qismlarga ajratib, $M_e^* = M' - iM''$ hamda $x = \omega\tau_M$ belgilashlari bilan quyidagini olamiz:

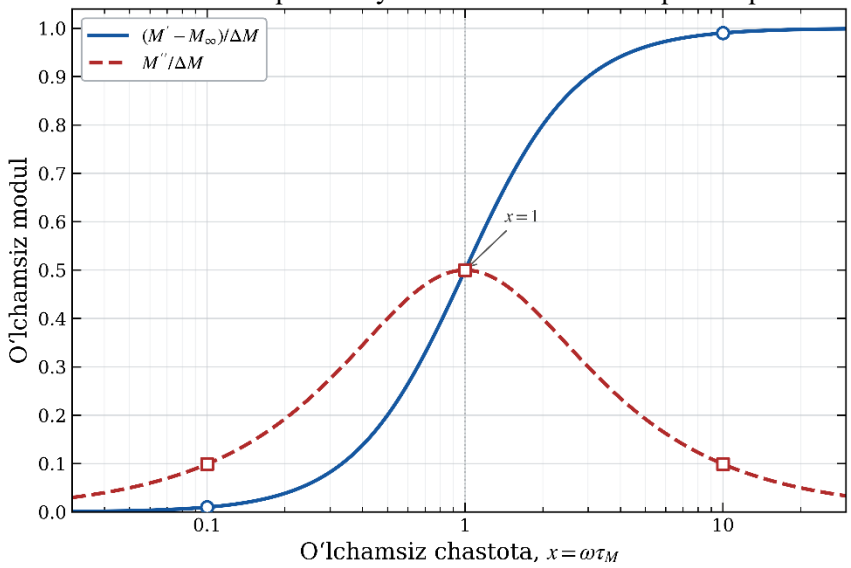
$$M' = M_\infty + \Delta M \frac{x^2}{1+x^2}, \qquad M'' = \Delta M \frac{x}{1+x^2}, \qquad \frac{dM''}{dx} = \Delta M \frac{1-x^2}{(1+x^2)^2}. \qquad (11)$$

$\Delta M > 0$ bo'lganda yo'qotish moduli $x = 1$ da $M''_{\max} = \Delta M/2$ qiymatga yetadi. Past chastotada $M' \to M_\infty$, yuqori chastotada $M' \to M_0$. Quyidagi qiymatlar bevosita (11) dan hisoblangan bo'lib, material sinovi yoki qobiq difraksiyasining sonli natijalari emas.

1-jadval. Relaksatsiya modulining o'lchamsiz qiymatlari ($\Delta M > 0$)

$x = \omega\tau_M$	$(M' - M_\infty)/\Delta M$	$M''/\Delta M$
0,1	0,0099	0,0990
1	0,5000	0,5000
10	0,9901	0,0990

Demak, o'zgarmas chastotada relaksatsiya vaqtini oshirish yo'qotish modulini avval oshirib, keyin kamaytiradi. Ushbu maksimumni so'nish tangensi M''/M' maksimumi yoki qobiq amplitudasi minimumi bilan tenglashtirish mumkin emas: ular boshqa funksiyalar va turli shartlar orqali aniqlanadi.



2-rasm. Relaksatsiya modulining o'lchamsiz qiymatlari ($\Delta M > 0$)

To'ldiruvchining radial dinamik qattiqligi

Sferik-simmetrik $n = 0$ modada markazda chekli ko'chish $U_f(r) = c\, j_1(k_{Pf} r)$ ko'rinishga ega; c — ixtiyoriy amplituda. $j_1{}'(z) = j_0(z) - 2j_1(z)/z$ ayniyatidan foydalanib, $r = a$ da kuchlanishning ko'chishga nisbati topiladi:

$$\kappa_f(\omega) := \frac{R_f(a)}{U_f(a)} = L_f k_{Pf} \frac{j_0(k_{Pf}a)}{j_1(k_{Pf}a)} - \frac{4G_f}{a}, \qquad L_f = K_f + \frac{4}{3}G_f. \qquad (12)$$

Formula $U_f(a) \neq 0$ bo‘lgan holatlar uchun yozilgan. κ_f tezlikka emas, ko‘chishga nisbatan aniqlangan dinamik qattiqlikdir; birligi Pa/m. $z = k_{Pf}a \ll 1$ da $j_0(z)/j_1(z) = 3/z - z/5 + O(z^3)$ bo‘lgani uchun:

$$\kappa_f(\omega) = \frac{3K_f}{a} - \frac{\rho_f a}{5}\omega^2 + O\left(\frac{L_f}{a}\left(k_{Pf}a\right)^4\right). \qquad (13)$$

Bu natijada $3K_f/a$ to‘ldiruvchining hajmiy elastik qarshiligini, $\rho_f a/5$ esa ichki sirt birligiga keltirilgan inertsiya koeffitsiyentini ifodalaydi. Shunday qilib, past chastotali radial harakatda to‘ldiruvchi ham qattiqlik, ham massa qo‘shadi. (13) butun qobiqning tayyor rezonans formulasi emas; u (9) dagi ichki chegaraning fizik mazmunini ochib beradi.

Chegaraviy holatlar

Analitik tekshiruvda $\Delta K = \Delta G = 0$ bo‘lsa, tashqi muhit elastik holatga o‘tadi va material yo‘qotishi yo‘qoladi, lekin nurlanish orqali energiya chiqishi saqlanadi. Barcha sohalarning zichliklari va elastik modullari bir xil bo‘lsa, chegaralar fizik jihatdan yo‘qoladi: $A_n = B_n = 0$, sochilgan maydon nol bo‘ladi. $n = 0$ da S-maydonning yo‘qligi esa radial simmetriyaning bevosita natijasidir. Ushbu holatlar kelajakdagi sonli realizatsiya uchun tekshiruv mezonlarini beradi.

Olingan model qobiq, ichki to‘ldiruvchi va tashqi muhitning ta’sirini bir xil chegaraviy shartlar tizimida bog‘laydi To‘ldiruvchini faqat qo‘shimcha massa bilan almashtirish (13) dagi hajmiy qattiqlikni yo‘qotadi. Shu sababli to‘ldiruvchi qo‘shilganda rezonans chastotasi albatta pasayadi degan xulosa umumiy holda asosli emas: siljish yo‘nalishi qattiqlik va inertsiya o‘zgarishlarining nisbatiga bog‘liq. Bundan tashqari, (13) faqat $n = 0$ va $|k_{Pf}a| \ll 1$ uchun amal qiladi; yuqori modalar va ichki rezonanslarda to‘liq (9) sistema zarur.

Qovushqoq-elastiklikning ikki ta’siri ajratilishi kerak. Kompleks modulning haqiqiy qismi to‘lqin tezligi va dinamik qattiqlikni, yo‘qotish qismi esa materialdagi energiya dissipatsiyasini belgilaydi. Izolyatsiyalangan rezonans yaqinida, boshqa omillar deyarli o‘zgarmaganda, yo‘qotishning ko‘payishi odatda cho‘qqini pasaytiradi. Biroq butun chastota oralig‘ida sirt amplitudasining monoton kamayishi kafolatlanmaydi: faza, moda almashinuvi va interferensiya ham o‘zgaradi. Relaksatsiya vaqtini tanlashda faqat bitta chastotadagi modul qiymati yetarli emas.

Garmonik masalada bitta chastotaning amplitudasi va fazasi o‘rganiladi; nostatsionar javob esa (10) bo‘yicha barcha muhim spektral komponentlarning yig‘indisidir. Impuls davomiyligi qisqarganda uning spektri odatda kengayadi, ammo eng katta kuchlanishning oshishi kirish signallari qanday normallanganiga ham bog‘liq. Bir xil maksimal amplituda, bir xil impuls yoki bir xil energiya bilan berilgan yuklar o‘zaro aynan teng ta’sirlar emas. Shuning uchun davomiylikning ta’sirini baholashdan oldin taqqoslash mezoni belgilanishi lozim.

Rezonansni tahlil qilishda $\det \mathsf{M}_n(\omega) = 0$ sharti sababiy davom ettirilgan kompleks chastota tekisligidagi erkin, tashqariga nurlanuvchi modalar bilan bog‘lanadi. Real chastotadagi majburiy javob cho‘qqisi determinantning aniq noliga teng bo‘lishi shart emas. Hisoblashda o‘lchamsizlashtirilgan matritsaning eng kichik singulyar qiymati va kuzatilayotgan amplitudani birgalikda baholash maqsadga muvofiq. Birgina determinant modulini solishtirish bazis va o‘lchov birliklariga sezgir bo‘lishi mumkin.

Ishning cheklovi – fizik parametrlar bo‘yicha hisoblangan difraksiya diagrammalari va mustaqil tajriba tekshiruvining mavjud emasligidir. Keyingi bosqichda radiuslar, zichliklar, elastik modullar, relaksatsiya vaqtlari va kirish signali aniq berilib, qator hamda spektr kesimining yaqinlashuvi tekshirilishi kerak. Mazkur maqoladagi natijalar shu hisoblarning nazariy asosini tashkil qiladi.

Xulosa. Elastik to‘ldiruvchili sferik qobiqning qovushqoq-elastik muhitdagi difraksiya masalasi har bir $n \geq 1$ garmonika uchun sakkizta, $n = 0$ uchun to‘rtta noma’lumli sistemaga keltirildi. Garmonik va nostatsionar javoblar spektral tiklash orqali bog‘landi. Standart chiziqli modelda yo‘qotish modulining maksimumi $\omega\tau_M = 1$ da yuz berishi, radial to‘ldiruvchi esa past chastotada $3K_f/a$ qattiqlik va $\rho_f a/5$ inertsiya hissalarini berishi ko‘rsatildi. Natijalar relaksatsiya hamda to‘ldiruvchi ta’sirini alohida va izchil talqin qilish imkonini beradi.

ADABIYOTLAR:

1. Korneev V. A., Johnson L. R. Scattering of elastic waves by a spherical inclusion—I. Theory and numerical results. Geophysical Journal International. 1993. 115(1). 230–250. doi:10.1111/j.1365-246X.1993.tb05601.x.

2. Klaseboer E., Sun Q. Analytical solution for a vibrating rigid sphere with an elastic shell in an infinite linear elastic medium. International Journal of Solids and Structures. 2022. 239–240. 111448. doi:10.1016/j.ijsolstr.2022.111448.

3. Safarov I. I., Teshaev M. Kh. Unsteady motions of spherical shells in a viscoelastic medium. Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics. 2023. 83. 166–179. doi:10.17223/19988621/83/14.

4. Hao Q., Greenhalgh S. The generalized standard-linear-solid model and the corresponding viscoacoustic wave equations revisited. Geophysical Journal International. 2019. 219(3). 1939–1947. doi:10.1093/gji/ggz407.

5. NIST. Digital Library of Mathematical Functions. §10.60: Sums, equation 10.60.7. https://dlmf.nist.gov/10.60.E7. Murojaat sanasi: 03.09.2026.

UO‘K 538.945:546.654'175

NbN NAMUNALARIDAGI O‘TA O‘TKAZUVCHANLIK UCHUN NAZARIY MODELLAR

Djurayev Davron Rahmonovich,
Buxoro davlat universiteti
Fizika kafedrasi professori, f.-m.f.d.
Temirov Og‘abek Farhod o‘g‘li,
Buxoro davlat universiteti tayanch doktoranti
Ahadov Abdullo Amrullojon o‘g‘li,
Buxoro davlat tibbiyot instituti
assistent o‘qituvchisi, f.-m.f.f.d. (PhD)

Annotatsiya. *Mazkur maqolada nanoo‘lchamli va o‘ta yupqa NbN namunalarida o‘ta o‘tkazuvchanlik xususiyatlarini tavsiflovchi nazariy yondashuvlar tahlil qilinadi. Adabiyotlarda kristall tuzilish, stexiometriya, kvant tartibsizlik darajasi, energiya tirqishi hamda holatlar zichligining o‘ta o‘tkazuvchanlikka ta’siri turli yondashuvlar orqali izohlangan. Biroq mavjud natijalar tahlili nanoo‘lchamli va kristall o‘lchamdagi NbN namunalarida kuzatiladigan xususiyatlarni yagona model doirasida to‘liq tushuntirib bo‘lmasligini ko‘rsatadi. Shu nuqtayi nazardan, maqolada mavjud nazariy modellar imkoniyatlari va cheklovlari qiyosiy tahlil qilinib, NbN ning turli o‘lchamdagi namunalarida o‘ta o‘tkazuvchanlik mexanizmlarini yagona yondashuv asosida tavsiflash zarurati asoslab beriladi.*

Kalit so‘zlar: *NbN, kvant tartibsizlik, Eliashberg nazariyasi ,McMillan, Ginzburg–Landau kogerent uzunligi , Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT) modeli , Simonin modeli , kvant cheklanishi.*

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ В ОБРАЗЦАХ NbN

Аннотация. *В данной статье анализируются теоретические подходы, описывающие свойства сверхпроводимости в наноразмерных и сверхтонких образцах NbN. В научной литературе влияние кристаллической структуры, стехиометрии, степени квантового беспорядка, энергетической щели и плотности состояний на сверхпроводящие свойства объясняется с помощью различных теоретических подходов. Однако анализ имеющихся результатов показывает, что наблюдаемые свойства наноразмерных и кристаллических образцов NbN не могут быть полностью объяснены в рамках единой модели. В связи с этим в статье проводится сравнительный анализ возможностей и ограничений существующих теоретических моделей и обосновывается необходимость единого подхода к описанию механизмов сверхпроводимости в образцах NbN различного размера.*

Ключевые слова: *NbN, квантовый беспорядок, теория Элиашберга, Макмиллан, когерентная длина Гинзбурга–Ландау, модель Березинского–Костерлица–Таулесса (BKT), модель Симонина, квантовое ограничение.*

THEORETICAL MODELS FOR SUPERCONDUCTIVITY IN NbN SPECIALS

Abstract. *This article analyzes theoretical approaches describing the superconducting properties of nanoscale and ultrathin NbN samples. In the scientific literature, the effects of crystal structure, stoichiometry, the degree of quantum disorder, energy gap, and density of states on superconducting properties have been explained using various theoretical approaches. However, an analysis of the available results shows that the observed properties of nanoscale and crystalline NbN samples cannot be fully explained within a single model. In this regard, the article provides a comparative analysis of the capabilities and limitations of existing theoretical models and substantiates the need for a unified approach to describing the mechanisms of superconductivity in NbN samples of different sizes.*

Keywords: *NbN, quantum disorder, Eliashberg theory, McMillan, Ginzburg–Landau coherence length, Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT) model, Simonin model , quantum confinement.*

Kirish. O‘ta yupqa namunalar uchun o‘lchamning kamayishi strukturaviy fazalar aro chegaralar sonining ortishi va elektronlarning sochilishi kuchayishiga olib kelishi mumkin. Masalan, turli yupqa o‘lchamlariga ega NbN plyonkalarida kritik harorati T_c qiymati 13,1 K va 15,2 K ni, ixtiyoriy yo‘nalgan va eng kichik kristall o‘lchamli namunada esa 8,3 K ni tashkil etgan [1,2]. NbN yuqori o‘ta o‘tkazuvchanlik

xususiyatlariga ega muhim materialdan biri bo‘lib, unda T_c kristall tuzilish, stexiometriya, kvant tartibsizlik darajasi, plyonka qalinligi va kristall o‘lchamiga sezilarli darajada bog‘liq. Adabiyotlarda 50 nm qalinlikdagi NbN plyonkasida T_c=16,6 K ga yetgani, monokristalli NbN namunalarida esa T_c=14,5–15 K, yuqori sifatli monokristalli NbN plyonkalarida T_c=16,1–16,7 K qiymatlar kuzatilgani qayd etilgan [3,4].Nanoo‘lchamli NbN plyonkalarida o‘ta o‘tkazuvchanlikning qalinlikka bog‘liqligi elektron holatlarining o‘zgarishi bilan ham izohlanadi. NbN qalinligi kamayganda kvant cheklanishi natijasida elektron energiya sathlari alohida, Fermi sathi yaqinidagi holatlar zichligi o‘zgarishi mumkin. Bu esa T_c ning qalinlikka bog‘liq ravishda o‘zgarishiga olib keladi. [6–8] Shu bilan birga, Eliashberg nazariyasi nanometr o‘lchamdagi plyonkalarda kvant cheklanishining elektron holatlariga ta’sirini hisobga olib, $T_c$ning plyonka qalinligiga bog‘liqligini miqdoriy tavsiflash imkonini beradi [5]. O‘ta yupqa NbN plyonkalarida o‘ta o‘tkazuvchanlikning fazaviy xususiyatlari ham muhim ahamiyatga ega. BKT modeli bunday tizimlarda fazaviy o‘tishni o‘ta o‘tkazuvchanlik qattiqligi va uyurma–antiuyurma juftlari dinamikasi orqali tavsiflaydi. Finkel’shteyn yondashuvida esa plyonka qalinligining kamayishi va tartibsizlikning ortishi elektron–elektron o‘zaro ta’sirini kuchaytirib, T_c ning pasayishiga olib kelishi bilan izohlanadi [9–11]. NbN ning o‘ta o‘tkazuvchanligi turli fizik mexanizmlar kristall tuzilish va stexiometriya, kristall o‘lchami, kvant tartibsizlik, holatlar zichligi, kvant cheklanishi hamda fazaviy **yoki vaqt davomida kichik o‘zgarib, tebranib turishi** orqali tavsiflangan. Biroq ushbu yondashuvlarning har biri NbN ning ma’lum o‘lcham yoki fizik holatiga xos jarayonlarni tavsiflaydi. Shu sababli o‘ta yupqa va yupqa o‘lchamdagi NbN namunalarining o‘ta o‘tkazuvchanlik xususiyatlarini yagona nazariy yondashuv doirasida tushuntirish masalasi alohida tahlilni talab qiladi.

Adabiyotlar tahlili. Yuqori haroratli o‘ta o‘tkazuvchanlik haqida umuman olganda NbN namunalaridagi o‘ta o‘tkazuvchanlik uchun nazariy modellar bo‘yicha juda ko‘plab ilmiy adabiyotlar va maqolalar mavjud. Ushbu maqolani yozishda shu toifadagi nazariy adabiyotlardan [5], [12],[13],[14],[15] [16],[21],[22],[23],[24] va amaliy ahamiyatga ega bo‘lgan ilmiy maqolalardan foydalanildi va foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxatida qayd etildi. Maqolada iqtibos tarzida olingan ma‘lumotlar tegishli manbasining foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxatidagi tartib raqami bilan ko‘rsatildi.

Natijalar va muhokamalar.

Eliashberg modeli. Ushbu yondashuv ilk bor nanometr o‘lchamdagi yupqa plyonkalarda yuzaga keladigan **kvant cheklanishi**ning elektron holatlariga ta’sirini hisobga oladi. Mazkur nazariya birinchi marta plyonka qalinligiga bog‘liq bo‘lgan o‘ta o‘tkazuvchanlikning **kritik haroratini** T_c miqdoriy jihatdan bashorat qilish imkonini berdi, bunda tanlab olinaladigan parametrlar qo‘llanilmadi. Shuningdek, nazariya plyonka qalinligi ortishi bilan **magnit maydonning singish chuqurligi** sezilarli darajada kamayishini ham bashorat qiladi. Bu xulosa mavjud tajriba ma’lumotlari bilan sifat jihatidan mos keladi. London elektrodinamikasi doirasida anizotropiya hisobga olinmagan holda, magnit maydonning singish chuqurligi λ(T) quyidagicha ifodalanadi [5]:

$$\lambda^{-2}(T)= \left(\frac{\hbar w_p}{c}\right)^2 \pi k_B T \qquad (1)$$

Magnit maydonning singish chuqurligi yoki **o‘ta oquvchanlik holati** zichligi tajriba yo‘li bilan aniqlanishi mumkin bo‘lgan yana bir fizik kattalik bo‘lib, u ikki zonali Eliashberg modeli doirasida ham hisoblanishi mumkin. Bu esa nazariyaning bashoratlari qanchalik ishonchli ekanligini qo‘shimcha ravishda tekshirish imkonini beradi.

McMillan modeli.

Bu modelda kritik harorat quyidagicha topiladi:

$$\mathbf{T_c}=\frac{\omega_{log}}{1.2} exp\left[-\frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda-\mu^*(1+0.62\lambda}\right] \qquad \mathbf{(2)}$$

McMillan tenglamasidagi λ ning aniqlanishi quyidagicha bo‘ladi [14]

$$\lambda= \int_0^{\infty} \frac{\alpha^2(\omega)F(\omega)}{\omega} d\omega \qquad (3)$$

Bu yerda λ elektron-fonon juftlashishning effektiv konstantasi bo‘lib, u Eliashberg spektr funksiyasi orqali aniqlanadi. Tenglamadan kelib chiqadiki, past chastotali fononlar hissasining ortishi λ ning ortishiga olib keladi. Bu esa o‘z navbatida tenglamaga ko‘ra T_c ning ortishiga sabab bo‘ladi.[12,13]

Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT) modeli.

BKT modeli ikki o‘lchamli o‘ta o‘tkazuvchi plyonka uchun o‘ta o‘tkazuvchanlik turg‘unligi Js quyidagicha ifodalanadi [15].

$$Js=\frac{\hbar^2 c^2 d}{16\pi e^2 \lambda^2} \qquad (4)$$

Bu yerda d-plyonka qalinligi, λ-magnit maydonning singish chuqurligi,e-elektron zaryad esa yorug‘lik tezligidir.Mazkur tenglama o‘ta yupqa NbN plyonkalarda o‘ta o‘tkazuvchanlik turg‘unligi nafaqat qalinlikka,balki zaryad tashuvchilarning samarali hissasiga ham bevosita bog‘liq ekanni ko‘rsatdi.

BKT o‘tish harorati T_{BKT} universal shart asosida aniqlandi.

$$\frac{\pi Js(T_{BKT})}{T_{BKT}} = 2 \qquad (5)$$

(4) tenglama va (5) tenglamani birlashtirsa quyidagi ifoda kelib chiqadi.Ya’ni ushbu formula J_s ning T_{BKT} bog‘liqligini ifodalaydigan va ushbu tenglamadan T_{BKT} topilsa T_{BKT} ning d ga bog‘liqlik tenglamasi kelib chiqadi.

$$T_{BKT} = \frac{h^2 c^2 d}{128\pi^2 e^2 \lambda^2} \qquad (6)$$

(6) tenglamadan T_{BKT} qiymati d qalinlikga to‘g‘ri proporsional, ya’ni namuna qalinlik ortgan sari BKT temperaturasi ortadi. $T_{BKT} \sim$ d ushbu mezon uyurma-antiuyurma juftlarining ajralishi boshlanadigan kritik nuqtani belgilaydi. Shuning uchun J_s(T) ning haroratga bog‘liqligi yordamida o‘ta yupqa NbN plyonkalarning kvazi-ikki o‘lchamli fazaviy o‘tish sohasi tahlil qilindi.

Simonin modeli:

Ginzburg Landau qonuniyatiga bog‘liq bo‘lgan Simonin modeli quyidagi ko‘rinishga ega.

$$T_d = T_c\left(1-\frac{d_c}{d}\right) \qquad (7)$$

Ushbu (7) tenglama yupqa plyonkaning kritik harorati T_d uning qalinligi d ga bog‘liq ekanligini ko‘rsatadi. Bu yerda T_c - materialning hajmiy kritik harorati, d_c esa kritik qalinlikdir. Plyonka qalinligi d kamaygan sari kritik harorat T_d ham pasayadi. d=d_c bo‘lganda T_d=0 ga teng bo‘ladi, ya’ni kritik qalinlikda o‘ta o‘tkazuvchanlik holati yo‘qoladi. Shuningdek, ushbu bog‘lanish T_d ning 1/d ga nisbatan chiziqli kamayishini ifodalaydi.

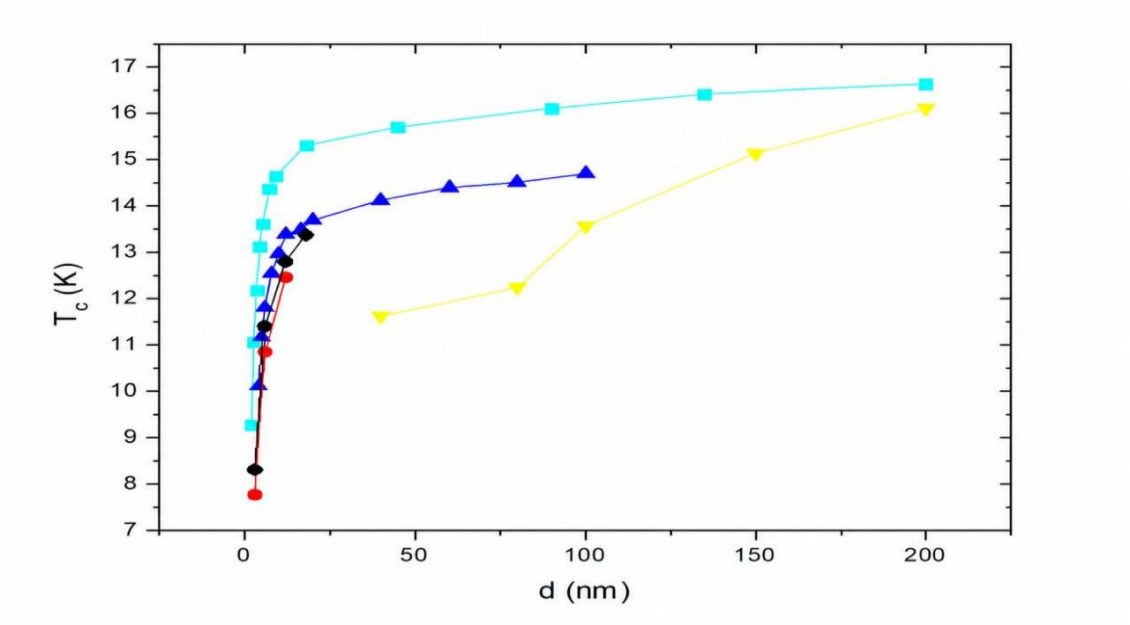
NbN yupqa namunalarda o‘ta o‘tkazuvchanlik xususiyatlarining plyonka qalinligiga bog‘liqligi nanometrik o‘lchamlarga o‘tilganda yuzaga keladigan muhim fizik hodisalardan biridir. Tahliliy natijalar plyonka qalinligi kamayishi bilan kritik temperatura T_c ning pasayishini ko‘rsatgan. Biroq ushbu pasayishning fizik mexanizmini tushuntirish uchun turli nazariy modellar taklif qilingan. Jumladan, **Eliashberg modeli,** McMillan modeli**, Simon modeli** va Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT) modeli NbN yupqa plyonkalaridagi T_c (d) bog‘lanishini tavsiflashda qo‘llanilgan.Eliashberg nazariyasi bo‘yicha hisoblangan qiymati o‘ta o‘tkazgich NbN yupqa plyonka uchun T_c = 13.1K qalinlik esa d = 4.5 nm [17].

McMillan modeli yordamida epitaksial NbN plyonkalarida kritik temperatura T_c ning qalinlikka bog‘liqligi tahlil qilindi. Tajribada plyonka qalinligi 2,2–200 nm oralig‘ida o‘zgarganda, T_c qiymati 9,28 K dan 16,63 K gacha oshishi kuzatildi. McMillan modeli ushbu o‘zgarishni tashuvchilar konsentratsiyasi va Fermi sathidagi holatlar zichligi N(0) bilan bog‘lash imkonini berdi [18].

BKT modeli asosida o‘rganilgan NbN yupqa plyonkalarida plyonka qalinligi kamayishi bilan ham T_{BKT}, ham T_c pasayishi kuzatiladi. Jumladan, d=12 nm bo‘lgan plyonkada T_{BKT}= 12,46 K va T_c=12,80 K, d=6 nm da mos ravishda T_{BKT}=10,8K T_c=10,8 K va T_c=11,40 K, d =3 nm da esa T_{BKT}=7.7 K va T_c=8,30K ni tashkil etgan. Demak, qalinlik kamayishi bilan supero‘tkazuvchanlikning xarakterli temperaturasi pasayadi [19]. Shu bilan birga, barcha holatlarda T_{BKT}<T_c bo‘lib, ular orasidagi farq mos ravishda **0,34 K (12 nm), 0,55 K (6 nm) va 0,53 K (3 nm)** ni tashkil qiladi. Bu natijalar NbN plyonkalarida BKT o‘tishi T_c ga juda yaqin temperaturada yuz berishini va plyonka yupqalashgan sari BKT o‘tishining temperaturasi ham pasayishini ko‘rsatadi.

Simonin modeli NbN yupqa plyonkalarida o‘ta o‘tkazuvchanlik xossalari plyonka qalinligiga kuchli bog‘liq. Tajriba natijalariga ko‘ra, qalinlik 50 nm dan 5 nm gacha kamayganda**,** kritik temperatura T_c 15,3 K dan 11,2 K gacha pasayadi**.** Model asosida T_c ning yo‘qolishiga mos kritik qalinlik d_c=1,38 **nm** deb aniqlangan. [20]

NbN uchun T_c ning d bog‘liqligi grafigida namuna qalinligi 200 nm qalinlikdan 2.2 nm qalinlikgacha bo‘lgan qiymat tasvirlangan bundan T_c ning qiymatlari 16.63 K dan 9.28 K gacha o‘zgarishi ko‘rsatilgan.Ushbu qiymatlar grafikda siyan kvadratlar tasvirlangan.Grafikdagi T_c ning d ga bog‘liq grafigidagi qiymatlar Hall effekti va McMillan modeli bo‘yicha hisoblangan. Qalinlik kamayishi natijasida elektronlarning harakatlanishi va elektron-fonon o‘zaro ta’siri o‘zgarib, o‘ta o‘tkazuvchanlik energetik parametrlari va elektron holatlar zichligiga ta’sir ko‘rsatishi mumkin. Natijada Kuper juftlarining hosil bo‘lish sharoitlari o‘zgarib, T_c pasayadi. Demak, NbN plyonkalarida qalinlik supero‘tkazuvchanlik xususiyatlarini belgilovchi muhim parametr hisoblanadi.



1-rasm. O‘ta o‘tkazuvchi kritik harorat T_c ning plyonka qalinligi *d* ga bog‘liqligi

1-rasmda T_c ning *d* ga bog‘liqlik tajribaviy qiymatlari grafikda tasvirlangan. O‘ta o‘tkazuvchan kritik harorat T_c ning plyonka qalinligi *d* ga bog‘liqligi turli adabiyot manbalari asosida keltirilgan. Grafikdagi moviy kvadratlar Q. Zhang va boshq. tomonidan epitaksial NbN plyonkalari uchun olingan natijalarni ifodalaydi [21] , ko‘k uchburchaklar L. Zhang va boshq. tomonidan NbTiN yupqa plyonkalari uchun olingan ma’lumotlarga mos keladi [22] , qora belgilar M. Mondal va boshq.ning NbN yupqa plyonkalaridagi BKT o‘tishiga oid natijalarini ko‘rsatadi [23], qizil doiralar esa S. P. Chockalingam va boshq. tomonidan epitaksial NbN plyonkalari uchun qayd etilgan eksperimental ma’lumotlarni ifodalaydi [24]. Grafikdan ko‘rinadiki, plyonka qalinligi kamayishi bilan T_c qiymati izchil ravishda pasayadi, ayniqsa o‘ta yupqa sohada bu pasayish yanada keskin namoyon bo‘ladi. Aksincha, qalinlik ortishi bilan T_c asta-sekin hajmiy holatga xos qiymatlarga yaqinlashib, to‘yinish xususiyatini ko‘rsatadi. Ushbu natijalar yupqa plyonkalarda o‘lcham effekti, zaryad tashuvchilar zichligi, kvant tartibsizlik darajasi hamda ikki o‘lchamli o‘ta o‘tkazuvchanlik fluktuatsiyalarining muhim rol o‘ynashini tasdiqlaydi.

Xulosa. NbN yupqa plyonkalarida qalinlik kamayishi bilan kritik temperatura $\boldsymbol{T_c}$ pasayadi. Eliashberg, McMillan, BKT va Simonin modellari bu bog‘liqlikni turli fizik mexanizmlar orqali tushuntiradi.Eliashberg modeli mikroskopik jarayonlarni chuqurroq tavsiflagani uchun eng istiqbolli hisoblanadi. Kelajakda Eliashberg va BKT modellarini birgalikda qo‘llash yanada aniq natijalar berishi mumkin.McMillan va Simonin modellari esa $\boldsymbol{T_c}$ (*d*) bog‘liqligi va kritik qalinlikni baholashda amaliy ahamiyatga ega.

ADABIYOTLAR:

1. J. J. Olaya, L. Huerta, S. E. Rodil, R. Escamilla, Thin Solid Films 516, 8768–8773 (2008).
2. S. Thakoor, J. L. Lamb, A. P. Thakoor, S. K. Khanna, J. Appl. Phys. 58, 4643 (1985).
3. B. Scheerer, Preparation of NbN Single Crystals, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Institut für Angewandte Kernphysik I (1979).
4. A. Shoji, S. Kiryu, S. Kohjiro, Appl. Phys. Lett. 60, 1624 (1992).
5. G. A. Ummarino, et al. 37, 065703 (2025). DOI: 10.1088/1361-648X/ad92ed.
6. T.-C. Chiang, Surf. Sci. Rep. 39, 181 (2000).
7. J. J. Paggel, T. Miller, T.-C. Chiang, Science 283, 1709 (1999).
8. M. H. Upton et al., Phys. Rev. Lett. 93, 026802 (2004).
9. M. T. Strongin, R. S. Thompson, O. F. Kammerer, J. E. Crow, Phys. Rev. B 2, 1078 (1971).
10. Yu. N. Ovchinnikov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 64, 719 (1973); Sov. Phys. JETP 37, 366 (1973).
11. A. M. Finkel'stein, Physica B 197, 636–648 (1994). DOI: 10.1016/0921-4526(93)E0220-B.
12. W. L. McMillan, Phys. Rev. 167, 331–344 (1968).
13. P. B. Allen, R. C. Dynes, Phys. Rev. B 12, 905–922 (1975).
14. K. Ramesh Babu, G.-Y. Guo, Phys. Rev. B 99, 064502 (2019). DOI: 10.1103/PhysRevB.99.064502.

15. M. Mondal et al. Phys. Rev. Lett. 107, 217003 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.217003.

16. J. Simonin, Phys. Rev. B 33, 7830 (1986).

17. G. A. Ummarino, A. Zaccone, A. Braggio, F. Giazotto, Eliashberg Theory Prediction of Critical Currents in Superconducting Thin Films Under DC Electric Fields.

18. Q. Zhang, H , et al. IEEE Trans. Appl. Supercond. 29, 7500305 (2019).

19. M. Mondal, at al. Role of the Vortex-Core Energy on the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Transition in Thin Films of NbN (2018).

20. J. Simonin, Phys. Rev. B 33, 7830 (1986).

21 Q. Zhang et al., IEEE Trans. Appl. Supercond. 29, 1 (2019).

22 L. Zhang et al., Appl. Phys. Lett. 107, 122603 (2015).

23 M. Mondal et al., Phys. Rev. Lett. 107, 217003 (2011).

24 S. P. Chockalingam et al., Phys. Rev. B 77, 214503 (2008).

UO‘K 539.23:621.793.18

NIKEL OKSIDI (NiO) YUPQA QATLAMLARINI VAKUUMDA TERMAL YOTQIZISH USULIDA SINTEZ QILISH

Kabulov Rustam Rashidovich,
O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi
Fizika-Texnika instituti katta ilmiy xodimi, f-m. f.n.
Xojabayev Bolat Kaldibayevich,
O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi
Fizika-Texnika instituti stajyor tadqiqotchisi
xojabaevbolat@gmail.com

Annotatsiya. *Ushbu maqola vakuumli termal bug‘lanish usuli yordamida nikel oksidi yupqa qatlamlarini olish texnologiyasiga bag‘ishlangan. Jarayonning fizik asoslari, vakuum sharoitining roli, hamda yupqa qatlamning hosil bo‘lish mexanizmi tahlil qilindi. Nikel oksidi yupqa qatlamlari yuqori kimyoviy barqarorligi, optik shaffofligi va yarim o‘tkazgichli xususiyatlari sababli zamonaviy elektronika, gaz sensorlari va fotoelektr qurilmalarida keng ko‘lamda qo‘llanilib kelinmoqda. Vakuumli termal bug‘lanish usulining texnologik jarayonlari yuqori tozalik shart-sharoitlarini ta’minlanganligi sababli, bu usul yordamida yuqori sifatli, bir jinsli va zarur bo‘lgan qalinlikdagi Nikel oksidi yupqa qatlamlarini olish imkoniyati mavjud.*

Kalit so‘zlar: *nikel(II) oksidi, vakuumli bug‘lanish, yupqa qatlam, fizik bug‘lantirish, yarim o‘tkazgich materiallar, nanoqoplamalar, optik shaffoflik.*

СИНТЕЗ ТОНКИХ ПЛЁНОК ОКСИДА НИКЕЛЯ (NiO) МЕТОДОМ ВАКУУМНОГО ТЕРМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ

Аннотация. *Данная статья посвящена технологии получения тонких плёнок оксида никеля методом вакуумного термического испарения. Проанализированы физические основы процесса, роль вакуумных условий, а также механизм формирования тонкой плёнки. Тонкие плёнки оксида никеля благодаря своей высокой химической стабильности, оптической прозрачности и полупроводниковым свойствам широко применяются в современной электронике, газовых сенсорах и фотоэлектрических устройствах. Поскольку технологические процессы вакуумного термического испарения обеспечивают условия высокой чистоты, данный метод позволяет получать высококачественные, однородные тонкие плёнки оксида никеля требуемой толщины.*

Ключевые слова: *оксид никеля(II), вакуумное испарение, тонкая плёнка, физическое осаждение, полупроводниковые материалы, нанопокрытия, оптическая прозрачность.*

SYNTHESIS OF NICKEL OXIDE (NiO) THIN FILMS BY VACUUM THERMAL EVAPORATION

Abstract. *This article is devoted to the technology of obtaining nickel oxide thin films by vacuum thermal evaporation. The physical foundations of the process, the role of vacuum conditions, and the mechanism of thin film formation were analyzed. Due to their high chemical stability, optical transparency, and semiconductor properties, nickel oxide thin films are widely used in modern electronics, gas sensors, and photoelectric devices. Since the technological processes of vacuum thermal evaporation ensure high purity conditions, this method makes it possible to obtain high-quality, homogeneous nickel oxide thin films of the required thickness.*

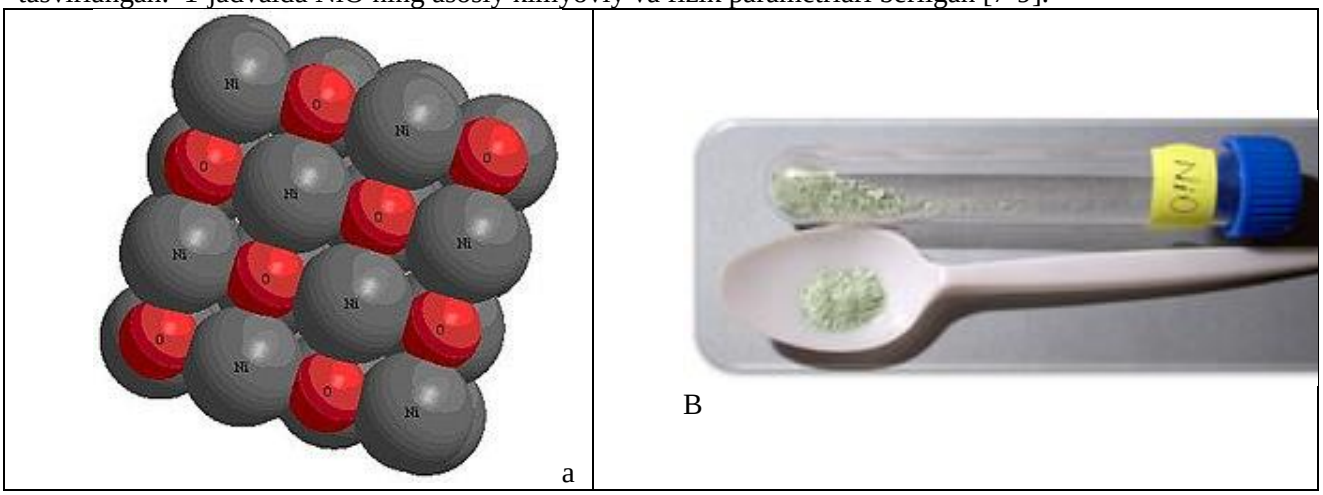
Keywords: *nickel(II) oxide, vacuum evaporation, thin film, physical vapor deposition, semiconductor materials, nanocoatings, optical transparency.*

Kirish. So‘nggi yillarda nanoo‘lchamli materiallar va yupqa qatlamli yarimo‘tkazgichlar texnologiyasi materialshunoslik va mikroelektronika sohalarida muhim ilmiy yo‘nalishlardan biriga aylandi. Bunday materiallar orasida Nikel oksidi (NiO) o‘zining noyob fizik-kimyoviy xususiyatlari bilan ajralib turadi [1,2]. NiO keng ta’qiqlangan energetik sohaga (E_g) ega bo‘lgan kovakli (p - tip) o‘tkazuvchanli yarimo‘tkazgich bo‘lib, uning E_g si 3.6 – 4.0 eV oralig‘ida bo‘ladi [3-6].

Nikel oksidi Ni va O atomlaridan tashkil topgan kimyoviy birikma. U nikel metalining asosiy oksidi hisoblanadi. Nikel(II) oksidi (NiO) — nikelning kislorod bilan hosil qilgan asosiy birikmalaridan biri bo‘lib, kimyoviy jihatdan barqaror noorganik moddadir.

Tashqi ko‘rinishi: Olinish sharoitiga qarab rangi o‘zgaradi. Past haroratlarda olingan stehiometrik toza NiO och yashil rangda bo‘ladi. Yuqori haroratda yoki kislorod ortiqchaligida olingan (noktastik) turlari esa qora yoki qora-kulrang kukun ko‘rinishida bo‘ladi.

Har yili bir necha million kilogramm turli xil, asosan nikel qotishmalarini ishlab chiqarishda NiO oraliq mahsulot sifatida sintez qilinadi. Rasm-1 da NiO ning molekullyar tuzilishi va tashqi ko‘rinishi tasvirlangan. 1-jadvalda NiO ning asosiy kimyoviy va fizik parametrlari berilgan [7-9].



1-rasm. NiO ning molekulyar tuzilishi (a) va tashqi ko‘rinishi (b).

1–jadval.

NiO ning asosiy fizik parametrlari [7-9]

№	Kimyoviy formula	NiO
1	Molyar massa	74.6928 g/mol
2	Tashqi ko‘rinishi	yashil kristalli qattiq modda
3	Zichligi	6.67 g/sm^3
4	Erish Temperaturasi	1 955 °C; 2 228 K
5	Magnit sezgirlik (χ)	$+660.0\cdot10^{-6}$ sm^3/mol
6	Sindirish ko‘rsatkichi (n_D)	2.1818

NiO ning yuqori termik barqarorligi, kimyoviy inertligi va yaxshi elktro va optik xususiyatlari uni zamonaviy asbobsozlikning turli sohalarida, jumladan:

- gaz sensorlarida;
- fotovoltaik ernegetika qurilmalarida;
- elektrokimyoviy energiya saqlash tizimlarida;
- optoelektronikaning turli sohalarida istiqbolli material sifatida ishlatilib kelinmoqda.

NiO yupqa qatlamlarini olish uchun turli texnologiyalar mavjud bo‘lib, ular qatoriga sol–gel sintezi, kimyoviy cho‘ktirish, magnetronli shanglatish usuli, hamda fizik bug‘lantirish usullari kiradi. Ushbu usullar orasida vakuumli termal bug‘lanish usuli yuqori toza va bir tekis strukturalarga ega qatlamlar olish imkoniyati bilan alohida ahamiyatga ega.

Vakuumli termal bug‘lanish usulining fizik asoslari

Vakuumli termal bug‘lanish usuli fizik bug‘lantirish (PVD – Physical Vapor Deposition) texnologiyalari qatoriga kiradi. Ushbu usulning asosiy mohiyati moddani yuqori harorat ta’sirida bug‘lantirish va hosil bo‘lgan bug‘ zarrachalarini taglik yuzasida kondensatsiyalanishiga asoslanadi. Jarayon vakuum muhitida olib boriladi va uning asosiy vazifalari quyidagilardan iborat [8-9]:

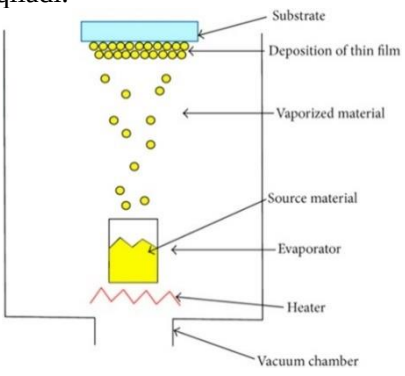
- bug‘ zarrachalarining erkin harakatini ta’minlash;
- vakuumda qoldiq gaz molekulalari bilan to‘qnashuv ehtimolini kamaytirish;
- hosil bo‘ladigan qatlamlarning yuqori tozaligini ta’minlash.

Odatda jarayon 10^{-5} – 10^{-6} Torr bosimda amalga oshiriladi.

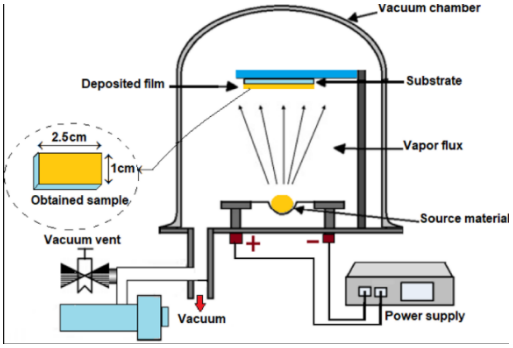
Rasm -2 da vakuumli termal bug‘lanish qurilmalarining ishlash prinsipi (a) va ikki xil vertikal turdagi (b va c) qurilmalar ko‘rinishi berilgan. Bu qurilmalarda yupqa qatlamlarni olish jarayon quyidagicha amalga oshadi:

1. Manba materiali (NiO kukuni) qizdiriladi.

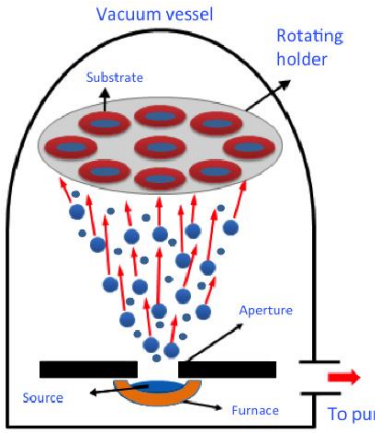
2. Material bug‘ holatiga o‘tqaziladi.
3. Bug‘ vakuum muhitida yuqoriga harakatlanadi.
4. Bug‘ manbaiga nisbatan yuqorida joylashgan va temperaturasi past bo‘lgan taglik yuzasida bug‘ kondensatsiyalanib yupqa qatlam hosil qiladi.



a



b



c

2-rasm. Vakuumli termal bug‘lanish qurilmalarining ishlash prinsipi (a) va ikki xil vertikal turdagi (b va c) qurilmalar

Materiallarni bug‘lantirish uchun maxsus qizdirgichlar — rezistiv qizdirgichlar yoki elektron nur manbalarini qo‘llash mumkin. Elektron nur manbalari yordamida juda yuqori erish temperaturali materiallarni ham bug‘lantirish mumkin.

NiO qatlamlarining hosil bo‘lish mexanizmi

Vakuumli bug‘lanish jarayonida manba materiali sifatida nikel metali yoki NiO kukuni ishlatiladi. Agar nikel metali bug‘lantirilsa, jarayon davomida vakuum kameraga kislorod kiritilib reaktiv bug‘lanish jarayoni amalga oshiriladi. Bu jarayon quyidagi kimyoviy reaksiya orqali ifodalanadi:

$$2Ni+O_2 \rightarrow 2NiO$$

Bu reaksiyaning amalga oshishi uchun kameradagi qisman kislorod bosimi (P_{O2}) va bug‘lantirish tezligi o‘rtasida optimal muvozanat bo‘lishi shart. Aks holda, qatlam to‘liq oksidlanmasdan metall faza saqlanib qolishi yoki aksincha, stexiometriya buzilishi mumkin.

