OPTIKA VA LAZER FIZIKASI BO'YICHA XALQARO KONFERENSIYA

MATERIALLARI

2026 yil 17 sentyabr

TOSHKENT-2026

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ОПТИКЕ И ЛАЗЕРНОЙ ФИЗИКЕ

СБОРНИК ТРУДОВ

17 сентября 2026 г.

ТАШКЕНТ-2026

УДК 535:535.53:538.9

“Optika va lazer fizikasi bo‘yicha xalqaro konferensiya” mavzusidagi xalqaro ilmiy-amaliy konferensiyasi materiallari to‘plami. Toshkent, O‘zR FA Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, 2026 yil 17 sentyabr.

To‘plamda “Optika va lazer fizikasi bo‘yicha xalqaro konferensiya” da ishtirok etgan respublika va horijiy ilmiy-tadqiqot institutlari va oliy ta’lim muassasalarining yetakchi olimlari, doktorantlari va yosh tadqiqotchilarining ilmiy ishlari jamlangan. To‘plam mualliflar taqdim qilgan materiallar asosida tuzilgan.

To‘plamdagi materiallar O‘zR FA Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti soha mutaxassislari tomonidan taqrizdan o‘tkazilgan. To‘plam institut Ilmiy Kengashi yig‘ilishining 2026 yil 28 sentyabrdagi 15-sonli majlisi qarori bilan tavsiya etilgan.

Matnlarda foydalanilgan ma’lumotlar, ilmiy natijalar va xulosalar aniqligi uchun javobgarlik to‘la mualliflar zimmasida qoladi.

DASTURIY QO‘MITA RAISI:
Akad. Baxramov Sagdulla Abdullayevich, O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi.
HAMRAIS:
Prof. Maxmanov Urol Kudratovich, Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti.
RAIS O‘RINBOSARI:
Prof. Kurbanov Mirtemir Shodiyevich, Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti.
DASTURIY QO‘MITA:
S.Z. Mirzayev, f.-m.f.d., prof., O‘zR FA;
X.B. Ashurov, t.f.d., prof., IPLTI O‘zR FA;
Sh.D. Payziyev, f.-m.f.d., prof., IPLTI O‘zR FA;
E.A. Zaxidov, f.-m.f.d., prof., IPLTI O‘zR FA;
A.M. Koxxarov, f.-m.f.d., k.i., IPLTI O‘zR FA;
Sh.Q. Nematov, f.-m.f.d., prof., Qarshi davlat texnika universiteti;
D.T. Usmanov, f.-m.f.d., prof., IPLTI O‘zR FA;
A.Q. Kasimov, f.-m.f.d., IPLTI O‘zR FA;
Sh. Otajonov, f.-m.f.d., prof., O‘zMU;
G.B. Eshonqulov, f.-m.f.n., dos., O‘zMU;
I.A. Raxmatullayev, f.-m.f.d., prof., Alfraganus universiteti;
A. Jumaboyev, f.-m.f.d., prof., SamDU;
Faysal Muxtar, professor, Navoiy davlat konchilik va texnologiyalar universiteti;
Xiaohong Jiang, professor, Nankin fan va texnologiya universiteti, Xitoy;
D.B. Yusupov, f.-m.f.d., prof., Toshkent davlat texnika universiteti;
A. Xolov, f.-m.f.d., prof., Tojikiston FA Fizika-texnika instituti, Tojikiston.
TASHKILIY QO‘MITA
Rais: f.-m.f.d., prof. Maxmanov U.K.
Rais o‘rinbosari: t.f.d., prof. Kurbanov M.Sh.
Ma’sul kotiblar: f.-m.f.d., prof. Usmanov D.T., kich. i.x. Chuliuv T.A.
Tashkiliy qo‘mita a’zolari: f.-m.f.d., prof. Sh.D. Payziyev; PhD, k.i.x. Z.Sh. Shaymardanov; f.-m.f.d., k.i.x. V.O. Quvondiqov; f.-m.f.d., k.i.x. I.I. Tojiboyev; f.-m.f.d., k.i.x. A.A. Saparbayev; PhD, k.i.x. Sh.Z. Urolov; PhD, k.i.x. D.T. Bozorova; PhD, k.i.x. R.R. Jalolov; PhD, T.K. Turdaliyev; B.A. Aslonov; A.M. Salimbayev.

© **Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, 2026**

УДК 535:535.53:538.9

Сборник материалов международной научно-практической конференции на тему «Международная конференция по оптике и лазерной физике». Ташкент, Институт ионно-плазменных и лазерных технологий Академии наук Республики Узбекистан, 17 сентября 2026 года.

В материалах конференции собраны научные работы ведущих ученых, докторантов и молодых исследователей научно-исследовательских институтов и высших образовательных учреждений Республики Узбекистан и зарубежных стран, принявших участие в «Международная конференция по оптике и лазерной физике». Сборник составлен на основе материалов, представленных авторами.

Материалы сборника прошли рецензирование специалистами соответствующего профиля Института ионно-плазменных и лазерных технологий Академии наук Республики Узбекистан. Сборник рекомендован к изданию решением заседания Ученого совета института № 15 от 28 сентября 2026 года.

Ответственность за достоверность использованных в текстах данных, научных результатов и выводов полностью несут авторы.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ ПРОГРАММНОГО КОМИТЕТА:
Академик Бахрамов Сагдулла Абдуллаевич, Академия наук Республики Узбекистан.

СОПРЕДСЕДАТЕЛЬ:
Проф. Махманов Урол Кудратович, Институт ионно-плазменных и лазерных технологий.

ЗАМ. ПРЕДСЕДАТЕЛЯ:
Проф. Курбанов Миртемир Шодиевич, Институт ионно-плазменных и лазерных технологий.

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ:
С.З. Мирзаев, д.ф.-м.н., проф., АН РУз;
Х.Б. Ашуров, д.т.н., проф., ИИПЛТ АН РУз;
Ш.Д. Пайзиев, д.ф.-м.н., проф., ИИПЛТ АН РУз;
Э.А. Захидов, д.ф.-м.н., проф., ИИПЛТ АН РУз;
А.М. Коххаров, д.ф.-м.н., к.и., ИИПЛТ АН РУз;
Ш.Қ. Нематов, д.ф.-м.н., проф., Каршинский государственный технический университет;
Д.Т. Усманов, д.ф.-м.н., проф., ИИПЛТ АН РУз;
А.Қ. Касимов, д.ф.-м.н., ИИПЛТ АН РУз;
Ш. Отажонов, д.ф.-м.н., проф., Национальный университет Узбекистана;
Г.Б. Эшонқулов, д.ф.-м.н., доц., Национальный университет Узбекистана;
И.А. Рахматуллаев, д.ф.-м.н., проф., Университет Альфраганус;
А. Жумабоев, д.ф.-м.н., проф., Самаркандский государственный университет;
Файсал Мухтар, проф., Навоийский государственный университет горного дела и технологий;
Xiaohong Jiang, профессор, Нанкинский университет науки и технологий, Китай;
Д.Б. Юсупов, д.ф.-м.н., проф., Ташкентский государственный технический университет;
А. Холов, проф., Физико-технический институт Академии наук Таджикистана, Таджикистан.

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ
Председатель: ф.-м.ф.д., проф. Махманов У.К.
Заместитель председателя: т.ф.д., проф. Курбанов М.Ш.
Ответственные секретари: ф.-м.ф.д., проф. Усманов Д.Т., мнс Чулиев Т.А.

Члены организационного комитета: д.ф.-м.н., проф. Ш.Д. Пайзиев; PhD, снс З.Ш. Шаймарданов; д.ф.-м.н., снс В.О. Кувондиков; д.ф.-м.н., снс И.И. Тожибоев; д.ф.-м.н., снс А.А. Сапарбаев; PhD, снс Ш.З. Уролов; PhD, снс Д.Т. Бозорова; PhD, снс Р.Р. Джалолов; PhD Т.К. Турдалиев; Б.А. Аслонов; А.М. Салимбаев.

© **Институт Ионно-плазменных и лазерных технологий, 2026**

ELECTROKINETIC PROPERTIES OF FUNCTIONALIZED CARBON BLACK IN A WATER-ALCOHOL MEDIUM

Andriyko L.S.[1,2], Khora O.V.[1], Gorelov B.M.[1], Marynin A.I.[3]
[1]Chuiko Institute of Surface Chemistry, NASU, 17, Oleg Mudrak Str., 03164, Kyiv, Ukraine, o_khora@ukr.net
[2]University of Geological Sciences, 64 Olimlar Str., Tashkent, 100125, Uzbekistan
[3]National University of Food Technology, 68 Volodymyrska Street, 01033 Kyiv, Ukraine

The colloidal stability of dispersed carbon-based systems is largely determined by the electrokinetic properties of their surfaces and the nature of interparticle interactions. Of particular interest is establishing the relationship between the chemical modification of the carbon black surface, its ζ-potential, and the aggregation state of the particles in water–alcohol media. Therefore, the aim of this study was to determine the effect of the acidity of a water–alcohol medium on the electrokinetic characteristics and aggregation state of carbon black particles with different surface conditions.