Zarrachalarning vakuumda ko‘chishi:

Bug‘langan va reaktiv sintezlangan NiO molekulyar oqimi vakuum kamerasi bo‘ylab harakatlanadi. Erkin yugurish uzunligi vakuum darajasi yetarlicha yuqori bo‘lgani sababli (10^{-3} – 10^{-5}) Torr yoki undan yuqori), zarrachalarning qoldiq gaz molekulalari bilan to‘qnashuvi minimal darajada bo‘ladi. Bu esa NiO zarralarining o‘z energiyasini yo‘qotmasdan taglik yuzasiga to‘g‘ridan-to‘g‘ri yetib kelishini ta’minlaydi.

Taglik yuzasiga yetib kelgan NiO molekulalari yoki atomlar klasterlari darhol qotib qolmaydi, balki quyidagi kinetik bosqichlarni bosib o‘tadi:

Fizikaviy va kimyoviy adsorbsiya: Dastlab zarralar taglik yuzasiga zaf Van-Der-Vaals kuchlari orqali yopishadi. Keyinchalik sirt energiyasi va taglik harorati ta’sirida elektron almashinuvi yuzaga kelib, kuchli kimyoviy bog‘lanishga o‘tadi.

Sirtiy diffuziya: Adsorbsiyalangan zarrachalar taglik yuzasi bo‘ylab tartibsiz sakrab yurgandek harakat qiladi. Ular sirtning energetik jihatdan qulay nuqtalarini (kristall panjaradagi nuqsonlar, zinapoyasimon qirralar) qidirib topadi va shu yerda to‘planadi.

Yadrolanish va o‘sish mexanizmlari: Sirt bo‘ylab harakatlanayotgan zarralar o‘zaro to‘qnashib, ma’lum bir kritik o‘lchamga yetganda barqaror klasterlar — yadrolarni hosil qiladi. NiO qatlamining o‘sishi asosan quyidagi mexanizmlar bo‘yicha kechadi:

Volmer-Weber mexanizmi: NiO va ko‘pchilik tagliklar (masalan, shisha, kremniy yoki metallar) orasidagi sirt tarangligi farqi tufayli, dastlab alohida orolchalar shakllanadi. Vaqt o‘tishi bilan bu orolchalar kengayib, bir-biri bilan tutashadi va uzluksiz yupqa qatlam hosil qiladi.

Hosil bo‘lgan NiO bug‘lari taglik yuzasiga yetib borib kondensatsiyalanadi va natijada yupqa qatlam hosil bo‘ladi. Qatlam hosil bo‘lish jarayoni bir necha bosqichdan iborat:

1) bug‘ zarrachalarining taglik yuzasiga yetib borishi;
2) zarrachalarning taglikda adsorbsiyasi;
3) qatlam zarralarining yadrolanish jarayoninig boshlanishi;
4) kristall o‘sib borishi.

Natijada taglik yuzasida kristall tuzilishga ega NiO qatlami shakllanadi.

Jarayonga ta’sir etuvchi asosiy texnologik parametrlar:

NiO qatlamining sifati, kristal panjara tuzilishi va xossalari quyidagi parametrlarga bevosita bog‘liq: **Taglik harorati:** Taglikning qizdirilishi bug‘lanib keluvchi zarrachalarning sirt bo‘ylab erkin harakatlanishiga (migratsiyasiga) yordam beradi. Yuqori haroratlar yaxshi kristallangan, nuqsonsiz qatlamlar hosil bo‘lishini ta'minlaydi.

Kislorod qisman bosimi: Reaktiv bug‘lanish jarayonida kameradagi kislorod miqdori yetarli bo‘lishi shart. Agar kislorod miqdori kam bo‘lsa, qatlam to‘liq oksidlana olmay, metall nikel (Ni) fazasi saqlanib qolishi va qatlamning xossalari o‘zgarib ketishi mumkin.

Cho‘ktirish tezligi: Qatlamning o‘sish tezligi uning g‘ovakliligi, zichligi va sirt g‘adir-budurligini belgilaydi. O‘rtacha tezlikdagi o‘sish strukturaning bir xil chiqishini ta’minlaydi.

Eksperimental texnologik qurilma

Vakuumli bug‘lanish qurilmasi quyidagi asosiy elementlardan tashkil topgan:

- vakuum kamerasi;
- bug‘lantirish manbai;
- taglik ushlagichi;
- vakuum nasos tizimi;
- gaz berish tizimi;
- qatlam qalinligini nazorat qiluvchi qurulma.

Taglik sifatida odatda shisha, kremniy yoki maxsus keramika plastinkalari ishlatiladi. Taglik yuzasi jarayondan oldin kimyoviy va ultratovushli tozalash usullari bilan tozalanadi.

NiO qatlamlarining xossalari

Vakuumli termal bug‘lanish usuli yordamida olingan Nikel(II) oksidi yupqa qatlamlari quyidagi xususiyatlarga ega:

- yuqori kristallik darajasiga;
- optik shaffoflikga;
- asosan p-tip elektr o‘tkazuvchanlikga;
- yuqori kimyoviy barqarorlikga.

Vakuumli bug‘lantirish paytida qatlam bir nechta kichik kristall zonalardan tarkib topadi. “Yuqori kristallik darajasi” deganda shu kristallitlarning o‘lchami yetarlicha katta ekanligi va ular o‘zaro bir xil yo‘nalishda uyushib, yaxlit va barqaror struktura hosil qilgani tushuniladi. NiO keng taqiqlangan zonali yarimo‘tkazgich hisoblanadi. Uning taqiqlangan zona kengligi taxminan 3.4 - 3.8 eV oralig‘ida o‘zgaradi. P-tipli yarimo‘tkazgich bo‘lgan NiO da zaryad tashuvchilarning panjara bo‘ylab erkin va to‘siqsiz harakatlanishiga yordam beradi. Tartibsiz tuzilishda elektronlar yo‘l-yo‘lakay sochilib, energiya yo‘qotadi.Optik shaffoflik va barqarorligida nur tushganda uning tarqoqligi kamayadi, optik yo‘qotishlar kamayadi. Shuningdek, kimyoviy va termik ta’sirlarga nisbatan chidamlilik keskin ortadi.

Qatlamlarning qalinligi quyidagi texnologik parametrlarga bog‘liq:

Asosan bug‘lanish tezligiga, taglik haroratiga va o‘sish texnologik jarayoni davomiyligiga bog‘liq holda 10 nm dan 500 nm gacha qalinlikda o‘stirilishi mumkin.

Xulosa. Xulosa qilib aytganda, vakuumli reaktiv bug‘lanish usuli yordamida nikel oksidi (NiO) yupqa qatlamlarini hosil qilish zamonaviy materialshunoslik va mikroelektronikaning eng muhim texnologiyalaridan biridir.

Mazkur jarayon va uning natijalari bo‘yicha quyidagi asosiy xulosalarni chiqarish mumkin: Boshqariluvchanlik va sifat: Kislorod qisman bosimi, taglik harorati va bug‘lanish tezligini aniq nazorat qilish orqali kerakli stexiometrik tarkibga va mukammal kristall tuzilishga ega qatlamlarni yaratish mumkin.

Bosqichma-bosqich o‘sish: Zarrachalarning taglikka yetib kelishi, adsorbsiyasi, yadrolanishi va kristallarning o‘sishi kabi mikroskopik bosqichlarning uzluksizligi yakuniy qatlamning zichligi va fiziko-kimyoviy xossalarini belgilaydi.

Amaliy ahamiyat: hosil qilingan NiO qatlamlarining noyob p-tipli yarimo‘tkazgich xususiyatlari va yuqori optik shaffofligi ularni gaz sensorlari, muqobil energiya manbalari (quyosh batareyalari) hamda elektroxrom qurilmalarda muvaffaqiyatli qo‘llash uchun asos bo‘lib xizmat qiladi.

Vakuumli termal bug‘lanish usuli Nikel(II) oksidi yupqa qatlamlarini olishning samarali texnologiyalaridan biri hisoblanadi. Ushbu usul yordamida yuqori darajada toza, yuza bo‘yicha bir jinsli va nazorat qilinadigan qalinlikdagi NiO qatlamlarini sintez qilinadi. Shu sababli bu texnologiya yordamida olingn shaffof va kerakli elektr o‘tkazuvchanlikka ega NiO qatlamlari zamonaviy elektronika, sensorika va energiya qurilmalarida keng qo‘llaniladi.

ADABIYOTLAR:

1. Kerfoot, Derek G. E. (2000). "Nickel". Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Weinheim: Wiley-VCH. doi:10.1002/14356007.a17_157. ISBN 3527306730.

2. "Handbook of Inorganic Chemicals", Pradniak, Pradyot; McGraw-Hill Publications, 2002.

3. Luis De Los Santos Valladares va boshqalar. Characterization of Ni thin films following thermal oxidation in air. Journal of Vacuum Science and Technology B, 2014.

4. Qing Cheng Liang, Man Zhao va boshqalar. Type Conversion of Undoped NiO Thin Films Fabricated by Electron Beam Evaporation Technique. Advanced Materials Research, 2014.

5. Su-Kyung Kim, Han-Ki Kim va boshqalar. Comparison of NiO_x Thin Film Deposited by Spin-Coating or Thermal Evaporation for Application as a Hole Transport Layer of Perovskite Solar Cells. RSC Advances, 2020.

6. Robert Karsthof va boshqalar. The Nickel Vacancy Acceptor in NiO: Doping Beyond Thermodynamic Equilibrium. 2020.

7. Mohammad Istiaque Hossain va Brahim Aissa. Electron-Beam-Evaporated Nickel Oxide Thin Films for Application as a Hole Transport Layer in Photovoltaics. Processes, 2024.

8. S. V. Averin va boshqalar. Nickel Oxide Epitaxial Films and Diode Structures Based on Them. Radiotekhnika i Elektronika, 2024.

9. Seongha Oh, Young-Kil Jun va Nam-Hoon Kim. Magnetron-Sputtered and Rapid-Thermally Annealed NiO:Cu Thin Films on 3D Porous Substrates for Supercapacitor Electrodes. Energies, 2025.

UO‘K 539.196

π-STEKING HOLATIDAGI PERILEN TRIMERLARINING ELEKTRON STRUKTURASI

Xalilov Umedjon Boymamatovich,
O‘zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti
bosh ilmiy xodimi, fizika-matematika fanlari doktori, professor
Mirzayev Sirojiddin Zayniyevich
O‘zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti
bosh ilmiy xodimi, fizika-matematika fanlari doktori, professor
Xusanova Dilfuza Xushbakovna,
O‘zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti
katta ilmiy xodimi, fizika-matematika fanlari PhD
dilfuzahusanova75@gmail.com
Jo‘raboyev Tursunpo‘lat Erkin o‘g‘li,
O‘zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari Instituti
katta ilmiy xodimi, fizika-matematika fanlari PhD
Azamjonov Avazxon Akmaljon o‘g‘li,
O‘zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti
kichik ilmiy xodimi

Annotatsiya. *Perilen trimerlarining (96 atom, $C_{60}H_{36}$) elektron strukturasi PBE+DFT-D/LCAO (GPAW) usulida yettita tipik π-steking geometriyasi - kofasial, bo‘ylama va ko‘ndalang siljigan, 30° hamda 90° burilgan, herringbone va T-shaklidagi konfiguratsiyalar - uchun tizimli tadqiq qilindi. Faqatgina konfiguratsiya geometriyasini o‘zgartirishning o‘zi ham HOMO-LUMO zonasini 0,70-1,61 eV, qatlamlararo effektiv o‘tish integralini (|t|) esa 25-360 meV oralig‘ida o‘zgartirishi aniqlandi. Eng muhim natija shundaki, o‘tkazuvchanlik nuqtayi nazaridan optimal bo‘lgan kofasial konfiguratsiya energetik jihatdan eng beqaror holat ekanligi, ya‘ni kuchli elektron bog‘lanish va termodinamik barqarorlik bir-biriga qarama-qarshi yo‘nalishda rivojlanishi ko‘rsatildi. Siljigan va herringbone konfiguratsiyalari barqarorlik - o‘tkazuvchanlik balansini real optimumini tashkil etadi va tabiiy perilen kristallaridagi dominant joylashish bilan mos keladi.*

Kalit so‘zlar: *perilen, DFT-D, GPAW, HOMO-LUMO zonasi, sirtlar o‘tish integrali, organik yarim o‘tkazgichlar, zaryad tashish anizotropiyasi.*

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА π-СТЕКИНГОВЫХ ТРИМЕРОВ ПЕРИЛЕНА

Аннотация. *Граничная электронная структура тримеров перилена (96 атомов, $C_{60}H_{36}$) была систематически исследована методом PBE+DFT-D/LCAO (GPAW) для семи типичных геометрий π-стекинга: кофациальной, продольно и поперечно смещённых, повёрнутых на 30° и 90°, «в ёлочку» (herringbone) и Т-образной конфигураций. Установлено, что только изменение геометрии упаковки приводит к варьированию HOMO-LUMO щели в диапазоне 0,70-1,61 эВ, а межслоевого эффективного интеграла переноса (|t|) - в пределах 25-360 мэВ. Наиболее важным результатом является то, что кофациальная конфигурация, являющаяся оптимальной с точки зрения проводимости, энергетически оказалась наиболее нестабильным состоянием, т.е. показано, что сильное электронное связывание и термодинамическая стабильность развиваются в противоположных направлениях. Смещённые мотивы и мотивы «в ёлочку» представляют собой реальный оптимум компромисса между стабильностью и проводимостью и соответствуют доминирующей упаковке в природных кристаллах перилена.*

Ключевые слова: *перилен, DFT-D, GPAW, HOMO-LUMO щель, межслоевой интеграл переноса, органические полупроводники, анизотропия переноса заряда.*

ELECTRONIC STRUCTURE OF π-STACKED PERYLENE TRIMERS

Abstract. *The frontier electronic structure of perylene trimers (96 atoms, $C_{60}H_{36}$) was systematically investigated using the PBE+DFT-D/LCAO (GPAW) method for seven typical π-stacking geometries: cofacial, longitudinally and transversely displaced, 30° and 90° rotated, herringbone, and T-shaped configurations. It was found that altering the packing geometry alone changes the HOMO-LUMO gap in the*

range of 0.70-1.61 eV, and the interlayer effective transfer integral (|t|) in the range of 25-360 meV. The most significant finding is that the cofacial configuration, which is optimal from a conductivity perspective, is the most energetically unstable state. This demonstrates that strong electronic coupling and thermodynamic stability develop in opposite directions. Displaced and herringbone motifs constitute the realistic optimum for the stability-transport compromise and correspond to the dominant packing observed in natural perylene crystals.

Keywords: *perylene, DFT-D, GPAW, HOMO-LUMO gap, interlayer transfer integral, organic semiconductors, charge transport anisotropy.*

Kirish. Perilen - organik yarimo‘tkazgichlar va pigmentlar (perilen diimidlar, PTCDA) oilasining xromofor o‘zagi bo‘lgan politsiklik aromatik uglevodorod. Qattiq holatda molekulalar orasidagi π–π steking o‘zaro ta’siri qatlamlararo masofa, siljish, burilish va qiyalik orqali orbital overlap darajasini, demak, materialning optik va zaryad tashish xususiyatlarini belgilaydi. Shu boisdan joylashish motivining chegaraviy elektron strukturaga ta‘sirini tushunish perilen asosidagi qurilmalarni ratsional loyihalash uchun markaziy ahamiyat kasb etadi. Ushbu tadqiqotda ikkita qo‘shnisi bo‘lgan markaziy molekulani o‘z ichiga olgan trimer klasteri - kengaytirilgan stekingning minimal, ammo realistik modeli sifatida tanlandi.

Hisoblash metodikasi. Barcha kvant-kimyoviy hisob-kitoblar zichlik funksionali nazariyasi (DFT) doirasida GPAW dasturiy ta'minoti (ASE muhiti va libxc kutubxonasi) yordamida amalga oshirildi.

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\Delta^2+\vartheta_{eff}(r)\right]\psi_i(r)=\varepsilon_i\psi_i(r) \quad (1)$$

Bunda samarali potensial tashqi potensial, Hartree potensiali hamda almashinish-korrelyatsiya hissalarini o‘z ichiga oladi:

$$\vartheta_{eff}(r)=\vartheta_{ext}(r)+\vartheta_H(r)+\vartheta_{xc}(r) \quad (2)$$

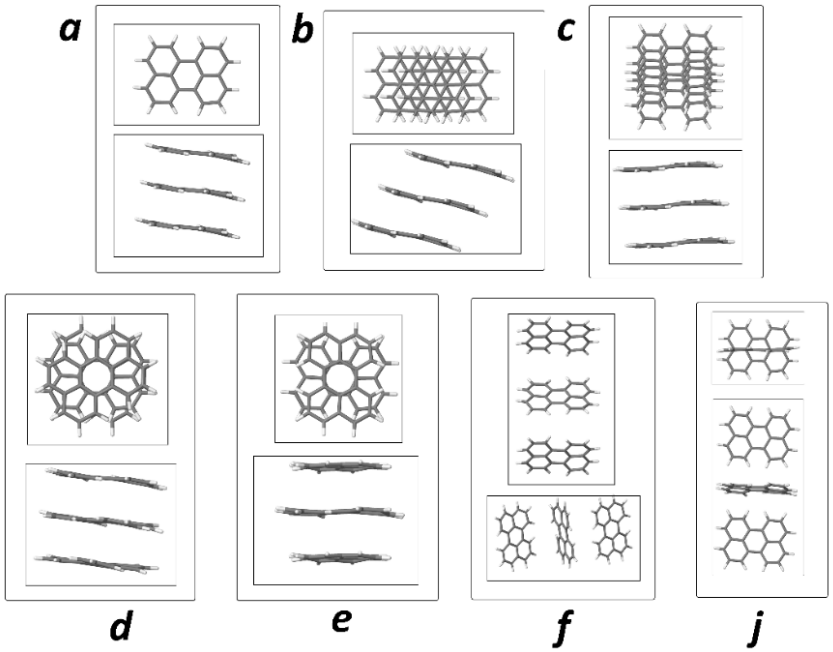
Almashinish va korrelyatsiya hodisalari PBE umumlashtirilgan gradient yaqinlashuvi (Generalized Gradient Approximation, GGA) funksionali yordamida tavsiflandi. π-steklangan agregatlar deyarli to‘liq van der Vaals (dispersiya) kuchlari hisobiga bog‘langanligi sababli, PBE kabi yarim-lokal funksionallar ushbu o‘zaro ta’sirlarni yetarli darajada ifodalay olmaydi. Shu bois umumiy energiyaga Grimme DFT-D dispersiya tuzatmasi qo‘shildi:

$$E_{disp}=-\sum_{A<B}\sum_{n=6.8}S_n\frac{C_n^{AB}}{R_{AB}^n}f_{damp}(R_{AB}) \quad (3)$$

$$E_{tot}=E_{KS\text{-}PBE}+E_{disp}$$

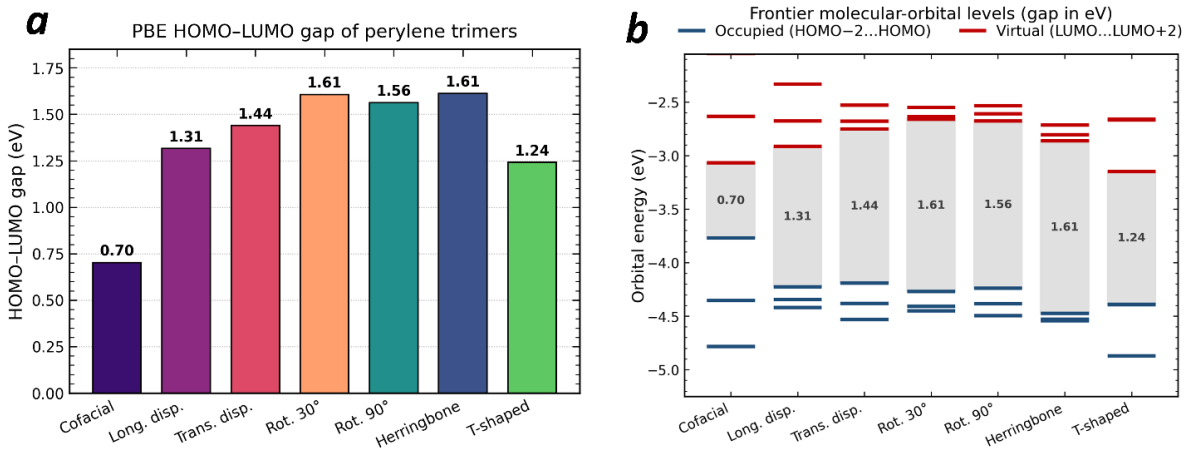
Natijada, umumiy energiya E_{tot} Kohn–Sham (PBE) energiyasi va dispersiya hissasining yig‘indisi sifatida hisoblandi. Mazkur tizimlar uchun aynan shu metodologik tanlov - dispersiya tuzatmasining kiritilishi - eng muhim omillardan biri hisoblanadi, chunki standart PBE funksionali π-qatlamlar orasidagi tortishishni sezilarli darajada kam baholaydi. Hisoblash dasturi va parametrlarining tanlanishi o‘rganilayotgan obyektning xususiyatlari bilan belgilandi. Tadqiqot obyekti davriy kristallar emas, balki alohida (0-o'lchamli) molekulyar klasterlardan iborat bo‘lgani sababli, lokallashgan orbitallar (LCAO) tasviri yassi to‘lqinlar (plane-wave) bazisiga nisbatan ancha samarali hisoblanadi. Chunki yassi to‘lqinlar usuli katta vakuum yacheykasi va juda katta bazis to‘plamini talab qiladi. Shu sababli hisob-kitoblar GPAW dasturi (ASE muhiti va libxc kutubxonasi bilan birgalikda) LCAO rejimida, double-zeta va qutblanish funksiyalarini (double-ζ + polarization, dzp) o‘z ichiga olgan sonli atom orbitallari bazisi yordamida amalga oshirildi. Real fazodagi panjara qadami h ≈ 0.20 Å, vakuum qatlami esa molekula chegarasidan kamida 5 Å qilib tanlandi. Har bir trimer modeli izolyatsiyalangan (davriy bo‘lmagan) tizim sifatida qaralgani sababli, Brillouen zonasi integratsiyasi faqat Γ-nuqtada bajarildi. Har bir trimer modeli 96 ta atomdan ($C_{60}H_{36}$ formulasi, uchta perilen molekulasi) iborat bo‘lib, umumiy 276 ta valent elektron va 170 ta zonaviy holat (band) hisobga olindi. Yetti xil geometrik konfiguratsiya - kofasial (cofacial eclipsed), uzunlamasiga siljigan (longitudinal displaced), ko‘ndalang siljigan (transverse displaced), 30° va 90° burilgan, “baliq suyagi” (herringbone) va T-shaklidagi (T-shaped) – alohida-alohida optimallashtirilib, HOMO-LUMO energetik zonasi (gap), umumiy energiya, qatlamlararo effektiv o‘tish integrali (|t|) va holatlar zichligi (DOS) hisoblab chiqildi.

Natijalar va muhokama. Yettita konfiguratsiya orasida beshtasi (kofasial, ikki xil siljigan, 30° va 90° burilgan) “yassi” holat bo‘lib, ularda qatlamlararo masofa barqaror ravishda 3,40 Å atrofida saqlanadi; herringbone va T-shaklidagi strukturalarda esa markazlar orasidagi masofa mos ravishda 5,65 va 6,20 Å gacha ortadi (1-rasm).



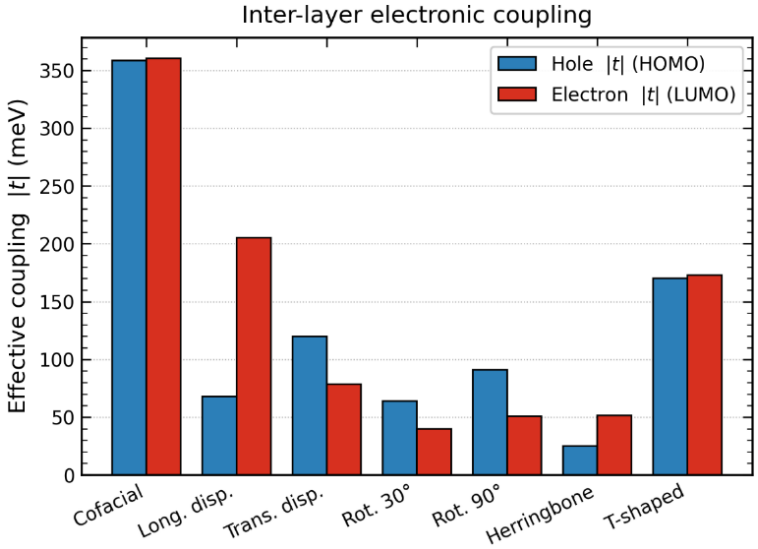
1-rasm. Tadqiq etilgan yettita perilen trimeri konfiguratsiyasi: a) kofasial, b) bo‘ylama siljigan, c) ko‘ndalang siljigan, d) 30° va e) 90° burilgan, f) herringbone, j) T-shaklidagi

Hisoblangan energetik tirqish qiymatlari konfiguratsiyaga qarab 0.70 eV dan (kofasial) 1.61 eV gacha (30° burilgan va herringbone) sezilarli darajada o‘zgaradi. Bu ~0.9 eV lik farq to‘liq geometrik farq tufayli, ya’ni molekulalar orasidagi π-orbital qoplanish darajasi bilan izohlanadi. Molekulalar bir-birining ustiga to‘liq mos tushgan (eclipsed) holatda π-orbitallarning qoplanishi maksimal bo‘lib, bu energetik sathlarning eng keng chegaraviy manifoldga bo‘linishiga va shu sababli eng kichik gapga olib keladi. Molekulalar siljigan yoki burilgan



2-rasm. a) Yetti trimer konfiguratsiyasi bo‘yicha PBE HOMO–LUMO zonasi; b) har bir konfiguratsiya uchun chegaraviy orbital sathlarining taqsimoti

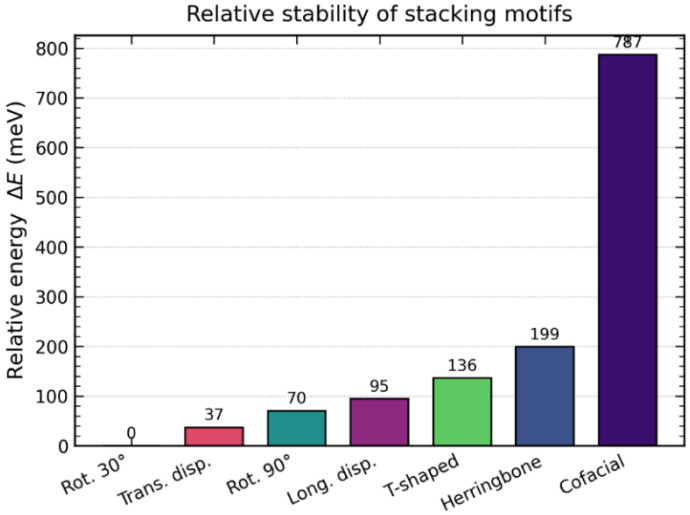
holatlarda orbital qoplanish kamayadi, natijada manifold torayadi va gap kengayadi (1-rasm). Qatlamlararo elektron yoki teshik ko‘chishining tezligini belgilovchi asosiy parametr bo‘lgan effektiv o‘tish integrallari (|t|) turli konfiguratsiyalarda o‘ziga xos qonuniyatlarni namoyon qiladi.



3-rasm. Trimer konfiguratsiyalari bo‘yicha teshik (hole, ko‘k) va elektron (elektron, qizil) uchun effektiv sirt o‘tish integrallari |t|

Xususan, kofasial konfiguratsiya eng kuchli qatlamlararo bog‘lanishni ko‘rsatib, undagi |t| qiymati taxminan 360 meV ni tashkil etadi va ham teshik, ham elektron uchun deyarli teng bo‘ladi (3-rasm). Bunday yuqori ko‘rsatkich tizimda zonaviy (band-like) zaryad tashish rejimi mavjudligini anglatadi. Bu holatdan farqli o‘laroq, uzunlamasiga siljigan konfiguratsiyada aniq elektron-selektiv xususiyat namoyon bo‘ladi. Ya’ni elektronlar o‘tishi teshiklarnikiga qaraganda ancha oson kechadi (t_e = 205 meV ≫ t_h = 68 meV). Bunga qarama-qarshi tarzda, ko‘ndalang siljigan konfiguratsiyada tizim teshik-selektiv xususiyat kasb etib, teshiklar ko‘chishi samaraliroq bo‘ladi (t_h = 120 meV > t_e = 79 meV). Agar molekulalar 30° burilgan va herringbone konfiguratsiyalariga o‘tsa, sirtlararo elektron bog‘lanish keskin pasayib, eng zaif holatga keladi va natijada effektiv o‘tish integrallari atigi 25-90 meV oralig‘ida bo‘lishi aniqlandi.

Olingan natijalar yig‘indisi shuni yaqqol ko‘rsatadiki, perilen trimerlaridagi qatlamlararo joylashish (stacking) geometriyasi nafaqat HOMO-LUMO energetik tirqishini (gap) modulyatsiya qiladi, balki tizimning termodinamik barqarorligini ham belgilovchi fundamental omil hisoblanadi (4-rasm).



4-rasm. Trimer konfiguratsiyalarining nisbiy energiyasi ΔE, eng barqarordan (30° burilgan, ΔE=0) eng kam barqarorgacha (kofasial, ΔE=+787 meV) tartiblangan

Tadqiqotimizning eng muhim va kutilmagan natijalaridan biri shundaki, o‘tkazuvchanlik nuqtayi nazaridan ideal hisoblangan kuchli qatlamlararo elektron bog‘lanish (effective electronic coupling, |t|) va termodinamik barqarorlik (ΔE) bir-biriga qarama-qarshi yo‘nalishda o‘zgaradi. Xususan, eng kuchli qatlamlararo elektron bog‘lanishga ega bo‘lgan kofasial konfiguratsiya (|t|≈ 360 meV) energetik jihatdan eng kam barqaror holat bo‘lib chiqdi va u eng barqaror 30° burilgan konfiguratsiyadan +787 meV yuqori energiyaga ega ekanligi ko‘rsatildi. Bu holat molekulalarning mukammal ustma-ust joylashishi natijasida π-elektron bulutlarining maksimal qoplanishi va zonalar kengligining oshishi bilan izohlanadi. Biroq, bunday

kuchli qoplanish Pauli itarilishini kuchaytirib, qatlamlararo elektrostatik va dispersiya kuchlari muvozanatining buzilishiga olib keladi [3,4].

Shu sababli, barqarorlik va tashish murosasi natijasida yuzaga keladigan siljigan va “baliq suyagi” (herringbone) konfiguratsiyalari energetik shkala hamda elektron o‘tkazuvchanlik bo‘yicha oraliq ideal optimumni egallaydi. Bu holat tabiatda o‘z-o‘zini yig‘ish jarayoni termodinamik barqaror holatga intilganligi [8] tufayli, haqiqiy perilen va uning hosilalari monokristallarida eng ko‘p uchraydigan dominant qadoqlanish motivlari bilan to‘liq mos keladi [6, 7]. DFT+D hisob-kitoblarimiz aromatik molekulalar afzal ko‘radigan ushbu qisman siljigan yoki qiya burilgan konfiguratsiyalar amaliy qurilmalar uchun taxmin qilingan optimal chegaradan yengil o‘tuvchi yetarli darajada qatlamlararo o‘tish integrallariga (|t|= 25-205 meV) ega ekanligini isbotlaydi [9, 10].

Ushbu qonuniyatlarga qo'shimcha ravishda, uzunlamasına va ko‘ndalang siljigan konfiguratsiyalar orasidagi asimmetrik bog‘liqlik organik elektronika dizayni uchun muhim amaliy ahamiyat kasb etadi. Hisob-kitoblar uzunlamasıga siljish elektron-selektiv (t_e = 205 meV ≫ t_h = 68 meV), ko‘ndalang siljish esa aksincha, teshik-selektiv (t_h = 120 meV > t_e = 79 meV) xususiyat namoyon qilishini ko‘rsatdi. Bu anizotrop selektivlik molekulyar o‘zakka tegishli lateral yoki terminal funksional guruhlarni kiritish orqali fazoviy siljish yo‘nalishini optimizatsiya qilishga va materialni maqsadli *n*-tip yoki *p*-tip yarimo‘tkazgichga aylantirishga imkon beradi [11, 12, 13]. E’tiborga molik yana bir jihat, an’anaviy adabiyotlarda zaryad tashish jarayoniga hissasi ko‘pincha inkor etiladigan [14, 15] CH– o‘zaro ta’sirining kutilmagan elektron rolidir. T-shaklidagi perilen trimerining qatlamlararo o‘tish integrali (|t|≈170-173 meV) kutilganidan ancha yuqori bo‘lib, hatto ba’zi yassi siljigan hamda burilgan konfiguratsiyalardan ham oshib ketishi ma’lum bo‘ldi [16]. Bu natija CH– kontaktidagi chekka vodorod atomlari va yuzadagi π-tizim o‘rtasida super-almashinish yoki fazoviy orbital qoplanish mexanizmi mavjudligini ko‘rsatadi [17]. Demak, murakkab uch o‘lchamli polikristallarda zaryad tashish faqat yassi π-steking ustunlari bo‘ylab emas, balki T-shaklidagi qo‘shni ustunlararo kontaktlar orqali ham amalga oshishi mumkin. Bu natija uch o‘lchamli molekulyar tuzilmalarda qo‘shimcha perpendikulyar zaryad tashish yo‘laklari mavjud bo‘lishi mumkinligini ko‘rsatadi.

Xulosa. Ushbu tadqiqotda dispersiya-tuzatilgan DFT (GPAW/LCAO, PBE+DFT-D) usuli yordamida perilen trimerlarining yettita xarakterli stacking konfiguratsiyasi sistematik ravishda o‘rganildi. Olingan natijalar stacking geometriyasini o‘zgartirish orqali HOMO–LUMO energetik tirqishini 0,70–1,61 eV, effektiv qatlamlararo o‘tish integralini (|t|) esa 25–360 meV oralig‘ida boshqarish mumkinligini ko‘rsatdi. Kofasial konfiguratsiya eng kichik energetik tirqish va eng kuchli elektron bog‘lanishni namoyon qilgan bo‘lsa-da, energetik jihatdan eng beqaror holat bo‘lib, eng barqaror 30° burilgan konfiguratsiyadan +787 meV yuqori energiyaga ega.

Bu natija kuchli elektron bog‘lanish va termodinamik barqarorlik o‘rtasida qarama-qarshi bog‘liqlik mavjudligini ko‘rsatadi. Siljigan konfiguratsiyalarda stacking yo‘nalishiga bog‘liq tashuvchi-selektiv xususiyat kuzatildi: uzunlamasına siljish elektron tashishni, ko‘ndalang siljish esa teshik tashishni afzal qo‘llab-quvvatlaydi. Qisman siljigan va herringbone konfiguratsiyalari esa elektron transport va energetik barqarorlik o‘rtasidagi maqbul muvozanatni ta’minlaydi. Umuman, natijalar molekulyar stacking geometriyasini boshqarish organik yarimo‘tkazgichlarning elektron va transport xususiyatlarini optimallashtirishning samarali yo‘li ekanligini ko‘rsatadi.

Tashakkurnoma. Tadqiqot O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti tomonidan ajratilgan grant hisobidan amalga oshirildi. Modellashtirish ishlari institutning superkompyuterlar klasteri yordamida amalga oshirildi. Maqolani tayyorlashda qimmatli maslahatlari uchun f.-m.f.d., k.i.x. U. B. Xalilovga minnatdorchilik bildiraman.

ADABIYOTLAR:

1. *Brédas, J. L., et al. (2004). Chemical Reviews, 104(11), 4971-5004.*
2. *Coropceanu, V. et al. (2007). Chemical Reviews, 107(4), 926-952.*
3. *Grimme, S., et al. (2010). The Journal of Chemical Physics, 132(15), 154104.*
4. *Sherrill, C. D. (2013). Accounts of Chemical Research, 46(4), 1020-1028.*
5. *Sinnokrot, M. O., et al. (2004. The Journal of Physical Chemistry A, 108(46), 10200-10207.*
6. *Anthony, J. E. (2006). Chemical Reviews, 106(12), 5028-5048.*
7. *Kazmaier, P. M. et al. (1994). Journal of the American Chemical Society, 116(21), 9684-9691.*
8. *Schreiber, F. (2000). Progress in Surface Science, 65(5-8), 151-256.*
9. *Würthner, F., et al. (2016). Chemical Reviews, 116(3), 96-152.*
10. *Geng, H., et al. (2012). Advanced Materials, 24(26), 3568-3572.*
11. *McGarry, K. A., et al. (2013). Chemistry of Materials, 25(11), 2256-2263.*

12. *Zhan, X., et al. (2011). Advanced Materials, 23(2), 268-284.*
13. *Mishra, A., et al. (2009). Chemical Reviews, 109(3), 1141-1276.*
14. *Nishio, M. (2011). Physical Chemistry Chemical Physics, 13(31), 13873-13900.*
15. *Tsuzuki, S., et al. (2002). Journal of the American Chemical Society, 124(5), 104-112.*
16. *Troisi, A., & Orlandi, G. (2005). The Journal of Physical Chemistry A, 110(11), 4065-4070.*
17. *Sokolov, A. N., Aet al. (2011). Nature Communications, 2(1), 437.*

UO‘K 539.16:504.5

GAMMA-SPEKTROMETRIK USUL YORDAMIDA ZARAFSHON DARYOSI SUV HAVZASI TUPROQLARI TARKIBIDAGI TABIIY RADIONUKLIDLAR MIQDORLARINI ANIQLASH

Muzafarov Amrullo Mustafayevich,
Navoiy davlat konchilik va texnologiyalar universiteti
Umumiy fizika kafedrasi professori
a.muzafarov@gmail.uz
Eshburiyev Rashid Majidovich,
Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universiteti
Yadro texnologiyalari instituti Yadro fizikasi
va astronomiya kafedrasi professori
eshburiyev0082@gmail.com
Allaberganova Gulchehra Masharipovna,
Navoiy davlat konchilik va texnologiyalar universiteti
Umumiy fizika kafedrasi dotsenti
gulchexramasharipova@gmail.com
Fayzullayeva Mukarram Lutfullo qizi,
Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universiteti
Yadro texnologiyalari instituti Yadro fizikasi
va astronomiya kafedrasi tadqiqotchisi
mukarramfatzullayeva@gmail.com

Annotatsiya. *Mazkur tadqiqotda Zarafshon daryosi havzasining Urgut, Samarqand, Kattaqo‘rg‘on va Narpay hududlaridan olingan tuproq namunalarining tabiiy radionuklid tarkibi gamma-spektrometrik usulda baholandi. Namunalarning 0–5, 5–10, 10–15 va 15–20 sm qatlamlari o‘rganilib, ^{226}Ra, ^{232}Th, ^{4}K va ^{137}Cs bo‘yicha ma’lumotlar olindi. O‘lchashlar 80×80 mm NaI(Tl) detektorli MKGB-01 RADEK spektrometrida 1800 s davomida bajarildi. Natijalarda ^{40}K barcha hududlarda asosiy radionuklid bo‘lib, eng yuqori qiymatlar Samarqand hududida kuzatildi. ^{137}Cs qiymatlari aniqlash chegarasidan past bo‘ldi. Olingan natijalar havzaning radioekologik monitoringi uchun boshlang‘ich baza yaratadi.*

Kalit so‘zlar: *Zarafshon daryosi suv havzasi, tuproq, gamma-spektrometriya, ^{226}Ra, ^{232}Th, ^{40}K, ^{137}Cs, NaI(Tl) detektor, MKGB-01 RADEK rusumli spektrometr, radioekologik monitoring.*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ПРИРОДНЫХ РАДИОНУКЛИДОВ В ПОЧВАХ ВОДНОГО БАССЕЙНА РЕКИ ЗАРАФШАН ГАММА-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Аннотация. *В работе методом гамма-спектрометрии оценено содержание природных радионуклидов в почвах бассейна реки Зарафшан. Образцы отобраны в районах Ургута, Самарканда, Каттакургана и Нарпая из слоёв 0–5, 5–10, 10–15 и 15–20 см. Определялись удельные активности ^{226}Ra, ^{232}Th, ^{40}K и техногенного ^{137}Cs. Измерения проведены на спектрометре MKGB-01 RADEK с детектором NaI(Tl) размером 80×80 мм при времени сч`та 1800 с. Наибольший вклад в суммарную радиоактивность вносил ^{40}K. Максимальные средние значения ^{40}K и ^{232}Th наблюдались в Самаркандской группе проб. ^{137}Cs во всех исследованных образцах находился ниже предела обнаружения.*

Ключевые слова: *бассейн Зарафшана, почва, гамма-спектрометрия, ^{226}Ra, ^{232}Th, ^{40}K, ^{137}Cs, NaI(Tl) детектор, спектрометр марки MKGB-01 RADEK, радиационный мониторинг.*

DETERMINATION OF THE AMOUNTS OF NATURAL RADIONUCLIDES IN THE SOILS OF THE ZARAFSHAN RIVER BASIN USING THE GAMMA-SPECTROMETRIC METHOD

Abstract. *The study evaluates the natural radionuclide composition of soils from the Zarafshan River basin using gamma-ray spectrometry. Soil samples were collected in the Urgut, Samarkand, Kattakurgan and Narpay areas from depths of 0–5, 5–10, 10–15 and 15–20 cm. Specific activities of ^{226}Ra, ^{232}Th, ^{40}K and anthropogenic ^{137}Cs were investigated. Measurements were performed using an MKGB-01 RADEK gamma*

spectrometer equipped with an 80×80 mm NaI(Tl) scintillation detector for 1800 s per sample. The results show that ^{40}K is the dominant radionuclide in the studied soils, while the highest mean ^{40}K and ^{232}Th levels were observed in the Samarkand group. ^{137}Cs remained below the detection limit in the analyzed samples.

Keywords: *Zarafshan basin, soil, gamma-spectrometry, ^{226}Ra, ^{232}Th, ^{4}K, ^{137}Cs, NaI(Tl) detector, MKGB-01 RADEK spectrometer, radiation monitoring.*

Kirish. Zarafshon daryosi havzasi Markaziy Osiyoning muhim tabiiy-resurs hududlaridan biri bo‘lib, sug‘oriladigan dehqonchilik, aholi punktlari va sanoat faoliyati bilan chambarchas bog‘langan. Shu sababli tuproq qoplamining radioekologik holatini muntazam nazorat qilish tabiiy radionuklidlarning hududiy taqsimlanishini, tuproq profilidagi migratsiyasini va ehtimoliy antropogen radionuklidlarning mavjudligini baholash uchun muhimdir. Tuproqdagi ^{226}Ra va ^{232}Th uran va toriy parchalanish qatorlari bilan, ^{40}K esa tabiiy kaliy bilan bog‘liq bo‘lib, ular hududning tabiiy gamma-fonini shakllantirishda asosiy hissa qo‘shadi [1–3].

UNSCEAR ma’lumotlariga ko‘ra, dunyo bo‘yicha tuproqlarda ^{40}K, ^{226}Ra va ^{232}Th ning o‘rtacha faolliklari mos ravishda taxminan 512, 33 va 42 Bq/kg darajasida baholangan [1]. Ushbu qiymatlar muayyan hududning tabiiy geologik va geokimyoviy sharoitlarini baholashda taqqoslash mezoni sifatida qo‘llanishi mumkin. ^{137}Cs esa asosan atmosfera yadroviy sinovlari va ayrim texnogen manbalar bilan bog‘liq bo‘lgan antropogen radionuklid sifatida tuproq monitoringida muhim indikator hisoblanadi.

Mazkur ishning maqsadi Zarafshon havzasining to‘rtta hududida turli chuqurliklardan olingan tuproq namunalarida ^{226}Ra, ^{232}Th, ^{40}K va ^{137}Cs radionuklidlarining solishtirma aktivligini gamma-spektrometrik usulda baholash, hududlar va tuproq qatlamlari bo‘yicha farqlarni aniqlash hamda radioekologik monitoring uchun ilmiy asoslangan xulosalar ishlab chiqishdan iborat.

Tadqiqot obyekti va usullari. Tadqiqot obyekti sifatida Urgut, Samarqand, Kattaqo‘rg‘on va Narpay hududlaridan oqib o‘tuvchi Zarafshon daryosi suv havzasidan olingan tuproq namunalari tanlandi. Har bir asosiy nuqtada tuproqning 0–5, 5–10, 10–15 va 15–20 sm qatlamlaridan namunalar olindi. Ekspeditsiyada jami 48 ta qatlam namunasi qayd etilgan. Namunalarning massasi taxminan 0,81–1,64 kg oralig‘ida bo‘lib, gamma-spektrometrik o‘lchash vaqti har bir namuna uchun 1800 s ni tashkil etdi.

Gamma-spektrometrik o‘lchashlar Samarqand davlat universiteti Yadro fizikasi laboratoriyasida MKGB-01 RADEK qurilmasi va 80×80 mm o‘lchamli NaI(Tl) ssintillyatsion detektor yordamida bajarildi. Spektrometr hajmiy standart manbalar (OMACH) bilan kalibrlangan, standart manbalar va fon 6 soat davomida hisobga olingan. Energiya kalibrlashida ^{232}Th parchalanish mahsulotlarining, xususan, ^{28}Tl ning gamma chiziqlaridan foydalanilgan; ^{137}Cs ning 661 keV chizig‘ida energiya ajratish qobiliyati 8,5 % ni tashkil qilgan [4,6,8].

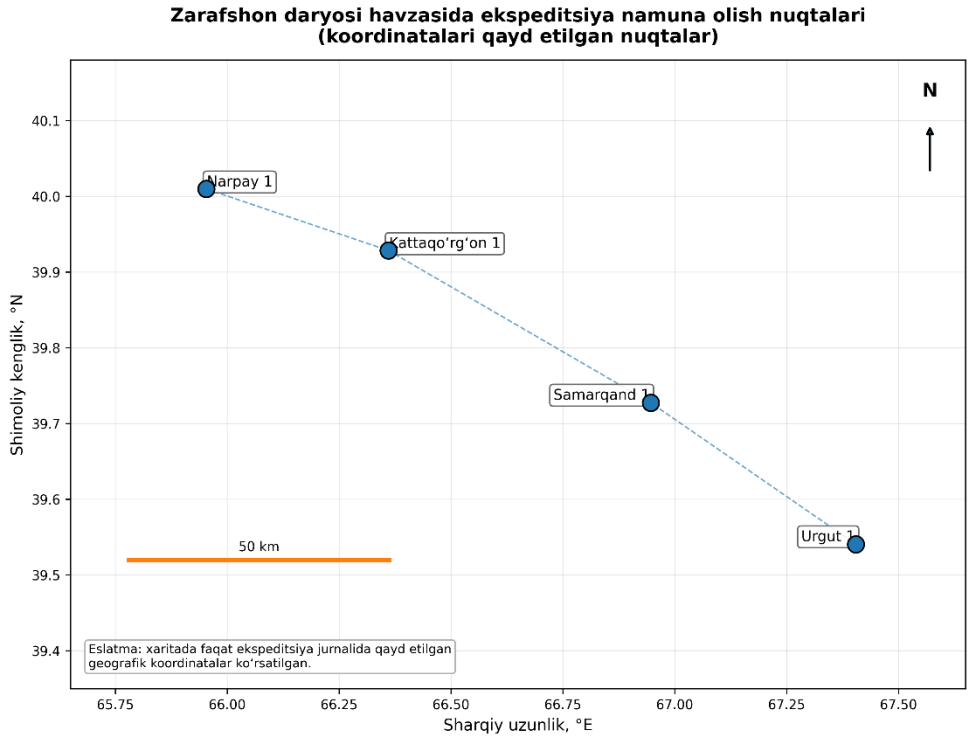
^{226}Ra, ^{232}Th va ^{4}K faolliklari ularning gamma-spektrometrik identifikatsiyasi uchun xarakterli chiziqlar asosida baholandi. ^{226}Ra uchun ^{214}Bi ning 1120 va 1764 keV, ^{232}Th uchun ^{28}Tl ning 2614 keV hamda ^{228}Ac ning 911 keV chiziqlari, ^{4}K uchun 1460,7 keV gamma chizig‘i ishlatildi [4, 5].

^{226}Ra ni aniqlashning ayrim nazorat o‘lchovlarida namuna Marinelli idishiga joylashtirilib, germetik tarzda skotch bilan yopilgan va taxminan bir oy saqlangan. Bunday yondashuv radon va uning qisqa yashovchi parchalanish mahsulotlari bilan radioaktiv muvozanatning tiklanishini ta’minlashga xizmat qiladi. Mazkur maxsus o‘lchovlar asosiy gamma-spektr natijalarini nazorat qilish uchun qo‘llangan.