The study investigated pristine carbon black, carbon black oxidized with 5% $KMnO_4$, and oxidized carbon black subjected to additional thermal treatment at 600 °C. The morphological features of the pristine and oxidized carbon black were examined by scanning electron microscopy (SEM). The ζ-potential and particle-size distribution were determined by dynamic light scattering using a Zetasizer Nano ZS instrument (Malvern Instruments, United Kingdom). The experiments were conducted in a water–alcohol medium at a water-to-alcohol ratio of 1:1 and a solid-phase concentration of 0.02 wt.%. The pH was varied from 2 to 12 by adding 0.1 M HCl or NaOH.

According to the SEM data, oxidation is accompanied by a noticeable change in the morphology of the carbon black. Compared with the pristine sample, the oxidized carbon black exhibits a more fragmented and dispersed agglomerate structure (Fig. 1). The observed morphological differences indicate a change in the aggregation behavior of the particles resulting from surface functionalization.

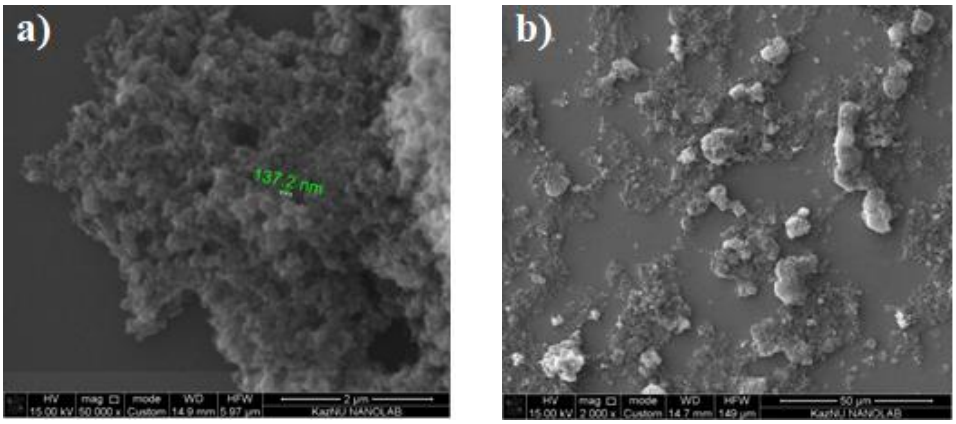


Fig. 1. SEM images of pristine (a) and oxidized (b) carbon black

To quantitatively evaluate these changes, the particle-size distribution was investigated. In the pristine carbon black dispersed in the water–alcohol medium, the distribution is predominantly bimodal. The main volume-weighted maximum corresponds to a particle size of approximately 1616 nm, while an additional maximum (shoulder) is observed at around 5000 nm. Changes in pH substantially affect the aggregation state of the pristine carbon black. Upon acidification of the medium to pH = 2.42, pronounced enlargement of the aggregates is observed. In contrast, in a strongly alkaline medium (pH = 11.50), the aggregates undergo disintegration: the particle size decreases to 315 nm by volume and 140 nm by number.

The changes in aggregate size are consistent with the pH dependence of the ζ-potential. For the pristine carbon black in an acidic medium, the ζ-potential has positive values and changes sign as the pH increases. The isoelectric point corresponds to pH = 3.50. With a further increase in pH, the absolute value of the ζ-potential increases, reaching −17.3 mV at pH = 11.50. Thus, the maximum enlargement of the aggregates in the acidic medium occurs in the region close to the isoelectric point, where electrostatic repulsion between the particles is weakened. In the alkaline medium, the increase in the negative surface charge promotes stronger electrostatic repulsion and, consequently, a reduction in aggregate size.