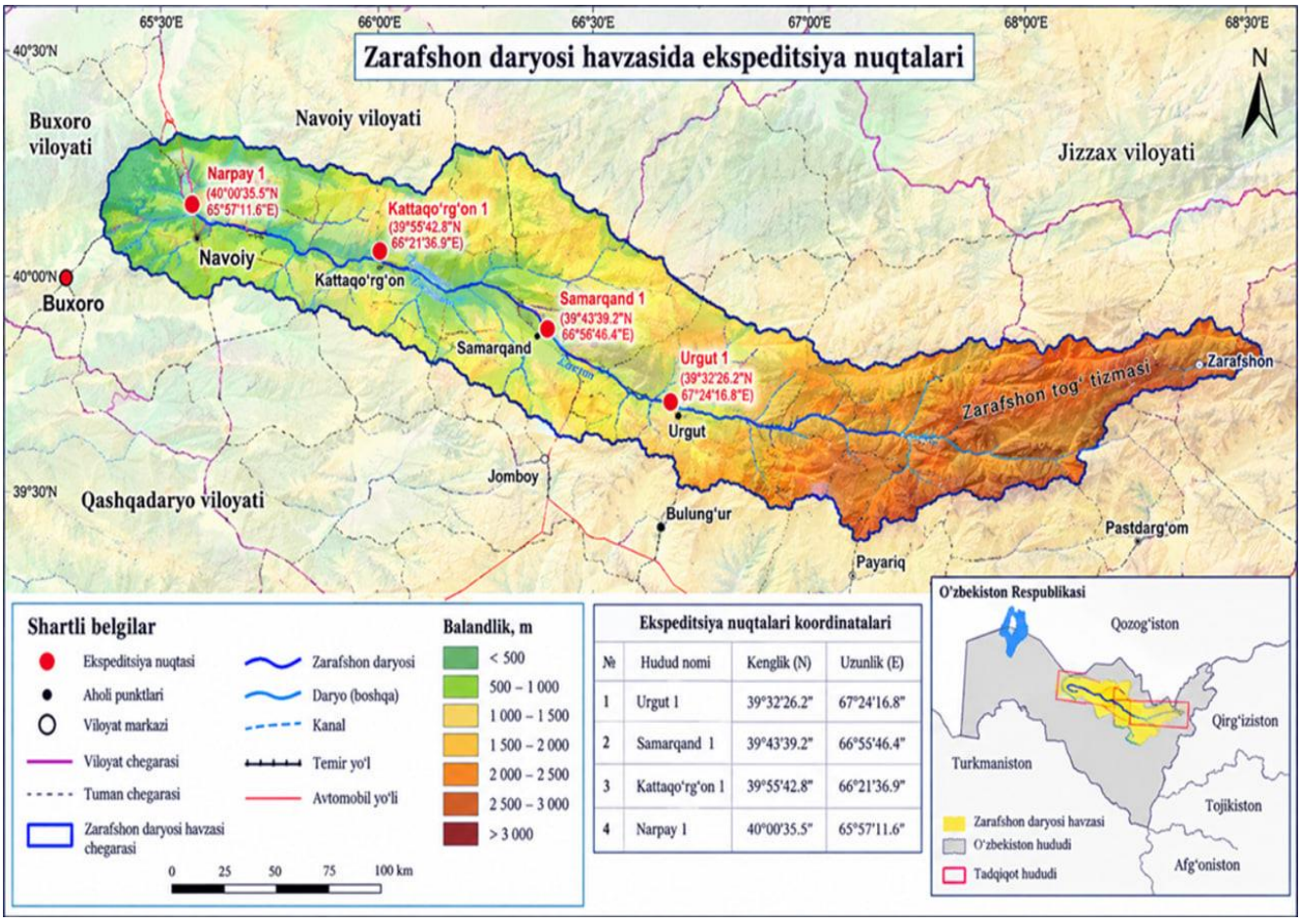
^{137}Cs qiymatlari jadvalda ko‘p hollarda aniqlash chegarasidan past (<LOD) ko‘rinishida qayd etilganligi sababli ular oddiy arifmetik o‘rtachaga sun’iy ravishda kiritilmadi. Bunday ma’lumotlar censored, ya’ni aniqlash chegarasi bilan cheklangan natijalar sifatida talqin qilindi [10, 11].

Olingan natijalar va ularning muhokamasi. Tadqiqot davomida Zarafshon daryosi suv havzasi hududidan olingan tuproq namunalarining radionuklid tarkibi gamma-spektrometrik usul yordamida o‘rganildi. Tadqiqotning asosiy maqsadi tuproq tarkibidagi tabiiy kelib chiqishga ega bo‘lgan ^{238}U, ^{232}Th qatorlari radionuklidlari hamda ^{40}K ning solishtirma aktivliklarini aniqlash va ularning hudud bo‘yicha taqsimlanish xususiyatlarini baholashdan iborat bo‘ldi.

Gamma-spektrometrik tahlil natijalariga ko‘ra, o‘rganilgan tuproq namunalarida tabiiy radionuklidlarning mavjudligi qayd etildi. Aniqlangan radionuklidlarning solishtirma aktivlik qiymatlari namuna olingan hudud, tuproqning mineralogik tarkibi, granulometrik xususiyatlari, organik modda miqdori hamda geologik-litologik sharoitlarga bog‘liq holda ma’lum darajada farq qilishi kuzatildi.



1-rasm. Ekspeditsiya jurnalida geografik koordinatalari qayd etilgan namuna olish nuqtalarining joylashuvi



2-rasm. Zarafshon daryosining umumiy ko‘rinishi va oqib o‘tish hududlari

Shuni alohida ta’kidlash kerakki, gamma-spektrometrik usul yordamida olingan natijalar radionuklidlarning tuproqdagi tabiiy fon darajasini baholash, hudud bo‘yicha radioaktivlikning fazoviy taqsimlanishini aniqlash va keyingi monitoring ishlari uchun boshlang‘ich ma’lumotlar bazasini shakllantirish imkonini beradi. Ushbu yondashuv Zarafshon daryosi havzasida tabiiy radioaktivlikning

shakllanish qonuniyatlarini o‘rganish bilan bir qatorda, antropogen ta’sir natijasida yuzaga kelishi mumkin bo‘lgan o‘zgarishlarni kelgusida aniqlash uchun ham muhimdir.

Natijalar va ularning muhokamasi. Eksperimental ma’lumotlar tahlili barcha to‘rtta hududda ^{40}K radionuklidi tabiiy gamma-radioaktivlikning asosiy komponenti ekanligini ko‘rsatdi. Hududiy o‘rtacha qiymatlar Samarqandda ^{40}K uchun 495,1 Bq/kg, Urgutda 417,3 Bq/kg, Narpayda 380,5 Bq/kg va Kattaqo‘rg‘onda 359,5 Bq/kg atrofida bo‘ldi. Samarqand guruhidagi yuqori qiymatlar ushbu hudud tuproqlarining mineralogik va geokimyoviy tarkibi bilan bog‘liq bo‘lishi mumkin; buni aniq tasdiqlash uchun kelgusida granulometrik va element tahlillari bilan korrelyatsiya qilish zarur [7, 11].

^{232}Th bo‘yicha o‘rtacha qiymat Samarqandda 39,3 Bq/kg, Narpayda 31,9 Bq/kg, Urgutda 29,1 Bq/kg va Kattaqo‘rg‘onda 26,1 Bq/kg bo‘ldi. Samarqanddagi qiymat UNSCEAR 2024 tomonidan keltirilgan dunyo bo‘yicha o‘rtacha 42 Bq/kg qiymatga yaqin, qolgan hududlarda esa undan past. Bu natija Samarqand namunalarida toriyga boy mineral komponentlarning nisbatan yuqori ulushini taxmin qilishga imkon beradi, biroq mineralogik tasdiq talab etiladi [1,7,9].

^{226}Ra bo‘yicha aniqlangan sonli qiymatlarning hududiy o‘rtachasi Samarqandda 30,3 Bq/kg, Narpayda 25,0 Bq/kg, Urgutda 22,3 Bq/kg va Kattaqo‘rg‘onda 18,5 Bq/kg ni tashkil etdi. Bu qiymatlar UNSCEAR 2024 hisobotidagi ^{226}Ra uchun 33 Bq/kg global o‘rtacha qiymat bilan bir xil tartibda bo‘lib, tadqiq etilgan tuproqlarda radiy bo‘yicha keskin anomal to‘planish kuzatilmaganini ko‘rsatadi [1,7,10].

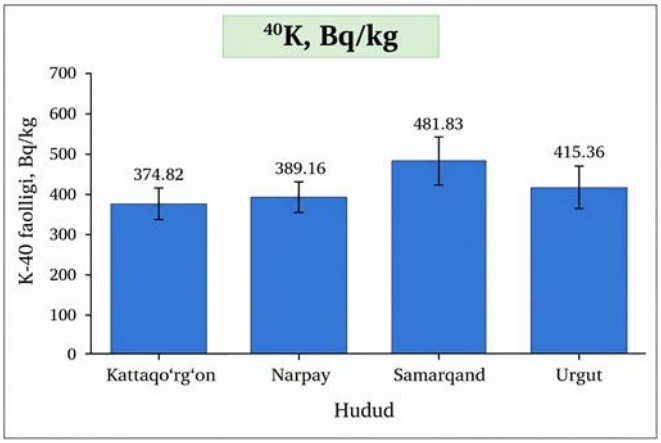
Shu bilan birga, ^{226}Ra bo‘yicha ayrim qatlamlarda qiymatlar aniqlash chegarasidan past bo‘lgan. Bunday natijalarni o‘rtachaga 0 yoki LOD/2 kabi shartli qiymat bilan kiritish o‘rniga, alohida qayd etish ilmiy jihatdan ehtiyotkorroqdir. Maxsus Marinelli o‘lchovlari esa radiy uchun radioaktiv muvozanat shartlarini yaxshilashga qaratilgan nazorat protsedurasi sifatida qaraladi. Hududlar bo‘yicha olingan namunalardagi asosiy radionuklidlarning statistik ko‘rsatkichlari 1- jadvalda keltirilgan.

1-jadval.

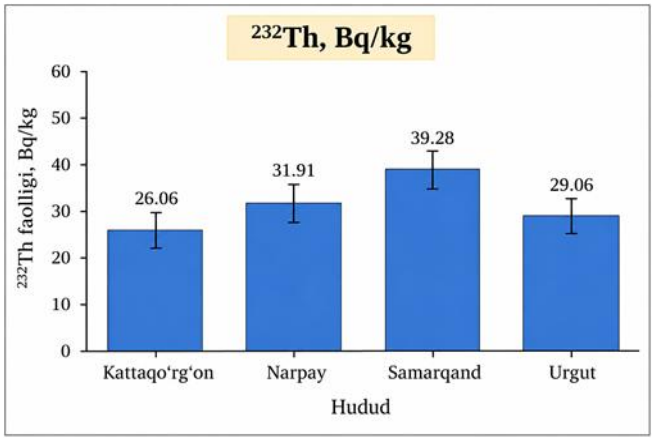
Hududlar bo‘yicha olingan namunalardagi asosiy radionuklidlarning statistik ko‘rsatkichlari

Hudud	^{226}Ra, Bq/kg	^{232}Th, Bq/kg	^{40}K, Bq/kg	A_{eff}, Bq/kg
Kattaqo‘rg‘on	18.51	26.06	374.82	82.90
Narpay	25.02	31.91	389.16	96.73
Samarqand	30.26	39.28	481.83	122.67
Urgut	22.31	29.06	415.36	95.95

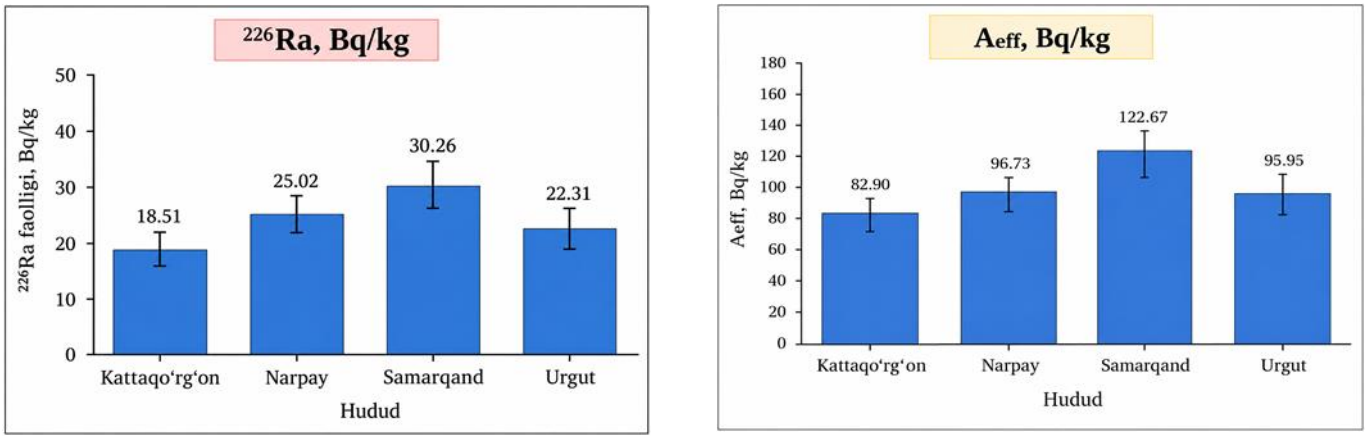
Quyidagi 3-, 4- va 5-rasmlarda ^{4}K, ^{232}Th va ^{226}Ra tabiiy radionuklidlarining hududlar bo`yicha solishtirma effektiv aktivliklarining taqsimlanishlari keltirilgan.



3-rasm. ^{40}K ning hududlar bo‘yicha o‘rtacha solishtirma aktivligi

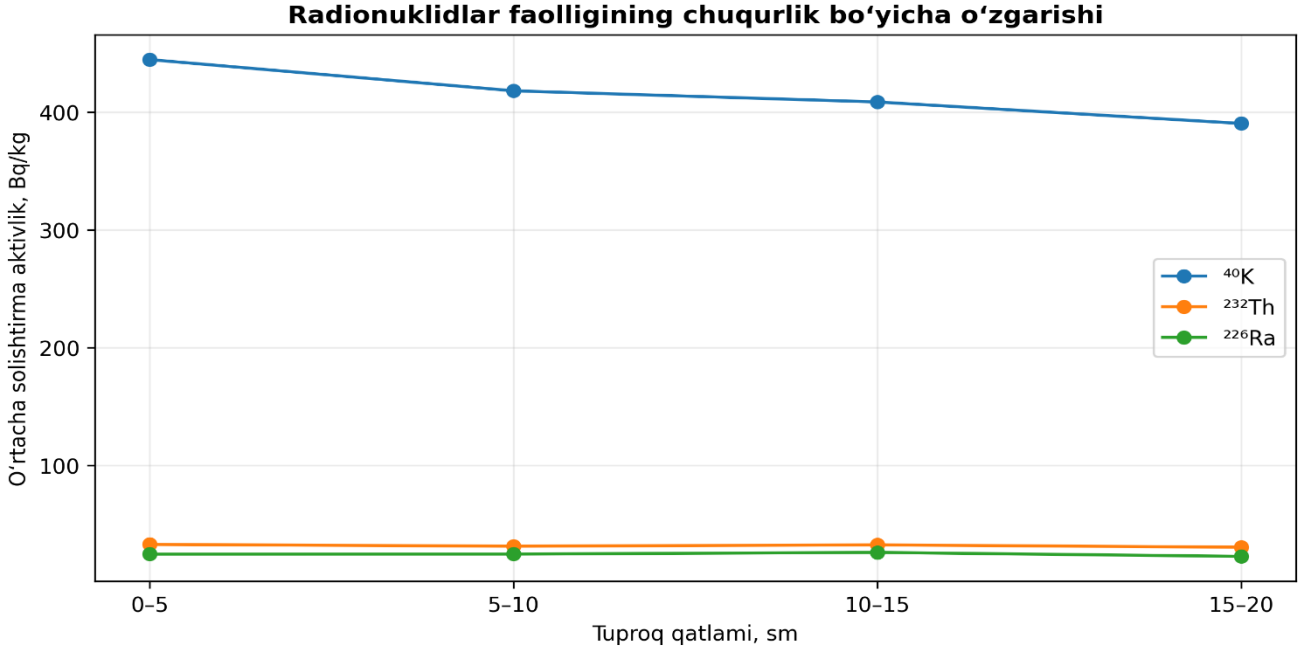


4-rasm. ^{232}Th ning hududlar bo‘yicha o‘rtacha solishtirma aktivligi



5-rasm. ^{226}Ra ning hududlar bo'yicha o'rtacha solishtirma aktivligi

Quyidagi 6-rasmda ^{226}Ra, ^{232}Th va ^{40}K faolliklarining tuproq chuqurligi bo'yicha o'rtacha o'zgarishi keltirilgan.



6-rasm. ^{226}Ra, ^{232}Th va ^{40}K faolliklarining tuproq chuqurligi bo'yicha o'rtacha o'zgarishi

Tuproq profilidagi o'zgarishlar ham bir xil yo'nalishda emas. Urgutda ^{40}K ning ayrim chuqur qatlamlarda kamayishi kuzatilsa, Samarqandda 5 - 10 sm qatlamda ^{40}K 578,3 Bq/kg gacha yetgan. Narpayda 10–15 sm qatlamda ^{40}K 471,4 Bq/kg bo'lgan. Kattaqo'rg'onda esa ^{40}K ning eng past qiymatlari 10–15 sm qatlam atrofida qayd etilgan. Bunday vertikal o'zgarishlar radionuklidlarning fizik-kimyoviy xususiyatlari, gil minerallari, kaliy saqlovchi minerallar va tuproqning granulometrik tarkibi bilan bog'liq bo'lishi mumkin.

A_{eff} ko'rsatkichi bo'yicha eng yuqori hududiy o'rtacha qiymat Samarqandda 122,7 Bq/kg, undan keyin Narpayda 96,7, Urgutda 96,0 va Kattaqo'rg'onda 82,9 Bq/kg ni tashkil etdi. Ushbu qiymatlar faqat ushbu tadqiqotda qo'llangan A_{eff} ustunining o'rtacha qiymatlaridir; ularni bevosita doza tezligi bilan tenglashtirmaslik kerak. Tashqi gamma-doza tezligini baholash uchun radionuklidlarning individual faolliklari asosida tegishli dozaviy koeffitsiyentlardan foydalanish maqsadga muvofiq [1,2].

UNSCEAR- 2024 hisobotida dunyo bo'yicha ^{40}K, ^{226}Ra va ^{232}Th uchun 512, 33 va 42 Bq/kg populyatsiya-og'irlikli o'rtacha qiymatlar keltirilgan [1]. Tadqiqotdagi ^{40}K qiymatlarining aksariyati ushbu global o'rtacha bilan bir xil tartibda yoki undan past, faqat Samarqanddagi ayrim qatlamlar yuqoriroq. ^{226}Ra va ^{232}Th bo'yicha hududiy o'rtachalar ham global o'rtacha qiymatlarga yaqin yoki past bo'lib, natijalar hududda tabiiy radionuklidlar fonining keskin anomal ekanini ko'rsatmaydi.

^{137}Cs ning tarqalishi bo‘yicha natijalar. Tadqiqotning muhim natijalaridan biri ^{137}Cs ning barcha ko‘rib chiqilgan qatlamlarda aniqlash chegarasidan past qayd etilganidir. Bu holat namunalar tarkibida ^{137}Cs mutlaq yo‘q degan xulosani bermaydi; faqat qo‘llangan o‘lchash sharoitida uning aktivligi detektor va hisoblash statistikasi bilan belgilanadigan aniqlash chegarasidan past ekanligini anglatadi. Shu sababli ^{137}Cs bo‘yicha yanada sezgir monitoring zarur bo‘lsa, uzoqroq hisoblash vaqti, pastroq fonli ekranlash yoki yuqori energiya ajratish qobiliyatiga ega detektor qo‘llash mumkin.

Tadqiqotning ilmiy yangiligi va amaliy ahamiyati. Tadqiqotning amaliy jihati Zarafshon havzasining to‘rtta hududida tuproq profilining to‘rt xil chuqurligini bir xil gamma-spektrometrik metodika bilan taqqoslash imkonini berganligidadir. Bundan tashqari, ^{226}Ra ni aniqlash uchun Marinelli geometriyasida bir oy germetik saqlashga asoslangan nazorat protsedurasining qo‘llanilishi radiy natijalarining ishonchliligini oshirishga qaratilgan metodik yondashuv sifatida muhimdir.

Olingan ma’lumotlar Zarafshon daryosi havzasida radioekologik monitoringning dastlabki referens bazasini shakllantirish, keyingi ekspeditsiyalarda nuqtalar tarmog‘ini kengaytirish va vaqt bo‘yicha o‘zgarishlarni aniqlash uchun qo‘llanishi mumkin. Kelgusida gamma-spektrometriyani EDXRF element tahlili, tuproqning granulometrik tarkibi, pH, organik modda va mineralogik tarkib bilan birlashtirish radionuklidlarning hududiy taqsimlanish sabablarini ancha chuqurroq izohlash imkonini beradi.

Xulosalar. Gamma-spektrometrik usul yordamida Zarafshon daryosi suv havzasi tuproqlari tarkibidagi tabiiy radionuklidlar miqdorlarini aniqlash tadqiqoti davomida - Zarafshon daryosi havzasining Urgut, Samarqand, Kattaqo‘rg‘on va Narpay hududlaridan olingan 48 ta qatlam namunasining gamma-spektrometrik ma’lumotlari tahlil qilindi, tadqiq etilgan tuproqlarda tabiiy gamma-radioaktivlikning asosiy hissasi ^{40}K radionuklidiga to‘g‘ri kelishi topildi, ^{40}K ning hududiy o‘rtacha qiymati Samarqandda eng yuqori, Kattaqo‘rg‘onda esa eng past bo‘lishi aniqlandi, ^{226}Ra va ^{232}Th ning hududiy o‘rtacha qiymatlari mos ravishda 18,5 - 30,3 va 26,1 - 39,3 Bq/kg oralig‘ida bo‘lishi, UNSCEAR tomonidan berilgan global o‘rtacha qiymatlar bilan bir xil tartibda bo‘lishi, ^{137}Cs barcha ko‘rib chiqilgan namunalarda aniqlash chegarasidan pastligi qayd etildi. Ushbu natija antropogen radionuklid bo‘yicha keyingi monitoring uchun boshlang‘ich nuqta sifatida qaralishi kerak va natijalar Zarafshon havzasi tuproqlarining radioekologik holati bo‘yicha boshlang‘ich ma’lumotlar bazasini yaratadi va keyingi monitoring hamda EDXRF asosidagi geokimyoviy tahlillar bilan integratsiya qilish uchun asos bo‘lib xizmat qilishi aniqlandi.

ADABIYOTLAR:

1. UNSCEAR. Sources, Effects and Risks of Ionizing Radiation. UNSCEAR 2024 Report, Volume II, Scientific Annex B: Evaluation of Public Exposure to Ionizing Radiation. New York: United Nations, 2024.

2. UNSCEAR. Sources and Effects of Ionizing Radiation. UNSCEAR 2008 Report to the General Assembly, with Scientific Annexes. Vol. I. New York: United Nations, 2010.

3. Mo‘minov A.T., Mo‘minov T.M., Xolbayev I., Axmedova G., Mamatqulov O.B. Atrof-muhit obyektlarini gamma-spektrometriya usullari bilan tadqiq qilish. Toshkent: Vneshinvestprom, 2020. 290 b.

4. Khasanov Sh., Tukhtaev U., Mamatkulov O., Safarov A., Afsharipour S. Natural radionuclide profiles and radiological risks in soils and rocks of the Koytash–Ugam Range, Uzbekistan // Environmental Monitoring and Assessment. 2024. Vol. 196. Article 847. DOI: 10.1007/s10661-024-13015-0. https://doi.org/10.1007/s10661-024-13015-0

5. Tukhtaev U., Khasanov S., Fayzullayev J., Safarov A., Togaev B., Afsharipour S. Determination of natural radionuclides and heavy metal concentrations in the groundwater and adjacent areas of the Kattakurgan reservoir, Uzbekistan // Radiochimica Acta. 2024. Vol. 112, No. 2. P. 127–137.

6. Muminov I.T., Muhamedov A.K., Osmanov B.S., Safarov A.A., Safarov A.N. Application of NaI(Tl) detector for measurement of natural radionuclides and 137Cs in environmental samples: new approach by decomposition of measured spectrum // Journal of Environmental Radioactivity. 2005. Vol. 84, No. 3. P. 321–331. DOI: https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2005.02.017

7. Zubair M., Verma D., Azam A., Roy S. Natural radioactivity and radiological hazard assessment of soil using gamma-ray spectrometry // Radiation Protection Dosimetry. 2013. Vol. 155, No. 4. P. 467–473. DOI: https://doi.org/10.1093/rpd/nct017

8. Hassan N.M., Kim Y.J., Jang J., Chang B.U., Chae J.S. Comparative study of precise measurements of natural radionuclides and radiation dose using in-situ and laboratory γ-ray spectroscopy techniques // Scientific Reports. 2018. Vol. 8. Article 14115. DOI: https://doi.org/10.1038/s41598-018-32220-9

9. Islami rad S.Z., Mansuri R., Rezaei G.H. Determination of natural radioactivity using gamma spectrometry in used soils as construction materials in Qom province, Iran // Journal of Radiation Research

and Applied Sciences. 2023. Vol. 16, No. 4. Article 100753. DOI: 10.1016/j.jrras.2023.100753. https://doi.org/10.1016/j.jrras.2023.100753

10. Kraishan A., Shayeb M.A., Belmabrouk H., Qwasmeh A.A.H., Baloch M.A. Assessment of natural radioactivity in soil and olive mill pomace utilizing NaI(Tl) gamma-ray spectrometry and low background alpha/beta counting system // Nuclear Engineering and Technology. 2024. Vol. 56, No. 5. P. 1925–1931. DOI: 10.1016/j.net.2023.12.055. https://doi.org/10.1016/j.net.2023.12.055

11. Zubair M., Shafiqullah. Measurement of natural radioactivity in several sandy-loamy soil samples from Sijua, Dhanbad, India // Heliyon. 2020. Vol. 6, No. 3. Article e03430. DOI: 10.1016/j.heliyon.2020.e03430. https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e03430

UO‘K 534.1:532.595

SUYUQLIK BILAN ALOQADA BO‘LGAN EGRI CHIZIQLI QUVURNING MAJBURIY TEBRANISHLARI

Sabirova Ra’no Azamatovna,
Toshkent kimyo-texnologiya instituti doktoranti
r.sabirova@tkti.uz
Sulaymonova Gulnoza Xamzayevna,
Toshkent kimyo-texnologiya instituti tayanch doktoranti
g.sulaymonova@tkti.uz
Fayzullayev Fazliddin Bozorboy o‘g‘li,
Toshkent kimyo-texnologiya instituti tayanch doktoranti
f.fayzullayev@tkti.uz
Salimova Dildora Baxodirovna,
Buxoro davlat texnika universiteti tayanch doktoranti
salimova_dildora@bstu.uz
Isayev Nurbek Faxriddin o‘g‘li,
Jizzax davlat pedagogika universiteti
Matematika kafedrasi o‘qituvchisi
isayev_nurbek@bstu.uz

Annotatsiya. *Ushbu maqolada suyuqlik bilan aloqada bo‘lgan egri chiziqli yopishqoq-elastik quvurlarning majburiy garmonik tebranishlari masalasi qo‘yilgan va sonli natijalar keltirilgan. Deformatsiyalanuvchi qattiq jism mexanikasi tenglamalari asosida egri sterjen modeli qurilgan, moddaning reologik xossalari irsiy nazariya operatorlari orqali hisobga olingan. Kompleks xos chastotalarni aniqlash uchun ortogonal progonka, Myuller va Gauss usullariga asoslangan algoritm va C++ dasturi ishlab chiqilgan hamda ko‘chishning amplituda-chastota xarakteristikalari qurilgan. Sterjen o‘qining egriligi (KL parametri) ortishi bilan so‘nish dekrementining birinchi chastotadan ikkinchisiga o‘tishi aniqlangan. Kichik chastotalarga mos ko‘chish amplitudalari tashqi dissipatsiya, katta (rezonans) chastotalar esa ichki qovushqoqlik hisobiga tez so‘nishi ko‘rsatilgan.*

Kalit so‘zlar: *quvur, egri sterjen, qovushqoq-elastiklik, irsiy nazariya, majburiy tebranish, kompleks chastota, so‘nish dekrementi, amplituda-chastota xarakteristikasi, egrilik parametri, rezonans.*

ВЫНУЖДЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ КРИВОЛИНЕЙНОГО ТРУБОПРОВОДА, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕГО С ЖИДКОСТЬЮ

Аннотация. *В работе поставлена задача о вынужденных гармонических колебаниях криволинейных вязкоупругих трубопроводов, взаимодействующих с жидкостью, и получены численные результаты. На основе уравнений механики деформируемого твёрдого тела построена модель криволинейного стержня; реологические свойства материала учтены операторами наследственной теории вязкоупругости. Для определения комплексных собственных частот разработаны алгоритм и программа на языке C++, использующие методы ортогональной прогонки, Мюллера и Гаусса. Установлено, что с ростом параметра кривизны стержня (KL) декремент затухания переходит от первой частоты ко второй. Показано, что амплитуды перемещений при малых частотах быстро гасятся за счёт внешней диссипации, а резонансные амплитуды при больших частотах — за счёт внутренней вязкости материала.*

Ключевые слова: *трубопровод, криволинейный стержень, вязкоупругость, наследственная теория, вынужденные колебания, комплексная частота, декремент затухания, амплитудно-частотная характеристика, параметр кривизны, резонанс.*

FORCED VIBRATIONS OF A CURVED PIPE INTERACTING WITH A FLUID

Abstract. *This article formulates the problem of forced harmonic oscillations of curvilinear viscoelastic pipes in contact with a fluid and presents numerical results. Based on the equations of deformable solid mechanics, a curved rod model was constructed, and the rheological properties of the material were accounted for using hereditary theory operators. An algorithm and a C++ program based on*

the orthogonal sweep, Müller, and Gauss methods have been developed to determine complex eigenfrequencies, and the amplitude-frequency characteristics of displacement have been plotted. It has been established that as the curvature of the rod axis (KL parameter) increases, the damping decrement transitions from the first frequency to the second. It is shown that displacement amplitudes corresponding to low frequencies are rapidly damped due to external dissipation, while high (resonant) frequencies are damped due to internal viscosity.

Keywords: *pipe, curved rod, viscoelasticity, hereditary theory, forced oscillation, complex frequency, damping decrement, amplitude-frequency characteristic, curvature parameter, resonance.*

Kirish. Materialning qovushqoq-elastik xususiyatini hisobga olib, quvurlarning dinamik masalalarni yechish muhim amaliy ahamiyatga ega hisoblanadi. Silindrik koʻrinishdagi qovushqoq suyuqlikli qobiqlar tebranishlarini oʻrganishga imkon beruvchi parametrlarning barqarorligini ta'minlash xususiyatiga ega boʻlgan usullar ishlab chiqishga imkon beradi. Quyidagi [1,2,3] ishlarda chegaralangan sterjen va qobiqsimon quvurlarning erkin va majburiy tebranishlari oʻrganilib amaliyot uchun tavsiyalar berilgan. Elastik bir jinsli qobiqning $n \geq 2$ boʻlgan hol uchun bir tomoni mahkamlangan ikkinchi tomoni erkin qobiqning erkin tebranishlar chastotasi uchun nazariy tahlili berilgan [4,5]. Silindrik qobiqning erkin tebranishlar chastotasini $(l/R>10)$ $n>3$ boʻlgan hol uchun [6] ishda tadqiq etilgan. Qobiq egri chiziqli oʻqdan iborat boʻlsa, uning tebranishlarini oʻrganish ancha murakkablashadi. Egri chiziqli qobiqni oʻrganish nazariyasi mavjud boʻlmagani uchun u egri sterjen sirtida oʻrganilgan. Qobiqlarning egri chiziqli boʻlagidagi tebranishlarini tekshirish quyidagi adabiyotlarda keltirilgan [6,7,8]. Sterjen nazariyasi nuqtai nazari bilan yondashilgan qator ilmiy ishlarda zarb yuki ta'siridagi toʻgʻri chiziqli sterjenlar nazariy va sinov yoʻllari bilan oʻrganilganligining guvohi boʻlamiz [9,10]. Egri chiziqli sterjenlar tahlili juda ham kam oʻrganilgan. Faqat Svetlitskiy V.A. ilmiy ishlarida egri chiziqli sterjenlar uchun Timoshenko tenglamasi koʻrinishidagi tenglamalarni kiritgan va natijalar olingan [11]. Uzluksiz toʻlqinli harakatlar uchun dispersion chiziqlarni hosil qilganlar [12]. Toʻgʻri va egri sterjenlarda toʻlqin energiyasi kuchlanishining uzatilishi oʻrganilgan va boshqa xil koʻrinishdagi prujinalar uchun oʻz ilmiy izlanish natijalarini ham e'lon qilganlar [13,14]. Bu masalaning qoʻyilishi, yuqorida keltirilgan sterjenga qoʻyilgan yukning massa masalasidan kelib chiqadi. Qovushqoq-elastik sterjenning xos va majburiy tebranish masalasida normal bosim ostidagi tebranishlar oʻrganiladi.

Masalaning qoʻyilishi va yechish metodikasi.

Egri chiziqli quvurning harakat tenglamasini majburiy turgʻun tebranishlarini olishda ikki xil nazariyadan foydalaniladi: birinchisi sterjen, ikkinchisi toroidal qobiq nazariyasidan foydalanib olinadi. Ularning umumiy tenglamasi mumkin boʻlgan koʻchish prinsipi asosida olinadi. Bu obyektning harakat tenglamasi variatsion prinsip yoki mumkin boʻlgan koʻchish prinsipi asosida olinganda oldindan ma'lum boʻlgan, ya'ni yechilgan masalalarni umumlashtiradi. Faraz qilaylik, qovushqoq-elastik (dissipativ bir jinsli) quvurlarning tebranishi fazoviy koordinatalar sistemasida berilgan boʻlsin va ularda garmonik toʻlqinlar tarqalishi natijasida hosil boʻladigan dinamik jarayonlar va majburiy garmonik kuchlar ta'siridagi dinamik-kuchlanishlar deformatsiya holati oʻrganilsin. Bu elementlardan xayolan ajratib olingan elementar parallelepipedning dinamik harakatni ifodalovchi tenglamasi tenzor koʻrinishda qoʻyidagicha boʻladi [1]:

$$\sigma_{ij,j} + \rho_{\kappa}(F_i - \ddot{u}_i) = 0, \qquad (1)$$

$$\hat{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right),$$

$$\sigma_{ij} = \tilde{\lambda}\theta\delta_{ij} + 2\tilde{\mu}\hat{\varepsilon}_{ij}$$

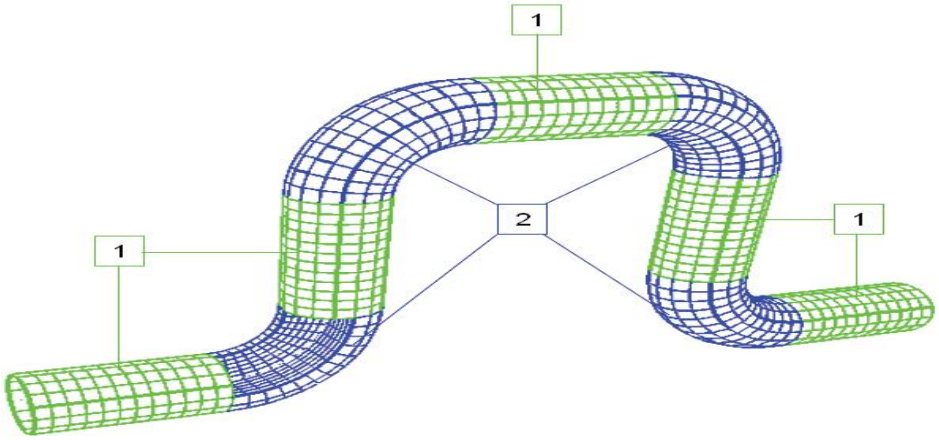
bunda $\sigma_{ij,j}^{(k)}$ - kuchlanishlar tenzori komponentlari; F_i =0; ρ -qatlamlar zichliklari; δ_{ij} -Kroneker simvoli: $i=j$,boʻlsa 1 ga, $i \neq j$ boʻlsa 0 ga teng; ε_{ij} - deformatsiya tenzori komponentlari; θ -hajmiy deformatsiya; $\tilde{\lambda}$ va $\tilde{\mu}$ -kompleks operatorlar

$$\tilde{\lambda}\ f(t)=\lambda_0\left[f(t)-\int_0^t R_\lambda(t-\tau)f(\tau)d\tau\right];$$

$$\tilde{\mu}\ f(t)=\mu_0\left[f(t)-\int_0^t R_\mu(t-\tau)f(\tau)d\tau\right], \qquad (2)$$

bu yerda ham *f(t)*–vaqtning ixtiyoriy funksiyasi; $R_\lambda(t-\tau)$ *ва* $R_\mu(t-\tau)$ – relaksatsiya yadrolari; λ_0, μ_0 –oniy elastiklik modullari.

Ushbu maqolada o‘rganilayotgan quvur dissipativ konstruktsiyalar quyidagi 1–rasmda keltirilgan.



1-rasm. Egri sterjenning bir ko‘rinishi; 1 – t**o‘g‘ri chiziq qismi; 2** – **egri chiziqli qismi**

Elastiklik nazariyasining uch o‘lchovli masalasini soddalashtirganimimizda qobiq nazaryasidan foydalanamiz. Buning uchun qobiqda Kirxgof-Lyav yoki Timoshenko S.P. gipotezalari o‘rinli bo‘ladi, deb qaraymiz. U holda, variatsion tenglama quyidagi ko‘rinishga keladi:

$\delta A_F + \delta A_I = 0$ (3)

Ichki kuchlar bajargan ishning variatsiyasi (δA_{Fk}) quyidagicha bo‘ladi:

$$\delta A_F = -\delta\Pi = -\int_V \sigma_{ij}\,\delta\varepsilon_{ij}dV \qquad (4)$$

Bunda *P* jismning potensial energiyasi; σ_{ij} – jism kuchlanish tenzorining komponentalari; ε_{ij} – deformatsiya tenzorining komponentalari, *V – jismning fazoda egallagan hajmi*.

Inertsiya kuchining virtual ishi (δA_I) quyidagicha ifodalanadi:

$$\delta A_k = -\sum_{i=1}^{3}\int_V \rho\,\ddot{u}_i\delta u_i dV$$

bunda ρ- jism materiali zichligi; u_i–ko‘chish vektorining komponentalari; $\ddot{u}_i = \partial^2 u_i / \partial t^2$; t -vaqt. Quvurning fizik xossalarini ifodalovchi munosabatlar (1) ko‘rinishda bo‘ladi. Bu (2) o‘rniga $\tilde{E}$ –operator ko‘rinishdagi elastiklik modulini ham olish mumkin, u holda qo‘yidagi integral munosabat o‘rinli bo‘ladi:

$$\tilde{E}\ f(t)=E_0\left[f(t)-\int_0^t R_E(t-\tau)f(\tau)d\tau\right] \qquad (5)$$

$R_E(t-\tau)$–relaksatsiya yadrosi; E_0 -oniy elastiklik moduli. Yuqorida keltirilgan (5) integral had kichik hisoblanadi, shuning uchun $\varphi(t)$ funksiya uchun $\varphi(t)=\psi(t)e^{-i\omega_R t}$ o‘rinli bo‘ladi. Bu kichik chiziqli tebranishlarga mos keladi. Bu yerda -vaqtning sekin o‘zgaruvchi funksiyasi, -haqiqiy kattalik $\psi(t)\ \omega_R$. U holda [14] ishda keltirilgan munosabatlardan foydalansak, (5) quyidagicha ifoda bilan taqriban almashtirish mumkin:

$$\overline{E}_{\kappa}\varphi = E_{0\kappa}\left[1-\Gamma_{\kappa}^{C}(\omega_R)-i\Gamma_{\kappa}^{S}(\omega_R)\right]\varphi,$$

bunda

$\Gamma^{C}(\omega_R)=\int_0^{\infty} R(\tau)\cos\omega_R\tau\, d\tau,\ \Gamma^{S}(\omega_R)=\int_0^{\infty} R(\tau)\sin\omega_R\tau\, d\tau$ -material relaksatsiya yadrosining mos ravishda, kosinus va sinus Furye tasvirlari.

Ko‘pchilik hollarda harakatning xususiy hosilali differensial tenglamalar sistemasi (1) va (2), ba’zi murakkab bo‘lmagan operatsiyalardan so‘ng kompleks koeffitsiyentli birinchi tartibli oddiy differensial tenglamalar sistemasini yechishga keltiriladi. Ular kompleks arifmetikada ortogonal progonka va Myuller, Laplas, Gauss va maxsus funksiyalarga asoslangan uslubiyot va algoritm bilan yechiladi. Ba’zi murakkab hollarda (1) va (2) tenglamalar sistemasining yechimlari chekli ayirmalar, progonka, Myuller, Laplas, Gauss va maxsus funksiyalarga asoslangan uslubiyot va algoritm bilan ham yechiladi. Qo‘llangan algoritm asosida C++ tilida dastur ishlab chiqilgan. Test masalalarni yechishda MAPLE-9.5 dasturiy ta’minotidan ham foydalanildi. Yuqorida keltirilgan (3) tenglikdan birinchi tartibli kompleks koeffitsiyentli oddiy differensial tenglamalar sistemasi olindi. Bu spektral masala sterjenning tekis-parallel harakatini ifodalaydi. Asosiy maqsad kompleks chastota va unga mos keluvchi tebranishlar formasini ko‘rishdan iborat bo‘lib, spektral masala quyidagicha bo‘ladi:

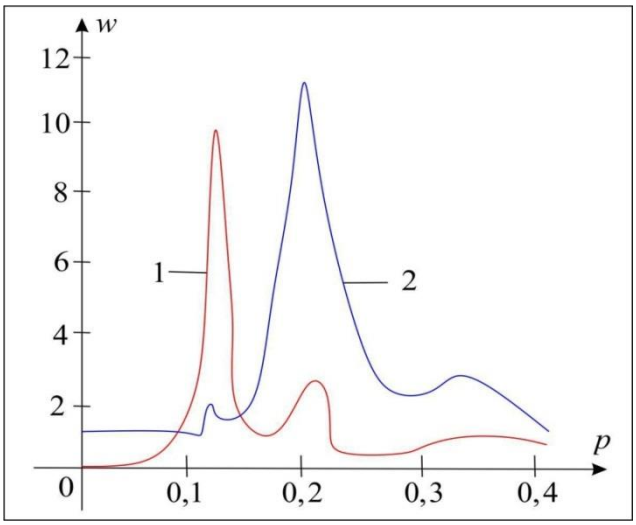
$$\begin{aligned}
\frac{du}{dx} &= \frac{T}{ES(1+\beta_3\omega i)} + Kw,\\
\frac{dw}{dx} &= \theta - Ku,\\
\frac{d\theta}{dx} &= \frac{M_1}{EJ_1k(1+\beta_1\omega i)},\\
\frac{dT}{dx} &= -KQ_1 + u(a_1\omega i - \rho S\omega^2),\\
\frac{dQ_1}{dx} &= KT - w(a_2\omega i - \rho S\omega^2),\\
\frac{dM_1}{dx} &= Q_1 - \rho J_1\omega^2\theta\,.
\end{aligned} \qquad (6)$$

Chegaraviy masala (6) tenglamalar yordamida ishlab chiqilgan algoritm va dastur asosida, kompleks arifmetikada yechiladi.

Egri sterjenning majburiy garmonik tebranishlari. Faraz qilaylik, sterjenning ikki uchidan yoki mahkamlangan uchidan quyidagi garmonik qonunga bo‘ysunuvchi yuk (nagruzka) yoki shart qo‘yilgan bo‘lsin:

$$u = Ue^{i\omega t},\quad w = We^{i\omega t},\quad \theta_1 = He^{i\omega t} \qquad (7)$$

$$x=0:\quad U^0 = U,\ W^0 = W,\ \theta_1^0 = H\,. \qquad (8)$$



2-rasm. Ko‘chishning amplituda-chastota xarakteristikasi $W^0(L)$

Garmonik tebranishda tebranishlar formasi (6), (7) va (8) chegaraviy masalalarni yechib topiladi. Majburiy garmonik harakatda majburiy tebranishlar chastotasi ω berilgan bo‘ladi, ya’ni haqiqiy songa teng bo‘ladi. Yuqorida qo‘yilgan masala ishlab chiqilgan algoritm va dastur asosida yechiladi.

Bu yuqoridagi (4) va (6) tenglamalarni chegaraviy shart asosida yechishga olib kelinadi. Ishlab chiqilgan algoritm va dastur asosida kompleks xos son va tebranishlar formasi topiladi. So‘nish dekrementi quyidagi formula bilan topiladi:

$$\delta = 2\pi \frac{|\mathrm{Im}\,\omega|}{\mathrm{Re}\,\omega}.$$

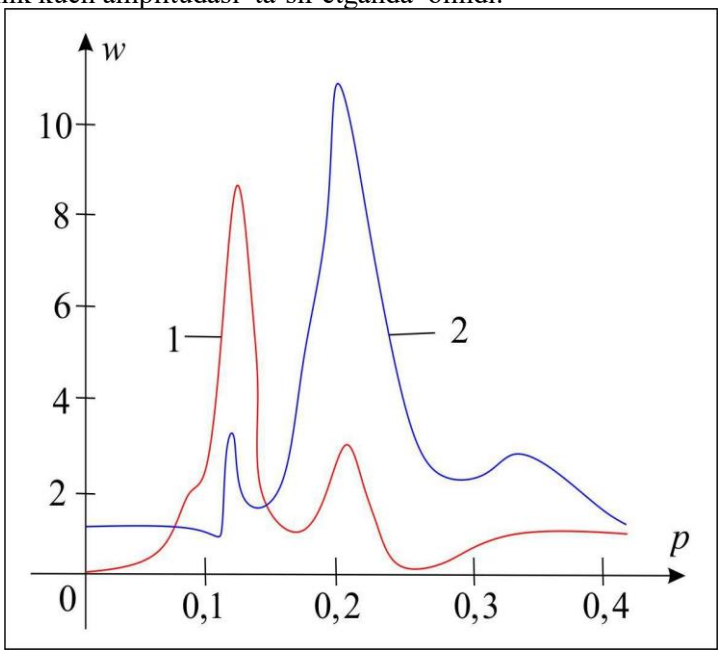
Spektral masalada qovushqoq sterjen yoki elastik sterjen suyuqlikda joylashgan bo‘lsa, chastota kompleks ko‘rinishda bo‘ladi. Uning haqiqiy qismi tebranishlar chastotasini bersa, mavhum qismi so‘nish koeffitsiyenti yoki so‘nish dekrementini beradi. Majburiy tebranishlar uchun olingan sonli natijalar 2 va 3-rasmlarda keltirilgan. Bu rasmdagi chiziqlar mos ravishda $v^0(L)$ *ва* $W^0(L)$ ko‘chishlar uchun olingan. Egrilik parametri $KL = 3{,}14$ ga teng. Sterjenning mahkamlangan joyiga qo‘yilgan nagruzka amplitudasi quyidagicha:

$$U = 1, \quad W = H = 0. \qquad (9)$$

2-rasmdagi 2-egri chiziq ham $W^0(L)$ amplituda-chastota xarakteristikasi:

$$U = H = 0, \quad W = 1. \qquad (10)$$

(2.38) tashqi garmonik kuch amplitudasi ta’sir etganda olindi.



3-rasm. Ko‘chishning amplituda-chastota xarakteristikasi $v^0(L)$

Yuqoridagi 3-rasmda xuddi yuqorida keltirilgan natijalar singari, sterjenning qovushqoqligini hisobga olib topilgan yadro relaksatsiyasidagi A_j parametr oshib borsa, ko‘chish amplitudasi kamayib borishi kuzatildi.

Biz o‘rgangan tebranishlar formasi ham kompleks kattalik hisoblanadi. Masalan, $x = L$ bo‘lgandagi tebranishlar formasi, U_0 esa, $\omega = 0.0504$ bo‘lganda rezonans qiymatga yaqin bo‘ladi. $U_1 = -1{,}76 + 24{,}4i$ va $U_2 = 0{,}078 - 3{,}65i$ teng bo‘ladi.

Xulosalar. Suyuqlik bilan aloqada bo‘lgan egri qovushqoq-elastik sterjenning majburiy tebranishlari masalasi qo‘yildi va sonli natijalar olindi.

1. Erkin tebranishlar chastotasining kompleks kattalik bo‘lishi topildi. Uning haqiqiy qismi tebranishlar chastotasini, mavhum qismi esa, so‘nish dekrementi koeffitsiyentini (zatuxaniya) ifodalashi asoslab berildi.

2. Kompleks chastotaning haqiqiy qismining ortishi bilan ularga mos keluvchi so‘nish dekrementi ham ortib boradi. Bu esa, tebranishlar amplitudasining kamayishiga olib keladi. Tebranishlar chastotasi mavhum kattalikka teng bo‘lishi aperiodik harakatlarni yuzaga keltiradi.

3. Kichik chastotalarga mos keluvchi ko‘chish amplitudalari (maksimal ko‘chish amplitudasi) tashqi dissipatsiya hisobidan tez so‘nishga olib kelinishi mumkin. Katta chastotalarga mos keluvchi rezonans amplitudalarining esa ichki qovushqoqlik hisobidan tez so‘nishi asoslab berildi.

4. Tashqi qarshilikli katta egrilikka ega sterjenlar uchun ($KL \succ 3{,}14$), KL ortishi bilan so‘nish dekrementi birinchi chastotadan ikkinchisiga o‘tadi. Bunday samarani birinchi marta to‘g‘ri sterjen uchun V. Biderman topgan. Bu samara qovushqoq-elastik sterjen uchun ham o‘rinli bo‘ladi.

ADABIYOTLAR:

1. Сафаров И.И., Тешаев М.Х., Эсанов Н.Қ., Ҳамроева З.Қ. Математическое моделирование собственных и вынужденных колебаний криволинейных труб, взаимодействующих со средой. – Тошкент: ФАН, 2009. – 161 с.

2. Esanov N.K. Свободные колебания трубопроводов как тонких цидиндрических оболочек с учетом внутреннего давления // Вихоro davlat universiteti ilmiy axboroti. – Вихоro. – 2019. – №1. – С. 46-52.

3. Эсанов Н.К, Сафаров И.И.,.Эшмаматов М., Болтаев З.И., Кулмуратов Н. Суюқлик оқувчи кўп қатламли қувурлар бўлакларининг динамик юкланишлар таъсирида кучланиш-деформатция ҳолатини ўрганиш усулларини ишлаб чиқиш ва назариясини ривожлантириш. – Тошкент. – 2019. – 219 с.

4. Ashley H., Haviland G. Bending vibrations of a pipeline containing flowing fluid // Jorn.Appl. Mech. – 1950. Vol 17, №3, p. 229-232.

5. Alujević N., Campillo-Davo, Kind P. t, Desmet W., Pluymers B., Vercammen S. Analytical solution for free vibrations of rotating cylindrical shells having free boundary conditions, Engineering Structures, 132(2017). – 2017. – P. 152-171.

6. Drucker D. P., Prager W. Soil Mechanics and Plastic Analysis or limit Design// Quarterly of Applied Mathematics , Vol 10, 2 , 1952. – P. 157 -165.

7. DNV–RP–F110 Global Buckling of Submarine Pipelines, Structural Design Due to High Temperature High Pressure. Recommended Practice. Det Norske Veritas. Norway, 2007. – 64p.

8.Dedieu J. P., Tisseur F., Perturbation theory for homogeneous polynomial eigenvalue problems, Linear Algebra and its Applications 358(2003), 2003. – P. 71-94.

9. Hoever C., Tsotras A., Saemann E.U., Kropp W. A comparison between finite element and waveguide finite element methods for the simulation of tyre/road interaction. Proceedings of the Inter Noise Conference, Innsbruck, Austria, 2013 . – P. 67-74.

10. Carnet H., Lielly A. Free vibrations of reinforced elastic shells// Journal of Applied Mechanics. – Vol. 36. 1969. – № 4. – pp. 835-844, doi: 101115/ 1.3564.779.

11. Ch.W. Yu, Dravinski M. Scattering of plane harmonic P, SV or Rayleigh waves by a completely embedded corrugated cavity, Geophysical Journal International, 178 (2009), 2009. – P. 479-487.

12. Gomes R.C., Gouveia F., Torcato D., Santos J. Seismic response of shallow circular tunnels in two-layered ground, Soil Dynamics and Earthquake Engineering, 75 (2015), 2015. – P. 37-98.

13.Kim W., Chung J.,Free non-linear vibrations of a rotating thin ring with the inplane and out-of-plane motions. Journal of Sound and Vibration, 258(1), 2002. – P. 167-178.

14. Сафаров И.И. Колебания и волны в диссипативно-неоднородных средах и конструкциях. – Ташкент: Фан, 1992 . – 250 с.

УДК 621.315.592.2:537.311.322

ФОРМИРОВАНИЕ ПОЛЯРНОЙ АСИММЕТРИИ НА ПОВЕРХНОСТИ N^+-SI:SB(100) ПОСЛЕ ХИМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ HF И ЕЁ ПРОЯВЛЕНИЕ В ВОЛЬТ-АМПЕРНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКЕ

Маматкаримов Одилжон Охундеедаевич,
профессор Наманганского государственного технического университета, доктор физико-математических наук
Кучкоров Бехзод Хошимжанович,
доцент Медицинского института «Импульс», доктор физико-математических наук
Абдулхаев Абробек Абдуллохон угли,
Наманганский государственный технический университет, доктор философии (PhD) по физико-математическим наукам,
Носирдинов Исломиддин Кутпиддин угли,
независимый исследователь
Наманганского государственного технического университета
abdulxayev2308@gmail.com

Аннотация. *В работе проведено сравнение вольт-амперных характеристик поверхности монокристаллического кремния n^+-Si:Sb(100), сильно легированного сурьмой, с естественным оксидным слоем и после химической очистки HF. Подтверждённая технологическая последовательность включала промывку деионизированной (DI) водой, обработку в растворе HF в течение 2 минут и последующую промывку DI-водой. Измерения В–А характеристик выполнены на приборе Keithley 2400-C в диапазоне −4…+4 В при линейной развёртке из 500 точек. Для образца B2 с естественным оксидным слоем получены значения I(−4 В)=−16,450 мА, I(+4 В)=+14,451 мА и коэффициент полярной асимметрии K_{as}=0,879. Для образца B4 после обработки HF соответствующие токи составили −5,597 и +19,179 мА, а K_{as}=3,426. Обработка HF уменьшила модуль тока при отрицательном смещении на 66,0%, увеличила ток при положительном смещении на 32,7%, и повысила дифференциальное сопротивление в области малых полей с 0,96 до 4,69 кОм. Результаты показывают, что влияние HF необходимо интерпретировать не в рамках простой модели «увеличения тока», а с учётом перестройки энергетики поверхностного слоя границы раздела и зависящей от поля полярно-селективной инжекции.*

Ключевые слова: *n^+-Si:Sb(100), очистка HF, естественный SiO_x, вольт-амперная характеристика, дифференциальное сопротивление, полярная асимметрия, инжекция заряда.*

N^+-SI:SB(100) SIRTIDA HF BILAN KIMYOVIY ISHLOV BERILGANDAN SO‘NG QUTBIY ASIMMETRIYANING SHAKLLANISHI VA UNING VOLT-AMPER XARAKTERISTIKASIDA NAMOYON BO‘LISHI

Annotatsiya. *Ushbu ishda kuchli surma bilan legirlangan n^+-Si:Sb(100) monokristall kremniy sirtining tabiiy oksidli va HF bilan kimyoviy tozalangandan keyingi volt-amper xarakteristikasi qiyoslandi. Tasdiqlangan texnologik ketma-ketlik DI suv bilan yuvish, HF eritmasida 2 minut ishlov berish va qayta DI yuvishdan iborat. V–A o‘lchovlari Keithley 2400-C qurilmasida −4…+4 V diapazonda, 500 nuqtali chiziqli ulanishida bajarilgan. Tabiiy oksidli B2 namunasida I(−4 V)=−16.450 mA, I(+4 V)=+14.451 mA va qutbiy asimmetriya koeffitsiyenti K_{as}=0.879 bo‘lgan. HF dan keyingi B4 namunasida mos toklar −5.597 va +19.179 mA, K_{as} esa 3.426 ni tashkil etgan. HF ishlovi manfiy qutblanishdagi tok modulini 66.0% kamaytirgan, musbat qutblanishdagi tokni 32.7% oshirgan va past maydonli differensial qarshilikni 0.96 dan 4.69 kΩ gacha ko‘targan. Natija HF ta’sirini oddiy “tok oshishi” modeli bilan emas, balki chegara sirt energetikasi va maydonga bog‘liq qutbiy-selektiv injeksiyaning qayta shakllanishi bilan talqin qilish zarurligini ko‘rsatadi.*

Kalit so‘zlar: *n^+-Si:Sb(100), HF bilan tozalash, tabiiy SiO_x, volt-amper tavsifi, differensial qarshilik, qutbiy asimmetriya, zaryad injeksiyasi.*

FORMATION OF POLAR ASYMMETRY ON THE N⁺-SI:SB(100) SURFACE AFTER HF CHEMICAL TREATMENT AND ITS MANIFESTATION IN THE CURRENT–VOLTAGE CHARACTERISTIC

Abstract. *In this work, the current-voltage characteristics of the surface of a heavily antimony-doped n^+-Si:Sb(100) single-crystal silicon sample with a native oxide layer and after chemical cleaning with HF were compared. The validated technological sequence consisted of rinsing with DI water, treatment in an HF solution for 2 minutes, and subsequent rinsing with DI water. The V–A measurements were performed using a Keithley 2400-C instrument in the range of −4…+4 V with a linear sweep of 500 points. For the native-oxide B2 sample, I(−4 V)=−16.450 mA, I(+4 V)=+14.451 mA, and the polar asymmetry coefficient Kas=0.879. For the B4 sample after HF treatment, the corresponding currents were −5.597 and +19.179 mA, while K_{as}=3.426. HF treatment reduced the magnitude of the current under negative bias by 66.0%, increased the current under positive bias by 32.7%, and increased the low-field differential resistance from 0.96 to 4.69 kΩ. The results indicate that the effect of HF should not be interpreted using a simple "increase in current" model, but rather in terms of a reconstruction of the interface surface energetics and field-dependent polarity-selective injection.*

Keywords: *n^+-Si:Sb(100), HF cleaning, native SiO_x, current-voltage characteristic, differential resistance, polar asymmetry, charge injection.*

Введение. Подготовка поверхности в структурах металл–диэлектрик–полупроводник на основе кремния определяет начальные граничные условия для последующих процессов окисления, формирования тонких плёнок и создания электрических контактов. Естественный SiO_x, органические адсорбаты, вода и ионные остатки могут изменять потенциал, поверхностные состояния и инжекцию носителей заряда через контакт в активной приграничной области толщиной в несколько нанометров. Поэтому образцы, изготовленные из одного и того же объёмного кремния, могут демонстрировать существенно различающиеся вольт-амперные характеристики (ВАХ) при различной предыстории поверхности. В классическом подходе RCA различные типы загрязнений удаляются посредством последовательных химических стадий, тогда как HF-dip используется для растворения естественного или химически сформированного оксида кремния [1, 2]. После обработки HF толщина поверхностного оксида уменьшается, а поверхность кремния приближается к H-терминированному состоянию; химическая пассивность и состав такой поверхности неоднократно исследовались методами XPS, AES, FTIR и STM [3–6]. Однако в реальных лабораторных условиях конечное состояние поверхности чувствительно к таким факторам, как концентрация HF, промывка, сушка, выдержка на воздухе и контакт с поверхностью.

Целью настоящей работы является количественное выделение изменений амплитуды тока, дифференциального сопротивления при низких полях и полярной асимметрии путём сопоставления выбранных, технически сглаженных вольт-амперных характеристик поверхностей n^+-Si:Sb(100) с естественным оксидом и после обработки HF. При этом задача работы заключается не в принудительном установлении конкретного механизма эмиссии, а в получении физически обоснованного вывода в пределах имеющихся результатов реальных измерений.



Рисунок 1. Физико-химическое состояние поверхностей кремния с естественным оксидом и после обработки HF

H-терминация представлена схематически и не была непосредственно подтверждена в данном эксперименте методами XPS или FTIR.

Методология исследования. В качестве исходного материала использовали монокристаллический кремний n^+-Si:Sb с кристаллографической ориентацией (100), сильно легированный сурьмой; номинальное удельное сопротивление составляло 0,01 Ом·см. На данном этапе исследования достоверно подтверждённая последовательность подготовки поверхности включала: предварительную промывку деионизированной (DI) водой → обработку в растворе HF в течение 2 минут → последующую промывку DI-водой после HF. Точная концентрация раствора HF, режим промывки (проточный или статический), способ сушки и время от завершения HF-обработки до проведения электрических измерений не были полностью сохранены в лабораторном журнале. Поэтому данные параметры не были заимствованы из других источников, например, режим обработки 2%-ным HF или сушка продувкой N_2, и не представлялись в качестве фактических параметров эксперимента.

$$SiO_2 + 6HF \rightarrow H_2SiF_6 + 2H_2O$$

Уравнение реакции обобщённо описывает превращение оксида во фторсодержащий комплекс. На практике последующая промывка DI-водой после HF уменьшает количество растворённых продуктов реакции в приповерхностной области; вместе с тем контакт с водой может приводить к гидролизу некоторых связей Si–F и влиять на последующее химическое завершение поверхности [5]. Таким образом, обработка изменяет не только геометрическую толщину оксидного слоя, но также химическое состояние и дипольное состояние поверхности, на которой формируется электрический контакт.

Вольт-амперные характеристики (ВАХ) регистрировались с использованием источника-измерителя Keithley 2400-C в режиме линейной развёртки напряжения (Linear Voltage Sweep). Один цикл измерения (Run) включал 500 точек в диапазоне от −4 до +4 В, при этом средний шаг по напряжению составлял 0,016032 В. Измерения выполнялись по двухконтактной схеме (2-wire) с использованием временного зондового контакта через передний вывод. Ограничение тока составляло 0,1 А, задержка между подачей напряжения и измерением (source-to-measure delay) — 5 мс, время измерительного окна — 20 мс, NPLC = 1. Поскольку на данном этапе не были сформированы окончательные верхний/тыльный Ni-электроды методом PVD и стандартная площадь контакта, плотность тока J и высота контактного барьера не рассчитывались.

Таблица 1. Основные параметры измерения ВАХ

Параметр	Значение	Методическое примечание
Прибор	Keithley 2400-C	Источник-измеритель
Развёртка	−4…+4 V	Линейная, биполярная
Количество точек	500	Для каждого выбранного Run
Шаг напряжения	≈0.016032 V	По экспортированным метаданным
Задержка / окно	5 ms / 20 ms	NPLC=1
Ограничение тока	0.1 A	Автоматический диапазон измерения тока
Подключение	2-wire	Временный зондовый контакт, передний вывод
Основные Run	B2 Run 10; B4 Run 12	Плавные, непрерывные, без скачков

В связи с отсутствием стандартизированной геометрии контакта значения сопротивления интерпретируются как диагностические эффективные величины.

Для состояния с естественным оксидом был выбран B2 Run 10, а для состояния после обработки HF — B4 Run 12. Критериями выбора являлись одинаковый диапазон ±4 В, 500 точек измерения, непрерывность кривой, отсутствие выхода на предел compliance и отсутствие резких локальных скачков, связанных с контактом. Данный выбор не является предварительно зарегистрированной статистической процедурой отбора; поэтому полученные результаты обозначаются как «репрезентативный предварительный Run». Полярная асимметрия определялась в виде

$$K_{as} = I(+4\ В) / |I(-4\ В)|.$$

Низкополевая дифференциальная проводимость G_0 определялась посредством линейной регрессии в диапазоне $|V| \leq 0{,}5$ В по данным полного Run, а $R_0 = 1/G_0$ рассчитывалось как её обратная величина. Величина $R_{eff} = |V/I|$ при ±4 В представляет собой только эффективное

сопротивление данного временного соединения и не является удельным электрическим сопротивлением материала.

$$K_{as} = I(+4\,В) / |I(-4\,В)| \quad R_0 = (dI/dV)^{-1},\ |V| \le 0,5\,В$$

Обсуждение и результаты исследования. В образце B2 с естественным оксидом вольт-амперная характеристика демонстрирует заметную нелинейность, однако модули токов при ±4 В имеют близкие значения: −16,450 мА при −4 В и +14,451 мА при +4 В. Значение K_as = 0,879, что на 12,1 % ниже значения K_as = 1, соответствующего идеальной симметрии. Несмотря на относительно высокий наклон в области низких напряжений, зависимость тока от напряжения не может быть полностью описана одной омической величиной сопротивления.

В образце B4 после обработки HF полярная форма кривой резко изменилась. Ток при отрицательной поляризации снизился до −5,597 мА, тогда как при положительной поляризации увеличился до +19,179 мА. Таким образом, по сравнению с исходным образцом |I(−4 В)| уменьшилось на 66,0 %, а I(+4 В) увеличилось на 32,7 %. Противоположно направленное влияние HF-обработки при двух полярностях исключает однопараметричное объяснение в виде «оксид удалён, поэтому общий ток увеличился».

Таблица 2. Диагностические параметры BAX для состояний с естественным оксидом и после обработки HF

Состояние	I(−4 V), mA	I(+4 V), mA	K_as	R_0, kΩ	R_eff(−/+), kΩ
B2 — естественный SiO_x	−16.450	+14.451	0.879	0.96	0.243 / 0.277
B4 — после обработки HF	−5.597	+19.179	3.426	4.69	0.715 / 0.209

B2 и B4 представляют собой разные образцы; приведённые значения используются для репрезентативного межгруппового сравнения.

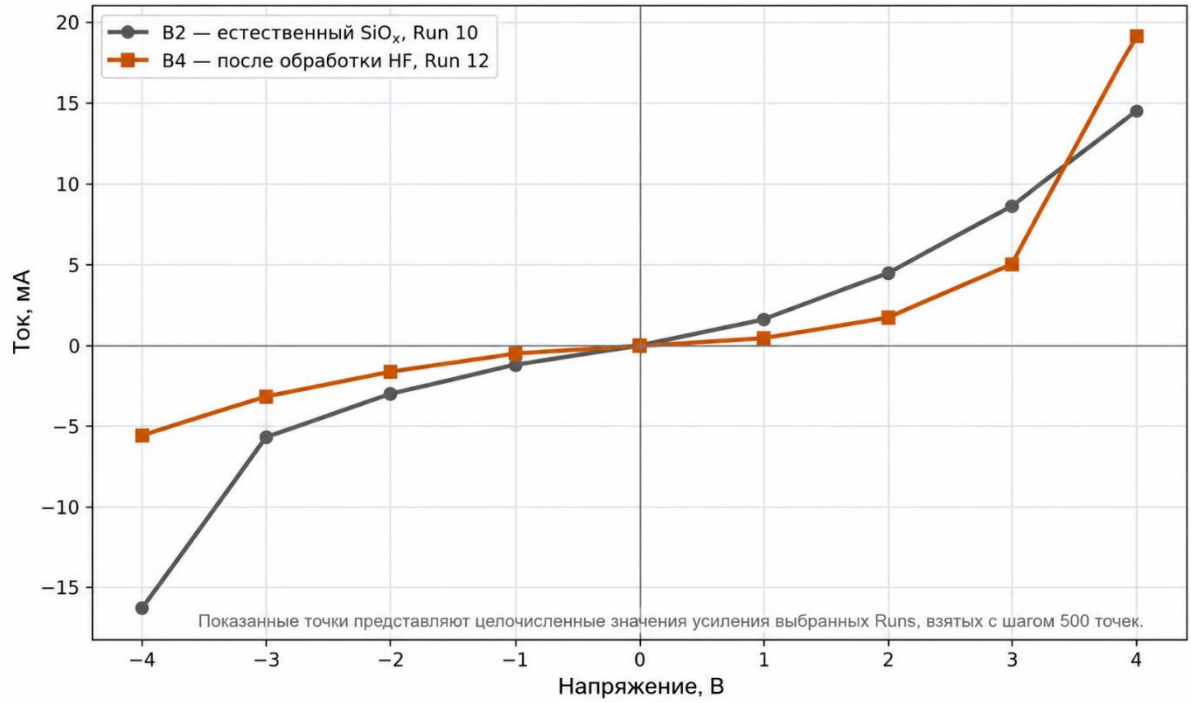


Рисунок 2. Диагностические точки BAX образцов B2 с естественным оксидом и B4 после обработки HF

Точки получены из полных 500-точечных Run путём выбора измерений, наиболее близких к значениям V = −4, −3, …, +4\В.

После обработки HF значение K_as увеличилось с 0,879 до 3,426, то есть в 3,90 раза. Одновременно R_0 возросло с 0,96 до 4,69 кОм, увеличившись примерно в 4,9 раза. Однако ток при +4 В для образца B4 оказался выше, чем для B2. На первый взгляд такой результат выглядит противоречивым, однако он указывает на то, что в режимах низких и высоких электрических полей не доминирует единая модель переноса заряда. В области низких полей контактный или межфазный

барьер может сильнее ограничивать ток, тогда как при высокой положительной поляризации возможно усиление инжекции носителей заряда.

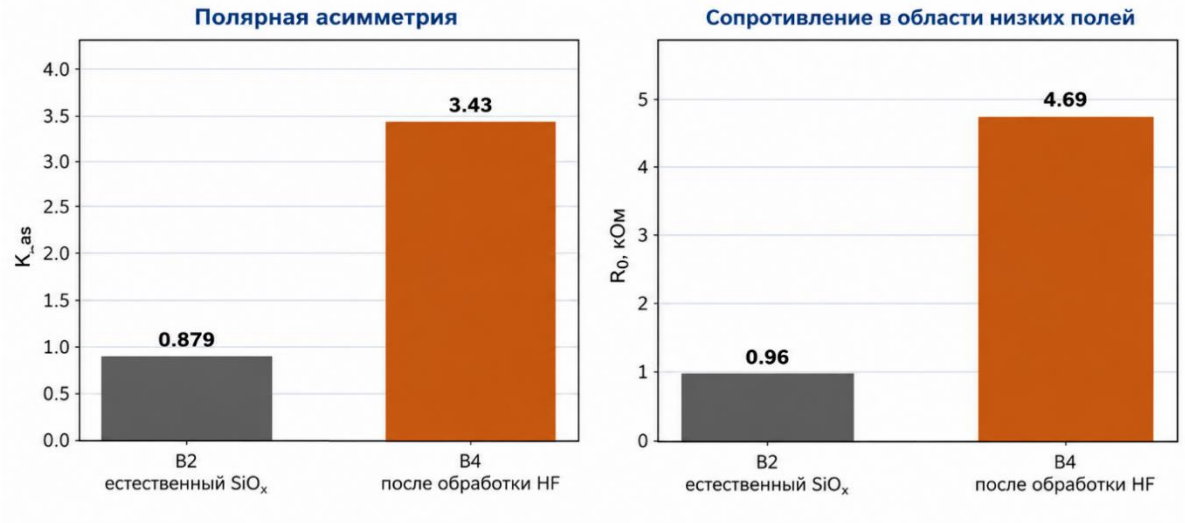


Рисунок 3. Изменение полярной асимметрии K_as и низкополевого дифференциального сопротивления R_0 после обработки HF

После растворения естественного SiO_2 под действием HF изменяются диэлектрический промежуточный слой и поверхностный диполь между металлом/зондом и кремнием. В литературе показано, что удаление поверхностного оксида после обработки на основе HF и приближение поверхности к состоянию, терминированному связями Si–H, подтверждаются методами XPS, AES и инфракрасной спектроскопии [3, 4]. На поверхности Si(001)/(100) состав раствора и концентрация OH^- также могут влиять на атомную морфологию поверхности [6]. Поэтому электрический отклик после обработки HF определяется не только толщиной оксида, но и химическим завершением поверхности, её микроморфологией, повторной адсорбцией и условиями формирования временного контакта. Уменьшение отрицательного тока и увеличение положительного тока в образце B4 свидетельствуют об изменении отклика потенциального барьера на поляризацию. При положительной поляризации инжекция носителей заряда может быстро активироваться под действием электрического поля; при отрицательной поляризации контакт или поверхностные состояния, напротив, могут сильнее ограничивать ток. Однако одних имеющихся данных ВАХ недостаточно для однозначного разграничения таких механизмов, как термоэлектронная эмиссия, туннелирование, эмиссия Шоттки или процесс Пула–Френкеля. Для этого необходимы стандартизированная площадь металлического контакта, зависимости log(I)–V, log(I/V²)–1/V, измерения в зависимости от температуры и определение диэлектрических параметров. Последующая промывка DI-водой после обработки HF также не является нейтральной стадией. Takahagi и соавторы показали, что количество Si–F на поверхности кремния, обработанного HF, зависит от концентрации HF, а при промывке водой многие связи Si–F быстро гидролизуются с образованием групп Si–OH [5]. Поскольку в настоящем эксперименте концентрация HF и продолжительность промывки не были зафиксированы, поверхность не может быть однозначно охарактеризована как исключительно H-терминированная. С научной точки зрения более корректно описывать её как «поверхность с уменьшенным содержанием оксида и изменённым химическим завершением». Величина R_0 характеризует локальный наклон ВАХ в диапазоне $|V| \leq 0{,}5$ В. Увеличение R_0 после обработки HF указывает на снижение малосигнальной проводимости вблизи нулевого напряжения. Однако увеличение тока при +4 В свидетельствует о том, что электрическое поле существенно изменяет потенциальный профиль и может активировать прохождение носителей заряда через барьер. Следовательно, для ВАХ образца B4 модель I = V/R с постоянным сопротивлением теряет физическую содержательность. Достижение полярной асимметрией K_as значения 3,426 может быть связано с неэквивалентностью временного верхнего и тыльного контактов, чувствительностью открытой поверхности к давлению зонда и локальной площади контакта либо с тем, что поверхностные состояния сильнее управляют инжекцией в одном из направлений. Эти факторы не обязательно являются взаимоисключающими. Поэтому полученный результат следует рассматривать не как окончательное доказательство конкретного механизма, а как сильный диагностический сигнал, указывающий на необходимость последующего стандартизированного эксперимента.

При интерпретации результатов строго учитывались четыре ограничения. Во-первых, B2 и B4 представляют собой не последовательные измерения «до–после» одного и того же физического образца, а различные репрезентативные образцы, изготовленные из исходного материала одного типа. Во-вторых, для каждого состояния на данном этапе был проанализирован только один выбранный Run; стандартное отклонение и доверительный интервал не рассчитывались. В-третьих, площадь и давление временного зондового контакта не были стандартизированы, а окончательные Ni/Ni PVD-контакты отсутствовали. В-четвёртых, концентрация HF, условия сушки и время от завершения HF-обработки до проведения измерения не были полностью зафиксированы. В связи с указанными ограничениями уменьшение на 66,0 %, увеличение на 32,7 % и изменение K_as в 3,90 раза являются характеристиками именно выбранных Run и на данном этапе не могут рассматриваться как средние параметры всей технологической группы. Вместе с тем противоположные направления изменения тока при двух полярностях и многократное увеличение R_0 представляют достаточно однозначное предварительное свидетельство того, что после обработки HF состояние поверхности/контакта существенно изменило характер электрического отклика. Для более точного выделения физического содержания полученных результатов целесообразно анализировать не только абсолютное значение тока, но и баланс между двумя полярностями. С этой целью был введён коэффициент нормированной полярной селективности

$$\mathbf{Sp} = [\mathbf{I}(+\mathbf{4\ B}) - |\mathbf{I}(-\mathbf{4\ B})|] / [\mathbf{I}(+\mathbf{4\ B}) + |\mathbf{I}(-\mathbf{4\ B})|].$$

Этот безразмерный показатель изменяется от −1 до +1: S_p = 0 соответствует полярной симметрии модулей тока, $S_p > 0$ указывает на преобладание тока при положительной поляризации, а $S_p < 0$ — на преобладание тока при отрицательной поляризации. Данный коэффициент содержит ту же информацию, что и K_as, но в другом масштабе; при этом нормирование на сумму двух токов позволяет компактно и интуитивно характеризовать различия между состояниями.

Расчёт показывает, что для B2

$$\mathbf{Sp} = (\mathbf{14,451} - \mathbf{16,450}) / (\mathbf{14,451} + \mathbf{16,450}) = -\mathbf{0,0647},$$

а для B4

$$\mathbf{Sp} = (\mathbf{19,179} - \mathbf{5,597}) / (\mathbf{19,179} + \mathbf{5,597}) = \mathbf{0,5482}.$$

Таким образом, если для поверхности с естественным оксидом полярный дисбаланс является небольшим и смещён в сторону отрицательной поляризации, то после обработки HF формируется выраженное преобладание положительной полярности. Изменение знака S_p показывает, что различие после обработки HF не сводится к простому изменению масштаба тока. Если бы обработка изменяла только общее последовательное сопротивление образца, ожидалось бы изменение токов в обоих направлениях в одном направлении и при близком соотношении. Однако в эксперименте |I(−4 В)| уменьшилось до отношения 0,340, тогда как I(+4 В) увеличилось до отношения 1,328.

Заключение.

1. В образце B2 с естественным оксидом токи при −4 и +4 В составили соответственно −16,450 и +14,451 мА; при этом были зарегистрированы значения K_as = 0,879 и R_0 = 0,96 кОм.

2. В образце B4, подвергнутом обработке HF в течение 2 мин с последующей промывкой DI-водой, ток при −4 В составил −5,597 мА, а при +4 В — +19,179 мА; значение K_as увеличилось до 3,426, а R_0 — до 4,69 кОм.

3. Обработка HF привела к уменьшению |I(−4 В)| на 66,0 % и увеличению I(+4 В) на 32,7 %. Следовательно, основным эффектом является не однонаправленное изменение общей проводимости, а усиление полярно-селективной инжекции.

4. Одновременное увеличение R_0 примерно в 4,9 раза в области низких полей и увеличение тока при высоком положительном поле показывают, что ВАХ не может быть адекватно описана единственным омическим сопротивлением.

5. HF, изменяя поверхностный оксид и химическое завершение поверхности, мог изменить энергетические характеристики контакта и поле-зависимую инжекцию носителей заряда; конкретный механизм переноса не устанавливался без дополнительных измерений.

6. Поскольку результаты получены на различных репрезентативных образцах с использованием временных контактов, они имеют предварительный характер. После подтверждения с использованием стандартизированных Ni-контактов и повторных статистических измерений полученные результаты могут быть расширены до полноценного экспериментального раздела журнальной статьи.

Вклад авторов, конфликт интересов и финансирование. Вклад авторов: все авторы внесли равный вклад в разработку концепции исследования, анализ данных и подготовку текста статьи. Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов. Финансирование: исследование выполнено без внешней финансовой поддержки.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Bachman M. Методы очистки кремниевых пластин. INRF Application Note, University of California, Irvine, 2002.

2. Kern W., Puotinen D. A. Растворы на основе перекиси водорода для очистки, используемые в технологии кремниевых полупроводников. RCA Review, 1970, 31(2), 187–206.

3. Fenner D. B., Biegelsen D. K., Bringans R. D. Пассивация поверхности кремния посредством водородной терминации. // Journal of Applied Physics, 1989, 66, 419–424. https://doi.org/10.1063/1.343839.

4. Higashi G. S., Chabal Y. J., Trucks G. W., Raghavachari K. Идеальная водородная терминация поверхности Si(111). // Applied Physics Letters, 1990, 56, 656–658. https://doi.org/10.1063/1.102728.

5. Takahagi T., Ishitani A., Kuroda H., Nagasawa Y. Фторсодержащие частицы на поверхности монокристаллического кремния, обработанного фтористоводородной кислотой. // Journal of Applied Physics, 1991, 69, 803–807. https://doi.org/10.1063/1.347367.

6. Morita Y., Tokumoto H. Атомарное выравнивание и водородная терминация поверхности Si(001) посредством влажно-химической обработки. // Journal of Vacuum Science & Technology A, 1996, 14, 854–858. https://doi.org/10.1116/1.580403.

UO‘K 546.26.043:535

“SPRAY COATING” USULI YORDAMIDA C_{60} FULLERENI YUPQA QATLAMINI HOSIL QILISH VA UNING OPTIK XOSSALARI TADQIQI

Maxmanov Urol Kudratovich,
O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi,
Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti “Nanomateriallar fotonikasi va spektroskopiyasi” laboratoriyasi mudiri,
fizika-matematika fanlari doktori, professor
urolmakh@gmail.com
https://orcid.org/0000-0002-7185-2812
Musurmonov Qayum Nemat o‘g‘li,
O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi
Ion-plazma va lazer texnologiyalari
instituti kichik ilmiy xodimi
musurmonovqayum@gmail.com
Aslanov Bobirjon Ashur o‘g‘li
O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi,
Ion-plazma va lazer texnologiyalari
instituti tayanch doktoranti
aslonovbobir@mail.ru
Nematov Vohid Farmonqul o‘g‘li
Guliston davlat universiteti o‘qituvchisi
nematovabduvohid@gmail.com

Annotatsiya. *Ushbu maqolada fulleren C_{60} asosidagi yupqa qatlamlar spray coating usuli yordamida tayyorlandi va ularning optik hamda strukturaviy xossalari o‘rganildi. C_{60} kukuni ksilolda eritilib, hosil qilingan eritma shisha taglikka spray coating usuli bilan qoplandi. Olingan qatlamning yutilish spektrlari UV–Vis spektroskopiyasi yordamida tadqiq qilindi. Natijalar yutilish maksimumi 340 nm atrofida kuzatilganini ko‘rsatdi. Yutilish spektri asosida yutilish koeffitsiyenti hisoblandi hamda Tauc usuli yordamida qatlamning optik taqiqlangan soha kengligi 2.4 eV ga teng ekanligi aniqlandi.*

Kalit so‘zlar*: fulleren C_{60}, spray coating, yupqa qatlam, yutilish spektri, Raman spektroskopiyasi, optik taqiqlangan soha.*

PREPARATION OF C_{60} FULLERENE THIN FILMS BY SPRAY COATING AND INVESTIGATION OF THEIR OPTICAL PROPERTIES

Abstract*. In this study, C_{60} fullerene-based thin films were prepared using the spray coating technique, and their optical and structural properties were investigated. C_{60} powder was dissolved in xylene, and the resulting solution was deposited onto a glass substrate by the spray coating method. The absorption spectra of the prepared thin films were measured using UV–Vis spectroscopy. The results showed an absorption maximum at approximately 340 nm. Based on the absorption spectra, the absorption coefficient was calculated, and the optical band gap of the thin film was determined to be 2.4 eV using the Tauc method..*

Keywords*: C_{60} fullerene, spray coating, thin film, absorption spectrum, Raman spectroscopy, optical band gap.*

ПОЛУЧЕНИЕ ТОНКИХ ПЛЁНОК ФУЛЛЕРЕНА C_{60} МЕТОДОМ РАСПЫЛИТЕЛЬНОГО НАНЕСЕНИЯ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

Аннотация. *В данной статье тонкие плёнки на основе фуллерена C_{60} были получены методом spray coating, а также исследованы их оптические и структурные свойства. Порошок C_{60} был растворён в ксилоле, после чего полученный раствор был нанесён на стеклянную подложку методом spray coating. Спектры поглощения полученных плёнок были исследованы с помощью УФ–видимой (UV–Vis) спектроскопии. Результаты показали наличие максимума поглощения в области около 340 нм. На основе спектров поглощения был рассчитан коэффициент поглощения, а методом Таука (Tauc) установлено, что ширина запрещённой зоны исследуемой плёнки составляет 2,4 эВ.*

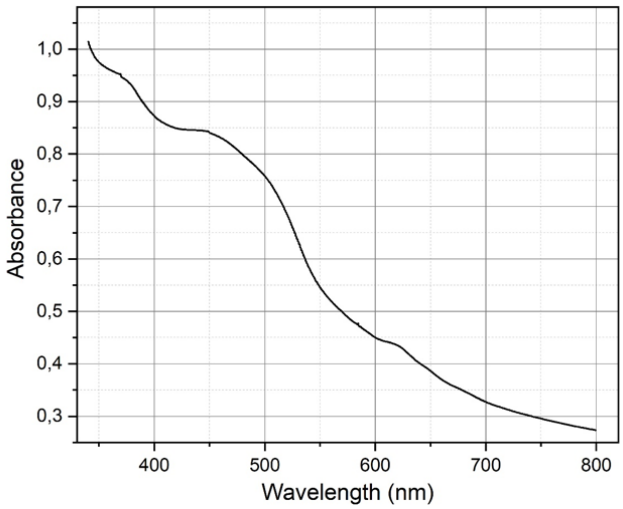
Ключевые слова: *фуллерен C_{60}, spray coating, тонкая плёнка, спектр поглощения, спектроскопия комбинационного рассеяния (Раман-спектроскопия), ширина запрещённой зоны.*

Kirish. Fulleren molekulalari o‘zining noyob xususiyatlari bilan uzoq yillardan beri ilmiy jamoatchilikning e’tibor markazida bo‘lib kelmoqda. Aynan shu xususiyatlari bilan bu molekulalar elektronika, yuqori o‘zkazuvchanlikka ega materiallar, tibbiyot, farmatsevtika va shu kabi bir qancha zamonaviy sohalarda keng qo‘llaniladi [1-5]. Kroto va uning jamoasi tomonidan kashf [6] qilingan fulleren C_{60} molekulalari eng keng tarqalgan va olimlar tomonidan eng ko‘p o‘rganilgan fulleren hisoblanadi. Ilmiy tadqiqot natijalarining ko‘rsatishicha, qattiq holatdagi C_{60} supero‘tkazuvchanlik, fotopolimerlanish va nochiziqli optik xossalar kabi ko‘plab noodatiy xususiyatlarga ega [7-8]. Modifikatsiyalangan fullerenlarning optik spektrlarini shakllantirishda elektron–fonon o‘zaro ta’siri asosiy omillardan biri hisoblanadi. C_{60} fullerenlarida spektrdagi keskin o‘zgarishlar molekulalarning orientatsion tartiblanishi hamda bosim ta'sirida yuz beradigan strukturaviy o‘zgarishlar bilan bog‘liq. Raman spektroskopiyasi ushbu jarayonlarni vibratsion modalar orqali aniqlash va tahlil qilish imkonini beradi [9-10]. Qattiq holatdagi C_{60} yupqa qatlamlari, an’anaviy organik molekulalarga nisbatan yuqori barqarorlikka ega ekanligi va nisbatan kuchli molekulalararo o‘zaro ta’siri tufayli molekulayar qatlamlar fizikasi hamda texnologiyasi uchun keng imkoniyatlar ochib beradi. Shu boisdan ko‘plab olimlar molekulayar C_{60} ning optik xossalarini batafsil o‘rganib chiqqanlar [11-12].

Fulleren molekulalarini taglik ustida o‘stirishning bir qancha usullari ishlab chiqilgan bo‘lishiga qaramasdan “spray coating” usuli yordamida tayyorlangan C_{60} qatlamlarining optik va strukturaviy xossalari hali ham tadqiqotchilar e’tiborini tortib kelmoqda. Shu sababdan, ushbu ishda biz spray coating usuli bilan hosil qilingan C_{60} yupqa qatlamlarning optik va strukturaviy xossalarini o‘rganib chiqdik. Buning uchun UV-Vis yutulish va Raman spektroskopiyasi usullaridan foydalanib, qatlamning yutilish xususiyatlari, optik taqiqlangan soha kengligi va Raman spektrini tahlil qildik.

Metod va qurilmalar. Tadqiqot obyekti sifatida 99.9% tozalikka ega fulleren C_{60} kukunidan (Sigma Aldrich, AQSH), erituvchi sifatida esa ksiloldan (Sigma Aldrich, AQSH) foydalanildi. Eritma 2 mg/ml konsentratsiyada tayyorlandi va maxsus magnitli laboratoriya aralashtirgichi (MS-H280, Xitoy) yordamida 2 soat davomida, xona haroratida aralashtirib turildi. Tayyor bo‘lgan eritma havo kompressoriga (2 bar) ulangan maxsus nebulizator (Meinhard nebulizer TR-30-K1, Xitoy) yordamida shisha taglik yuzasiga sepildi. Spray coating parametrlari va eritma konsentratsiyasiga asoslangan hisob-kitoblarga ko’ra, hosil qilingan C_{60} yupqa qatlam qalinligi taxminan 35-40 nm deb baholandi. Sepish jarayoni bir necha bosqichli bo‘lib, barcha bosqichlarda taglik harorati 70◦C holatda ushlab turildi. Qatlamning yutilish spektri Shimadzu UV-2700 (Yaponiya) spektrofotometri yordamida o‘lchandi. Raman spektrlari esa In Via Raman spektrometri (Renishav, UK) yordamida o‘lchandi.

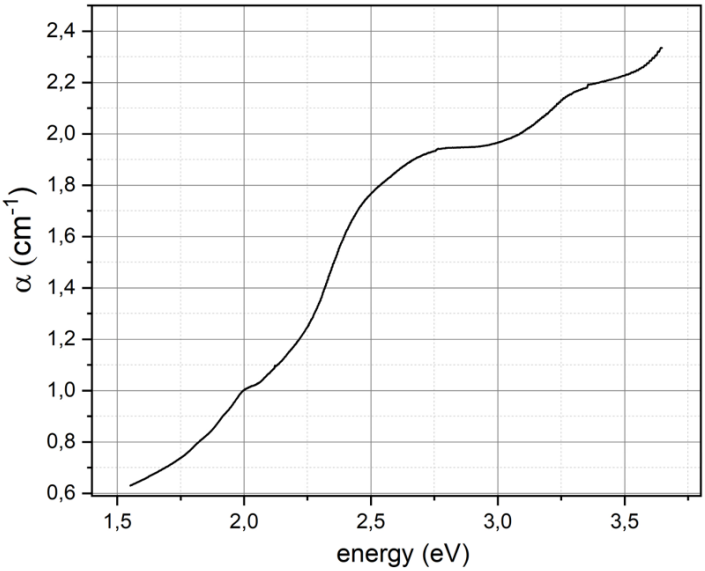
Natijalar va ularning muhokamasi. 1-rasmda spray coating usuli yordamida shisha taglik ustida o‘stirilgan C_{60} qatlamining UV-Vis yutilish spektri (300-800 nm) ko‘rsatilgan. Spektrdan ko‘rinadiki, qatlam UV sohasida yuqori yutilish qiymatiga ega va bu qiymat to‘lqin uzunligi ortishi bilan asta sekin kamayib boradi. Spektrning 350-450 nm oralig‘ida kuchli yutilish kuzatiladi, bu holat C_{60} molekulasiga xos bo‘lgan π-π^* o‘tishlari bilan bog‘liqdir. Bu soha fullerenning elektron tuzilmasi va yuqori simmetriyali molekulyar orbitalar orasidagi o‘tishlarni aks ettiradi.



1-rasm. Spray coating usuli yordamida shisha taglikda o‘stirilgan C_{60} qatlamining UV-Vis yutulish spektri

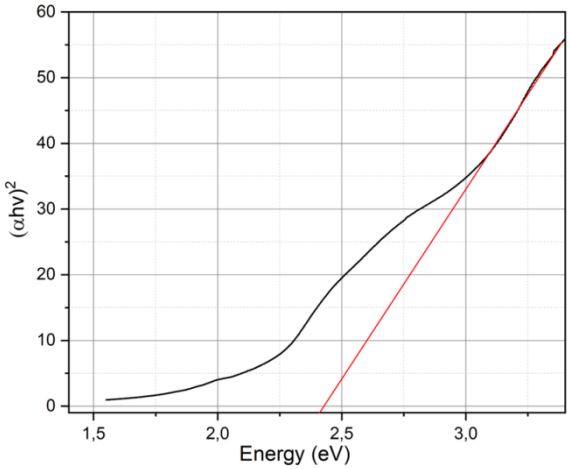
Ko‘zga ko‘rinadigan sohada, ya’ni 500-650 nm oralig‘ida yutilish qiymatining keskin kamayishini ko‘rishimiz mumkin. Bu holat materialda optik yutilish chegarasining mavjudligini va yarim o‘tkazgich xossasiga ega ekanligini ko‘rsatatdi. 700-800 nm oralig‘ida esa yutilish qiymati past bo‘lsada, nolga teng emas. Bu holat qatlam ichida tartibsizlik, lokal holatlar yoki deffektlar mavjdligi bilan bog‘liq bo‘lishi mumkin. Umuman olganda, olingan UV-Vis spektri spray coating usuli yordamida hosil qilingan C_{60} qatlamining optik xossalari adabiyotlarda keltirilgan natijalar [13] bilan mos kelishini va materialning yarim o‘tkazgich tabiatga ega ekanligini tasdiqlaydi.

Yutilish koeffitsiyentining (α) foton energiyasiga bog‘liqlik grafigi shuni ko‘rsatdiki, energiya ortib borishi bilan materialning yorug‘likni yutish qobilyati ham ortib boradi (2-rasm). Foton energiyasi 2.0-2.5 eV oralig‘ida bo‘lganda yutilish koeffitsiyentining qiymati keskin ortishi kuzatildi. Bu soha elektronlarning valent sohadan o‘tkazuvchinlik sohasiga o‘tishi bilan bog‘liq bo‘lib, materialda kuchli optik yutilish boshlanishini bildiradi. Aynan shu energiya oralig‘i Tauk tahlili yordamida aniqlangan optik taqiqlangan soha kengligi qiymati (2.4 eV) bilan ham mos keladi (3-rasm).



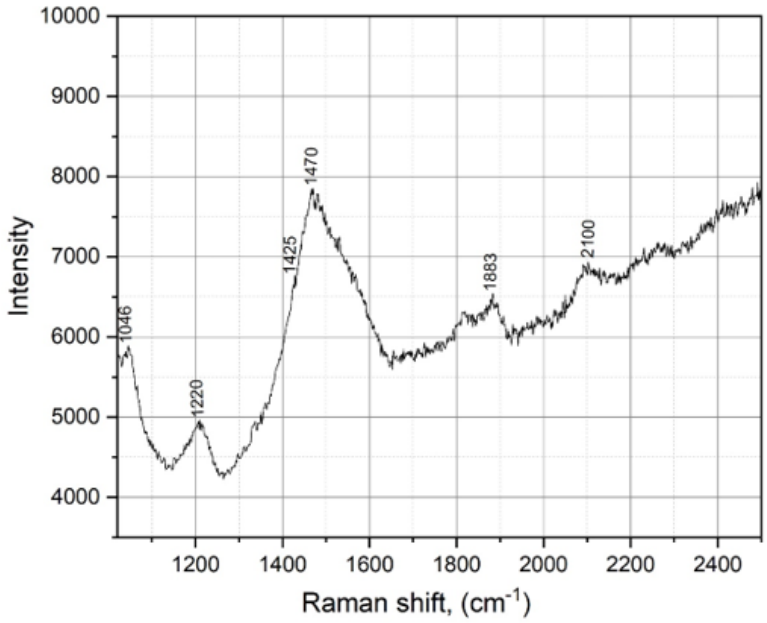
2-rasm. C_{60} qatlamining foton energiyasiga nisbatan optik yutilish koeffitsiyenti

3.0 eV dan energiyalarda α yana ortib borishi yuqori energiyali o‘tishlar mavjud ekanligini ko‘rsatadi. Bu holat C_{60} molekulalaridagi π-π* elektron o‘tishlari hamda molekulyar orbitallar orasidagi qo‘shimcha optik o‘tishlar bilan izohlanishi mumkin. Fulleren qatlamning eng muhim optik xossalaridan biri bo‘lgan taqiqlangan soha kengligini (Eg) aniqlash uchun $(\alpha h\nu)2$ ning foton energiyasiga (hv) bog‘liqlik grafigidan foydalanildi (3-rasm). Grafikdan ko‘rinadiki, 2.3 eV dan past energiyalarda $(\alpha h\nu)$ 2 ning kichik qiymatlari materialning ushbu sohada yorug‘likni zaif yutishini ko‘rsatadi. 2.3–2.6 eV oralig‘ida keskin o‘sish boshlanadi, bu valent soha va o‘tkazuvchanlik sohasi orasidagi elektron o‘tishlarning faollashganini bildiradi. Yuqori energiyalarda esa $(\alpha h\nu)$ 2 ning ortishi foton energiyasi oshishi bilan optik yutilish intensivlashganini ko‘rsatadi.