For the oxidized carbon black, the electrokinetic behavior differs substantially from that of the pristine sample. The ζ-potential of the oxidized carbon black remains

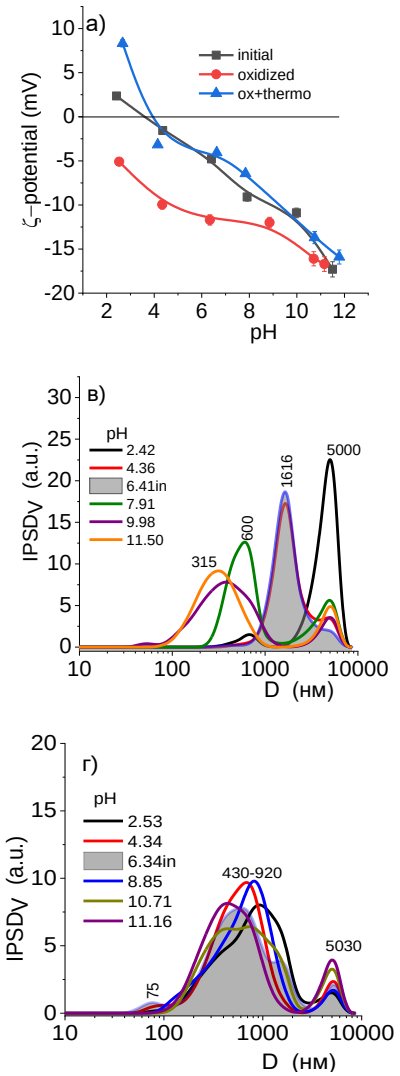


Fig. 2. Dependence of the ζ-potential (a) and the volume-weighted particle-size distribution (b–c) on the pH of the water–alcohol medium.

negative throughout the investigated pH range, varying from −5.1 to −16.7 mV. At the same time, the effective particle diameter is practically independent of pH and amounts to approximately 350 nm. Thus, surface functionalization results not only in morphological changes but also in changes in the electrokinetic characteristics and aggregation behavior of the particles.

Additional thermal treatment of the oxidized carbon black at 600 °C also affects its electrokinetic properties. In an acidic medium, the ζ-potential becomes positive (+8.33 mV), while the pH of the isoelectric point shifts to 3.9. As the pH increases to 11.78, the ζ-potential reaches −15.9 mV. Accordingly, the effective particle diameter decreases from approximately 1170 nm in the acidic medium to 500 nm in the alkaline medium. For the pristine carbon black, this trend is more pronounced: the effective particle diameter decreases from approximately 3630 to 270 nm.

Thus, the SEM results and PSD analysis demonstrate changes in the aggregation state of the carbon black caused by oxidative functionalization, whereas the ζ-potential data make it possible to relate these changes to the electrokinetic properties of the surface. For the pristine carbon black, approaching the isoelectric point is accompanied by intensive aggregation, whereas an increase in the absolute value of the ζ-potential in the alkaline medium promotes aggregate dispersion. Surface oxidation alters the pH dependence of the ζ-potential and the aggregation state of the particles, indicating the decisive role of surface functional groups in the colloid-chemical behavior of carbon black.

НАНОКОМПОЗИТНЫЕ СЦИНТИЛЛЯТОРЫ ДЛЯ ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ: УПРАВЛЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ

А.А. Яблочкина, Д.Б. Элмуротова
ГУ «Научно-технический центр радиационной и ядерной безопасности», г. Ташкент, Узбекистан
evelejn63@gmail.com

Введение. Органические сцинтилляторы находят широкое применение в спектрометрии ионизирующих излучений благодаря малому времени высвечивания и технологичности изготовления. Однако их эмиссионные спектры лежат в ультрафиолетовой и коротковолновой видимой области (360–420 нм), что снижает эффективность регистрации при использовании кремниевых фотоумножителей (SiPM) с максимумом спектральной чувствительности в диапазоне 450–550 нм [1]. Актуальной задачей является разработка методов управления спектральными характеристиками органических сцинтилляторов для обеспечения спектрального согласования с фотоприемниками.

Цель работы — оценка возможности направленного изменения положения максимума люминесценции полимерных сцинтилляторов путем введения полупроводниковых квантовых точек.