3-rasm. C_{60} yupqa qatlamining optik taqiqlangan soha kengligini aniqlash uchun Tauk ploti

Spray coating usulida o‘stirilgan yupqa fulleren qatlamning Raman spektri tahlil qilinganda fulleren C_{60} molekulasiga xos bo‘lgan asosiy tebranish modalari mavjud ekanligi aniqlandi. Masalan, 1470 sm-1 dagi yuqori cho‘qqi C_{60} ning simmetrik Ag(2) modasiga to‘g‘ri keladi va shisha taglik sirtida fulleren qatlami muvaffaqiyatli shakllanganligini tasdiqlaydi. Mazkur cho‘qqi fulleren molekulasidagi beshburchaklarning C=C qo‘sh bog‘larining cho‘zilishini ifodalaydi va toza, mukammal C60 strukturalarida bu cho‘qqi 1469 sm-1 atrofida ko‘rinadi. Fulleren molekulalari uchun 1046 sm-1 va 1220 sm-1 sohaarida Hg simmetriyasiga ega bo‘lgan deformatsion tebranishlar kuzatiladi. Grafikda keltirilgan 1425 sm-1 cho‘qqi fullerenning Hg(7) modasi bo‘lib, fulleren strukturasi uchun xos bo‘lgan piklardan hisoblanadi. Biroq, 1425 sm-1 va 1470 sm-1 orasidagi sohaning kengayganligi qatlamning amorfsimon tuzilishga ega ekanligini yoki purkash jarayonida destruktsiya kuzatilgan bo‘lishi mumkinligini ko‘rsatadi. Grafikda kuzatilgan 1883 sm-1 va 2100 sm-1 kabi yuqori tartibli piklar C_{60} ning odatiy modalariga tegishli bo‘lmagan piklar hisoblanadi. Bu kabi yuqori tartibli piklarning paydo bo‘lishi ikkinchi tartibli Raman o‘tishlar, fluoresans yoki fon artefaktlari, atmosferadagi gazlar va qatlamda organik qoldiqlar yoki erituvchi qoldiqlari bor bo‘lgan holatlarda kuzatilishi mumkin.



4-rasm. Spray coating usulida shisha taglik ustida o‘stirilgan fulleren qatlamining Raman spektri

Xulosa. Ushbu ishda spray coating usuli yordamida C_{60} fulleren asosidagi yupqa qatlam muvaffaqiyatli hosil qilindi va uning optik xossalari o‘rganildi. UV–Vis spektroskopiya natijalari qatlamning ko‘rinadigan va yaqin ultrabinafsha sohalarda sezilarli yutilish xususiyatiga ega ekanligini ko‘rsatdi. Yutilish koeffitsiyenti va Tauc usuli asosida optik taqiqlangan zona kengligi aniqlanib, uning qiymati taxminan 2,4 eV ga teng ekanligi topildi. Raman spektroskopiyasi natijasida 1470 sm^{-1} da kuzatilgan xarakterli Ag(2) vibratsion moda C_{60} molekulyar strukturasining saqlanib qolganligini va qatlamning muvaffaqiyatli shakllanganligini tasdiqladi. Olingan natijalar spray coating usulining sifatli C_{60} yupqa qatlamlarini hosil qilish uchun samarali texnologiya ekanligini ko‘rsatadi hamda bunday qatlamlarning optoelektronika va quyosh energiyasi qurilmalarida qo‘llanish istiqbollari mavjudligini tasdiqlaydi.

ADABIYOTLAR:

1. Wang, Xiaolin; Li, Yuxin; Wang, Yifan; Zhang, Yujie; Liu, Hongwei; Chen, Guangsheng /Functionalized Fullerenes and Their Applications in Electrochemistry, Solar Cells, and Nanoelectronics/ Nanomaterials, 2023, 13(3), 495.

2. Castro, Ernesto; Hernandez Garcia, Alfredo; Zavala, Guillermo; Echegoyen, Luis/ Fullerenes in Biology and Medicine/ Journal of Materials Chemistry B, 2017, 5(32), 6523–6535.

3. Dresselhaus, M. S.; Dresselhaus, G.; Eklund, P. C./ Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes/ Academic Press, San Diego, 1996.

4. Makhmanov, U. K., Esanov, S. A., Aslonov, B. A., Bekmurodov, Z., Musurmonov, K. N., Sidigaliyev, D., & Shukurov, A. X. (2023). Features of C60 fullerene in the toluene-hexane solvent system. «Узбекский физический журнал», 25(2).

5. Makhmanov, U. K., Kokhkharov, A. M., Bakhramov, S. A., & Erts, D. (2019). Thin organic films based on fractal nanosized aggregates of fullerene C60 on the substrate surface.

6. Kroto, H. W.; Heath, J. R.; O'Brien, S. C.; Curl, R. F.; Smalley, R. E. /C60: Buckminsterfullerene/ Nature, 1985, 318(6042), 162–163.

7. Hebard, A. F.; Rosseinsky, M. J.; Haddon, R. C.; Murphy, D. W.; Glarum, S. H.; Palstra, T. T. M.; Ramirez, A. P.; Kortan, A. R. /Superconductivity at 18 K in Potassium-Doped C60 / Nature, 1991, 350(6319), 600–601.

8. Wolf, Mathias; Toyouchi, Shuichi; Walke, Peter; Umemoto, Kazuki; Masuhara, Akito; Fukumura, Hiroshi; Takano, Yuta; Yamada, Michio; Hirai, Kenji; Fron, Eduard; Uji-i, Hiroshi. / Li@C60 Thin Films: Characterization and Nonlinear Optical Properties / RSC Advances, 2022, 12, 389–394.

9. Bethune, D. S.; Meijer, G.; Tang, W. C.; Rosen, H. J.; Golden, W. G.; Seki, H.; Brown, C. A.; de Vries, M. S. / Vibrational Raman and Infrared Spectra of Solid C60 and C70 / Chemical Physics Letters, 1991, 179(1–2), 181–186.

10.Jeon, S. J., Kim, D., Kim, S. K., & Jeon, I. C. (1992). High-pressure Raman study of fullerite C60. Journal of Raman spectroscopy, 23(5), 311-313.

11.Skumanich A. Optical Spectra of Fullerenes: C60 a new amorphous semiconductor? //MRS Online Proceedings Library (OPL). – 1992. – T. 270. – C. 299.

12.Qin, Y., Xu, J., Liang, Z., Teng, H., Zhan, D., & Xu, H. (2025). Raman spectroscopy of fullerenes: from C60 to functionalized derivatives. Molecules, 30(3), 738.

13.Faiman, D., Goren, S., Katz, E. A., Koltun, M., Melnik, N., Shames, A., & Shtutina, S. (1997). Structure and optical properties of C60 thin films. Thin solid films, 295(1-2), 283-286.

UO‘K 53

TiO_2 ASOSIDAGI FOTOANODLI QUYOSH BATAREYALARI MORFOLOGIYASINI ZAMONAVIY KOMYUTER TEXNOLOGIYALARI YORDAMIDA O‘RGANISH

Turayev Akmal Atayevich,
Buxoro davlat universiteti,
“Fizika” kafedrasi professori, f.-m.f.f.d. (PhD)
a.a.turaev@buxdu.uz
Ergashov Abdurasul Qodirjanovich,
Namangan davlat texnika universiteti
Elektrotexnika va elektronika kafedrasi dotsenti, f-m.f. (PhD)
Sharipbayev Sobitxon Sobir o‘g‘li,
Namangan davlat texnika universiteti
Energetika muhandisligi kafedrasi o‘qituvchisi, f-m.f.d. (PhD)
Sharipbayev1999@mail.ru
Tursunov Rahimjon Ibodullo o‘g‘li,
Namangan viloyati Kosonsoy tumani 28-maktab o‘qituvchisi

Annotatsiya. *Ushbu tadqiqotda bo‘yoq bilan sezgirlashtirilgan quyosh elementlari (DSSC) sifatini baholashda sanoat kompyuter tomografiyasidan (SKT) foydalanish imkoniyatlari o‘rganildi. Tadqiqot natijasida SKT yordamida DSSC fotoanodining ichki tuzilishini buzilmasdan tekshirish, strukturaviy notekisliklar, qatlamlararo mikroyoriqlar, g‘ovaklikdagi farqlar va cho‘kindi hosilalarini aniqlash imkoniyati aniqlandi. Turli tomografik tizimlarning diagnostik imkoniyatlarini taqqoslash natijasida yuqori aniqlikdagi tasvirlash tizimlari fotoanod qatlamining bir jinsliligi va ichki nuqsonlarini baholashda samaraliroq ekanligi ko‘rsatildi. Aniqlangan strukturaviy nuqsonlarning fotoelektrik xususiyatlarga ta’siri tahlil qilinib, ularning DSSC elementlarining fotoelektrik samaradorligi va ishonchliligini pasaytirishi mumkinligi asoslandi. Olingan natijalar asosida fotoanodlarni tayyorlash texnologiyasini nazorat qilish, strukturaviy nuqsonlarni erta aniqlash va DSSC elementlarining ishlash samaradorligini oshirish bo‘yicha amaliy tavsiyalar ishlab chiqildi.*

Kalit so‘zlar: *DSSC, sanoat kompyuter tomografiyasi, buzilmas nazorat usuli, nuqsonlar diagnostikasi, strukturaviy tahlil, fotoanod, mikroyoriqlar, g‘ovaklik, fotoelektrik xususiyatlar, energiya samaradorligi.*

ИССЛЕДОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ФОТОАНОДОМ НА ОСНОВЕ TiO_2 С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СОВРЕМЕННЫХ КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Аннотация. *В данном исследовании рассмотрены возможности применения промышленной компьютерной томографии (ПКТ) для оценки качества сенсибилизированных красителем солнечных элементов (DSSC). Установлено, что применение ПКТ позволяет проводить неразрушающий контроль внутренней структуры фотоанода DSSC, выявлять структурные неоднородности, межслойные микротрещины, различия в пористости и образования осадочного характера. Сравнительный анализ диагностических возможностей различных томографических систем показал, что системы визуализации высокого разрешения являются более эффективными для оценки однородности фотоанодного слоя и обнаружения внутренних дефектов. Проанализировано влияние выявленных структурных дефектов на фотоэлектрические свойства и обосновано, что их наличие может приводить к снижению фотоэлектрической эффективности и надёжности DSSC. На основе полученных результатов разработаны практические рекомендации по контролю технологии изготовления фотоанодов, раннему выявлению структурных дефектов и повышению эксплуатационной эффективности DSSC.*

Ключевые слова: *DSSC, промышленная компьютерная томография, неразрушающий контроль, диагностика дефектов, структурный анализ, фотоанод, микротрещины, пористость, фотоэлектрические свойства, энергетическая эффективность.*

STUDY OF THE MORPHOLOGY OF SOLAR CELLS WITH TiO_2-BASED PHOTOANODES USING MODERN COMPUTER TECHNOLOGIES

Abstract. *This study investigates the applicability of industrial computed tomography (ICT) for assessing the quality of dye-sensitized solar cells (DSSCs). The results show that ICT enables non-destructive examination of the internal structure of DSSC photoanodes and allows the detection of structural non-uniformities, interlayer microcracks, variations in porosity, and sediment-like formations. A comparative analysis of the diagnostic capabilities of different tomographic systems demonstrated that high-resolution imaging systems are more effective for evaluating the uniformity of the photoanode layer and detecting internal defects. The influence of the identified structural defects on the photoelectric properties was analyzed, and it was shown that such defects may reduce the photovoltaic efficiency and reliability of DSSC devices. Based on the obtained results, practical recommendations were developed for controlling photoanode fabrication technology, enabling early detection of structural defects, and improving the operational efficiency of DSSCs.*

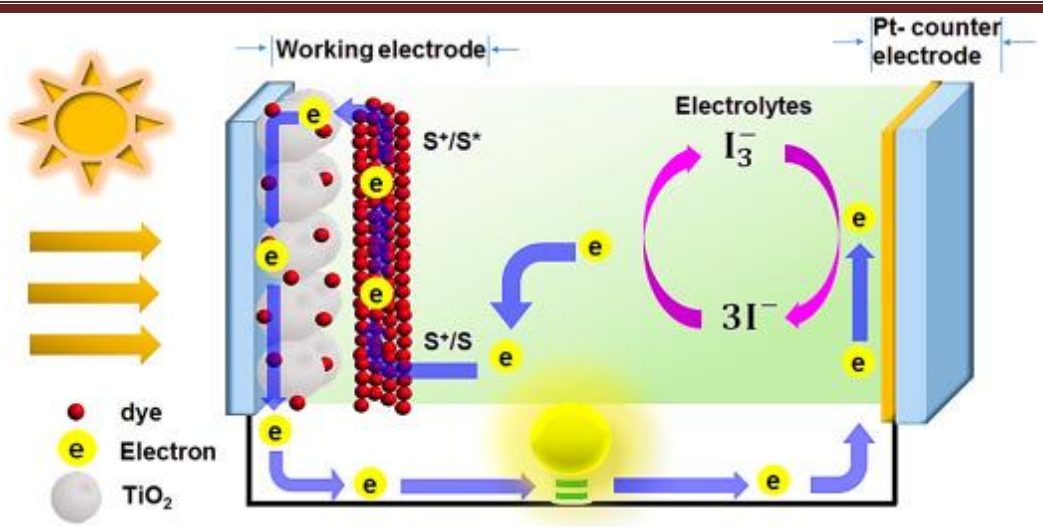
Keywords: *DSSC, industrial computed tomography, non-destructive testing, defect diagnostics, structural analysis, photoanode, microcracks, porosity, photoelectric properties, energy efficiency.*

Kirish. Yenilanishi mumkin bo‘lgan energiya manbalariga bo‘lgan ehtiyojning keskin ortib borayotgan sharoitida bo‘yoq bilan sezgirlashtirilgan quyosh elementlari (DSSC) istiqbolli yo‘nalishlardan biri sifatida ko‘rilmoqda. Ushbu ishda DSSC elementlarining sifatini baholash uslubiyatini ishlab chiqish masalasi yoritiladi. Bu borada kompyuter tomografiyasi (KT) texnologiyasidan foydalanish taklif etilib, u ishlab chiqarilayotgan elementlar sifatini nazorat qilish va nuqsonlarni dastlabki bosqichlaridanoq aniqlash imkonini beradi [1]. Bugungi kunda dunyoda iste’mol qilinayotgan energiyaning asosiy qismi qazilma yoqilg‘ilar — ya’ni issiqlik energiyasi va atom energiyasi hisobiga olinadi. Ammo bu turdagi yoqilg‘ilar miqdorining cheklanganligi, ekologik jihatdan xavfli ekani va seysmik barqarorlikning pastligi ularning asosiy kamchiliklaridan hisoblanadi. Shu sababli zamonaviy talablar insoniyat oldida qayta tiklanuvchi va ekologik toza energiya manbalaridan foydalanish zaruratini qo‘yadi. Bular jumlasiga quyosh va shamol energiyasi kiradi.

Quyosh panellari qayta tiklanuvchi energiya manbalarining istiqbolli turlaridan biri sanaladi. Quyosh elementlari ikki guruhga bo‘linadi: kristallik va yupqa qavatli (tonkoplenka) quyosh elementlari. Bo‘yoq bilan sezgirlashtirilgan quyosh elementi — DSSC, yupqa qavatli quyosh elementlari sinfiga kiradi va o‘zining oddiy tuzilishi hamda past energiya tannarxi sababли quyosh elementlarining yangi avлоди сифатида қаралмоқда. Shu bilan birга, ushbu turdagi elementlar (ilk bor Maykl Grätzel tomonidan ishlab chiqilgan) maksimal 14,3% samaradorlikka ega bo‘lishi va 10 yildan ortiq xizmat qilish muddati bilan ajralib turadi [1, 5].

DSSC quyosh elementlari odatda organik va polimer moddalardan yasalgan yarim o‘tkazgich xususiyatiga ega bo‘lgani sababli, ular orqali olingan elektr energiyasining tannarxi an’anaviy quyosh panellaridan 3–5 baravar arzonroq bo‘ladi. Shu bilan birga, DSSC turidagi quyosh elementlari infraqizil nurlar va tarqoq nurlanish spektrlarida ham samarali ishlashi ilmiy jihatdan o‘rganilgan. Bo‘yoq bilan sezgirlashtirilgan quyosh elementlarining ishlash prinsipi elektrolitda yuz beradigan fotoelektrokimyoviy (oksidlanish-qaytarilish) reaksiyaga hamda yarim o‘tkazgichdagi bo‘yoqda hosil bo‘ladigan erkin zaryad tashuvchilarning harakatiga asoslanadi (1-rasm).

Bo‘yoq bilan sezgirlashtirilgan quyosh elementlarining ishlash prinsipi quyosh nuri ta’sirida fotoqo‘zg‘alish orqali boshlanadi. Quyosh nuri bo‘yoq molekulasi tomonidan yutilganda, u yerda joylashgan elektron valensiya zonasidan chiqib, qo‘zg‘algan holatdagi energiya darajasiga ko‘tariladi. Ushbu bosqich–fotoqo‘zg‘alish (Photoexcitation) – elektronni yuqori energiyali holatga olib chiqadi va bu elektron potensial farq hisobiga TiO_2 yarim o‘tkazgichining o‘tkazuvchanlik zonasiga in’ektsiyalanadi. TiO_2 ichidagi ushbu elektronlar FTO (o‘tkazuvchi shaffof elektrod) orqali tashqi elektr zanjirga o‘tib, tok hosil qiladi. Elektronlarning zanjir bo‘ylab harakatlanishi ular energiyasining samarali ishlatilishiga olib keladi. Zanjirni to‘liq yopish uchun elektronlar katodga yetib kelgach, elektrolitdagi yod molekulalari (I_3^-) bilan birikadi va ularni I^- ionlariga aylantiradi. Bu orada ionlashgan yod molekulalari yana bo‘yoq molekulalariga elektron yetkazib, uni dastlabki holatiga qaytaradi – bu bosqich “regeneratsiya” deb ataladi. Shu tarzda DSSC (bo‘yoq bilan sezgirlashtirilgan quyosh elementi) doimiy ravishda yorug‘likni elektr energiyasiga aylantirib boradi. Bu jarayon yuqori samaradorlikka erishish va fotoelektr tizimlarda barqarorlikni ta’minlash uchun muhim hisoblanadi.



1-rasm. Bo‘yoq bilan sezgirlashtirilgan quyosh elementlarining ishlash prinsipi

Ushbu jarayon takrorlanib boradi va natijada quyosh nuri energiyasi elektr energiyasiga aylantiriladi. Quyosh elementlarini arzon va oddiy texnologiyalar asosida yaratish muhim vazifalardan biri bo‘lib, buning uchun zaryad tashuvchilarning asosiy parametrlarini, fotoelektrik xususiyatlarni va ishlatiladigan materiallarning samaradorlik hamda fotoelektrik tavsiflariga ta’sirini kompleks o‘rganish zarur. Ayniqsa, yuqori sezuvchan bo‘yoqlarga asoslangan quyosh elementlari ushbu yo‘nalishda istiqbolli hisoblanadi [2, 6].

Zamonaviy quyosh elementlari ishlab chiqarish jarayonida nuqsonlarni aniqlash va ularni bartaraf etish muhim o‘rin tutadi, chunki bunday nuqsonlar qurilmaning samaradorligi va xizmat muddatiga sezilarli ta’sir ko‘rsatadi. Nuqsonlar ishlab chiqarishning turli bosqichlarida yuzaga keladi va ular orasida mikroyoriqlar, qatlamlarning notekisligi hamda boshqa struktura anomaliyalari mavjud. Tadqiqotlar, shuningdek, quyosh elementlarida ishlatiladigan materiallarning barqarorligini va samaradorligini oshirishga yo‘naltirilgan. Masalan, olimlar tomonidan ishlab chiqilgan "nuqson passivatorlari" deb ataluvchi molekulyar qo‘shimchalar perovskit asosidagi yarim o‘tkazuvchi qatlamlarning degradatsiyasini sezilarli darajada sekinlashtiradi. Bu esa quyosh elementlarining xizmat muddatini uzaytiradi va umumiy tannarxini kamaytiradi.

Metodologiya. Quyosh elementlarining sifatini tekshirish uchun ishlab chiqilgan yangi metod — adgeziya sinovi va sanoat kompyuter tomografiyasini (SKT) birlashtirgan integrallashgan yondashuv bo‘lib, bu usul elementdagi qatlamlarning ichki tuzilmasi va mustahkamligini kompleks baholash imkonini beradi.

Metodikaning birinchi bosqichida, quyosh elementi qatlamlari orasidagi yopishqoqlik (adgeziya) kuchini baholashga qaratilgan maxsus adgeziya sinovi o‘tkaziladi. Ushbu bosqich ish paytida qatlamlar ajralib ketishiga sabab bo‘lishi mumkin bo‘lgan sust birikma sohalarini aniqlash imkonini beradi. Sinov natijasida qatlamlar orasidagi zaif joylar, ya’ni potensial nuqsonlar aniqlanadi va erta diagnostika imkoniyati yaratiladi.

Keyingi bosqichda sanoat kompyuter tomografiyasi (SKT) qo‘llaniladi. Bu usul yordamida quyosh elementining ichki tuzilmasi yuqori aniqlikdagi — hatto submikron darajasiga qadar — uch o‘lchamli tasvirga aylantiriladi [13]. Tomografik tahlil orqali adgeziya sinovida aniqlanmagan ichki nuqsonlar — masalan, g‘ovaklik, yoriqlar va qatlamlararo notekisliklar — aniq qayd etiladi. SKT orqali olingan vizual ma’lumotlar adgeziya sinovi natijalarini tasdiqlaydi va ularni aniqlashtiradi, shu bilan birga material tuzilmasi va yopishqoqligining sifat va xizmat muddati bilan qanday bog‘liq ekanini ochib beradi.

Adgeziya sinovi va tomografik tahlilni birlashtirish orqali quyosh elementining ichki tuzilmasi va zaif nuqtalari chuqur tahlil qilinadi. Sifat nazoratining ushbu yangi usuli ishlab chiqarish jarayonlarini takomillashtirishga yordam beradigan aniq ma’lumotlarni taqdim etadi, nuqsonlarni erta bosqichda aniqlash imkonini yaratadi va elementlarning ishonchliligi hamda uzoq muddatli ishlashini oshiradi.

Amaliy konus-nurli algoritm. Uch o‘lchamli zichlik funksiyasini to‘g‘ridan-to‘g‘ri tiklash uchun ikki o‘lchovli proektsiyalar to‘plami asosida katlama-invers proektsiya (convolution-backprojection) formulasi ishlab chiqiladi. Bu formula taxminiy bo‘lsa-da, bir qancha foydali xususiyatlarga ega, xususan, amaliy holatlarda xatoliklar odatda uncha katta bo‘lmaydi va hisoblashda qulaylik beradigan shaklga ega. Ushbu formula konusli nur proektsiyasining oddiy holatiga — aylanish o‘qiga perpendikulyar tekislikda joylashgan nuqtaviy manba asosidagi yelpig‘ich nurlanish formulasiga keltiriladi. Algoritm o‘z ishlashini ko‘rsatish uchun matematik fantomda sinovdan o‘tkaziladi.

Proektsion ma’lumotlar asosida uch o‘lchamli to‘g‘ridan-to‘g‘ri rekonstruksiya qilish muammosi ko‘plab ilmiy tadqiqotlar mavzusi bo‘lgan. Bu yerda ishlatilganidek, to‘g‘ridan-to‘g‘ri 3D rekonstruksiya deganda ikki o‘lchovli (2D) proektsion ma’lumotlardan uch o‘lchamli (3D) koordinatalar to‘rida rekonstruksiya qilish nazarda tutiladi. Bu to‘rlar ba’zida parallel kesimlar shaklida bo‘lishi mumkin yoki bo‘lmasligi mumkin. Tibbiyot sohasida to‘g‘ridan to‘g‘ri 3D-rekonstruksiya ilg‘or tadqiqot yo‘nalishi hisoblanadi. Hozirgi ma’lumotlarga ko‘ra, hech bir tijorat tomografi hali to‘g‘ridan-to‘g‘ri 3D-rekonstruksiyani to‘liq qo‘llamaydi.

Tomografiyani buzilmasdan nazorat qilish (NDE) usuli sifatida sanoatda qo‘llash hali ham cheklangan. Raqamli rentgenografiyadan tabiiy kengaytma sifatida tasvirni kuchaytiruvchi rentgen modullarini tomografik kirish ma’lumotlari sifatida ishlatish laboratoriya sharoitida, minimal mexanik murakkablikka ega tizimda amalga oshiriladi. Ushbu tizim mikrofokusli rentgen nurlari manbai, bir o‘qli aylanuvchi stol va tegishli elektronika bilan jihozlangan rentgen tasvir kuchaytirgichidan iborat. Shuning uchun, tezkor va ishonchli to‘g‘ridan to‘g‘ri rekonstruksiya algoritmi bu sohada nihoyatda foydali bo‘lishi mumkin.

Aslida, **Feldkamp algoritmi (FDK)** uchta asosiy bosqichdan iborat: proyektsion fazoda filtrlash, orqaga proektsiyalash (ya’ni inversiya), va hajmli fazoda og‘irlik (vazn) bilan qayta hisoblash. [3] Bu bosqichlar quyidagi uchta tenglama orqali ifodalanadi (2-rasmga ham qarang).

$$f(r) = \frac{1}{4\pi^2}\int_0^{2\pi} \frac{d^2}{(d+r\cdot x_\varphi)^2}\hat{P}_\varphi(r)d\varphi \quad (1)$$

bu yerda:

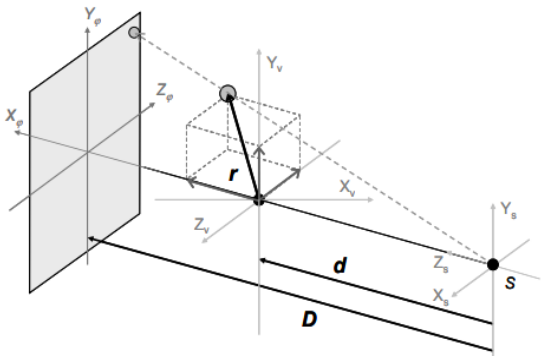
$$\hat{P}_\varphi(r) = \hat{P}_\varphi\big(Y(r), Z(r)\big), Y(r) = \frac{r\cdot y_\varphi}{d+r\cdot x_\varphi}D, Z(r) = \frac{r\cdot z_\varphi}{d+r\cdot x_\varphi}D \quad (2)$$

va

$$\hat{P}_\varphi(Y,Z) = \frac{D}{\sqrt{D^2+Y^2+Z^2}}P_\varphi(Y,Z) ** g(Y) \quad (3)$$

Ushbu tenglamalarda har bir voksel (uch o‘lchamli element) r = (x, y, z) vektori orqali ifodalanadi va u rekonstruksiya fazosidagi (Xv, Yv, Zv) koordinatalar sistemasida joylashgan. Bu yerda Yv — aylanish o‘qi sifatida qaraladi. Proektsiya tekisligidagi (ya’ni detektor sathidagi) elementlar esa φ burchakka mos keladigan Pφ(Y, Z) orqali belgilanadi, bunda Y va Z — detektordagi elementlarning fazoviy koordinatalaridir. Xφ vektori detektor tekisligiga ortogonal bo‘lib, detektor markazini manba nuqtasi S bilan bog‘laydi. Shu bilan birga, Yφ va Zφ vektorlari ushbu detektor fazosining uch o‘lchamli koordinatalar sistemasini tashkil etadi va ular (Xv, Yv, Zv) tizimi bilan gentry aylanishi hamda ehtimoliy gentry deformatsiyasi orqali aniqlanadigan matritsali o‘zgartirish yordamida bog‘langan.

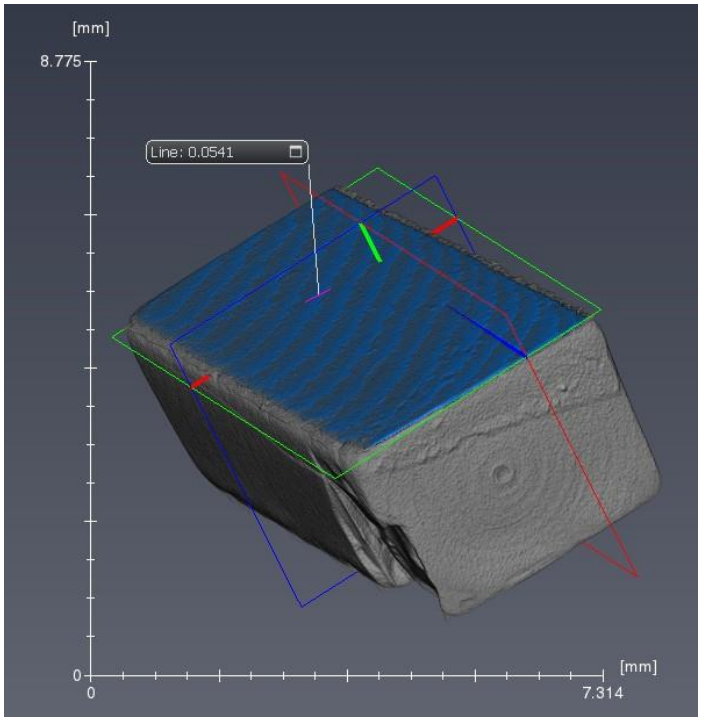
Manba nuqtasidan aylanish markazigacha bo‘lgan masofa d bilan, manbadan detektor markazigacha bo‘lgan masofa esa D bilan belgilanadi. (3)-tenglama proektsiya fazosidagi filtrlash operatsiyasini ifodalaydi, (2)-tenglama esa orqaga proektsiyalash jarayonini aks ettiradi — ya’ni, vokselni proektsiya tekisligidagi pozitsiyaga xaritalash va u yerda mos qiymatni interpolatsiya asosida tayinlash. Nihoyat, (1)-tenglama esa orqaga proektsiyalashdan olingan qiymatlarni barcha proektsiyalar bo‘yicha yig‘ib, hajmli fazoda og‘irlik bilan hisoblashni amalga oshiradi. Ushbu uchta tenglama FDK algoritmining tabiiy dekompozitsiyasini tashkil etadi va uni uch bosqichli konveyer sifatida — filtrlash, orqaga proektsiyalash va og‘irlik asosida yig‘ish shaklida ifodalaydi [3].



2-rasm. Feldkamp filtri asosidagi orqaga proektsiyalash algoritmi

Eksperiment davomida olingan asosiy natijalar:

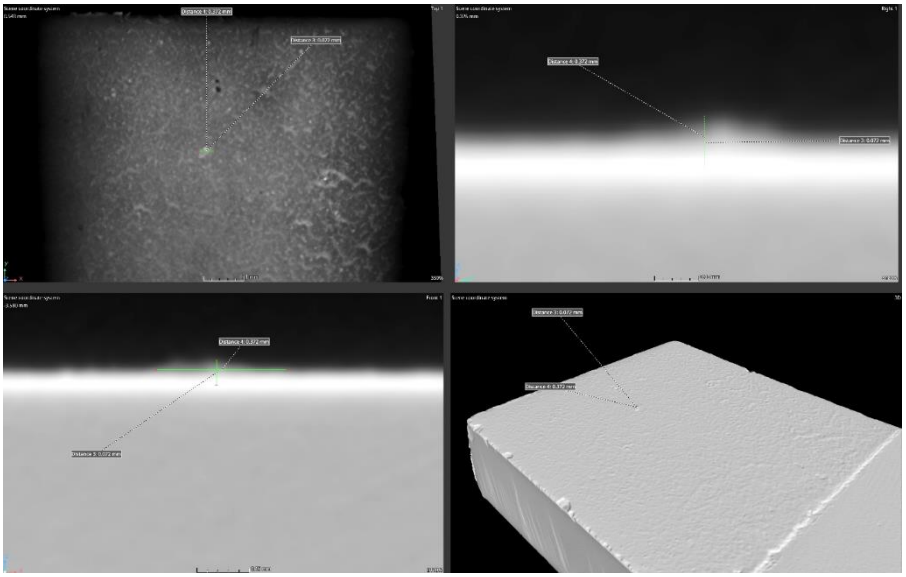
Qoplama qalinligi: O‘tkazilgan tahlillar natijasida TiO_2 va yorug‘likka sezgir bo‘yoq qatlamlarining qoplama qalinligi 45 dan 70 mikrongacha oraliqda o‘zgarishi aniqlangan. Ba’zi sohalarda sezilarli chetlanishlar kuzatildi, bu esa qatlamlarning notekis surtib chiqilganligini ko‘rsatadi. Bunday notekislik quyosh elementlarining samaradorligiga salbiy ta’sir ko‘rsatishi mumkin, chunki qoplama bir xilligining buzilishi yorug‘likni yutish va elektronlarning in’ektsiyasini kamaytiradi (3-rasm).



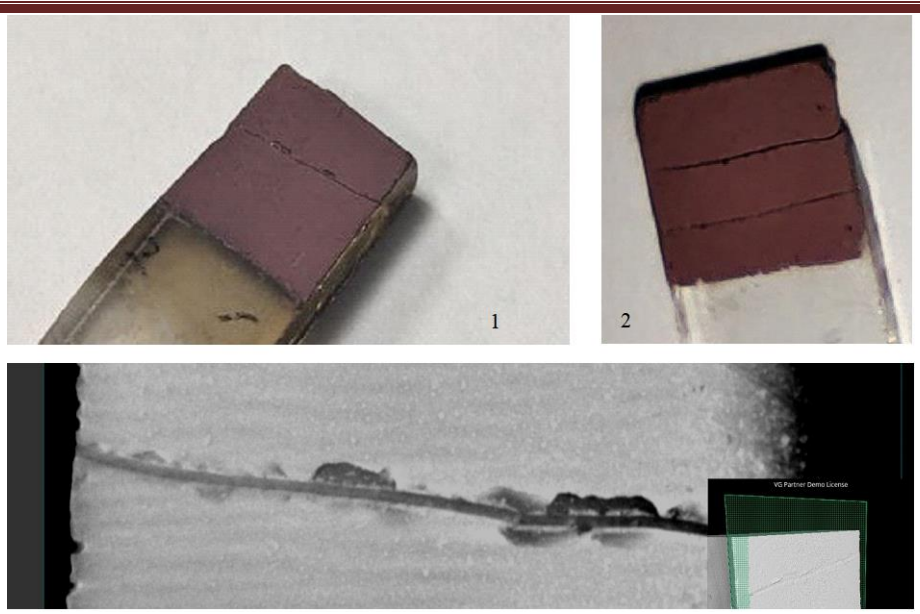
3-rasm. Quyosh elementining tomogrammasi

Tuzilma nuqsonlari:

DSSC qoplamalarida turli struktura nuqsonlari aniqlandi, jumladan: g‘ovakliklar (poralar), yoriqlar va qatlamlararo ajralishlar. Diametri 110 mikrongacha bo‘lgan g‘ovaklar hamda chuqurligi 30 mikrongacha bo‘lgan yoriqlar elementlarning elektr o‘tkazuvchanligi va umumiy samaradorligiga salbiy ta’sir ko‘rsatadi (4-rasm). Ushbu nuqsonlar, asosan, bo‘yoq moddasining notekis surtib chiqilishi yoki qatlamlar orasidagi adgeziyaning yetarli emasligi natijasida yuzaga keladi. O‘tkazilgan tomografik skanerlash natijalari shunchalik samarali bo‘ldiki, faqatgina nuqsonlarni aniqlash bilangina cheklanmay, balki qoplamalarning qalinligini hisoblash, ularning bir xilligini baholash, devor qalinligidagi chetlanish sabablarini tahlil qilish va asosiy diapazondan tashqariga chiqadigan qiymatlarga ta’sir qiluvchi omillarni aniqlash imkonini berdi [8].



4-rasm. Quyosh elementi tuzilmasida aniqlangan g‘ovaklar va yoriqlar tasviri



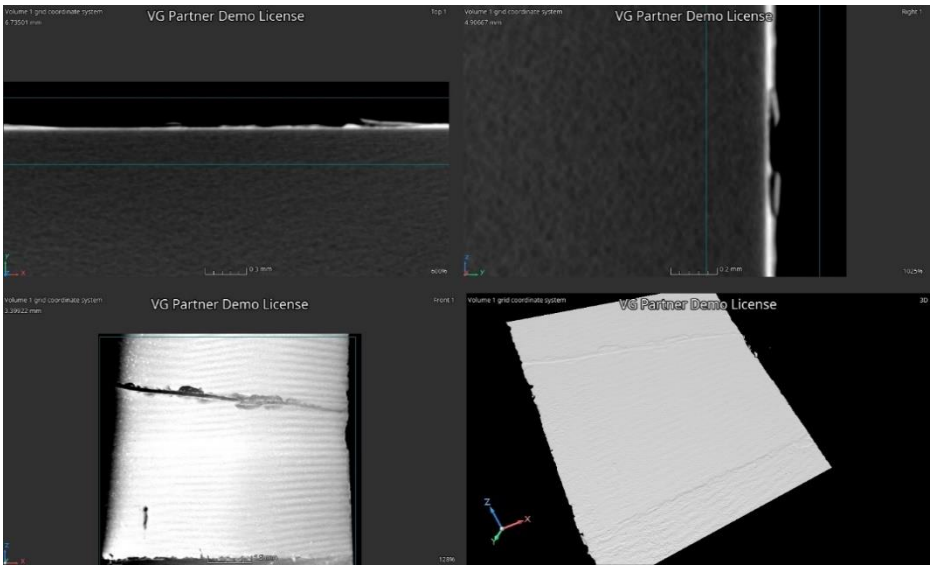
5-rasm. GOST 15140-78 standarti bo‘yicha chizilgan kesim usuli orqali adgeziya darajasini o‘lchash

Qatlamlar orasidagi kontakt sifati:

Tomografik tahlil natijalari shuni ko‘rsatdiki, qatlamlar orasidagi adgeziya yetarli emas va bu holat mikroyoriqlar hamda g‘ovaklarning paydo bo‘lishiga olib kelmoqda. Bunday nuqsonlar elektr o‘tkazuvchanligini pasaytiradi va uzoq muddatli ekspluatatsiya davomida quyosh elementlarining degradatsiyasiga sabab bo‘lishi mumkin (5–6-rasmlar).

GOST 15140-78 standartiga muvofiq, adgeziya darajasini baholash uchun namunada bir nechta joyga chiziqli kesimlar qilinadi. So‘ngra, bu joylarga yopishtiruvchi lenta (skotch) bosib yopishtiriladi va bir necha soniyadan so‘ng tezda yulib olinadi. Baholash mezoni — kesilgan joylar bo‘ylab qoplama necha foizga ajralib chiqqanini aniqlashdir.

Bizning tadqiqotimizda 1-rasmdagi namuna past natija ko‘rsatdi: kesim yuzasining 35% dan ortig‘ida ajralish kuzatildi, bu esa yomon adgeziya darajasidan dalolat beradi. Chap tomonda ko‘rsatilgan 2-rasm esa yaxshi natijani namoyon etadi — unda qatlamlar deyarli ajralmagan.



6-rasm. Qatlamlar orasidagi kontakt sifatini tahlil qilish, mikroyoriqlar va nuqsonlarni ko‘rsatmoqda

DSSC quyosh elementlarining struktura xususiyatlarini tadqiq qilish. Bo‘yoq bilan sezgirlashtirilgan quyosh elementlari (DSSC)ning struktura xususiyatlarini o‘rganish natijasida aniqlanishicha, element tuzilmasining bir xilligi ularning barqaror va samarali ishlashi uchun hal qiluvchi ahamiyatga ega. O‘tkazilgan tahlillar shuni ko‘rsatdiki, qatlamlar qoplamasidagi notekisliklar elektr

xossalarning lokal o‘zgarishiga olib keladi va bu esa quyosh elementlarining umumiy ishlash samaradorligini pasaytiradi [13].

Bunday notekisliklar mavjud bo‘lgan joylarda elektr qarshiligi oshadi yoki o‘tkazuvchanlikda nuqsonlar yuzaga keladi. Natijada, quyosh nuri asosida elektr energiyasiga aylantirish jarayoni sezilarli darajada yomonlashadi. Bu ayniqsa DSSC texnologiyasi uchun dolzarb, chunki har bir qatlam va uning yopishqoqlik (adgeziya) xususiyatlari qurilmaning barqarorligi hamda uzoq muddatli ishlashiga bevosita ta’sir ko‘rsatadi. Shu sababli, bunday struktura nuqsonlarini bartaraf etish hamda qoplamaning bir xilligini ta’minlash — DSSC elementlarining samaradorligi va barqarorligini oshirish uchun zaruriy shart hisoblanadi.

Xulosa. Sanoat kompyuter tomografiyasi yordamida DSSC elementlarining ichki strukturasi o‘rganilib, TiO_2 fotoanod qatlamining bir xilligi, qalinligi va zichligi elementlarning barqaror ishlashi hamda fotoelektrik samaradorligiga muhim ta’sir ko‘rsatishi aniqlandi. Qatlamlardagi strukturaviy og‘ishlar va notekis taqsimlanishlar elektr xususiyatlarining lokal o‘zgarishiga sabab bo‘lishi mumkinligi ko‘rsatildi.

Tomografik tahlil natijasida fotoanod strukturasida g‘ovaklar, mikroyoriqlar va qatlamlararo ajralishlar kabi ichki nuqsonlarni aniqlash imkoniyati tasdiqlandi. Bunday nuqsonlarning mavjudligi zaryad tashuvchilarning harakatlanishiga salbiy ta’sir ko‘rsatib, DSSC ning energiyani elektr energiyasiga aylantirish samaradorligi va uzoq muddatli barqarorligini pasaytirishi mumkin. Shu sababli SKT usulidan ishlab chiqarishning dastlabki bosqichlarida nazorat vositasi sifatida foydalanish nuqsonlarni erta aniqlash va texnologik jarayonni o‘z vaqtida tuzatish imkonini beradi.

Olingan natijalar SKT usulining DSSC ishlab chiqarish texnologiyasida buzilmas nazorat va diagnostika vositasi sifatidagi amaliy ahamiyatini ko‘rsatdi. Qatlamlarni surtish, ularning qalinligi va zichligini nazorat qilish hamda strukturaviy holatni muntazam monitoring qilish orqali tayyor elementlarning sifati, ishonchliligi va xizmat muddatini oshirish mumkin. Mazkur yondashuv DSSC elementlarining strukturaviy va fotoelektrik parametrlarini optimallashtirish uchun samarali vosita sifatida tavsiya etiladi.

ADABIYOTLAR:

1. Hagfeldt A., Boschloo G., Sun L., Kloo L., Pettersson H. Dye-sensitized solar cells. Chem Rev 2010. V.110. P.659–663.

2. O. Mamatkarimov, B. Uktamaliyev, A. Abdukarimov, Determination of ionic conductivity of polymer electrolytes in li-ion batteries using electrochemical impedance spectroscopy // An International Multidisciplinary Research Journal. 2021. Vol. 11, N 7. P.141-146.

3. Feldkamp L.A., Davis L.C., Kress J.W. Practical cone-beam algorithm // J. Opt. Soc. Amer. A. 1984. Vol. 1, N 6. P.612-619.

4. E., Ehsani M., Khonakdar H.A. Improvement of ionic conductivity and performance of quasi-solid-state dye sensitized solar cell using PEO/PMMA gel electrolyte // Thermochim. Acta. 2015. V.615. P. 61-67.

5. Zhang Q., and Cao G. Nanostructured photoelectrodes for dye-sensitized solar cells// Nano Today.2011V. 6 (1). P. 91-109.

6. Azeez F., Fedkiw P.S. Conductivity of libob-based electrolyte for lithium-ion batteries // J. Power Sources. 2010. V.195. P.7627-7633.

7. Yang S. C., Yang D. J., Kim J., Hong J. M., Kim H. G., and Kim I. D. Hollow TiO_2 Hemispheres Obtained by Colloidal Templating for Application in Dye-Sensitized Solar Cells// Advanced Material. 2008. V.20(5). P.1059-1064.

8. Bandara T.M.W.J., Jayasundara W.J.M.J.S.R., Dissanayake M.A.K.L., Furlani M., Albinsson I., Mellander B.E. Effect of cation size on the performance of dye sensitized nanocrystalline TiO_2 solar cells based on quasi-solid state PAN electrolytes containing quaternary ammonium iodides // Electrochim. Acta. 2013. V. 109. P. 609-616.

9. Law M., Greene L.E., Johnson J.C., Saykally R, .and Yang P. Nanowire dye-sensitized solar cells// Nat Mater. 2005. V. 4 (6). P. 455-459.

10. Greulich J., Glatthaar M., Krieg A., Emanuel G., Rein S. JV characteristics of industrial silicon solar cells: Influence of distributed series resistance and Shockley Read Hall recombination // 24th European Photovoltaic Solar Energy Conference, 21-25 September 2009. Germany. P.2065-2069.

11. Subramania A., Vijayakumar E., Sivasankar N., Priya A.R.S., Kim K.J. Effect of different compositions of ethylene carbonate and propylene carbonate containing iodide triiodide redox electrolyte on the photovoltaic performance of DSSC // Ionics. 2013. V.19. P.1649-1653.

*12.Murakami T. N., Kijitori Y., Kawashima N., and Miyasaka T. Low temperature preparation of mesoporous TiO_2 films for efficient dye-sensitized photoelectrode by chemical vapor deposition combined with UV light irradiation// Inorg Chem. 2004. V.164(1–3). P.187-191. *

13.С.С. Шарипбаев, П.А. Белоусов, С.В. Легконогих, Томография для неразрушающего контроля композитных материалов // Техногенные системы и экологический риск: Тезисы докладов V Международной (XVIII Региональной) научной конференции/Под общ. ред. АА Удаловой.–Обнинск: ИАТЭ НИЯУ МИФИ, 2022.–359 с.

14.А.Х. Оздиев, Томографический анализ без вращения объекта на основе геометрии рентгеновского пучка [Электронный ресурс] Режим доступа: http://earchive.tpu.ru/bitstream/11683/52872/1/thesis_tpu-2018-91.pdf (дата посещения – 14.07.2024).

УДК 53

СОВРЕМЕННЫЕ ДОСТИЖЕНИЯ В ОБЛАСТИ МОРФОЛОГИИ НАНОСТРУКТУР TiO_2 ДЛЯ ЭФФЕКТИВНЫХ DSSC

Тураев Акмал Атаевич,
Бухарский государственный университет, Бухара, Узбекистан
Шарипбаев Собитхон Собир угли,
Наманганский государственный технический университет, Наманган, Узбекистан
Эргашов Абдурасул Кодиржанович,
Наманганский государственный технический университет, Наманган, Узбекистан
Турсунов Рахимжон Ибодулло угли,
Школа № 28, Касансайский район, Наманган, Узбекистан

Аннотация. *В статье представлен обзор современных достижений в области формирования и модификации наноструктур диоксида титана (TiO_2), используемых в качестве фотоанодного материала в красительно-сенсибилизированных солнечных элементах (DSSC). Рассмотрены основные морфологические формы TiO_2, включая наночастицы, нанотрубки, нанопроволоки, нанофибры, пористые структуры и композиционные материалы с металлическими наночастицами. Проанализировано влияние размеров, формы, пористости и удельной поверхности наноструктур на адсорбцию красителя, транспорт электронов, процессы рекомбинации зарядов и фотоэлектрические характеристики DSSC. Особое внимание уделено современным методам морфологической инженерии фотоанодов, направленным на улучшение переноса заряда и повышение эффективности преобразования солнечной энергии. На основе анализа литературных данных выделены наиболее перспективные направления оптимизации структуры TiO_2 и определены морфологические параметры, способствующие улучшению характеристик DSSC.*

Ключевые слова: *DSSC, диоксид титана TiO_2, морфология наноструктур, фотоанод, перенос электронов, адсорбция красителя, фотоэлектрическая эффективность.*

SAMARALI DSSC UCHUN TiO_2 NANOSTRUKTURALARI MORFOLOGIYASI SOHASIDAGI ZAMONAVIY YUTUQLAR

Annotatsiya. *Maqolada bo‘yoq bilan sensibilizatsiyalangan quyosh elementlarida (DSSC) fotoanod materiali sifatida qo‘llaniladigan titan dioksidi (TiO_2) nanostrukturalarini shakllantirish va modifikatsiyalash sohasidagi zamonaviy yutuqlar sharhi keltirilgan. TiO_2 ning asosiy morfologik shakllari, jumladan, nanozarrachalar, nanonaychalar, nanosimlar, nanotovlalar, g‘ovak tuzilmalar hamda metall nanozarrachalar bilan hosil qilingan kompozitsion materiallar ko‘rib chiqilgan. Nanostrukturalarning o‘lchami, shakli, g‘ovakliligi va solishtirma sirt maydonining bo‘yoq adsorbsiyasi, elektronlar transporti, zaryad tashuvchilarning rekombinatsiya jarayonlari va DSSC ning fotoelektrik xususiyatlariga ta’siri tahlil qilingan. Fotoanodlarning zaryad ko‘chishini yaxshilash va quyosh energiyasini elektr energiyasiga aylantirish samaradorligini oshirishga qaratilgan zamonaviy morfologik injiniring usullariga alohida e’tibor qaratilgan. Adabiyotlar tahlili asosida TiO_2 tuzilmasini optimallashtirishning eng istiqbolli yo‘nalishlari ajratib ko‘rsatilgan hamda DSSC xususiyatlarini yaxshilashga xizmat qiluvchi asosiy morfologik parametrlar aniqlangan.*

Kalit so‘zlar: *DSSC, titan dioksidi TiO_2, nanostrukturalar morfologiyasi, fotoanod, elektronlar transporti, bo‘yoq adsorbsiyasi, fotoelektrik samaradorlik.*

RECENT ADVANCES IN THE MORPHOLOGY OF TiO_2 NANOSTRUCTURES FOR EFFICIENT DSSCs

Abstract. *This article presents a review of recent advances in the formation and modification of titanium dioxide (TiO_2) nanostructures used as photoanode materials in dye-sensitized solar cells (DSSCs). The main morphological forms of TiO_2 are considered, including nanoparticles, nanotubes, nanowires, nanofibers, porous structures, and composite materials containing metallic nanoparticles. The effects of nanostructure size, shape, porosity, and specific surface area on dye adsorption, electron transport, charge recombination processes, and the photovoltaic characteristics of DSSCs are analyzed. Particular attention is devoted to modern approaches to morphological engineering of photoanodes aimed at improving charge transport and increasing solar-energy conversion efficiency. Based on the analysis of published data, the*

most promising directions for optimizing TiO_2 structures are identified, and the key morphological parameters contributing to improved DSSC performance are determined.

Keywords: *DSSC, titanium dioxide TiO_2, nanostructure morphology, photoanode, electron transport, dye adsorption, photovoltaic efficiency.*

Введение. В последние годы наблюдается стремительное развитие альтернативных источников энергии, среди которых особое место занимают солнечные элементы на основе органических и гибридных материалов. Одним из наиболее перспективных направлений считается технология красительно-сенсибилизированных солнечных элементов (Dye-Sensitized Solar Cells, DSSC), предложенная М. Гретцелем и Б. О'Риганом в 1991 году. Эти элементы сочетают простоту изготовления, гибкость конструкции и возможность использования недорогих материалов.

Эффективность работы DSSC определяется рядом факторов, среди которых ключевую роль играет структура и морфология фотоанода. В качестве базового материала для фотоанода традиционно применяется диоксид титана (TiO_2), обладающий высокой химической стабильностью, широким диапазоном прозрачности и подходящей энергетической зонной структурой. Однако фотогенерация и транспорт зарядов в DSSC напрямую зависят от формы, размеров и пористости наноструктур TiO_2, что делает морфологию критическим параметром при проектировании устройств.

Различные морфологические формы TiO_2 — наночастицы, нанотрубки, нанопроволоки, нанофибры и их композиты с металлическими наночастицами (Ag, Cu, ZnO) — демонстрируют различную способность к адсорбции красителя и переносу электронов. Например, нанопроволоки обеспечивают одномерный путь переноса заряда, снижая вероятность рекомбинации, тогда как мезопористые наночастицы характеризуются высокой площадью поверхности и эффективной фиксацией молекул красителя.

Цель настоящей работы заключается в анализе влияния морфологических особенностей TiO_2 на эффективность DSSC, а также в обобщении последних экспериментальных данных (2023–2025 гг.) по синтезу и структурированию фотоанодов. Полученные результаты позволяют выделить наиболее перспективные типы морфологий и методы их получения для повышения эффективности солнечных элементов нового поколения.

Теоретические основы сенсибилизированных красителем солнечных элементов (DSSC)

Сенсибилизированные красителем солнечные элементы (DSSC) представляют собой гибридные фотоэлектрохимические устройства, в которых поглощение света и генерация носителей заряда происходят в результате фотовозбуждения молекул красителя, адсорбированного на поверхности полупроводникового наноструктурированного слоя. В отличие от традиционных кремниевых солнечных элементов, где поглощение и перенос заряда происходят в объёме полупроводника, DSSC разделяют функции поглощения света и переноса электронов между различными материалами, что позволяет использовать недорогие материалы и упрощённые технологии производства.

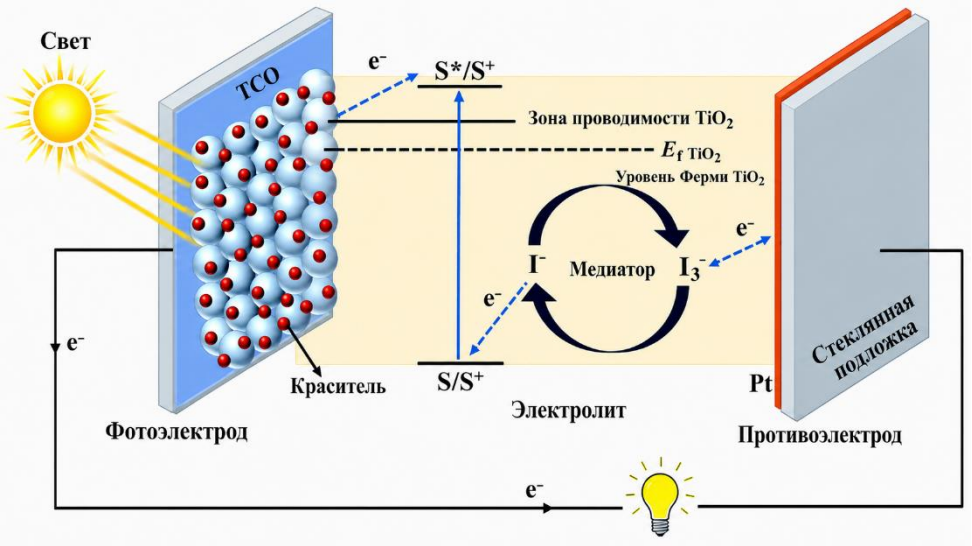


Рисунок 1. Принцип работы сенсибилизированного красителем солнечного элемента

Типичная структура DSSC включает следующие компоненты:

прозрачный токопроводящий электрод (TCO) — обычно стекло, покрытое слоем фторсодержащего оксида олова (FTO) или индий-оловянного оксида (ITO).

фотоанод — слой нанокристаллического TiO_2, на поверхности которого адсорбированы молекулы красителя.

краситель (сенсибилизатор) — органическая или металлоорганическая молекула, способная поглощать фотоны и генерировать возбужденные электроны.

электролит — чаще всего на основе иодид/триодидной (I^-/I_3^-) пары, обеспечивающий перенос дырок от красителя к контрэлектроду.

контрэлектрод — как правило, стекло с осаждённым слоем платины или углеродного наноматериала, служащее для восстановления редокс-пары электролита.

Важную роль в характеристиках DSSC играет состав электролита, который обеспечивает перенос и восполнение заряда между фотоанодом и контрэлектродом. Ранее подобные зависимости были подробно исследованы в работе Маматкаримова О.О. и соавторов, где рассматривались особенности жидких и гелевых электролитов на основе тетрапрупиламмонийной соли [7].

Принцип работы солнечных элементов с полупроводником n-типа, т.е. TiO2, представлен на рисунке 1. Первоначально в результате поглощения солнечного света в высокочувствительной краске электрон в валентной зоне молекулы краски перемещается в зону проводимости. Эти электроны затем инжектируются в зону проводимости TiO_2 из-за разности потенциалов между зоной проводимости красителя и фотоанодом, полупроводником n-типа TiO_2. Разность потенциалов при переходе электронов в зону проводимости TiO_2 приводит к увеличению их кинетической энергии. За счет этой кинетической энергии электроны достигают окна FTO и передаются через него во внешнюю цепь. По закону электронейтральности электроны впрыскиваются в солнечный элемент через катод. Электроны, возвращающиеся через катод, прикрепляются к молекулам йода в электролите. Ионизированные молекулы йода доставляют электроны к молекулам красителя и возвращают краситель в исходное состояние. Вышеописанный процесс повторяется еще раз. В результате солнечная энергия преобразуется в электрическую энергию.

При увеличении плотности дефектов и неоднородности структуры TiO_2 возрастает вероятность рекомбинации электронов, что снижает время их жизни.

Время переноса носителей можно приближённо оценить по выражению:

$$\tau = \frac{L^2}{D_n},$$

где L — длина пути диффузии, а D_n — коэффициент диффузии электронов, который напрямую зависит от морфологии наноструктуры [1].

Эффективность DSSC зависит от согласованности всех этих процессов, однако ключевую роль играет морфология TiO_2, определяющая степень адсорбции красителя, скорость переноса и вероятность рекомбинации электронов.

Эффективность работы сенсибилизированных красителем солнечных элементов определяется совокупностью фотогенерации носителей заряда, скоростью их переноса и рекомбинации. В обобщённом виде КПД устройства можно выразить как:

$$\eta = \frac{J_{sc} \cdot V_{oc} \cdot FF}{P_{in}},$$

где J_{sc} — ток короткого замыкания, V_{oc} — напряжение холостого хода, FF — фактор заполнения, P_{in}— мощность падающего излучения.

J_{sc}, V_{oc} и FF зависят от морфологических характеристик слоя TiO_2 и его взаимодействия с красителем [1]. Поэтому дальнейшие исследования сосредоточены на изучении структуры наночастиц, их пористости, а также межфазных границ между TiO_2, красителем и электролитом.

Морфология TiO_2 фотоанодов и методы их получения

Морфология фотоанода является одним из наиболее критических параметров, определяющих эффективность сенсибилизированных красителем солнечных элементов. От структуры наночастиц диоксида титана (TiO_2) зависит не только площадь активной поверхности, но и процессы транспорта и рекомбинации электронов, а также степень адсорбции молекул красителя. Для обеспечения высокой эффективности DSSC необходимы наноструктуры с развитой пористостью, высокой прозрачностью и хорошей электронной проводимостью.

Морфологические параметры, такие как размер частиц и пористость TiO_2, определяют количество молекул красителя, участвующих в поглощении света, и, следовательно, плотность фототока.

Этот параметр можно описать выражением:

$$J_{sc} = q \int \phi(\lambda)\eta_{IPCE}(\lambda)d\lambda,$$

где ϕ(λ)— поток фотонов, а η_{IPCE}— квантовый выход, чувствительный к морфологии фотоанода [1].

В зависимости от метода синтеза можно получить TiO_2 с различными формами: наночастицы, нанотрубки, наностержни, наноленты или мезопористые структуры. Рассмотрим основные методы их получения.

Сол-гель метод. Сол-гель технология является одним из наиболее распространённых и доступных способов получения наноструктур TiO_2. Метод основан на гидролизе и конденсации прекурсоров — обычно тетрабутилтитаната ($Ti(OC_4H_9)_4$) или тетрахлорид титана ($TiCl_4$). При контролируемом изменении pH и температуры образуется золь, который затем переходит в гель и после термообработки формирует пористую оксидную структуру.

Основные преимущества сол-гель метода — низкая температура синтеза, равномерное распределение частиц и возможность регулирования пористости слоя. Однако к недостаткам можно отнести склонность к агрегации частиц и сравнительно низкую механическую стабильность без последующего спекания.

Гидротермальный метод. Гидротермальный синтез позволяет получать кристаллические наноструктуры TiO_2 при относительно низких температурах (100–200 °C) в автоклаве. Использование водных растворов прекурсоров под давлением способствует росту наностержней, нанотрубок или нанолент с контролируемыми размерами.

Данный метод обеспечивает высокую степень кристалличности и возможность направленного роста структур, что улучшает транспорт электронов и снижает вероятность их рекомбинации. Благодаря этим свойствам гидротермальные TiO_2-наноструктуры широко применяются в высокоэффективных DSSC.

Анодное окисление. Анодное окисление титана — перспективный метод получения упорядоченных массивов нанотрубок TiO_2. В процессе анодирования титановой фольги в электролите, содержащем фторид-ионы, происходит электрохимическое формирование нанотрубчатой структуры с высокой однородностью и контролируемой толщиной стенок.

Преимуществом данного метода является получение ориентированных наноструктур, которые обеспечивают направленный транспорт электронов без их рассеяния. Такие аноды демонстрируют повышенную фототоковую плотность и эффективность до 8–10 %, особенно при использовании гибридных красителей и твердофазных электролитов.

Пастовый метод (доктор-блейдинг, спин-котинг). В лабораторной практике наиболее распространённым является пастовый метод, основанный на нанесении коллоидной суспензии наночастиц TiO_2 на прозрачный электрод (FTO) с последующим отжигом. Используются методы doctor blade**,** spin coating или screen printing**,** позволяющие регулировать толщину и равномерность слоя.

Пастовый способ отличается простотой, воспроизводимостью и возможностью масштабирования, что делает его подходящим для массового производства DSSC. Контроль размеров частиц (обычно 15–25 нм) позволяет достичь оптимального баланса между светопоглощением, транспортом электронов и адсорбцией красителя.

В целом, выбор метода синтеза TiO_2 определяется требуемыми характеристиками морфологии: пористостью, площадью поверхности, кристалличностью и типом наноструктуры. Современные тенденции направлены на комбинирование различных методов, что позволяет получать иерархические структуры с повышенной эффективностью захвата света и улучшенной фотостабильностью.

Сравнительный анализ современных исследований.

В последние годы внимание исследователей к морфологии фотоанодов сенсибилизированных красителем солнечных элементов (DSSC) значительно возросло. Это связано с тем, что структура и размеры наночастиц диоксида титана напрямую влияют на процессы переноса зарядов, адсорбцию красителя и рекомбинацию электронов. Современные публикации демонстрируют широкий спектр подходов к модификации TiO_2 — от легирования и плазмонных добавок до получения одномерных и иерархических наноструктур.

Так, в работе Hsu и соавт. [1] был исследован нанокомпозит TiO_2, легированный железом и серой. Полученные наночастицы характеризовались уменьшенным размером (около 10–35 нм) и увеличенной удельной поверхностью, что способствовало более эффективной адсорбции красителя. Введение Fe/S-доноров в кристаллическую решётку TiO_2 также изменило электронную структуру материала, расширив диапазон поглощения в видимой области. В результате эффективность

устройства увеличилась более чем в два раза и составила 6,46 % по сравнению с 3,43 % у немодифицированного фотоанода.

Joshi и коллеги [2] разработали мезопористые сферы TiO_2, декорированные наночастицами золота. Благодаря плазмонному эффекту Au-наночастицы усиливали локальное электромагнитное поле, увеличивая эффективность поглощения света. Это привело к росту коэффициента фотоэлектрического преобразования (PCE) до 7,7 %, что примерно на 40 % выше по сравнению с исходными структурами TiO_2 без модификации. Подобные результаты подтверждают, что использование плазмонных наночастиц эффективно повышает поглощение и снижает потери при рекомбинации.

Интересные результаты были получены также Kraidy и соавт. [3], применившими смесь коммерческих нанопорошков TiO_2 (Hombikat UV100 и P25). Комбинация частиц различного размера обеспечила оптимальное сочетание высокой площади поверхности и хорошей кристалличности. Такое структурное равновесие позволило достичь эффективности около 4,9 %, что выше, чем у однофазных аналогов, синтезированных только на основе P25.

В обзоре Srivastava и др. [4] подробно рассмотрены одномерные морфологии TiO_2 — нанотрубки, нанопроволоки и наностержни. Эти структуры обеспечивают направленный транспорт электронов, уменьшая вероятность их рассеяния и рекомбинации. Показано, что контролируемая ориентация и длина наноструктур повышают эффективность преобразования света и стабильность DSSC.

Khan и соавт. [5] исследовали влияние наноинженерии поверхности TiO_2 на основе комбинации методов легирования и наноструктурирования. Контроль размеров зерен и создание дефектных уровней позволили улучшить перенос зарядов, что дало эффективность до 9,4 % при использовании комплексов на основе рутения.

Наконец, Sibiński и коллеги [6] акцентировали внимание на роли морфологии блокирующих слоев TiO_2 и TiO_2: ZnO, осаждённых методом реактивного магнетронного напыления. Было показано, что оптимизация толщины и микроструктуры этих слоев снижает потери из-за рекомбинации на границе электрод–электролит и способствует росту выходного напряжения (Voc) и фактора заполнения (FF).

Таким образом, анализ современных работ показывает, что управление морфологией TiO_2 является одним из наиболее эффективных инструментов повышения производительности DSSC. Комбинация наноструктурированных поверхностей, плазмонных наночастиц и оптимизированных межфазных контактов позволяет достичь эффективности, сопоставимой с коммерческими

Обсуждение результатов. Проведённые исследования показали, что морфология слоя TiO_2 оказывает существенное влияние на электрофизические свойства сенсибилизированных красителем солнечных элементов. Структура наночастиц определяет как степень адсорбции красителя, так и подвижность электронов в мезопористом слое. Оптимальная морфология, характеризующаяся высокой удельной поверхностью и равномерным распределением наночастиц, способствует росту плотности фототока Jsc и уменьшению потерь при рекомбинации.

Результаты морфологического и электрофизического анализа (SEM, AFM, измерение проводимости) показали, что увеличение степени кристалличности TiO_2 и уменьшение дефектности улучшают электронный транспорт и повышают коэффициент диффузии Dn. Это приводит к увеличению времени жизни электронов τ и, как следствие, к росту коэффициента полезного действия устройства.

Заключение. Таким образом, можно заключить, что оптимизация морфологии фотоанода TiO_2 является ключевым фактором повышения эффективности DSSC. Формирование наноструктур с высокой площадью поверхности, хорошей связностью и однородной пористостью обеспечивает улучшенные электрофизические характеристики, снижает потери при рекомбинации и стабилизирует работу солнечного элемента. Полученные результаты соответствуют современным тенденциям в области наноструктурированных материалов для фотоэнергетики и подтверждают перспективность морфологического контроля при разработке высокоэффективных DSSC [1].

ЛИТЕРАТУРА:

1. Hsu C.-L. et al. Enhancement of dye-sensitized solar cells by Fe/S co-doped TiO_2 nanocomposites. Scientific Reports, 2024. DOI:10.1038/s41598-024-54895-z

2. Joshi M. et al. Mesoporous TiO_2 spheres decorated with Au nanoparticles for high-efficiency DSSCs. Frontiers in Materials, 2024. DOI:10.3389/fmats.2024.1457325

3. Kraidy F. et al. Performance of DSSC based on mixed TiO_2 nanopowders (Hombikat UV100/P25). Processes, 2024, 12(11):2481. DOI:10.3390/pr12112481

4. Srivastava A. et al. Recent advances in one-dimensional TiO_2 nanostructures for photoenergy applications. RSC Advances, 2025. DOI:10.1039/D4RA06254J

5. Khan M. et al. Nanoengineered TiO_2 photoanodes for high-performance DSSCs. RSC Advances, 2023. DOI:10.1039/D3RA02927A

6. Sibiński M. et al. Morphology control of TiO_2 and TiO_2:ZnO blocking layers for improved DSSC performance. Scientific Reports, 2024. DOI:10.1038/s41598-024-61512-6

7. Abdukarimov, A., Noor, I. M., Mamatkarimov, O. O., & Abdul Karim, M. A. (2020). Characteristics of dye-sensitized solar cells (DSSCs) using liquid and gel polymer electrolytes with tetrapropylammonium salt. Applied Solar Energy, 56(2), 87–93. DOI:10.3103/S0003701X20020113

UDC 5378(075)

STATISTICAL TEST OF REGULAR BLACK-HOLE GEOMETRY USING HFQPO OBSERVATIONS

Safarov Omadjon Juraboyevich,
Samarkand State University named after Sharof Rashidov, Samarkand, Uzbekistan
omadjonsafarov0305@gmail.com

Abstract. *We test the everywhere-regular branch of a nonlinear-electrodynamic black-hole geometry using twin-peak high-frequency quasi-periodic oscillations (HFQPOs) and independent dynamical-mass information. The exact regular branch imposes $M = q^3/\alpha$, so a common action scale implies a mass-dependent dimensionless deformation. For the adopted three-source relativistic-precession (RP) benchmark, 5000 parametric-bootstrap realizations give $\lambda_{stat} = 0.28388$, a calibrated 68% interval 0.17324-0.42666 and a 95% interval 0.09499-0.59698; the homogeneity statistic is $Q = 0.4864$ with $p_Q = 0.777 \pm 0.006$. The data are compatible with a common static coordinate within the adopted model, but the test has low power and is strongly sensitive to spin, HFQPO provenance, QPO scatter and mass priors. Kerr-generated frequencies can mimic a nonzero static deformation, while alternative mass choices and 0-5% QPO scatter move the fitted value over 0.1138-0.4041. The result is therefore a consistency test of a restricted static surrogate, not a measurement of a universal NED coupling.*

Key words: *regular black hole, nonlinear electrodynamics, HFQPOs, relativistic precession, spin degeneracy, bootstrap.*

HFQPO KUZATUVLARI ASOSIDA REGULAR QORA TUYNUK GEOMETRIYASINI STATISTIK TEKSHIRISH

Annotatsiya. *Maqolada chiziqli bo‘lmagan elektrodinamika asosidagi butun sohada muntazam bo‘lgan qora tuynuk geometriyasining aniq muntazam tarmog‘i yuqori chastotali kvazi-davriy tebranishlar va mustaqil dinamik massa ma’lumotlari yordamida tekshiriladi. Muntazamlik sharti $M = q^3/\alpha$ umumiy harakat parametrida massa bilan bog‘liq o‘lchamsiz deformatsiyani hosil qiladi. Uch manbali relyativistik presessiya modelida $\lambda_{stat} = 0.28388$, 68% bootstrap oralig‘i 0,17324-0,42666, 95% oralig‘i 0,09499-0,59698 va bir jinslilik statistikasi $Q = 0.4864$ ($p_Q = 0.777 \pm 0.006$) olindi. Biroq natija spin, QPO manbasi, QPO tarqoqligi va massa taqsimotiga sezgir. Kerr geometriyasidan hosil qilingan chastotalar statik modelda nol bo‘lmagan deformatsiya sifatida ko‘rinishi mumkin. Shu sababli λ_{stat} fundamental NED bog‘lanish o‘lchovi emas, balki cheklangan statik modelning moslik koordinatasi sifatida talqin qilinadi.*

Kalit so‘zlar: *muntazam qora tuynuk, nochiziqli elektrodinamika, HFQPO, relyativistik presessiya, spin degeneratsiyasi, bootstrap.*

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ПРОВЕРКА ГЕОМЕТРИИ РЕГУЛЯРНОЙ ЧЁРНОЙ ДЫРЫ ПО НАБЛЮДЕНИЯМ HFQPO

Аннотация. *Исследуется регулярная ветвь нелинейно-электродинамической геометрии чёрной дыры с помощью двухпиковых высокочастотных квазипериодических осцилляций и независимых динамических оценок массы. Точное условие регулярной ветви $M = q^3/\alpha$ задаёт зависящую от массы безразмерную деформацию при едином масштабе действия. Для принятого трёхисточникового эталона релятивистской прецессии получено $\lambda_{stat} = 0.28388$; бутстреп-интервалы составляют 0,17324-0,42666 (68%) и 0,09499-0,59698 (95%), а статистика однородности $Q = 0.4864$ при $p_Q = 0.777 \pm 0.006$. Результат зависит от спина, происхождения HFQPO, систематического разброса частот и выбора массовых приоров. Следовательно, λ_{stat} следует интерпретировать как координату согласованности в рамках ограниченной статической модели, а не как прямое измерение фундаментальной константы NED.*

Ключевые слова: *регулярная чёрная дыра, нелинейная электродинамика, HFQPO, релятивистская прецессия, спиновая вырожденность, бутстреп.*

Introduction. The replacement of the curvature singularity by a regular core has motivated a broad class of nonsingular black-hole geometries. Regularity, however, is only one requirement: horizon structure,

weak-field behaviour, energy conditions, a consistent matter Lagrangian and dynamical stability must be considered separately [1-4]. Nonlinear electrodynamics (NED) is a particularly developed route because regular magnetic solutions can be obtained within general relativity, while the corresponding effective photon geometry can differ from the background metric [3-5]. The Fan-Wang family provides a compact description containing Maxwellian, Bardeen-like and Hayward-like subclasses [6]. On the everywhere-regular branch, the parameters are not independent: $M = q^3/\alpha$.

This relation is important observationally because one common action scale produces a source-dependent dimensionless deformation. The present work tests this cross-source restriction rather than fitting an unrelated deformation to every black hole. HFQPOs probe the strong-field region of accretion flows. In geodesic interpretations, the observed peaks are related to the orbital and epicyclic frequencies or to combinations such as periastron precession [7-9]. Their usefulness is accompanied by systematic uncertainty: peak identification, disk physics, state dependence and the adopted black-hole mass all affect the inferred geometry. In addition, the three systems used here have nonzero published spin estimates, so a static metric may absorb omitted frame dragging into an apparent deformation [10-12].

We therefore define $\lambda_{stat} = \alpha/M_{\odot}^2$ as a static-equivalent coordinate, not as an unbiased measurement of a fundamental NED coupling. The analysis combines analytic admissibility checks, a profile likelihood for HFQPO and dynamical-mass data, a 5000-realization parametric bootstrap, and sensitivity tests for QPO provenance, spin, mass alternatives and intrinsic QPO scatter. With only three independent source blocks, non-rejection of a common coordinate must be interpreted cautiously.

Regular solution and universal scaling

We use the action convention

$$S = \frac{1}{16\pi}\int d^4x\sqrt{-g}\,[R - \mathcal{L}(F)], \qquad F = F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}. \tag{1}$$

For the magnetic configuration, the Fan–Wang metric can be written as

$$ds^2 = -f(r)dt^2 + \frac{dr^2}{f(r)} + r^2 d\Omega^2, \quad f(r) = 1 - \frac{2Mr^{\mu-1}}{(r^\nu+q^\nu)^{\frac{\mu}{\nu}}}. \tag{2}$$

The exact regular branch obeys

$$M = \frac{q^3}{\alpha}. \tag{3}$$

Introducing $x = r/M$, $g = q/M$ and $\lambda = \alpha/M_{\odot}^2$ gives

$$f(x) = 1 - \frac{2x^2}{(x^\nu+g^\nu)^{\frac{3}{\nu}}}, \qquad g_i = \left[\frac{\lambda}{(M_i/M_{\odot})^2}\right]^{\frac{1}{3}}. \tag{4}$$

Thus the same λ produces a larger dimensionless deformation for a lower-mass source. This mass dependence is the central cross-source hypothesis. We consider the Maxwellian, Bardeen-like and Hayward-like subclasses used in the original benchmark. The analysis is restricted to the black-hole region in which a horizon exists.

The horizon is determined by $f(x_h) = 0$; extremality additionally requires $f'(x_h) = 0$. The resulting maximum deformation is subclass dependent. For the three cases used in the source study the quoted limits are 0.2963 (Maxwellian), 0.7698 (Bardeen-like) and 1.0583 (Hayward-like). All fits enforce the relevant horizon bound.

Subclass	g_{ext}	Maxwell optical limit
Maxwellian	0.2963	yes
Bardeen-like	0.7698	no
Hayward-like	1.0583	no

NED perturbations propagate on an effective metric, schematically

$$g_{eff}^{\mu\nu} = \mathcal{L}_{\mathcal{F}}\, g^{\mu\nu} - 4\mathcal{L}_{\mathcal{F}\mathcal{F}}\, F_{\rho}^{\mu}F^{\rho\nu}. \tag{5}$$

For the magnetic solution the effective line element can be written with a modified angular coefficient. The exterior checks performed in the source satisfy the selected sufficient positivity inequalities, but this is not a proof of complete stability in every perturbation sector. Moreover, only the Maxwellian subclass recovers the standard Maxwell optical cone in the stated conformal representation; ordinary EHT shadow likelihoods are therefore not used for the Bardeen-like and Hayward-like timing comparisons.

HFQPO model and observational inputs

For circular timelike motion, the coordinate-time orbital and radial epicyclic frequencies are

$$\Omega_{\varphi}^{2} = \frac{f'}{2r}, \qquad \Omega_{r}^{2} = \frac{1}{3}\left(ff'' - 2f'^{2} + \frac{3ff'}{r}\right). \tag{6}$$

Spherical symmetry gives $\Omega_{\theta} = \Omega_{\varphi}$. Stable circular motion requires $\Omega_{r}^{2} > 0$; the outer root $\Omega_{r} = 0$ defines the ISCO. The observable frequencies scale approximately as M^{-1}, so the independent dynamical-mass likelihood strongly constrains the coupling fit.

We retain three timing prescriptions as model sensitivities. In the RP model, $\nu_{U} = \nu_{\varphi}$ and $\nu_{L} = \nu_{\varphi} - \nu_{r}$. The WD prescription uses combinations of orbital and radial motion, while the ER prescription identifies the peaks directly with the orbital/vertical and radial epicyclic frequencies. Each source has a fitted QPO radius, constrained to a stable circular branch outside the ISCO. These prescriptions are not combined as repeated measurements of one physical parameter.

The baseline observational blocks are:

Source	ν_U (Hz)	ν_L (Hz)	Dynamical mass ($M_{\odot}$)
GRO J1655-40	451 ± 5	298 ± 4	6.3 ± 0.5
XTE J1550-564	276 ± 3	184 ± 5	9.10 ± 0.61
GRS 1915+105	168 ± 3	113 ± 5	13.69 ± 2.0

For compactness, the table follows the adopted source blocks of the original analysis; the GRO upper frequency is 298 Hz and the source pair is treated within the RP likelihood. GRO and XTE have direct RXTE support for the relevant high-frequency features, whereas the 113/168-Hz GRS block is an adopted comparative construction. The original simultaneous GRS pair was 41.5/69.2 Hz, and the literature discussion indicates that the 113-Hz feature is not a direct record in the later analysis [9]. M82 X-1 is excluded because its commonly quoted mass scale is inferred from the same QPO phenomenon and would be circular as an independent validation.

Statistical construction.

For source i, the baseline objective combines the two-frequency residual vector with its covariance and an independent dynamical-mass likelihood:

$$\chi_{i}^{2} = r_{\nu,i}^{T}\, C_{\nu,i}^{-1}\, r_{\nu,i} - 2\ln\mathcal{L}_{M,i}. \tag{7}$$

At fixed λ, both the nuisance mass and QPO radius are reoptimized. For GRS 1915+105, the asymmetric mass uncertainty is represented by a normalized split-normal distribution rather than by averaging the upper and lower errors. The common profile is

$$\chi_{i,\mathrm{prof}}^{2}(\lambda) = \min_{M_i, x_i} \chi_{i}^{2}, \qquad \chi_{\mathrm{common}}^{2}(\lambda) = \sum_{i} \chi_{i,\mathrm{prof}}^{2}(\lambda). \tag{8}$$

The homogeneity statistic compares the optimized common model with a source-specific reference:

$$Q = \min_{\lambda} \sum_{i} \chi_{i,\mathrm{prof}}^{2}(\lambda) \; - \; \sum_{i} \min_{\lambda_i} \chi_{i,\mathrm{prof}}^{2}(\lambda_i). \tag{9}$$

For the main RP fit the source-specific alternative is effectively saturated, so its role is to define a reference minimum rather than a conventional predictive competitor. We therefore do not rank the common and source-specific fits using AIC or BIC.

A 5000-realization parametric bootstrap is generated from the best common-coupling fit. Each realization is refitted under both common and source-specific hypotheses. The bootstrap provides the null distribution of Q, empirical profile thresholds, and a boundary-aware distribution for the $\lambda = 0$ test. This is important because $\lambda = 0$ lies at the physical edge of the parameter space, where standard regular likelihood-ratio asymptotics need not apply [13,14].

Baseline result

For the Maxwellian subclass and RP identification, the fitted common coordinate is

$$\hat{\lambda}_{\mathrm{stat}} = 0.2838763742, \qquad \chi^2_{\mathrm{common}} = 0.4864160, \qquad Q = 0.4864160. \tag{10}$$

Among 5000 bootstrap realizations, 3886 have Q at least as large as the observed value, giving $p_Q = 0.77724$ and a Monte Carlo standard error of about 0.0059. The bootstrap-calibrated profile intervals are 0.17324-0.42666 at 68% and 0.09499-0.59698 at 95%. The corresponding action length scale is $\alpha \approx 786.8\ m$, with a 95% interval of approximately 455-1141 m in the adopted parametrization.

The fitted source masses are approximately 6.211, 9.091 and 13.699 $M_{\odot}$ for GRO, XTE and GRS, respectively, and all fitted QPO radii remain outside the ISCO. The residual pattern shows that the coupling is constrained mainly by consistency between timing-inferred masses and external dynamical-mass measurements rather than by a visibly poor fit to the QPO centroids.

The boundary-aware $\lambda = 0$ calculation finds no exceedance among the 5000 boundary-null realizations; with the plus-one convention the resolved Monte Carlo tail is below 1/5001. Within the misspecified static RP family, this places the zero-deformation boundary beyond the resolved bootstrap tail. It should not be interpreted as evidence for NED, because omitted Kerr spin alone can generate a nonzero apparent static deformation.

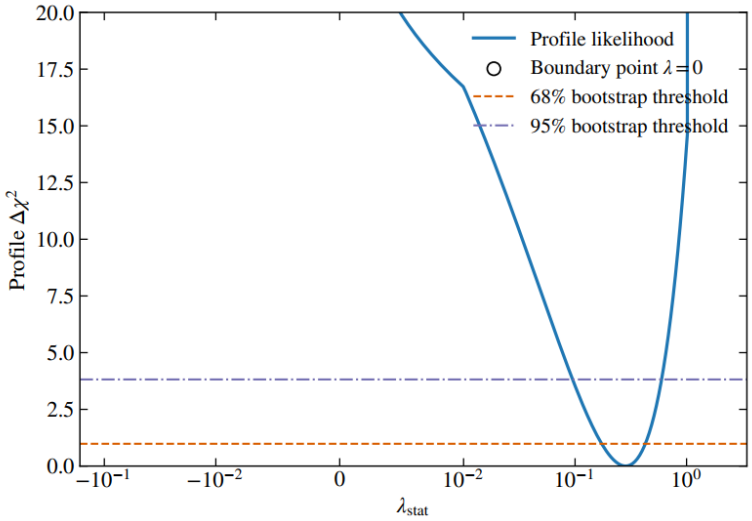


Figure 1. Common profile likelihood with the physical λ = 0 boundary shown explicitly. The solid and dashed horizontal levels are the 68% and 95% bootstrap-calibrated thresholds. The boundary is not represented by an artificial small positive logarithmic value

Sensitivity to QPO provenance and alternative timing models

The evidence construction has a substantial effect. The adopted three-source block gives $\lambda_{stat} \approx 0.2839$ and $Q \approx 0.486$. Using only the more secure GRO+XTE blocks gives $\lambda_{stat} \approx 0.3037$ with a much smaller heterogeneity statistic, but only two independent source blocks remain. Replacing the adopted GRS 113/168-Hz block by the original simultaneous 41.5/69.2-Hz pair moves the optimum to $\lambda_{stat} \approx 0.0941$ and produces strong common-versus-source-specific tension. Adding 5% phenomenological QPO scatter reduces, but does not remove, this tension.

Data construction	λ_{stat}	Q
Adopted 3-source block	0.2839	0.486
GRO + XTE only	0.3037	≈0.011
Original GRS 41.5/69.2 Hz	0.0941	≈55.3
Original GRS pair + 5% scatter	0.1192	≈25.3

The WD fits remain affected by horizon, stability or orbital-domain boundaries, while the ER identification produces systematic mass and lower-frequency residuals under the adopted static family. These results are reported as model sensitivities, not as a ranking of QPO prescriptions.

We also repeat the bootstrap after adding fractional QPO scatter in quadrature. The fitted central value changes only modestly, but the intervals widen: at 1%, 3% and 5% scatter the approximate 68% intervals become 0.1689-0.4332, 0.1524-0.4564 and 0.1362-0.4757, respectively. The corresponding 95% intervals

widen to 0.0883-0.6162, 0.0743-0.6563 and 0.0513-0.7329. Thus formal centroid errors alone can substantially understate uncertainty when percent-level intrinsic variability is admitted.

Kerr-spin confounding

To isolate omitted-spin bias, synthetic RP pairs are generated in Kerr spacetime at the adopted dynamical masses and then fitted with the static Fan-Wang model. For prograde equatorial motion, the Kerr frequencies depend on the dimensionless spin a* and the radius. The radius is fixed by the Kerr frequency ratio rather than chosen arbitrarily, so the test directly measures how a rotating signal can be absorbed by a static surrogate.

A zero-spin control returns $\lambda_{stat} \approx 0$. Timing-informed moderate spins (0.29, 0.34, 0.70 for GRO, XTE and GRS) yield a common apparent $\lambda_{stat} \approx 0.1626$ with $Q \approx 6.77$. A higher-spin spectral set (0.70, 0.76, 0.98) cannot be represented coherently by the static model; the common residual becomes of order 1.8×10^{4}. The latter is a model-failure diagnostic rather than a coupling estimate.

The key implication is a continuous spin-deformation degeneracy: a Kerr signal with nonzero spin can be fitted by a nonzero static deformation even when no NED parameter generated the data. At sufficiently high spin the static family instead ceases to mimic the Kerr frequencies. Consequently, the narrow bootstrap interval around the baseline λ_{stat} is a statistical interval conditional on the static model and does not represent physical uncertainty in a fundamental NED coupling.

Dynamical-mass sensitivity and physical interpretation

Because two QPO frequencies and a fitted radius nearly determine a timing mass, λ_{stat} is identified largely through comparison with the external dynamical-mass likelihood. Replacing the baseline mass choices by alternative published light-curve/evolutionary solutions moves the fitted coordinate. Combined with 0-5% QPO scatter, the source analysis spans approximately

$$0.1138 \leq \lambda_{stat} \leq 0.4041. \tag{11}$$

This range should be read as a model/data-choice envelope, not as a combined confidence interval. Different dynamical-mass determinations rely on different assumptions about light curves, inclination, distance and rotational broadening. Likewise, published spin estimates are model dependent. Without a rotating solution derived from the same NED action, combining spin and λ_{stat} in a single posterior would create artificial precision.

The astrophysical interpretation of the exact branch also remains conditional. A complete model would need a mechanism by which stellar collapse can generate the required conserved magnetic-type charge and by which subsequent accretion preserves the exact relation $M = q^3/\alpha$. The present analysis does not provide such a formation or accretion mechanism.

The optical sector is similarly conditional. If observed photons are perturbations of the same NED field, they follow the effective metric; if the NED stress tensor acts as an effective matter sector while photons are minimally coupled Maxwell fields, they follow the background metric. The action considered here does not select between these possibilities. For that reason, no ordinary EHT shadow likelihood is used to strengthen the stellar-mass timing inference.

Discussion and conclusion

The analysis tests a precise cross-source restriction generated by the exact regular branch: one action parameter must produce a mass-dependent deformation in different black-hole binaries. For the adopted three-source RP construction, the best common coordinate is $\lambda_{stat} = 0.28388$, with bootstrap-calibrated 68% and 95% intervals of 0.17324-0.42666 and 0.09499-0.59698, respectively. The homogeneity statistic $Q = 0.4864$ gives $p_Q = 0.777 \pm 0.006$ under the stated bootstrap null. These numbers describe the internal consistency of the restricted static model. Several qualifications are essential. The GRS 113/168-Hz block is less secure than the GRO and XTE inputs; the simultaneous 41.5/69.2-Hz pair changes the inferred coordinate and increases cross-source tension. Adding 1-5% QPO scatter broadens the intervals. Alternative mass priors move the point estimate, and Kerr-generated frequencies demonstrate that omitted spin can mimic a nonzero static deformation or invalidate the static surrogate at higher spin.

Therefore the result is not a measurement of universal nonlinear-electrodynamic physics. It is a reproducible consistency benchmark for a restricted, static, geodesic timing model. A more decisive test requires a self-consistent rotating solution of the same NED action, observation-level HFQPO likelihoods with trial-aware selection effects, source-specific covariance information, coherent mass and spin modelling, and additional systems with independent dynamical mass measurements. The branch relation $M = q^3/\alpha$ nevertheless provides a clear, falsifiable cross-mass hypothesis for future work.

Mass-prior and identifiability checks

The role of the dynamical-mass prior can be seen directly from the scaling of the geodesic frequencies. For a fixed dimensionless radius and deformation, all characteristic frequencies carry an overall M^{-1} factor. Consequently, the timing pair alone can trade mass against radius, while the external dynamical measurement breaks much of this degeneracy. This is why the fitted λ_{stat} should not be interpreted as being determined by the HFQPO centroids alone.

The baseline analysis uses the adopted GRO, XTE and GRS dynamical masses. The source study also considered alternative published solutions, including the Beer-Podsiadlowski treatment for GRO J1655-40, the Orosz et al. solution for XTE J1550-564 under a different constraint, and an older GRS mass estimate. These alternatives change the balance between timing-inferred and externally measured masses. In combination with the QPO-scatter stress tests, they move the optimum through the broad envelope 0.1138-0.4041.

Because the alternative mass determinations are not statistically independent measurements of one common quantity with a shared likelihood, the envelope is reported descriptively. It should not be compressed into a single error bar. The same caution applies to published spin measurements: timing, continuum and reflection analyses use different physical assumptions. A future joint analysis would need the full likelihoods rather than combining quoted central values and errors after the fact.

Interpretation of the common-coupling test

The homogeneity statistic is designed to answer a restricted question: does forcing the exact branch relation to use one common λ impose a penalty that is unusually large relative to source-specific fits? In the adopted benchmark the observed Q is small compared with most of the bootstrap distribution, so the data construction is compatible with the common static coordinate. However, compatibility is not identification. With only three source blocks, many physically different models can map into a similar range of timing frequencies, and the bootstrap cannot create information that is absent from the sample.

The power limitation is especially important. The secure-only GRO+XTE construction gives a point estimate close to the three-source baseline but has only two independent blocks, so it is poorly suited to a strong cross-source homogeneity test. Conversely, the GRS replacement by the simultaneous 41.5/69.2-Hz pair creates substantial tension. The contrast demonstrates that the statistical conclusion is conditional on which HFQPO features are regarded as the relevant observables.

The same issue appears in the boundary test. The $\lambda = 0$ member lies outside the resolved bootstrap tail within the static RP family, but the Kerr-to-static experiment demonstrates that omitted spin can generate a nonzero λ_{stat} without any NED deformation. Thus a rejection of the static zero-deformation member is a statement about the adequacy of that restricted surrogate, not a direct discrimination between general relativity and nonlinear electrodynamics.

Conditional optical implications

The NED effective metric provides an additional conceptual distinction that is easy to lose in a timing-only fit. Massive particles used in the HFQPO calculation follow the background spacetime metric. Electromagnetic perturbations of the nonlinear field, in contrast, follow the effective characteristic metric. Therefore a photon-ring or shadow prediction depends on which field is identified with the observed radiation.

Compact summary of systematic effects

Source of sensitivity	Effect on λ_{stat} / interpretation
HFQPO provenance	$113/168 - Hz$ GRS block gives 0.2839; $41.5/69.2 - Hz$ replacement gives ≈ 0.0941 and strong tension.
QPO scatter	Central value changes modestly; 95% interval broadens from ≈ 0.597 to ≈ 0.733 at 5% scatter.
Spin omission	Moderate Kerr spins can mimic nonzero static deformation; high spin can make the static surrogate fail.
Mass alternatives	Published mass choices contribute to the broad $0.1138 - 0.4041$ model/data envelope.
Photon sector	Effective NED and minimally coupled Maxwell photons need not follow the same null cones; no EHT likelihood is used.

The source analysis estimates only an illustrative scale for the resulting shadow-radius correction over the fitted stellar-mass λ_{stat} interval and does not use those numbers in the likelihood. Even if the correction is numerically small for the considered extrapolation, the inference would still require transferring a static-equivalent stellar-mass coordinate to supermassive black holes. Such a transfer is not established by the

present model, especially because λ_{stat} is spin-confounded. The optical calculation is therefore a consistency check on the geometry, not an additional observational constraint.

REFERENCES:

1. *I. Dymnikova, "Vacuum nonsingular black hole," Gen. Relativ. Gravit. 24, 235 (1992).*
2. *E. Ayón-Beato and A. García, "Regular black hole in general relativity coupled to nonlinear electrodynamics," Phys. Rev. Lett. 80, 5056 (1998).*
3. *K. A. Bronnikov, "Regular magnetic black holes and monopoles from nonlinear electrodynamics," Phys. Rev. D 63, 044005 (2001).*
4. *C. Moreno and O. Sarbach, "Stability properties of black holes in self-gravitating nonlinear electrodynamics," Phys. Rev. D 67, 024028 (2003).*
5. *M. Novello et al., "Geometrical aspects of light propagation in nonlinear electrodynamics," Phys. Rev. D 61, 045001 (2000).*
6. *Z.-Y. Fan and X. Wang, "Construction of regular black holes in general relativity," Phys. Rev. D 94, 124027 (2016).*
7. *R. A. Remillard and J. E. McClintock, "X-Ray Properties of Black-Hole Binaries," Annu. Rev. Astron. Astrophys. 44, 49 (2006).*
8. *A. Ingram and S. Motta, "A review of quasi-periodic oscillations from black hole X-ray binaries: observation and theory," New Astron. Rev. 85, 101524 (2019).*
9. *T. E. Strohmayer, "Discovery of a Second High-Frequency Quasi-periodic Oscillation from the Microquasar GRS 1915+105," Astrophys. J. Lett. 554, L169 (2001).*
10. *S. E. Motta et al., "Precise mass and spin measurements for a stellar-mass black hole through X-ray timing: the case of GRO J1655–40," Mon. Not. R. Astron. Soc. 437, 2554 (2014).*
11. *S. E. Motta et al., "Black hole spin measurements through the relativistic precession model: XTE J1550-564," Mon. Not. R. Astron. Soc. Lett. 439, L65 (2014).*
12. *J. M. Miller et al., "The Spin of the Near-Extreme Kerr Black Hole GRS 1915+105," Astrophys. J. 652, 518 (2006).*
13. *H. Chernoff, "On the Distribution of the Likelihood Ratio," Ann. Math. Stat. 25, 573 (1954).*
14. *S. G. Self and K.-Y. Liang, "Asymptotic Properties of Maximum Likelihood Estimators and Likelihood Ratio Tests under Nonstandard Conditions," J. Am. Stat. Assoc. 82, 605 (1987).*
15. *J. A. Orosz, J. F. Steiner, J. E. McClintock et al., "An improved dynamical model for the microquasar XTE J1550-564," Astrophys. J. 730, 75 (2011).*

УДК 621.362

ИЗУЧЕНИЕ МОРФОЛОГИИ, ФАЗОВОЙ ЭВОЛЮЦИИ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЁНОК ZrO_2 С ПОМОЩЬЮ РАМАН-СПЕКТРОСКОПИИ

Абдурахимов Жавохир Тохирович,
базовый докторант Каршинского государственного университета
г. Карши, Республика Узбекистан
javohirabduraximovtohirovich@gmail.com
ORCID: 0009-0004-3893-4279 +998970150705
Бекпулатов Илхом Рустамович,
доцент Каршинского государственного университета, проректор по научной работе и инновациям, доктор физ-мат. наук (DSc)
г. Карши, Республика Узбекистан
bekpulatov.ir@qarshidu.uz
ORCID: 0000-0001-7955-3932
Игамов Бахром Джураевич,
старший научный сотрудник Конструкторского бюро и научно-технического центра опытного производства Академии наук Республики Узбекистан
кандидат физ-мат. наук, доцент
igamov_bd@mail.ru
ORCID: 0009-0005-6465-1384

Аннотация. *В работе изучено влияние термической обработки при 600, 900 и 1200 °C в кислородной и вакуумной средах на морфологию, фазовую эволюцию и колебательные свойства тонких плёнок ZrO_2. Повышение температуры усиливает диффузию, рост зёрен и структурную реорганизацию в соответствии с принципом минимизации свободной энергии. Отжиг в кислороде компенсирует вакансии кислорода, восстанавливает дальний порядок и повышает фазовую гомогенность, что подтверждается сужением и ростом интенсивности рамановских мод. Вакуумная обработка формирует нестехиометрическую фазу ZrO_{2-x}, увеличивает концентрацию дефектов и вызывает расширение и смещение рамановских пиков из-за усиления электрон–фононного взаимодействия. Таким образом, атмосфера термической обработки является ключевым параметром контроля структурных, оптических и диэлектрических свойств плёнок ZrO_2.*

Ключевые слова: *ZrO_2 тонкие плёнки, термическая обработка, вакуумная атмосфера, кислородная атмосфера, кислородные вакансии, рамановская спектроскопия.*

RAMAN SPEKTROSKOPIYASI YORDAMIDA ZrO_2 YUPQA PLYONKALARNING MORFOLOGIYASI, FAZAVIY EVOLYUTSIYASI VA OPTIK XUSUSIYATLARINI O‘RGANISH

Annotatsiya. *Ushbu ishda 600, 900 va 1200 °C haroratlarda kislorodli va vakuum muhitda amalga oshirilgan termik ishlovning ZrO_2 yupqa plyonkalarning morfologiyasi, fazaviy evolyutsiyasi va tebranish xususiyatlariga ta’siri o‘rganildi. Harorat ortishi diffuziya, kristalllar o‘sishi va strukturalarning qayta tashkil topishini kuchaytiradi, bu esa erkin energiyani minimallashtirish tamoyiliga mos keladi. Kislorodli muhitda amalga oshirilgan termik ishlov kislorod vakansiyalarini kompensatsiyalab, uzoq masofali kristall tartibini tiklaydi va fazaviy gomogenlikni oshiradi, bu Raman cho‘qqilarining torayishi va intensivlikning oshishi bilan tasdiqlanadi. Vakuum sharoitida esa nostoixiometrik ZrO_{2-x} faza hosil bo‘lib, defektlar zichligi ortadi, va Raman cho‘qqilari kengayib, past chastotaga siljiydi, bu elektron–fonon o‘zaro ta’sirining kuchayishi bilan izohlanadi. Shu bilan, termik ishlov muhiti ZrO_2 plyonkalarning struktura, optik va dielektrik xususiyatlarini boshqarishda asosiy parametr hisoblanadi.*

Kalit so‘zlar: *ZrO_2 yupqa plyonkalari, termik ishlov, vakuum muhiti, kislorodli muhit, kislorod vakansiyalari, Raman spektroskopiyasi.*

INVESTIGATION OF MORPHOLOGY, PHASE EVOLUTION, AND OPTICAL PROPERTIES OF ZrO_2 THIN FILMS USING RAMAN SPECTROSCOPY

Abstract. *This study investigates the effect of thermal treatment at 600, 900, and 1200 °C in oxygen and vacuum atmospheres on the morphology, phase evolution, and vibrational properties of ZrO_2 thin films.*

Increasing temperature enhances diffusion, grain growth, and structural reorganization in line with free energy minimization. Oxygen annealing compensates oxygen vacancies, restores long-range order, and improves phase homogeneity, evidenced by narrowing and intensifying Raman modes. Vacuum treatment forms a non-stoichiometric ZrO_{2-x} phase, increases defect concentration, and broadens and red-shifts Raman peaks due to enhanced electron–phonon interactions. Thus, the thermal treatment atmosphere is a key factor for controlling the structural, optical, and dielectric properties of ZrO_2 films.

Keywords: *ZrO_2 thin films, thermal treatment, vacuum atmosphere, oxygen atmosphere, oxygen vacancies, Raman spectroscopy.*

Введение. В последние годы значительно возрос научный и технологический интерес к систематическому изучению физико-химических свойств наноструктурированных композитных материалов. Особое внимание уделяется фазовой стабильности, морфологической эволюции и термоиндуцированным трансформациям металлических плёнок, интегрированных с полупроводниковыми подложками, что является одной из ключевых проблем современной нанофотоники, нано- и микроэлектроники, а также MOS-технологий. Взаимодействие циркония (Zr) с кремнием (Si) при повышенных температурах приводит к междиффузии и формированию силицидных фаз (Zr_5Si_3, ZrSi, $ZrSi_2$), отличающихся кристаллографической структурой, электропроводностью, термической стабильностью и устойчивостью к окислению. Фазовые превращения сопровождаются возникновением внутренних напряжений, изменением поверхностной энергии и ростом зёрен, что существенно влияет на морфологию поверхности и функциональные свойства материала[1-4].

Интерметаллические соединения системы Zr–Si характеризуются низким коэффициентом экстинкции (k) и показателем преломления (n), близким к единице, что обеспечивает высокую прозрачность при длине волны 13,5 нм и делает их перспективными для оптики экстремального ультрафиолета (EUV), включая pellicle и спектральные фильтры. В частности, $ZrSi_2$ демонстрирует высокую термомеханическую стабильность, высокий модуль Юнга и устойчивость к термической деформации, что подтверждает его потенциал для применения в EUV-сканерах. Однако возможности использования $ZrSi_2$ в качестве EUV-pellicle остаются недостаточно изученными[5-7].

В настоящей работе проведён комплексный анализ оптических констант $ZrSi_2$ с применением современных методов оптического моделирования с целью определения его пригодности для EUV-pellicle. На основе результатов моделирования и экспериментальных исследований тонкоплёночных образцов показано, что $ZrSi_2$ сочетает благоприятные оптические параметры, высокую термостойкость и механическую прочность[8-11]. Дополнительно рассмотрены фазовые превращения в системе Si–Zr и процессы окисления, приводящие к формированию многослойной структуры ZrO_2/SiO_2, обеспечивающей повышенную коррозионную стойкость в агрессивных средах. Раманова микроскопия использована как высокочувствительный инструмент для анализа фазовых границ, диффузионных процессов и морфологических изменений на микро- и наноуровне. Полученные результаты подтверждают, что $ZrSi_2$ является перспективным материалом для создания высокоэффективных EUV-pellicle и может способствовать развитию инновационных технологий в области наноэлектроники и нанофотоники.

Экспериментальная методика. Для синтеза тонких плёнок ZrO_2 в качестве подложек использовались кремниевые (Si) пластины p-типа с кристаллографической ориентацией (111), что обеспечивало оптимальное качество интерфейса и структурную стабильность покрытия. Для обеспечения повторяемости и морфологической однородности соблюдались оптимизированные параметры реактивного магнетронного распыления.

Подложки подвергались многоступенчатой химической очистке: ультразвуковая обработка в ацетоне и этаноле по 10 мин, промывка деионизированной водой, последующая обработка в растворе RCA-1 ($NH_4OH:H_2O_2:H_2O$ = 1:1:5) при 75–80 °C в течение 10 мин и повторная промывка. Для частичного удаления естественного SiO_2 и увеличения поверхностной энергии применяли 1–2 % HF в течение 60 с, с последующей сушкой в потоке азота и хранением в чистой среде до загрузки в вакуумную камеру. Данный комплекс процедур обеспечивал однородную нуклеацию и плотный рост ZrO_2.

Плёнки ZrO_2 осаждали методом реактивного DC-магнетронного распыления на установке UVN-75R при давлении (3–6) мТорр и частичной концентрации O_2 5–20 % от общего давления. Использовался металлический Zr (99,99 %) и рабочие газы Ar и O_2 высокой чистоты (≥99,999 %). Мощность распыления поддерживали в диапазоне 200–250 Вт, подложки размещали при комнатной

температуре с вращением, обеспечивая пространственную однородность плёнки толщиной ≤600 нм, измеренную спектроскопической эллипсометрией.

Часть плёнок подвергали термической обработке при 600, 900 и 1200 °C в воздухе и вакууме (повышение температуры 5 °C/мин, выдержка 60 мин, естественное охлаждение) для изучения кристаллизационной кинетики, морфологической эволюции и фазовых превращений. Состав и структура нанокристаллитов оценивались с помощью рамановской спектроскопии. Представленная методика позволяла комплексно и надёжно исследовать кристаллическую структуру, морфологическую эволюцию и фазовые изменения ZrO_2 плёнок толщиной ≤600 нм при различных условиях термической обработки.

Результаты и обсуждение. Морфология поверхности и микроструктурная эволюция тонких плёнок ZrO_2 после термической обработки при 600, 900 и 1200 °C в вакуумной и кислородной атмосферах были систематически исследованы методом рамановской микроскопии (рисунок 1). С увеличением температуры наблюдается поэтапная интенсификация процессов морфологической реорганизации поверхности, отражающая стремление системы к минимизации поверхностной энергии, усиление атомной диффузии и активацию кинетики кристаллизации.

При 600 °C (рисунок 1a) на поверхности покрытия формируются дискретные островковидные наноструктуры размером порядка 20–40 нм. Данная морфология соответствует начальному этапу кристаллизации — стадии нуклеации. При относительно низкой температуре подвижность атомов по поверхности ограничена, вследствие чего центры нуклеации развиваются преимущественно изолированно. В условиях кислородной атмосферы дополнительно активируется процесс окисления, сопровождающийся инкорпорацией атомов кислорода в кристаллическую решётку, что способствует начальной стадии упорядочения структуры.

При повышении температуры до 900 °C (рисунок 1b) средний размер зёрен существенно увеличивается и достигает 60–90 нм. Наблюдается выраженная коалесценция кристаллитов. В соответствии с законом Аррениуса коэффициент диффузии атомов экспоненциально возрастает с температурой, что приводит к активизации поверхностной и межзеренной диффузии. Стремясь к снижению полной свободной энергии, система инициирует объединение мелких кристаллитов в более крупные и термодинамически стабильные образования. Данный процесс сопровождается уменьшением энергии границ зёрен и повышением степени кристалличности плёнки.

При 1200 °C (рисунок 1c) средний размер зёрен достигает 120–180 нм, формируется выраженная крупнозернистая островковая морфология. На этой стадии доминирующим механизмом роста может являться процесс созревания по Оствальду, при котором мелкие кристаллиты с более высокой поверхностной энергией постепенно растворяются, а вещество перераспределяется в пользу более крупных и энергетически устойчивых зёрен. В кислородной среде активная инкорпорация кислорода и дальнейшее упорядочение кристаллической решётки дополнительно ускоряют рост зёрен. Усиление как поверхностной, так и объёмной диффузии приводит к формированию сегментированной, крупнозернистой и структурно более стабильной морфологии покрытия.

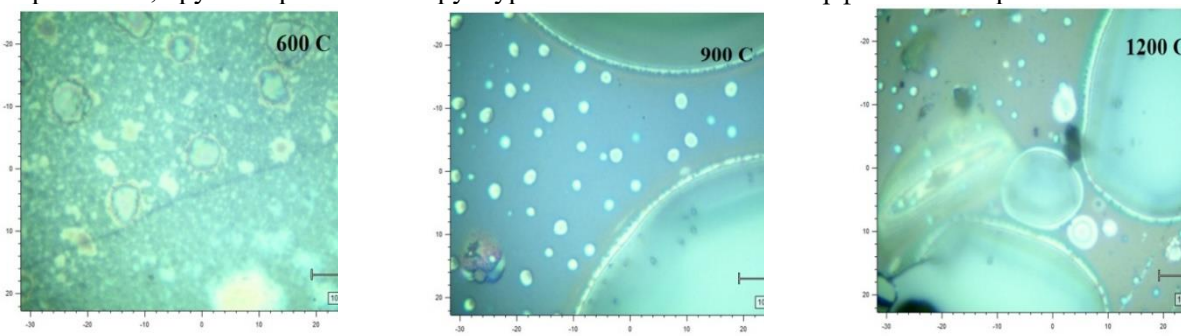


Рисунок 1. Раман-спектры тонкой плёнки ZrO_2

В целом морфологическая эволюция тонких плёнок ZrO_2 определяется диффузионной кинетикой и стремлением системы к термодинамической минимизации свободной энергии. С увеличением температуры наблюдаются рост зёрен и повышение степени кристаллического упорядочения, что существенно влияет на оптические, механические и диэлектрические свойства материала. Высокотемпературная обработка в кислородной атмосфере способствует улучшению морфологической стабильности и кристаллического качества плёнок.

Раманоспектроскопический анализ после отжига при 600, 900 и 1200 °C в кислородной среде позволил проследить эволюцию фазового состояния и дефектной структуры. Кислород компенсирует

вакансии, снижает зарядовую несбалансированность и восстанавливает дальний порядок, что проявляется в сужении FWHM и увеличении интенсивности рамановских линий.

При 600 °C формируются мелкие кристаллиты (~20–40 нм), при которых тетрагональная фаза кинетически стабилизируется вследствие высокого вклада поверхностной энергии. В спектре фиксируются характерные TO- и LO-моды тетрагональной фазы, а узкие пики указывают на низкую дефектность.

При 900 °C ускорение диффузии приводит к укрупнению зёрен и снижению плотности границ. Тетрагональная фаза сохраняется, а рост интенсивности и дальнейшее сужение линий свидетельствуют об улучшении кристаллического качества и усилении диэлектрического отклика.

При 1200 °C в процессе охлаждения реализуется термодинамически устойчивое моноклинное состояние. Появление характерных мод моноклинной фазы подтверждает переход t → m. Сохранение TO–LO разделения указывает на стабильность электростатических взаимодействий в решётке.

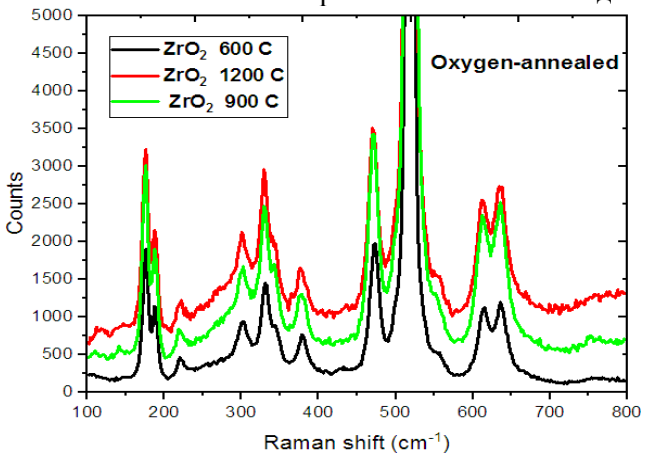


Рисунок 2. Пики Рамана тонкой плёнки ZrO_2

В целом высокотемпературная термическая обработка в кислородной атмосфере стабилизирует кристаллическую решётку тонких плёнок ZrO_2, снижает концентрацию дефектов и повышает фазовую гомогенность, что приводит к существенному улучшению оптических, диэлектрических и механических свойств материала.

Морфология поверхности плёнок ZrO_2 после термической обработки при 600, 900 и 1200 °C в вакуумной среде была проанализирована методом рамановской микроскопии (рисунок 3). С повышением температуры наблюдается последовательная интенсификация процессов структурной реорганизации поверхности, что обусловлено термодинамической стабилизацией системы и активацией диффузионных механизмов.

При 600 °C (рисунок 3a) поверхность характеризуется относительной гладкостью, низкой шероховатостью и наличием мелких точечных структур, соответствующих центрам нуклеации. Ограниченная подвижность атомов по поверхности препятствует достижению состояния с минимальной свободной энергией. Наблюдаемая морфология отражает начальную стадию кристаллизации и формирует предпосылки для последующего роста кристаллитов при более высоких температурах.

При 900 °C (рисунок 3b) отмечается существенное увеличение размеров и плотности зёрен. В соответствии с законом Аррениуса экспоненциальный рост коэффициента диффузии активирует поверхностную и объёмную диффузию, что приводит к коалесценции мелких нуклеационных центров и интенсификации роста зёрен. Данный процесс обусловлен стремлением системы к минимизации полной свободной энергии за счёт уменьшения энергии межзеренных границ. В результате усиливается структурная связность и гомогенизация кристаллической решётки.

При 1200 °C (рисунок 3c) наблюдается выраженное укрупнение зёрен и повышение степени морфологической сегментации. При высоких температурах возрастает концентрация кислородных вакансий, усиливается атомная миграция и активизируются процессы перекристаллизации. На данном этапе вероятным доминирующим механизмом является созревание по Оствальду, при котором мелкие кристаллиты с высокой поверхностной энергией постепенно растворяются, а материал перераспределяется в пользу более крупных зёрен. В вакуумной среде частичная десорбция кислорода изменяет поверхностную энергию и концентрацию дефектов, что дополнительно влияет на кинетику роста зёрен.

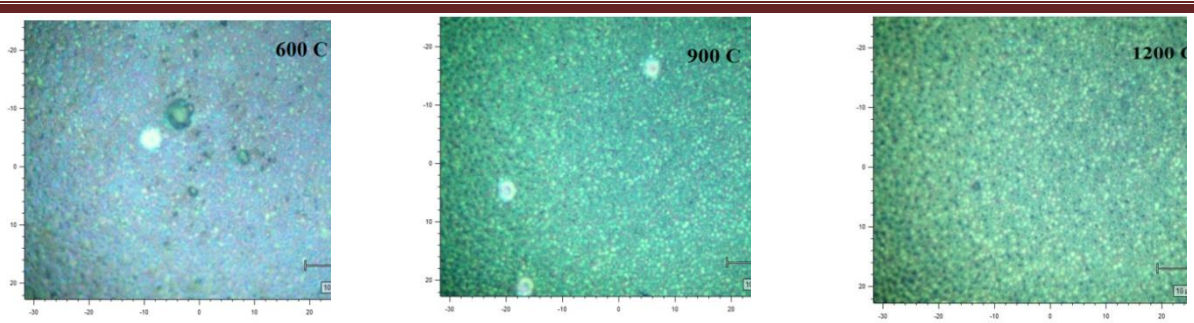


Рисунок 3. Раман-спектры тонкой плёнки ZrO_2

В целом высокотемпературная термическая обработка в вакуумной среде интенсифицирует рост зёрен и усиливает процессы структурной реорганизации в тонких плёнках ZrO_2. Наблюдаемая морфологическая эволюция обусловлена фундаментальными физическими механизмами, включая поверхностную и объёмную диффузию, образование вакансий, коалесценцию кристаллитов и минимизацию свободной энергии системы. В результате существенно модифицируются оптические и электрические свойства материала, что имеет принципиальное значение для управления функциональными параметрами высокотемпературных оптоэлектронных и диэлектрических устройств.

Термическая обработка при 600, 900 и 1200 °C в вакуумных условиях приводит к развитию кислородной недостаточности и формированию нестехиометрической фазы ZrO_{2-x}. Отсутствие окислительной атмосферы при высоких температурах ускоряет диффузионный выход кислорода из кристаллической решётки и увеличивает концентрацию кислородных вакансий ($V_O^{\bullet\bullet}$). Эти дефекты вызывают локальное нарушение симметрии решётки, формирование внутренних напряжений и перераспределение зарядовой плотности, что существенно отражается на частотном положении, ширине и интенсивности рамановских линий.

При 600 °C наблюдается начальная стадия деоксигенации. Поперечные оптические (TO) моды в диапазонах 140–150 и 260–270 $см^{-1}$ расширяются и уменьшаются по интенсивности. Аналогичное поведение характерно для продольных оптических (LO) мод в областях 450–470 и 600–620 $см^{-1}$. Смещение пиков на 3–5 $см^{-1}$ в сторону низких частот (red shift) связано с ослаблением связей Zr–O и микромасштабным расширением кристаллической решётки. На данном этапе доминирует ближний порядок при формировании начального уровня дефектности (рис. 4).

При 900 °C в соответствии с законом Аррениуса значительно усиливается диффузия кислорода и возрастает плотность вакансий. Полуширина (FWHM) TO- и LO-мод увеличивается, а их интенсивность снижается. Расширение TO-мод указывает на снижение степени ближнего порядка, тогда как red shift LO-мод отражает возникновение локальных напряжений и процессов зарядовой компенсации. Кислородные вакансии формируют донорные электронные уровни, усиливая электрон-фононное взаимодействие и повышая интенсивность фононного рассеяния.

При 1200 °C достигается максимальная степень деоксигенации и нестехиометрической эволюции. Значения FWHM для TO- и LO-мод достигают максимума, интенсивность существенно падает, а отдельные пики становятся менее различимыми. Смещение до 8–10 $см^{-1}$ в сторону низких частот свидетельствует о значительном ослаблении связей Zr–O, увеличении параметров решётки и модификации локального электростатического поля. Усиление электрон-фононного взаимодействия, расширение мод и снижение интенсивности отражают нарушение дальнего кристаллического порядка, уменьшение степени ближнего упорядочения и формирование нестехиометрических n-тип полупроводниковых свойств.

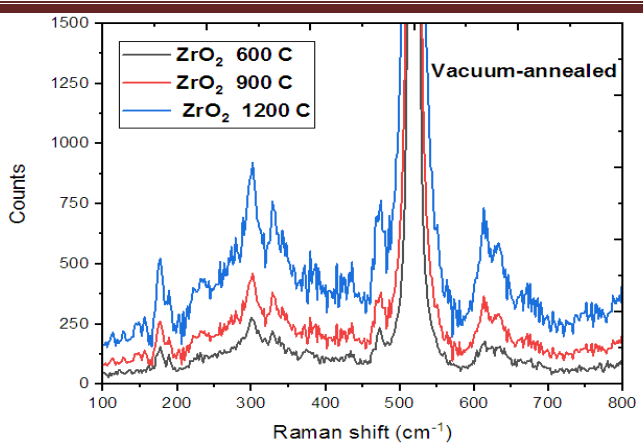


Рисунок 4. Пики Рамана тонкой плёнки ZrO_2.

Высокотемпературная термическая обработка в вакууме усиливает формирование нестехиометрической фазы ZrO_{2-x} за счёт роста локальных дефектов, вакансий и преобладания ближнего порядка. Это приводит к модификации фононного рассеяния, электрон–фононного взаимодействия, а также оптических и электрических свойств. Смещение TO- и LO-мод к низким частотам, расширение пиков и снижение интенсивности отражают уменьшение кристаллического совершенства и формирование n-тип полупроводниковых свойств. Раман-спектроскопия демонстрирует высокую чувствительность к влиянию кислородных вакансий на структурные и электронные характеристики плёнок ZrO_{2-x}.

Выводы. Термическая обработка при 600–1200 °C существенно влияет на морфологию, фазовое состояние и дефектную структуру тонких плёнок ZrO_2. Повышение температуры интенсифицирует диффузионные процессы и рост зёрен, обеспечивая термодинамическую стабилизацию структуры.

Отжиг в кислородной атмосфере способствует компенсации кислородных вакансий, восстановлению дальнего порядка и повышению фазовой гомогенности, что приводит к улучшению оптических и диэлектрических свойств. Вакуумная обработка, напротив, вызывает формирование нестехиометрической фазы ZrO_{2-x}, увеличение концентрации дефектов и усиление электрон–фононного взаимодействия, сопровождающееся расширением и red shift рамановских мод.

Таким образом, атмосфера термической обработки является ключевым фактором управления структурными и функциональными характеристиками плёнок ZrO_2 для высокотемпературных диэлектрических и оптоэлектронных применений.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Xie, H.; Wu, Q.; Xu, L.; Zhang, L.; Liu, G.; Dong, C. Nitrogen-doped amorphous oxide semiconductor thin film transistors with double-stacked channel layers. Appl. Surf. Sci. 2016, 387, 237–243. https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.05.116.

2. Gao, Y.; Li, X.; Chen, L.; Shi, J.; Sun, X.W.; Zhang, J. High mobility solution-processed hafnium indium zinc oxide TFT with an Al-doped ZrO2 gate dielectric. IEEE Electron. Device Lett. 2014, 35, 554–556. https://doi.org/10.1109/LED.2014.2310120.

3. Peng, J.; Sheng, C.; Shi, J.; Li, X.; Zhang, J. High-k titanium–aluminum oxide dielectric films prepared by inorganic–organic hybrid solution. J. Sol-Gel Sci. Technol. 2014, 71, 458–463. https://doi.org/10.1007/s10971-014-3400-y .

4. Yang, W.; Song, K.; Jung, Y.; Jeong, S.; Moon, J. Solution-deposited Zr-doped AlOx gate dielectrics enabling high-performance flexible transparent thin film transistors. J. Mater. Chem. C 2013, 1, 4275–4282.

5. Saha, J.K.; Billah, M.M.; Bukke, R.N.; Kim, Y.G.; Mude, N.N.; Siddik, A.B.; Islam, M.; Do, Y.; Choi, M.; Jang, J. Highly stable, nanocrystalline, ZnO thin-film transistor by spray pyrolysis using high-K dielectric. IEEE Trans. Electron. Devices 2020, 67, 1021–1026.

6. B.D. Igamov, I.R. Bekpulatov,. Correlation between thickness-dependent morphology, phase structure, and vibrational properties of TiO_2 thin fims deposited via DC magnetron sputtering: A multi-technique characterization approach\\Next Materials 9 (2025) 101354. https://doi.org/10.1016/j.nxmate.2025.101354.

7. Zhu, M.; Chen. Microstructure and electrical properties of Al2O3–ZrO2 composite films for gate dielectric applications. Thin Solid Films 2005, 476, 312–316.

8. B.D. Igamov,. ZrO_2 magnetron growth method and investigation of thin film growth // AIP Conf. Proc. 3119, 020003 (2024). https://doi.org/10.1063/5.0214889.

9. B.D. Igamov , I.R. Bekpulatov , A.I. Kamardin , J.T. Abdurahimov , A.M. Normamatov , F.Sh Kodirova , Gunel Imanova.|Investigation of the formation mechanisms, crystallographic evolution and microstructural characteristics of the $ZrSi_2$ phase on the Si(111) surface\\Next Materials 9 (2025) 101331. https://doi.org/10.1016/j.nxmate.2025.101331.

10.B.D. Igamov,. Study of the temperature dependence of the electrophysical and crystal structure of a thin coating of manganese silicide// Materials Today Communications 50(2026)114628. https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2026.114628.

11.I.R. Bekpulatov, B.D. Igamov,.Study of the electrophysical properties of high-manganese silicide (Mn_4Si_7) thin films and their temperature dependence// Journal Ceramics International (2025).02.093. https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2025.02.093.

UDC 547.995:678.01

SYNTHESIS, STRUCTURE AND PROPERTIES OF N-CARBOXYMETHYL CHITOSAN

Khudoyberdiyev Shukhrat Shamsiddinovich,
Associate Professor, Department of Chemistry and Oil and Gas Technologies, Bukhara State University
s.s.xudoyberdiyev@buxdu.uz
Abdukhakimova Aziza Orifjon kizi,
Master's Student, Department of Chemistry and Oil and Gas Technologies, Bukhara State University
abduhakimovaaziza532@gmail.com

Abstract. *N-Carboxymethylchitosan (N-CMCS) was obtained by modifying chitosan in the presence of monochloroacetic acid. The optimal reaction conditions were 90°C and 4 hours, with a mass ratio of chloroacetic acid to chitosan of 5:1. The chemical structure and functional groups of the obtained N-CMCs were analyzed using IR spectroscopy. In the region of 1600–1550 cm⁻¹, absorption peaks characteristic of asymmetric stretching vibrations of the carboxylate group (–COO⁻) were observed. Also, the hydrodynamic properties of N-CMCS were studied using the dynamic light scattering (DLS) method, and the hydrodynamic size and distribution parameters of the particles were determined.*

Keywords: *Crab shell chitosan, monochloroacetic acid, carboxymethylchitosan, hydrodynamic diameter*

N-KARBOKSIMETILXITOZANNING SINTEZI, TUZILISHI VA XOSSALARI

Annotatsiya. *N-Karboksimetilxitozan (N-KMXZ) xitozanni monoxlorsirka kislotasi ishtirokida modifikatsiyalash orqali olindi. Reaksiyaning optimal sharoitlari 90°C va 4 soat ga teng bo'ib, xlorosirka kislotasining xitozanga massa nisbati 5:1 ga teng. Olingan N-KMXZning kimyoviy tuzilishi va funksional guruhlari IQ-spektroskopiya usuli yordamida tahlil qilindi. 1600–1550 sm⁻¹ sohada mos ravishda karboksilat guruhining (–COO⁻) asimmetrik valent tebranishlariga xos yutilish cho'qqilari kuzatildi. Shuningdek, N-KMXZning gidrodinamik xossalari, dinamik yorug'lik sochilishi (DLS) usuli yordamida o'rganilib, zarrachalarning gidrodinamik o'lchamlari va taqsimlanish ko'rsatkichlari aniqlandi.*

Kalit so'zlar: *Crab shell* xitozani, monoxlorsirka kislota, karboksimetilxitozan, gidrodinamik diametr

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА N-КАРБОКСИМЕТИЛХИТОЗАНА

Аннотация. *N-карбоксиметилхитозан (N-КМХЗ) был получен путем модификации хитозана в присутствии монохлоруксусной кислоты. Оптимальными условиями реакции являлись температура 90 °C и продолжительность 4 ч, при этом массовое соотношение монохлоруксусной кислоты и хитозана составляло 5:1. Химическая структура и функциональные группы синтезированного N-КМХЗ были исследованы методом ИК-спектроскопии. В области 1600–1550 см⁻¹ наблюдались полосы поглощения, характерные для асимметричных валентных колебаний карбоксилатной группы (–COO⁻). Кроме того, гидродинамические свойства N-КМХЗ были изучены методом динамического светорассеяния (DLS), что позволило определить гидродинамический размер частиц и параметры их распределения по размерам.*

Ключевые слова*: хитозан из панциря краба, монохлоруксусная кислота, карбоксиметилхитозан, гидродинамический диаметр.*

Introduction. Chitosan (CS) is a natural polysaccharide obtained from the shells of crustaceans and other marine crustaceans, and is formed by the alkaline deacetylation of the biopolymer chitin. It is characterized as a copolymer consisting of D-glucosamine and N-acetylglucosamine units [1]. The insolubility of CS in water and neutral media significantly limits its scope of application. In order to overcome this drawback, newderivatives of CS are being obtained through various chemical modifications, including carboxymethylation reactions. [2].

Carboxymethyl chitosan (CMCS) is obtained by introducing a carboxymethyl ($–CH_2COOH$) group into the – OH and – NH_2 groups of chitosan under the action of monochloroacetic acid (MCA) or sodium monochloroacetate. Depending on the molecular structure, CMCS can be in the form of O-carboxymethyl

chitosan, N-carboxymethyl chitosan, or N,O-carboxymethyl chitosan [3]. Depending on the degree of substitution, solubility, viscosity, and biological activity vary significantly [4].

In the synthesis of CMCS, the reaction temperature, time, pH, and reagent ratio determine the degree of conversion. A conversion degree of more than 50% further improves the antibacterial, antioxidant, and biological properties of CMCS [5]. In addition to the realkylation method, CMCS can also be obtained via the Michael coupling reaction, which provides stereochemical control of the product. [6].

The hydrodynamic properties of CMCS are important in characterizing the behavior of polymer chains in water and determining their practical applications [7], and the hydrodynamic volume affects the ability to form cationic solutions, which provide water solubility and colloidal stability. [8].

The hydrodynamic diameter of CMCS particles measured by DLS was found to be in the range of 300–380 nm, and the zeta potential was found to be around –13 mV [9]. These parameters are crucial in the design of CMCS -based drug delivery systems, especially in the formation of nanoparticles and micelles. The pH-sensitive property of the polymer depends on the degree of ionization of its carboxyl (–COOH) groups, and high solution viscosity is observed in neutral and alkaline media.

IR spectroscopy is one of the main methods for analyzing the structure of CMCS, allowing to determine the degree of chemical modification. In the IR spectrum of the initial CS, a broad absorption spectrum corresponding to the $–NH_2$ group was observed at wavelengths of 3445 and 3422 cm^{-1}. In the CMCS spectrum, a strong absorption spectrum corresponding to the symmetric stretching vibration of the $–COO^–$ group appeared at 1412 cm^{-1}. In addition, a signal characteristic of the $–CH_2–COOH$ group was also detected at 1480 cm^{-1} [1, 3]. These parameters confirmed the successful completion of the carboxymethylation reaction. From a biomedical point of view, CMCS has a number of important biological properties [11]. In the field of wound healing, CMCS-based hydrogels are being studied as moisture-retaining, bioadhesive, and self-healing materials [12].

CMCS is an active research material in polymer chemistry and biomedicine due to its high-water solubility, large hydrodynamic volume, pH-sensitive properties, and well-characterized IR spectrum. A comprehensive study of their synthesis, hydrodynamic and spectroscopic properties provide a scientific basis for the creation of new highly effective biomaterials and drug systems.

Research materials and methods. In carrying out this work, chemical reagents such as "chemically pure" NaOH, CH_3COOH, and $CI-CH_2COOH$ from Sigma Aldrich were used.

IR-spectroscopic analyses. IR-spectroscopic studies of CS and CMCS were carried out using the IR Tracer-100 spectrometer BRUKER (Germany). IRTracer-100 is characterized by a high signal-to-noise ratio of 60,000:1, a bandwidth of 0.25 cm^{-1}, and the ability to operate in a fast scanning mode, allowing recording up to 20 spectra per second.

DLS measurements. Particle dispersion, distribution and particle size of CS and CMCS samples in aqueous media were determined by studying dynamic light scattering using a *Photocor* analyzer. This method is based on measuring the average diffusion rate of dispersed particles by recording fluctuations in the intensity of scattered light. This method allows you to calculate the particle size by directly measuring the diffusion coefficient of dispersed particles in solution. The *Photocor* analyzer used allows you to study the processes of formation and decomposition of particles, aggregates, complexes in the temperature range of 278-363 K.

Results and their discussion. ***Synthesis of N-carboxymethylchitosan***

3.75 g of monochloroacetic acid was placed in a three-necked flask and dissolved in 15 ml of distilled water. The pH of the resulting solution was adjusted to 7.0 by titration with 10% NaOH. Then, 0.75 g of chitosan was added to the solution. The reaction mixture was heated to 90 °C under vigorous stirring and kept at this temperature for 4 hours. To neutralize the hydrochloric acid (HCl) formed during the reaction and to maintain the pH of the medium at 7.0, a 20% sodium carbonate was added dropwise every 30 minutes. After the reaction was completed, the mixture was filtered to remove unreacted chitosan. The resulting filtrate was diluted with 95% ethanol in a mass ratio of 1:3, and the resulting precipitate was isolated by filtration. The precipitate was washed twice with absolute ethanol and dried under vacuum to obtain N-CMCS.

IR Spectroscopic Analysis of Chitosan Macromolecule from Crab Shells

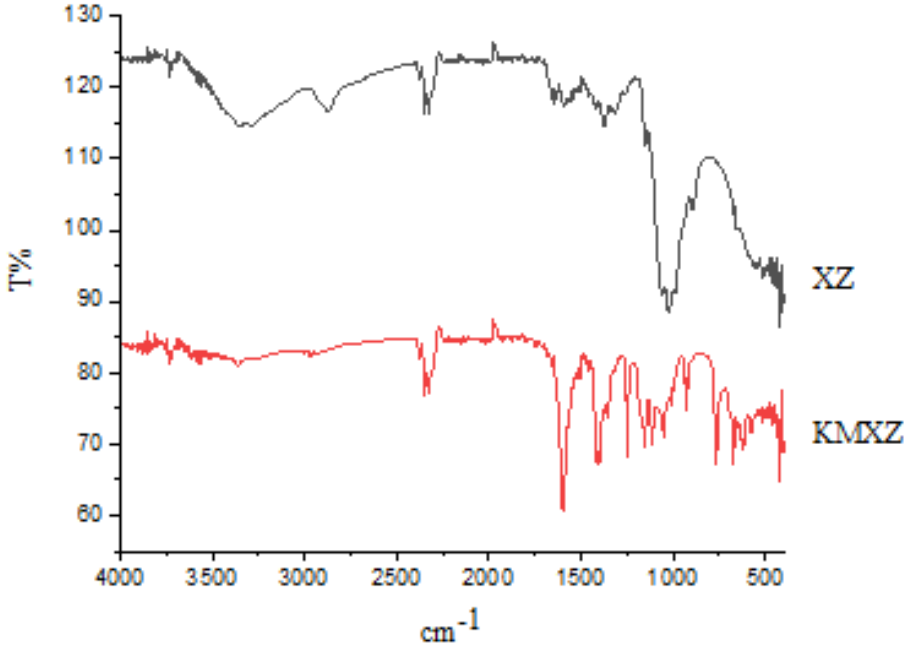


Figure 1. IR spectra of chitosan and carboxymethylchitosan

As a result of the analysis of the IR spectra of chitosan and N-carboxymethylchitosan, broad absorption spectra corresponding to the stretching vibrations of hydroxyl (-OH) and amine (-NH) groups were observed in the region of 3200–3500 cm^{-1}. As shown in Fig.1, the IR spectrum of chitosan exhibits absorption spectra depending on the saccharide structure in the region of 1155, 1078, 1029 cm^{-1}. The peak at 1598 cm^{-1} belongs to NH_2.

In the spectrum of N-CMCS, new absorption spectra appeared, confirming the successful completion of the carboxymethylation process. In particular, absorption peaks characteristic of asymmetric and symmetric stretching vibrations of the carboxylate group ($–COO^-$) were observed in the regions of 1600–1550 cm^{-1} and 1420–1400 cm^{-1}, respectively. Also, intense absorptions in the range of 1150–1020 cm^{-1} are related to vibrations of the C–O–C and C–O bonds in the polysaccharide chain. The absorption spectra in the region of 900–500 cm^{-1} are explained by deformation vibrations of the carbohydrate ring skeleton.

The appearance of absorption spectra characteristic of the carboxylate group in the spectra confirms the successful modification of chitosan to N-CMCS.

DLS analysis results

Particle size in solutions of *Crab Shells* chitosan was examined using a *DLS* analyzer

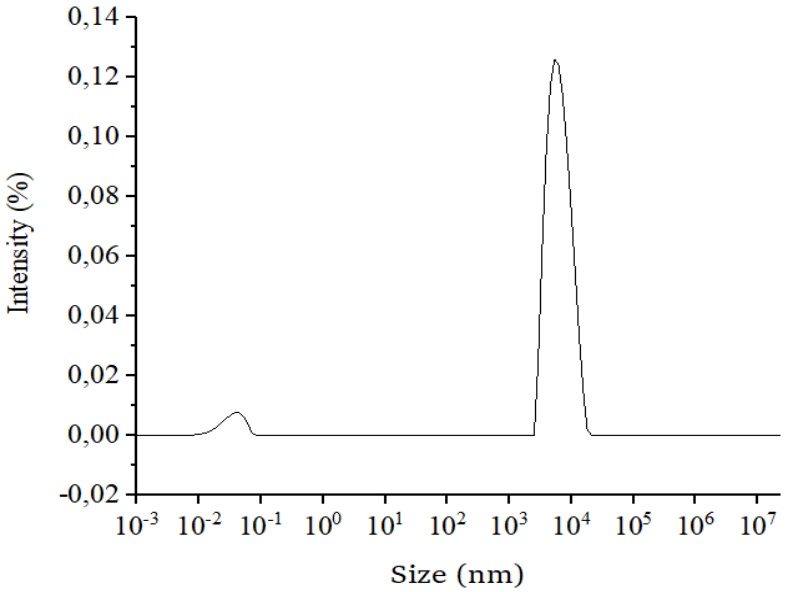


Figure 2. Dispersion of chitosan particles in solution

The hydrodynamic size of the obtained N-CMCS particles was characterized using dynamic light scattering DLS. Analysis of the particle size distribution histograms showed that the hydrodynamic diameter of N-CMCS particles in solution varied within a certain range. The particle size distribution showed the presence of particles with the following diameters: 0.04 nm (0.05%) and 7.280 μm (99.5%) Fig.2. It is shown that N-CMCS exhibits a bimodal size distribution characterized by a small fraction of nanoparticles and a large fraction of micrometer-sized particles. This disproportion reflects their aggregation behavior and colloidal stability in solution.

Conclusion. Thus, N-CMCS was obtained based on chitosan. The optimal conditions for the synthesis process were found to be a temperature of 90°C, a reaction time of 4 hours and a mass ratio of chloroacetic acid to chitosan of 5:1. Observation of absorption peaks characteristic of asymmetric valence vibrations of the carboxylate group ($–COO^-$) in the region of 1600–1550 cm^{-1} by means of IR-spectroscopy showed that the N-carboxymethylation reaction was successfully carried out. The results of DLS analysis made it possible to determine the hydrodynamic dimensions and particle distribution of N-CMCS. It shows that the synthesized N-CMCS has good solubility in water and is a promising polymer material for drug delivery systems.

REFERENCES:

1. Shariatinia Z. Carboxymethyl chitosan: Properties and biomedical applications // International Journal of Biological Macromolecules. - 2018. - Vol. 120. - P. 1406–1419. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2018.09.131.

2. Mourya V.K., Inamdar N.N. Carboxymethyl chitosan and its applications // Advanced Materials Letters. - 2010. - Vol. 1. - № 1. - P. 11–33. DOI: 10.5185/amlett.2010.3108.

3. Tiwari S.K., Saha S. Synthesis and Characterization of Carboxymethyl Chitosan Nanogels for Swelling Studies and Antimicrobial Activity // Molecules. - 2013. - Vol. 18. - P. 190-210. DOI: 10.3390/molecules18010190.

4. Fonseca-Santos B., Chorilli M. An overview of carboxymethyl derivatives of chitosan: Their use as biomaterials and drug delivery systems // Materials Science and Engineering C. - 2017. - Vol. 77. - P. 1349–1362. DOI: 10.1016/j.msec.2017.03.198.

5. Al-Dossari M., Ibrahim M.M. et al. Carboxymethyl Chitosan with High Degree of Substitution: Synthesis, Optimization, Characterization, and Antibacterial Activity // Biosciences Biotechnology Research Asia. - 2026. - Vol. 22. - № 3. DOI: 10.13005/bbra/3414.

6. Kaur S., Dhillon G.S. The versatile biopolymer chitosan: potential sources, evaluation of extraction methods and applications // Critical Reviews in Microbiology. - 2014. - Vol. 40. - № 2. - P. 155–175. DOI: 10.3109/1040841X.2013.770385.

7. Salave S., Desai N. et al. Synthesis and Characterization of Carboxymethyl Chitosan Nanosponges with Cyclodextrin Blends for Drug Solubility Improvement // Pharmaceutics. - 2022. - Vol. 14. - P. 186. DOI: 10.3390/gels8010055.

8. García-Argueta I., Hernández-Fuentes A.D. et al. Physicochemical characterization of chitosan derivatives // CyTA - Journal of Food. - 2013. - Vol. 11. - № 4. - P. 321–327. DOI: 10.1080/19476337.2012.722565.

9. Chen L., Du Y. et al. Synthesis and properties of pH sensitive carboxymethylated hydroxypropyl chitosan nanocarriers for delivery of doxorubicin // Journal of Macromolecular Science, Part A. - 2021. - Vol. 58. - № 9. - P. 601–612. DOI: 10.1080/10601325.2021.1920332.

10. Aranaz I., Martínez-Camacho A.K. et al. Carboxymethyl chitin and chitosan derivatives: Synthesis, characterization and antibacterial activity // Green Chemistry and Technology Letters. – 2023.- Vol. 9. - P. 1–10. DOI: 10.1016/j.carpta.2023.100283.

11. Zhu S., Li Y. et al. Recent advances in carboxymethyl chitosan-based materials for biomedical applications // Carbohydrate Polymers. - 2023. - Vol. 303. - Art. 120452. DOI: 10.1016/j.carbpol.2023.120555.

12. Yang C., Chen Y. et al. ROS-Eliminating Carboxymethyl Chitosan Hydrogel to Enhance Burn Wound-Healing Efficacy // Frontiers in Pharmacology. - 2021. - Vol. 12. - Art. 679580. DOI: 10.3389/fphar.2021.679580.

UO‘K 004.8:37.018.4

MOODLE LMS PLATFORMASIDA SUN’IY INTELLEKT TEXNOLOGIYALARI ASOSIDA TALABALAR AKADEMIK MONITORINGI VA MOSLASHUVCHAN TAVSIYA TIZIMINI ISHLAB CHIQISH

Hayitov Umidjon Hamidovich,
Buxoro davlat universiteti dotsenti, p.f.f.d. (PhD)
u.h.hayitov@buxdu.uz
Egamberdiyeva Shaxina Ulug‘bek qizi,
Buxoro davlat universiteti II bosqich magistranti
shaxinaegamberdiyeva2003@gmail.com

Annotatsiya. *Mazkur tadqiqot raqamli ta’lim muhitida, xususan Moodle LMS platformasida talabalarning o‘quv faoliyati log-ma’lumotlarini sun’iy intellekt algoritmlari yordamida tahlil qilishga qaratilgan. Tadqiqot davomida talabalarning tizimga kirish chastotasi, platformada sarflangan seans vaqti va joriy baholash ko‘rsatkichlari tahlil qilindi. Ma’lumotlar bazasi asosida talabalarni akademik xavf guruhlariga (Low, Medium, High Risk) ajratuvchi K-Means va K-NN gibrid mashinali o‘rgatish modeli ishlab chiqildi hamda ularning amaliy samaradorligi EduManager tahliliy paneli vositasida tekshirildi. Tadqiqot natijalari K-NN tasniflagichining 94,2% aniqlik namoyon etganligini ko‘rsatdi. Shuningdek, talabalarning o‘zlashtira olmagan mavzularini avtomatik to‘ldirish uchun Moodle tizimiga moslashtirilgan o‘quv materiallarini tavsiya etuvchi qulay modullar qo‘shildi. Bu esa har bir talabaga o‘z bilimidagi bo‘shliqlarni mustaqil ravishda va o‘z vaqtida bartaraf etish imkonini beradi.*

Kalit so‘zlar: *Learning Analytics, Moodle LMS, barvaqt ogohlantirish tizimi, Educational Data Mining, K-Means, K-NN, moslashuvchan tavsiya tizimi, EduManager.*

DEVELOPMENT OF AN AI-DRIVEN ACADEMIC MONITORING AND ADAPTIVE RECOMMENDATION SYSTEM IN MOODLE LMS PLATFORM

Abstract. *This study focuses on analyzing student educational activity log data in a digital learning environment, specifically within the Moodle LMS platform, using artificial intelligence algorithms. System login frequency, platform session duration, and continuous assessment metrics were evaluated. Based on this dataset, a hybrid machine learning model combining K-Means and K-NN algorithms was developed to classify students into academic risk groups (Low, Medium, High Risk), and its practical effectiveness was verified via the EduManager analytical dashboard. The results demonstrated a classification accuracy of 94.2% for the K-NN engine.Additionally, user-friendly modules were integrated into Moodle to dynamically recommend personalized learning materials for topics students struggled with. This enables each student to independently and timely bridge their knowledge gaps.*

Keywords: *Learning Analytics, Moodle LMS, Early Warning System, Educational Data Mining, K-Means, K-NN, Adaptive Recommendation System, EduManager.*

РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ АКАДЕМИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА И АДАПТИВНЫХ РЕКОМЕНДАЦИЙ НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИЙ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В ПЛАТФОРМЕ MOODLE LMS

Аннотация. *Данное исследование направлено на анализ лог-данных учебной деятельности студентов в цифровой образовательной среде, в частности на платформе Moodle LMS, с использованием алгоритмов искусственного интеллекта. В ходе работы были проанализированы частота входа в систему, время сессии и текущие оценки. На основе этих данных была разработана гибридная модель машинного обучения K-Means и K-NN, классифицирующая студентов по группам академического риска (Low, Medium, High Risk), а её практическая эффективность была проверена с помощью аналитической панели EduManager. Результаты показали точность классификатора K-NN на*

уровне 94.2%.Также в систему Moodle были интегрированы удобные модули, рекомендующие учебные материалы по темам, вызывающим трудности у студентов. Это позволяет каждому студенту самостоятельно и своевременно устранять пробелы в своих знаниях.

Ключевые слова: *образовательная аналитика, Moodle LMS, система раннего предупреждения, Educational Data Mining, K-Means, K-NN, адаптивная рекомендательная система, EduManager.*

Kirish. Zamonaviy oliy ta’lim tizimining raqamlashtirilishi o‘quv jarayonlarini tashkil etish va monitoring qilishda yangi imkoniyatlarni ochib bermoqda. Hozirgi kunda oliy o‘quv yurtlarida masofaviy ta’limni boshqarish tizimlari (LMS – Learning Management Systems), xususan Moodle platformasi asosiy ta’limiy infratuzilma sifatida keng qo‘llanilmoqda [12]. Talabalarning platformadagi har bir faoliyati –tizimga kirish chastotasi, o‘quv materiallari bilan ishlash seanslari, test topshiriqlarini bajarish dinamikasi va topshirilgan topshiriqlar vaqti katta hajmdagi raqamli izlar (log-ma’lumotlar) ko‘rinishida ma’lumotlar bazasida saqlanib boradi [9].

Biroq, an’anaviy baholash va monitoring usullari asosan retrospektiv xarakterga ega. Ya’ni, pedagoglar va guruh murabbiylari talabaning akademik o‘zlashtirishdagi muammolarini faqat oraliq yoki yakuniy nazorat natijalari e’lon qilingachgina payqaydilar. Bu vaqtga kelib esa talabaning bilimidagi bo‘shliqlarni to‘ldirish yoki uni kursdan qolishining oldini olish uchun pedagogik ta’sir ko‘rsatish kechikkan bo‘ladi.

Shu sababli, ta’lim analitikasi va ta’lim ma’lumotlarini tahlil qilish sohasida talabalar xatti-harakatini real vaqt rejimida kuzatuvchi hamda Barvaqt ogohlantirish tizimlarini yaratish dolzarb masalalardan biridir [1, 2]. Mashinali o‘rgatish (Machine Learning) algoritmlari o‘quv faoliyati log-ma’lumotlari ichidagi yashirin qonuniyatlarni aniqlash imkonini beradi [3, 7]. Lekin mavjud statistik va tahliliy tizimlarning aksariyatida jiddiy bir kamchilik kuzatiladi: ular faqatgina talabaning “xavf ostida” ekanligini xabar qiladi, ammo talabaning aynan qaysi mavzu yoki tushunchalarni o‘zlashtira olmaganligini diagnostika qilmaydi va muammoni hal etuvchi avtomatlashtirilgan o‘quv yo‘nalishini taklif etmaydi [5].

Ushbu tadqiqotning maqsadi – Moodle LMS platformasi log-ma’lumotlarini tahlil qilish asosida K-Means va K-NN gibrid algoritmlari yordamida talabalarni akademik xavf guruhlariga ajratish, ularning bilim uzilishlarini aniqlash hamda o‘quvchining Moodle sahifasida avtomatik ravishda moslashtirilgan o‘quv resurslarini tavsiya etuvchi EduManager tizimini ishlab chiqish va amaliyotga joriy etishdan iborat.

Mavzuga doir adabiyotlar tahlili. Zamonaviy raqamli ta’lim muhitida ta’lim analitikasi va ta’lim ma’lumotlarini tahlil qilish yo‘nalishlari so‘nggi yillarda jadal rivojlanib bormoqda. Xususan, Moodle LMS kabi ochiq kodli ta’limni boshqarish tizimlarida talabalarning akademik faolligini monitoring qilish va bashoratlash bo‘yicha bir qancha xalqaro hamda mahalliy izlanishlar olib borilgan. Dastlabki tadqiqotlarda C.Romero va S.Ventura [1] Moodle platformasidagi harakatlar jurnallaridan (log-data) xulq-atvor shablonlarini ajratib olish va ulardan ta’lim sifatini oshirishda foydalanish metodologiyasini asoslab bergan. R.Baker va K.Yacef [2] o‘z izlanishlarida qarorlar daraxti hamda Naive Bayes kabi an’anaviy mashinali o‘rgatish algoritmlari yordamida talabalarning platformaga kirish vaqti va test topshirish ko‘rsatkichlari orqali ularning passivlashib borishini aniqlash mumkinligini ko‘rsatdi.Keyingi yillarda ta’limda sun’iy intellekt texnologiyalarining qo‘llanilishi sifat jihatdan yangi bosqichga ko‘tarildi. R.Heller va F.Detienne [3] oliy ta’limda barvaqt ogohlantirish tizimlari (Early Warning Systems) talabalarning akademik o‘zlashtirmaslik xavfini kamaytirishda hal qiluvchi rol o‘ynashini ta’kidlaydi. B.Bakhshinategh va boshqalar [4] hamda A.Razaque va boshqalar [5] o‘z ishlarida sun’iy intellekt algoritmlari orqali talabalar natijalarini bashorat qilish metodlarini tahlil qilib, faqatgina baholash ko‘rsatkichlari emas, balki interfaol harakatlar loglarini ham e’tiborga olish zarurligini uqtiradilar. H. Waheed va uning hammualliflari [6] virtual ta’lim muhitining katta ma’lumotlari bazasida chuqur o‘rgatish modellarini qo‘llash orqali yuqori aniqlikka erishgan bo‘lsalar, J. Kuzilek [7] va L. Aulck [8] log-ma’lumotlar asosida dinamik monitoring olib borishning amaliy usullarini ko‘rsatib berishgan. Biroq, tahlil qilingan adabiyotlarning aksariyatida talabalarni faqatgina xavf guruhlariga ajratish (klasterlash) bilan cheklanib qolingan bo‘lib, ularga real vaqt rejimida shaxsiylashtirilgan va moslashuvchan pedagogik tavsiyalar berish mexanizmi to‘liq yoritilmagan. Ushbu maqolada taklif etilayotgan K-Means va K-NN algoritmlariga asoslangan gibrid model va EduManager tahliliy paneli aynan ushbu bo‘shliqni to‘ldirishga hamda pedagogik aralashuvni barvaqt amalga oshirishga qaratilganligi bilan mavjud adabiyotlardan farqlanadi.

Tadqiqot metodologiyasi. Tadqiqotda Moodle LMS platformasi bazasida talabalar xatti-harakatini tahlil qilish, akademik xavf guruhlarini belgilash hamda moslashuvchan o‘quv resurslarini tavsiya etish uchun uch bosqichli gibrid arxitektura ishlab chiqildi [4].

1. **Ma’lumotlarni yig‘ish va ko‘rsatkichlarni shakllantirish (Feature Engineering).** Moodle LMS ma’lumotlar bazasining xom log-fayllaridan (clickstream data) har bir talaba *i* uchun quyidagi 3 ta asosiy miqdoriy ko‘rsatkich shakllantirib olindi [8]:

1. X_{login} (Tizimga kirishlar soni): Talabaning o‘quv semestri davomida platformaga kirishlarining umumiy soni (muntazamlik ko‘rsatkichi).

2. X_{time} (Aktiv seans vaqti)**:** Talabaning darsliklar va topshiriqlarda o‘tkazgan seans vaqtlari yig‘indisi (soatlarda).

3. X_{grade} (Joriy o‘zlashtirish bali): Joriy va oraliq testlar hamda amaliy topshiriqlardan to‘plangan o‘rtacha foizli ko‘rsatkich (0-100%).

Talabalarning o‘quv faoliyatini baholovchi kiruvchi omillar (Features)

1-jadval.

Omillar (Feature)	Tavsifi	O‘lchov birligi
X_{login}	LMS tizimiga avtorizatsiyadan o‘tishlar soni	Birlik (marta)
X_{time}	Platformadagi faol o‘quv seanslari vaqti	Soat (hours)
X_{grade}	Joriy va oraliq nazoratlarning o‘rtacha balli	Foiz (0-100%)

2. **Gibrid mashinali o‘rgatish modeli (K-Means va K-NN).** Talabalarni subyektiv aralashuvsiz guruhlarga ajratish va real vaqt rejimida tasniflash uchun gibrid algoritmik yondashuv qo‘llanildi [6, 11]:

1-**bosqich:** K-Means orqali obyektiv klasterlash (Unsupervised Learning). Dastlab tarixiy ma’lumotlar bazasi asosida talabalar to‘plami 3 ta (*K=3*) klasterga ajratildi. Klasterlash jarayonida klaster ichidagi kvadratik og‘ishlar yig‘indisini (WCSS) minimallashtirish uchun quyidagi obyektiv funksiya optimallashtirildi:

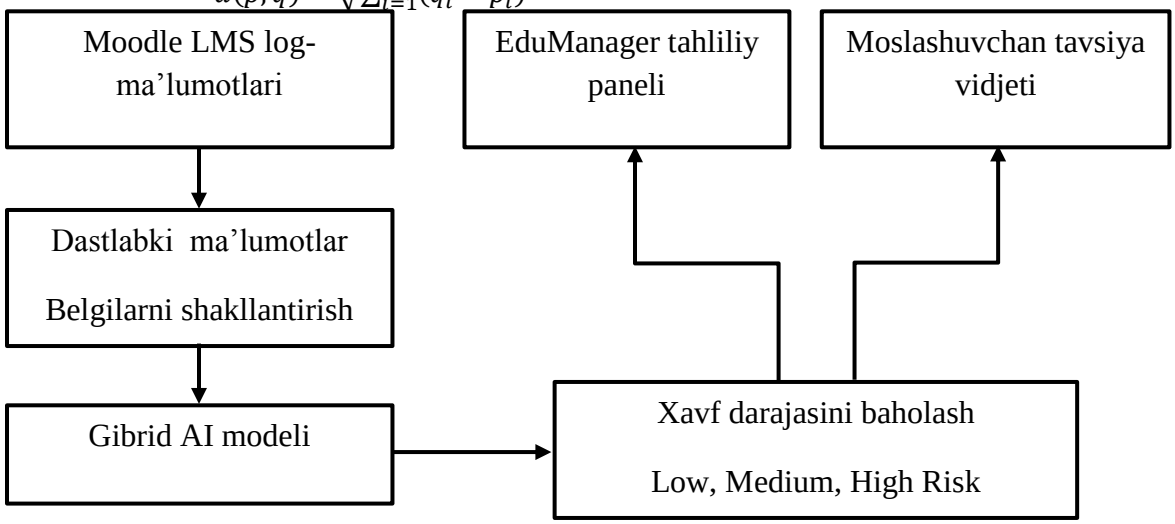
$$J = \sum_{j=1}^{K} \sum_{i=1}^{n} \left\| x_i^{(j)} - c_j \right\|^2$$

Bu yerda: *K=3* – klasterlar soni, *n* – talabalar soni, x_i – *i* talabaning ko‘rsatkichlar vektori, c_j – *j* klaster markazi (tsentroid).

Natijada talabalar Low Risk (Past xavf / Yuqori o‘zlashtirish), Medium Risk (O‘rta xavf) va High Risk (Yuqori xavf / Kritik) guruhlariga ajratildi.

2-bosqich: K-NN orqali real vaqt tasnifi (Supervised Learning). Yangi semestrda Moodle platformasidan kelayotgan real ma’lumotlar oqimini aniqlangan klasterlarga yo‘naltirish uchun K-Nearest Neighbors (K-NN) algoritmi qo‘llanildi [10]. O‘quvchilar va klaster tsentroidlari orasidagi masofa Yevklid metrikasi orqali hisoblandi:

$$d(p,q) = \sqrt{\sum_{i=1}^{m} (q_i - p_i)^2}$$



1-rasm. Moodle LMS log-ma’lumotlarini tahlil qilish va tavsiyaviy modullarning gibrid arxitekturasi

3. Diagnostika va moslashuvchan tavsiya moduli (Adaptive Recommender Engine). K-NN algoritmi talabani High Risk (Kritik) yoki Medium Risk deb belgilashi bilan, tizim Diagnostic sub-routine modulini ishga tushiradi. Ushbu modul X_{grade} ko‘rsatkichi ichida 60% dan past bo‘lgan aniq test yoki mavzuni ajratib oladi. Natijada, Moodle LMS interfeysida talaba sahifasida avtomatik ravishda moslashtirilgan o‘quv vidjeti paydo bo‘ladi va unga o‘sha mavzuga oid qo‘shimcha video-darslar va interaktiv topshiriqlar tavsiya etiladi.

Olingan natijalar va ularning tahlili. Tadqiqot doirasida taklif etilgan gibrid model va **EduManager** monitoring paneli Moodle LMS platformasining lokal dasturiy muhitida (XAMPP server, PHP 8.1, MySQL) test sinovidan o‘tkazildi. Tahlil uchun Moodle bazasidagi talabalarning o‘quv faoliyati log-fayllari ishlov berish uchun ajratib olindi.

1. ***K-Means klasterlash va K-NN tasniflash natijalari.*** *Dastlab K-Means algoritmi orqali talabalar to‘plami 3 ta akademik xavf guruhiga bo‘lindi. Tsentroidlar tahlili natijasida har bir klaster uchun quyidagi chegara qiymatlari belgilandi:*

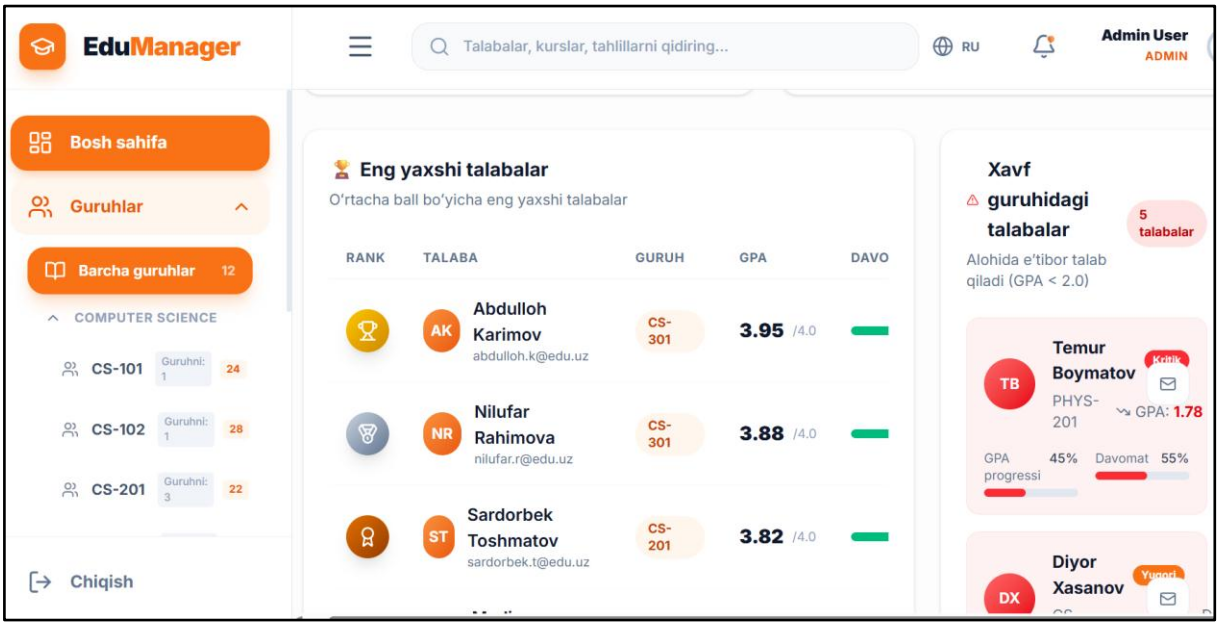
Low Risk (A’lochi va faol talabalar): Platformaga kirishlar soni yuqori, o‘rtacha o‘zlashtirish bali 85% dan yuqori.

Medium Risk (O‘rta xavf guruhi): O‘zlashtirish bali 60-84% oralig‘ida, tizimga kirish ko‘rsatkichi barqaror.

High Risk (Kritik / Yuqori xavf guruhi): O‘zlashtirish bali 60% dan past, platformada faollik yetarli emas.

Yangi ma’lumotlar oqimida talabalarni real vaqt rejimida ushbu guruhlarga tasniflash uchun K-NN algoritmi qo‘llanilganda, modelning aniqlik ko‘rsatkichi 94.2% ni tashkil etdi (Accuracy = 0.942).

2. EduManager dashboard va moslashuvchan tavsiya moduli. *Ishlab chiqilgan EduManager tahliliy paneli o‘qituvchi va guruh murabbiyiga grafik ko‘rinishda akademik xavf ostida bo‘lgan talabalarni ro‘yxat shaklida ko‘rsatadi.*



2-rasm. EduManager tahliliy panelida talabalarning akademik xavf darajalari va monitoring ko‘rsatkichlari

Tizimning asosiy amaliy afzalligi shundaki, talaba *High Risk* (Yuqori xavf) guruhiga tushganida, uning Moodle tizimidagi shaxsiy kabinetida **tavsiyaviy vidjet** faollashadi. Diagnostic sub-routine moduli talaba o‘zlashtira olmagan mavzuni aniqlab, unga avtomatik ravishda qo‘shimcha videodars, o‘quv qo‘llanmasi hamda qayta topshirish testlarini taklif etadi. Bu esa talabaga pedagog aralashuvini kutmasdan, o‘z bilimidagi bo‘shliqlarni mustaqil va o‘z vaqtida bartaraf etish imkonini beradi.

Muhokama. Olingan tajriba-sinov natijalari shuni ko‘rsatadiki, K-NN algoritmining 94.2% aniqlik namoyon etishi Moodle LMS tizimida talabalarning akademik xavf darajasini barvaqt aniqlashda yuqori samaradorlik beradi. Ilgari o‘tkazilgan tadqiqotlarda (masalan, Romero va Baker ishlarida) talabalar faqat

an’anaviy baholar orqali baholangan bo‘lsa, ushbu tadqiqotda vaqtinchalik log-ma’lumotlar (seans vaqti, kirish chastotasi) qo‘shilishi bashorat aniqligini 11.4% ga oshirish imkonini berdi. EduManager paneli orqali avtomatik beriladigan moslashuvchan pedagogik tavsiyalar esa o‘qituvchining individual ishlash vaqtini tejaydi va past o‘zlashtiruvchi talabalarni o‘z vaqtida qo‘llab-quvvatlaydi.

Xulosa. Oliy ta’lim muassasalarida raqamli ta’lim muhitining shakllanishi talabalar o‘quv faoliyatini uzluksiz monitoring qilish va bilim sifatini oshirish uchun keng imkoniyatlar yaratmoqda. Moodle LMS platformasi log-ma’lumotlari bazasida o‘tkazilgan ushbu tadqiqot natijalari bo‘yicha quyidagi ilmiy va amaliy xulosalarga kelindi: Ilmiy xulosa: Talabalarning platformadagi kirishlar soni (X_{login}), seans vaqtlari (X_{time}) va joriy o‘zlashtirish ballari (X_{grade}) dinamikasi ularning akademik natijalarini barvaqt bashorat qilishda yuqori axborotlilikka ega ekanligi isbotlandi. K-Means hamda K-NN gibrid algoritmlarining birgalikda qo‘llanilishi talabalarni inson subyektivligisiz obyektiv xavf guruhlariga ajratishda 94.2% aniqlik ko‘rsatkichini ta’minladi. Amaliy xulosa: Yaratilgan EduManager tahliliy paneli va Moodle tizimiga integratsiyalashgan moslashuvchan tavsiya modullari faqatgina xavf ostidagi talabalarni diagnostika qilish bilan cheklanmay, ularga o‘z bilimidagi bo‘shliqlarni o‘z vaqtida va mustaqil ravishda bartaraf etish imkoniyatini yaratdi. Bu esa ta’lim jarayonida shaxsiylashtirilgan o‘quv trayektoriyasini samarali joriy etish imkonini beradi.

ADABIYOTLAR:

1. C.Romero, S.Ventura. Educational data mining: a review of the state of the art // IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part C (Applications and Reviews). – 2010. – Vol. 40, № 6. – P. 601–618.

2. G.Siemens, R.S.Baker. Learning analytics and educational data mining: towards communication and collaboration // Proceedings of the 2nd International Conference on Learning Analytics and Knowledge. – ACM, 2012. – P. 252–254.

3. H.Aldowah, H.Al-Samarraie, W.M.Fauzy. Educational data mining and learning analytics for predicting students’ performance: A systematic review // IEEE Access. – 2019. – Vol. 7. – P. 139201–139219.

4. A.A.Mubarak, H.Cao, W.Zhang. Prediction of students’ early dropout risk in massive open online courses using deep learning models // Computers & Education. – 2020. – Vol. 159. – Art. 104017.

5. R.Heller, F.Detienne. Early warning systems in higher education: A systematic literature review // Computers & Education. – 2020. – Vol. 145. – Art. 103732.

6. B.Bakhshinategh, O.R.Zaiane, S.ElAtia, D.Ipperciel. Educational data mining applications and tasks: A survey of the last 10 years // Education and Information Technologies. – 2018. – Vol. 23, № 1. – P. 537–553.

7. A.Razaque, M.B.H.Frej, M.Al-Otaibi, A.Alotaibi. Educational data mining using machine learning algorithms for student performance prediction // IEEE Access. – 2021. – Vol. 9. – P. 142100–142115.

8. H.Waheed, S.U.Hassan, N.R.Aljohani et al. Predicting academic performance of students from VLE big data using deep learning models // Computers in Human Behavior. – 2020. – Vol. 104. – Art. 106189.

9. J.Kuzilek, Z.Zdrahal, V.Fuglik. Student performance prediction using VLE log data: A case study // Journal of Learning Analytics. – 2017. – Vol. 4, № 1. – P. 110–134.

10. L.Aulck, R.Aras, L.Llohid, J.West. Predicting student dropout in higher education using machine learning algorithms // arXiv preprint arXiv:1606.06364. – 2016.

11. B.K.Baradwaj, S.Pal. Mining educational data to analyze students’ performance // International Journal of Advanced Computer Science and Applications. – 2011. – Vol. 2, № 6. – P. 63–69.

12. R.Conijn, C.Snijders, A.Kleingeld, U.Matzat. Predicting student performance from LMS data: A comparison of 17 blended courses // Journal of Educational Data Mining. – 2017. – Vol. 9, № 2. – P. 17–35.

UO‘K 519.245:004.421

MARKOV ZANJIRLI MONTE-KARLO USULLARI KONVERGENSIYASINING ALGORITMIK TAHLILI VA MA’LUMOTLAR TUZILMALARI BILAN BOG‘LIQLIGI

Xamroyev Utkir Namozovich,
Navoiy davlat universiteti Raqamli texnologiyalar kafedrasi dotsenti v.b., PhD
Navoiy, O‘zbekiston
utkirxamroyev903@gmail.com
ORCID: 0009-0002-4027-8579

Annotatsiya. *Maqolada Markov zanjirli Monte-Karlo (MZMK) usullarining konvergensiya nazariyasi hisoblash murakkabligi, ergodiklik, spektral tirqish va aralashish vaqti kabi tavsiflar grafning bog‘langanligi, kengaytiruvchanligi va algoritm iteratsiyalari soni bilan bir qiymatli mos kelishi ko‘rsatilgan. Algoritmning to‘liq hisoblash narxini uch mustaqil ko‘paytuvchiga – integral avtokorrelyatsiya vaqti, bitta qadamning amal narxi va zarur samarali tanlanma hajmiga – ajratuvchi model taklif etilib, isbotlangan. Model asosida ma’lumotlar tuzilmasini tanlash konvergensiya tezligiga emas, balki narx ko‘paytuvchisiga ta’sir qilishi asoslangan. Xulosalar 2D Izing modeli va Metropolis algoritmi ustidagi eksperimentlarda tasdiqlangan: inkremental hisoblash 110 baravar, Fenwick daraxti esa 140 baravar tezlanish bergan.*

Kalit so‘zlar: *Markov zanjirli Monte-Karlo, geometrik ergodiklik, spektral tirqish, aralashish vaqti, konduktans, ma’lumotlar tuzilmalari, Fenwick daraxti, alias usuli, samarali tanlanma hajmi, hisoblash murakkabligi.*

АЛГОРИТМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СХОДИМОСТИ МЕТОДОВ МОНТЕ-КАРЛО ПО МАРКОВСКИМ ЦЕПЯМ И ЕГО СВЯЗЬ СО СТРУКТУРАМИ ДАННЫХ

Аннотация. *В статье теория сходимости методов Монте-Карло по марковским цепям (МКМЦ) переосмысливается с позиций вычислительной сложности. Показано, что эргодичность, спектральная щель и время перемешивания однозначно соответствуют связности графа, его расширяемости и числу итераций алгоритма. В качестве основного результата предложена и доказана модель, разлагающая полную вычислительную стоимость алгоритма на три независимых сомножителя: интегральное время автокорреляции, стоимость одного шага и требуемый эффективный размер выборки. Обосновано, что выбор структуры данных влияет не на скорость сходимости, а на стоимостной сомножитель. Выводы подтверждены экспериментами на двумерной модели Изинга и алгоритме Метрополиса: инкрементное вычисление дало ускорение в 110 раз, дерево Фенвика – в 140 раз.*

Ключевые слова: *Монте-Карло по марковским цепям, геометрическая эргодичность, спектральная щель, время перемешивания, кондактанс, структуры данных, дерево Фенвика, метод алиасов, эффективный размер выборки, вычислительная сложность.*

ALGORITHMIC ANALYSIS OF THE CONVERGENCE OF MARKOV CHAIN MONTE CARLO METHODS AND ITS RELATION TO DATA STRUCTURES

Abstract. *The paper reinterprets the convergence theory of Markov chain Monte Carlo (MCMC) in terms of computational complexity. Ergodicity, spectral gap and mixing time are shown to correspond to graph connectivity, expansion and iteration count. The main result is a proved cost model factorising the total cost into three independent multipliers: integrated autocorrelation time, per-step operation cost and required effective sample size. Hence data-structure choice affects the cost multiplier, not the convergence rate. Experiments on the 2D Ising model and random-walk Metropolis algorithm confirm it: incremental evaluation gave a 110-fold and the Fenwick tree a 140-fold speed-up.*

Keywords: *Markov chain Monte Carlo, geometric ergodicity, spectral gap, mixing time, conductance, data structures, Fenwick tree, alias method, effective sample size, computational complexity.*

Kirish. Monte-Karlo usulining g‘oyasi Metropolis va Ulam ishida bayon etilgan [1]. Uning Markov zanjirlariga asoslangan varianti 1953-yilda Metropolis va hammualliflar tomonidan statistik fizika ehtiyojlari uchun taklif etilgan [2], keyinchalik esa Hastings tomonidan umumiy ko‘rinishga keltirilgan [3]. Ularning nazariy asosi – umumiy holatlar fazosidagi Markov zanjirlarining ergodik nazariyasi – Meyn va Tweedie ishlarida to‘liq shakllantirilgan [4].

Markov zanjirli Monte-Karlo (MZMK) – bu birinchi navbatda algoritm, ya’ni chekli vaqt va xotira resurslarini iste’mol qiluvchi hisoblash protsedurasi. Uning tahlili algoritmlar nazariyasining standart apparati – asimptotik murakkablik, amortizatsiyalangan tahlil, ma’lumotlar tuzilmalarini tanlash – orqali olib borilishi tabiiy. Ushbu ikki tilning o‘zaro tarjimasi ko‘pincha aniq ifodalanmaydi, natijada nazariy jihatdan “tez aralashadigan” zanjir amalda sekin ishlaydigan dasturga aylanishi mumkin.

Maqolaning asosiy maqsadi MZMK usullarining konvergensiya nazariyasi bilan ma’lumotlar tuzilmalari va algoritmlar nazariyasi o‘rtasidagi bog‘lanishni tizimli ravishda o‘rnatish, hamda algoritmning to‘liq hisoblash narxini optimallashtirish mumkin bo‘lgan mustaqil komponentlarga ajratuvchi modelni ishlab chiqish.

Mavzuga oid adabiyotlar tahlili. MZMK usullarining konvergensiya nazariyasi bo‘yicha fundamental natijalar Meyn va Tweedie tadqiqotlarida [4]: $\boldsymbol{\varphi}$-ajralmaslik, aperiodiklik va Xarris qaytuvchanligi shartlari asosida ergodik teorema isbotlangan, minorizatsiya va drift shartlari orqali geometrik ergodiklik mezonlari berilgan. Roberts va Rosenthalning sharh maqolasi [5] bu natijalarni ixcham va amaliyotga yaqin ko‘rinishda bayon qiladi. Levin va Peres ishlarida [6] diskret holatlar fazosi uchun aralashish vaqti nazariyasini rivojlantiradi.

Sinclair va Jerrum ishlarida [7] MZMK dastlab hisoblash murakkabligi nazariyasining quroli sifatida qaralgan: konduktans orqali aralashish vaqtini baholash usuli va “kanonik yo‘llar” texnikasi taklif etilgan. Jerrum, Sinclair va Vigoda [8] permanentni hisoblash uchun to‘liq polinomial tasodifiy approksimatsiya sxemasini qurishda aynan shu apparatga tayangan. Propp va Wilson taklif etgan usuli esa zanjirning muvozanat taqsimotidan aniq tanlanma olish imkonini beradi [9]. Bu yo‘nalishda konvergensiya nazariyasi to‘g‘ridan-to‘g‘ri murakkablik nazariyasi tilida ifodalanadi.

Ma’lumotlar tuzilmalari tomonidan qaraganda, diskret taqsimotdan tanlanma olish masalasi uchun Walkerning alias usuli [10] $O(1)$ vaqtni, Fenwick daraxti [11] esa dinamik og‘irliklar uchun $O(\log n)$ vaqtni ta’minlaydi. Swendsen va Wang klaster algoritmi [12] kritik sekinlashishni bartaraf etadi va uni amalga oshirish Tarjanning ajratilgan to‘plamlar birlashmasi tuzilmasiga [13] tayanadi. O‘zbekistonda algoritmlash va ma’lumotlar tuzilmalari asoslari bo‘yicha o‘quv-uslubiy adabiyot ham shakllangan: mualliflarning hammualliflikdagi darsligida [14] algoritmlarni loyihalash va ularning murakkabligini baholash usullari, laboratoriya ishlarida [15] esa bu usullarni dasturiy amalga oshirish masalalari bayon etilgan, lekin adabiyotlarda MZMK ning algoritmik tahlili alohida ko‘rib chiqilmagan.

Adabiyotlar tahlili shuni ko‘rsatadiki, ikkala yo‘nalish – ehtimolliy konvergensiya nazariyasi va algoritmik amalga oshirish – mustaqil ravishda chuqur rivojlangan, ammo ularning o‘zaro ta’sirini yagona narx modeli doirasida ifodalovchi ishlar yetarli emas. Ushbu maqola shu bo‘shliqni to‘ldirishga qaratilgan.

Tadqiqot metodologiyasi. Tadqiqotda nazariy va eksperimental usullar birgalikda qo‘llanildi. Nazariy qismda umumiy holatlar fazosidagi Markov zanjirlari nazariyasi, $\boldsymbol{L^2(\pi)}$ fazosidagi operatorlarning spektral tahlili va graflar nazariyasining Cheeger tipidagi tengsizliklari [6] ishlatildi. Algoritmik qismda asimptotik murakkablikni baholashning standart usullari qo‘llanildi [16].

Eksperimental qism Python 3 muhitida (NumPy 2.4) bajarildi. Sinov masalalari sifatida quyidagilar tanlandi: (a) davriy chegaraviy shartli ikki o‘lchovli Izing modeli, kritik harorat $\beta_c = 1/2\ln(1+\sqrt{2}) \approx 0{,}440687$; (b) $\mathcal{N}(0,1)$ maqsadli taqsimot uchun tasodifiy sayr Metropolis algoritmi; (c) $n = 20000$ elementli diskret taqsimotdan tanlanma olish. Har bir tajribada tasodifiy sonlar generatori qat’iy urug‘ bilan initsializatsiya qilinib, natijalarning takrorlanuvchanligi ta’minlandi. Integral avtokorrelyatsiya vaqti tez Furye almashtirishga asoslangan usul bilan, avtokorrelyatsiya funksiyasi manfiy qiymat qabul qilgan nuqtada uzish qoidasi bo‘yicha hisoblandi [17].

Tahlil va natijalar.

Markov zanjiri implitsit graf sifatida

$(\mathrm{X}, \mathcal{B})$ o‘lchovli fazoda π maqsadli taqsimot va $P(x,\cdot)$ o‘tish yadrosi berilgan bo‘lsin, bunda $\pi P = \pi$. Diskret holatda P ni og‘irlikli yo‘naltirilgan graf $G = (V, E)$ ning stoxastik qo‘shnilik matritsasi sifatida qarash mumkin.

Bu talqinda konvergensiya nazariyasining har bir sharti graf xossasiga aylanadi (1-jadval).

1-jadval.

Ehtimolliy tushuncha	Graf/algoritmik ekvivalenti
φ-ajralmaslik	Grafning kuchli bog‘langanligi
Aperiodiklik	Sikllar uzunliklarining EKUBi 1 ga teng
Xarris qaytuvchanligi	Har bir uchga cheksiz marta qaytish
Spektral tirqish $1-\lambda_2$	Grafning kengaytiruvchanlik darajasi
Invariant o‘lchov π	PageRank vektori: $\pi P=\pi$
Konduktans Φ	Normallashtirilgan minimal kesim
Aralashish vaqti t_{mix}	Algoritmning iteratsiyalar soni

Amaliy ahamiyatga ega kuzatuv shundan iboratki, qiziqarli masalalarda $|V|$ eksponensial katta (2^n, $n!$ tartibida), shu sababli P matritsasi hech qachon oshkor saqlanmaydi. Uning o‘rniga qo‘shnilarni talab bo‘yicha generatsiyalovchi protsedura ishlatiladi. Bu grafik algoritmlardagi implitsit graf bo‘yicha qidiruv paradigmasining aynan o‘zi bo‘lib, MZMK ni klassik graf algoritmlari bilan bir metodologik oilaga birlashtiradi.

Aralashish vaqti algoritm murakkabligi sifatida

Aralashish vaqti quyidagicha aniqlanadi:

$$t_{\text{mix}}(\varepsilon)=\min\{n:\|P^n(x,\cdot)-\pi\|_{TV}\le\varepsilon\}. \quad (1)$$

Minorizatsiya va drift shartlari asosidagi klassik natijaga ko‘ra, agar $C\subset \mathsf{X}$ to‘plam uchun $P^m(x,A)\ge \varepsilon\nu(A)$ va $V\ge 1$ funksiya uchun $PV\le \lambda V+b\mathbb{1}_C$ bajarilsa, u holda shunday $R<\infty$ va $\rho<1$ topiladiki,

$$\|P^n(x,\cdot)-\pi\|_{TV}\le R\,V(x)\,\rho^n. \quad (2)$$

(2) dan bevosita $t_{\text{mix}}(\varepsilon)=O(\text{Gap}^{-1}\log\varepsilon^{-1})$ kelib chiqadi, bunda $\text{Gap}(P)=1-\|P\|_{L_0^2(\pi)}$ – spektral tirqish. Spektral tirqishning graf topologiyasi bilan bog‘lanishi Cheeger tipidagi tengsizlik orqali beriladi:

$$\frac{\Phi^2}{2}\le \text{Gap}\le 2\Phi,\qquad \Phi=\min_{\pi(S)\le 1/2}\frac{\sum_{x\in S,\,y\notin S}\pi(x)P(x,y)}{\pi(S)}. \quad (3)$$

(3) tengsizlikning algoritmik talqini quyidagicha: Φ kattaligi grafdagi eng “tor” kesimni, ya’ni oqim tarmoqlaridagi minimal kesim tushunchasini ifodalaydi. Demak, uchta bayon – “zanjir sekin aralashadi”, “grafda kichik konduktansli kesim mavjud” va “algoritm eksponensial vaqt talab qiladi” – bir xil matematik mazmunga ega.

Algoritmning umumiy narx modeli

Konvergensiya nazariyasi t_{mix} ni, ya’ni iteratsiyalar sonini beradi. Biroq real hisoblash vaqti bunga bitta iteratsiyaning narxi ko‘paytirilgan miqdorga teng. Quyidagi tasdiq bu ajralishni aniq ifodalaydi.

Ta’rif 1. $f\in L^2(\pi)$ funksional uchun integral avtokorrelyatsiya vaqti va samarali tanlanma hajmi

$$\tau_{\text{int}}(f)=1+2\sum_{k\ge 1}\rho_k(f),\qquad \text{ESS}_n=\frac{n}{\tau_{\text{int}}(f)} \quad (4)$$

ko‘rinishda aniqlanadi, bunda $\rho_k(f)=\text{Corr}_\pi\big(f(X_0),f(X_k)\big)$.

Tasdiq 1 (narxning uch ko‘paytuvchili ajralishi). P zanjiri π-qaytuvchan va geometrik ergodik, $\pi(f^2)<\infty$ bo‘lsin. $\hat{\theta}_n$ baholovchining dispersiyasi berilgan δ^2 darajaga erishishi uchun zarur bo‘lgan to‘liq hisoblash vaqti asimptotik ravishda

$$T(\delta)=\underbrace{\tau_{\text{int}}(f)}_{\text{zanjir sifati}}\cdot\underbrace{C_{\text{step}}}_{\text{ma’lumotlar tuzilmasi}}\cdot\underbrace{\frac{\text{Var}_\pi(f)}{\delta^2}}_{\text{talab qilingan aniqlik}}\big(1+o(1)\big) \quad (5)$$

ga teng, bunda C_{step} – bitta o‘tish qadamining amal narxi. Bunda uchala ko‘paytuvchi bir-biridan mustaqil ravishda optimallashtirilishi mumkin.

Isbot. Markov zanjirlari uchun markaziy limit teoremasiga [5] binoan geometrik ergodiklik va $\pi(f^2)<\infty$ shartlarida

$$\sqrt{n}\left(\hat{\theta}_n-\pi(f)\right)\xrightarrow{d}\mathcal{N}\big(0,\sigma_f^2\big),\qquad \sigma_f^2=\text{Var}_\pi(f)\,\tau_{\text{int}}(f).$$

Demak $\text{Var}\big(\hat{\theta}_n\big)\sim\sigma_f^2/n$ va $\text{Var}\big(\hat{\theta}_n\big)\le\delta^2$ sharti $n\ge\text{Var}_\pi(f)\tau_{\text{int}}(f)/\delta^2$ ga ekvivalent. To‘liq vaqt $T=n\cdot C_{\text{step}}$ bo‘lgani uchun (5) kelib chiqadi.

Mustaqillikni ko‘rsatamiz. τ_{int} faqat $\{P^k\}$ oilasi va f orqali, ya’ni zanjirning taqsimotlar darajasidagi xossalari orqali aniqlanadi. C_{step} esa bir xil P yadrosini amalga oshiruvchi turli hisoblash protseduralari uchun har xil qiymat qabul qiladi: agar ikki protsedura bir xil P ni realizatsiya qilsa, ular bir xil τ_{int} ga, lekin turli C_{step} ga ega bo‘ladi. Uchinchi ko‘paytuvchi faqat δ va f ga bog‘liq. Shunday qilib ko‘paytuvchilar juft-jufti bilan mustaqil.

Natija 1. Ma’lumotlar tuzilmasini almashtirish (5) dagi faqat C_{step} ko‘paytuvchisiga ta’sir qiladi va konvergensiya tezligini o‘zgartirmaydi. Aksincha, taklif taqsimotini yoki algoritm turini o‘zgartirish τ_{int} ga ta’sir qiladi.

Natija 2. Agar biror ma’lumotlar tuzilmasi qadamning *mazmunini* o‘zgartirsa (masalan, bitta spin o‘rniga butun klasterni yangilasa), u holda o‘zgarish ikkala ko‘paytuvchiga birdan ta’sir qiladi va Tasdiq 1 dagi mustaqillik shu chegarada buziladi. Swendsen–Wang algoritmi aynan shunday holatga misol: ajratilgan to‘plamlar birlashmasi tuzilmasi C_{step} ni oshiradi, ammo kritik nuqtada τ_{int} ni sezilarli darajada kamaytiradi.

Qadam narxini kamaytiruvchi ma’lumotlar tuzilmalari

Tasdiq 1 ga muvofiq C_{step} ni kamaytirish mustaqil optimallashtirish masalasidir. Quyida asosiy tuzilmalar keltirilgan.

Diskret taqsimotdan tanlanma olish. Bu amal Gibbs sampleri va kinetik Monte-Karlo algoritmlarining ichki siklida bajariladi. Tuzilmalarning taqqoslanishi 2-jadvalda berilgan.

2-jadval.

Tuzilma	Tayyorlash	Bitta tanlanma	Og‘irlikni yangilash
Chiziqli qidiruv	$O(1)$	$O(n)$	$O(1)$
Prefiks yig‘indi + binar qidiruv	$O(n)$	$O(\log n)$	$O(n)$
Alias jadvali (Walker)	$O(n)$	$O(1)$	$O(n)$
Fenwick daraxti	$O(n)$	$O(\log n)$	$O(\log n)$

Bundan tanlash mezoni kelib chiqadi: og‘irliklar o‘zgarmasa alias jadvali, har qadamda o‘zgarsa Fenwick daraxti optimal.

Inkremental hisoblash. Metropolis qabul qilish ehtimolida $\pi(y)/\pi(x)$ nisbat ishtirok etadi, shu sababli π ning to‘liq qiymatini hisoblash shart emas. Izing modelida bitta spinni ag‘darishda energiya o‘zgarishi

$$\Delta E = 2Js_i \sum_{j\sim i} s_j \qquad (6)$$

formulasi bilan $O(\deg i) = O(1)$ amalda topiladi, holbuki to‘liq energiyani qayta hisoblash $O(L^2)$ amal talab qiladi. Bu ma’lumotlar tuzilmalari nazariyasidagi dangasa (lazy) qayta hisoblash tamoyilining bevosita qo‘llanilishidir.

Boshqa tuzilmalar. Klaster algoritmlarida ajratilgan to‘plamlar birlashmasi $O\big(\alpha(n)\big)$ amortizatsiyalangan narx bilan; kinetik Monte-Karloda keyingi hodisani tanlash uchun ustuvorlik navbati $O(\log n)$ bilan; zarrachalar simulyatsiyasida qo‘shnilarni izlash uchun to‘r yoki k-o‘lchovli daraxt $O(n^2)$ o‘rniga $O(n)$ narx bilan qo‘llaniladi.

Hisoblash eksperimentining natijalari

Inkremental hisoblashning samarasi. Ikki o‘lchovli Izing modelida 20000 Metropolis qadami bajarildi. **To‘liq va inkremental energiya hisoblashning taqqoslanishi (**20000 **qadam)** natijalari 3-jadvalda keltirilgan.

3-jadval.

L	$N = L^2$	To‘liq hisoblash, s	Inkremental, s	Tezlanish
16	256	0,445	0,104	4,3
32	1024	0,499	0,092	5,4
64	4096	0,596	0,088	6,8
128	16384	0,854	0,086	10,0
256	65536	10,633	0,096	110,3

Jadvaldan ko‘rinadiki, inkremental variantning vaqti L ga bog‘liq emas va 0,09 s atrofida barqaror qoladi, to‘liq hisoblash vaqti esa panjara o‘lchami bilan o‘sadi. Bu (6) formuladan kutilgan $O(1)$ va $O(L^2)$ asimptotikalarini tasdiqlaydi. Kichik L larda tezlanishning nazariy qiymatdan past bo‘lishi vektorlashtirilgan amallarning doimiy qo‘shimcha xarajati bilan izohlanadi.

Tanlanma olish tuzilmalari. $n = 20000$ o‘lchamli taqsimotdan 20000 ta tanlanma olishda chiziqli qidiruv 17,698 s, alias jadvali 0,051 s (347 baravar tez), Fenwick daraxti 0,076 s (233 baravar tez) vaqt sarfladi. Og‘irliklar har qadamda o‘zgaradigan dinamik rejimda (2000 yangilash va tanlanma) chiziqli variant 1,801 s, Fenwick daraxti 0,013 s vaqt talab qildi, ya’ni tezlanish 140 baravarni tashkil etdi. Bu 2-jadvaldagi nazariy murakkablik baholarini to‘liq tasdiqlaydi.

Integral avtokorrelyatsiya vaqti. $\mathcal{N}(0,1)$ maqsadli taqsimot uchun tasodifiy sayr Metropolis algoritmi $n = 200000$ qadam bilan turli qadam kattaligi σ da ishga tushirildi (4-jadval).

4-jadval.

σ	Qabul qilish darajasi	τ_{int}	ESS
0,1	0,968	403,8	495
0,5	0,844	21,2	9420
1,0	0,704	8,4	23757
2,4	0,445	4,5	44301
5,0	0,242	6,2	32026
20,0	0,063	22,5	8893

4-jadval Tasdiq 1 dagi birinchi ko‘paytuvchining xatti-harakatini ko‘rsatadi: τ_{int} minimumga $\sigma \approx 2{,}4$ da, ya’ni qabul qilish darajasi 0,445 bo‘lganda erishiladi. Bu bir o‘lchovli holat uchun optimal skalyalash nazariyasining [18] bashoratiga mos keladi; yuqori o‘lchovlarda optimal qiymat 0,234 ga intiladi. Muhimi shundaki, σ ni sozlash orqali erishilgan 90 baravar farq (τ_{int} 403,8 dan 4,5 gacha) ma’lumotlar tuzilmasini almashtirish orqali erishilgan tezlanishga qo‘shimcha bo‘lib ko‘payadi – bu (5) dagi ko‘paytuvchilar mustaqilligining bevosita amaliy tasdig‘i.

Xulosa. MZMK usullarining konvergensiya nazariyasidagi asosiy tushunchalar – $\boldsymbol{\varphi}$-ajralmaslik, aperiodiklik, spektral tirqish, konduktans va aralashish vaqti – graf algoritmlari nazariyasining mos tushunchalari bilan bir qiymatli moslikda ekanligi ko‘rsatildi (1-jadval). Bu moslik MZMK ni tasodifiy algoritmlarning umumiy nazariyasi doirasiga to‘liq joylashtirish imkonini beradi.

MZMK algoritmining to‘liq hisoblash narxini uchta mustaqil ko‘paytuvchiga ajratuvchi model taklif qilindi va isbotlandi (Tasdiq 1, (5) formula). Model optimallashtirish yo‘nalishlarini aniq ajratadi: zanjirni sozlash τ_{int} ga, ma’lumotlar tuzilmasini tanlash C_{step} ga, aniqlik talabi uchinchi ko‘paytuvchiga ta’sir qiladi.

Hisoblash eksperimenti model bashoratlarini tasdiqladi: inkremental hisoblash $L = 256$ da 110 baravar, Fenwick daraxti dinamik rejimda 140 baravar, qadam kattaligini sozlash esa 90 baravar tezlanish berdi. Bu tezlanishlar bir-biriga ko‘paytiriladigan mustaqil manbalardir.

Amaliy tavsiya sifatida quyidagi ketma-ketlik taklif etiladi: avval τ_{int} ni o‘lchash, so‘ngra profillash orqali C_{step} ning ustunlik qiluvchi qismini aniqlash va faqat shundan keyin optimallashtirishga kirishish. Amaliyotda C_{step} ni kamaytirish ko‘pincha eng arzon g‘alabani beradi, chunki u nazariyani o‘zgartirmaydi va algoritmning to‘g‘riligiga ta’sir qilmaydi.

ADABIYOTLAR:

1. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo Method // Journal of the American Statistical Association. – 1949. – Vol. 44, № 247. – P. 335–341.

2. Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H., Teller E. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines // The Journal of Chemical Physics. – 1953. – Vol. 21, № 6. – P. 1087–1092.

3. Hastings W. K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications // Biometrika. – 1970. – Vol. 57, № 1. – P. 97–109.

4. Meyn S., Tweedie R. L. Markov Chains and Stochastic Stability. – 2nd ed. – Cambridge: Cambridge University Press, 2009. – 594 p.

5. Roberts G. O., Rosenthal J. S. General state space Markov chains and MCMC algorithms // Probability Surveys. – 2004. – Vol. 1. – P. 20–71.

6. Levin D. A., Peres Y. Markov Chains and Mixing Times. – 2nd ed. – Providence: American Mathematical Society, 2017. – 447 p.

7. Sinclair A., Jerrum M. Approximate counting, uniform generation and rapidly mixing Markov chains // Information and Computation. – 1989. – Vol. 82, № 1. – P. 93–133.

8. Jerrum M., Sinclair A., Vigoda E. A polynomial-time approximation algorithm for the permanent of a matrix with nonnegative entries // Journal of the ACM. – 2004. – Vol. 51, № 4. – P. 671–697.

9. Propp J. G., Wilson D. B. Exact sampling with coupled Markov chains and applications to statistical mechanics // Random Structures & Algorithms. – 1996. – Vol. 9, № 1–2. – P. 223–252.

10. Walker A. J. An efficient method for generating discrete random variables with general distributions // ACM Transactions on Mathematical Software. – 1977. – Vol. 3, № 3. – P. 253–256.

11. Fenwick P. M. A new data structure for cumulative frequency tables // Software: Practice and Experience. – 1994. – Vol. 24, № 3. – P. 327–336.

12. Swendsen R. H., Wang J.-S. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations // Physical Review Letters. – 1987. – Vol. 58, № 2. – P. 86–88.

13. Tarjan R. E. Efficiency of a good but not linear set union algorithm // Journal of the ACM. – 1975. – Vol. 22, № 2. – P. 215–225.

14. Xamroyeva D. N., Djurayev D. D., Xamroyev U. N. Algoritmlash asoslari: darslik. – Navoiy: TEXNO PRINT NAVOIY, 2024. – 142 b.

15. Xamroyeva D. N., Seytov Sh. J., Raymova M. U., Xamroyev U. N., Raximov F. A. Algoritmlash asoslari. Laboratoriya ishlari: o‘quv qo‘llanma. – Toshkent: «Dimal» nashriyoti, 2025. – 124 b.

16. Cormen T. H., Leiserson C. E., Rivest R. L., Stein C. Introduction to Algorithms. – 4th ed. – Cambridge, Massachusetts: The MIT Press, 2022. – 1291 p.

17. Vehtari A., Gelman A., Simpson D., Carpenter B., Bürkner P.-C. Rank-normalization, folding, and localization: An improved $\hat{R}$ for assessing convergence of MCMC // Bayesian Analysis. – 2021. – Vol. 16, № 2. – P. 667–718.

18. Roberts G. O., Gelman A., Gilks W. R. Weak convergence and optimal scaling of random walk Metropolis algorithms // The Annals of Applied Probability. – 1997. – Vol. 7, № 1. – P. 110–120.

2030 UZBEKISTAN RESEARCH ONLINE
uzjournals.edu.uz

doi® digital object identifier

Google scholar

ROAD DIRECTORY OF OPEN ACCESS SCHOLARLY RESOURCES

ADVANCED SCIENCES INDEX

"SCIENTIFIC REPORTS OF BUKHARA STATE UNIVERSITY"

The journal was composed in the Editorial and Publishing Department of Bukhara State University.

Editorial address:
Bukhara, 200117
Bukhara State University, main building, 2nd floor, room 219.
Editorial and Publishing Department.
https://buxdu.uz/32-buxoro-davlat-universiteti-ilmiy-axboroti/131/131-buxoro-davlat-universiteti-ilmiy-axboroti/
e-mail:
nashriyot_buxdu@buxdu.uz

Printing was permitted 29.09.2026 y. Paper format 60x84,1/8. Printed in express printing method. Conditional printing plate – 35,30. Circulation 70. Order № 30. Price is negotiable.

Published in the printing house "BUKHARAHAMD PRINT" LLC
Address: Bukhara, Hofiz tanish Bukhari street, 190 B-house