Сравнительный анализ. В качестве объектов исследования рассмотрены нанокомпозиты на основе полистирольной матрицы с включениями квантовых точек CdSe и $CsPbBr_3$. Выбор данных материалов обусловлен наличием размерно-зависимой фотолюминесценции [2]. Анализ проведен на основе литературных данных с сопоставлением спектральных и временных характеристик исследуемых композитов с эталонными сцинтилляторами NaI(Tl) и $LaBr_3$(Ce). Из представленных данных следует, что неорганические кристаллы $LaBr_3$(Ce) обладают рекордным световыходом и наилучшим энергетическим разрешением, но их время высвечивания хуже, чем

у органических пластиков. BGO, несмотря на высокую плотность и эффективность регистрации гамма-квантов, характеризуется низким световыходом и большим временем высвечивания.

Таблица 1- Сравнительные характеристики сцинтишлляционных материалов.

Материал	**Пик испускания, нм**	**Время высвечивания, нс**	**Световыход, фотон/МэВ**	**Плотность, г/см^3**
NaI(Tl)	415	230	38000	3,67
$LaBr_3(Ce)$	380	16	63000	5,08
BGO	480	300	8200	7,13
EJ-200 (пластик)	425	2,1	10000	1,03
CdSe/ZnS (в полистироле)	490-620	2-5	8000-12000	1,5-2
$CsPbBr_3$ (в полимере)	510-550	1-5	10000-15000	2-3

Наиболее быстрыми являются органические пластики (EJ-200), однако их спектр испускания не совпадает с областью максимальной чувствительности кремниевых ФУ, которая находится в диапазоне 450–550 нм. Это приводит к потере до 30–40% полезного сигнала. Нанокомпозиты на основе квантовых точек демонстрируют, что их спектр испускания может быть настроен на длину волны в диапазоне 490–620 нм путем изменения размера нанокристаллов. Это обеспечивает оптимальное согласование с фотоприемником. Также, время высвечивания сопоставимо с лучшими органическими пластиками и радиационная стойкость нанокомпозитов выше, чем у немодифицированных пластиков [4]. Основным недостатком остается более низкий, по сравнению с $LaBr_3(Ce)$, световыход и пока еще нерешенная проблема агрегации наночастиц при высоких концентрациях.

Проведенный анализ позволяет предложить следующие рекомендации по выбору материала в зависимости от решаемой задачи: - Максимальное энергетическое разрешение — $LaBr_3(Ce)$. - Высокое временное разрешение — пластиковые сцинтилляторы или нанокомпозиты на основе КТ. - Спектральная адаптация под SiPM — нанокомпозиты.

Сравнительный анализ показывает, что ни один материал не является универсальным. Выбор определяется конкретными требованиями.

Заключение. В результате работы установлено, что:

- Классические неорганические кристаллы сохраняют преимущество в световыходе и энергетическом разрешении.
- Органические пластики незаменимы в задачах, требующих наносекундного временного разрешения.
- Нанокомпозиты на основе полупроводниковых КТ представляют собой перспективный класс материалов, обеспечивающий возможность настройки спектра испускания под конкретный фотоприемник при сохранении высокого быстродействия.

Наиболее интересным направлением для дальнейших исследований является разработка гибридных систем, сочетающих высокий световыход неорганических активаторов и спектральную настраиваемость квантовых точек.

Список использованных источников:

1. *Renker D., Lorenz E.* Advances in solid state photon detectors // JINST. — 2009. — Vol. 4. — P. 04004.
2. *Kang S., Alivisatos A. P., Ercius P., Park J.* Visualizing Millisecond Atomic Dynamics of Nanocrystals in Liquid. J. Am. Chem. Soc. 2026. DOI: 10.1021/jacs.6c08238.
3. *Knoll G.F.* Radiation Detection and Measurement. — Wiley, 2010. — 864 p.
4. *Yanagida T., Koshimizu M., Okada G.* Scintillator materials for harsh radiation environments // *Japanese Journal of Applied Physics.* — 2022. — Vol. 61. — P. SB0804.

СТРУКТУРНЫЕ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МИКРОСТРУКТУР ZnSe ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ

Рахматуллаев И.А.[1], Абдусаттаров Б.А.[2]
[1]Университет Альфраганус, Ташкент, Узбекистан
[2] Самаркандский государственный университет имени Шарофа Рашидова, Самарканд, Узбекистан
E-mail: i.rakhmatullaev@afu.uz

Селенид цинка (ZnSe) по-прежнему остается наиболее перспективным материалом A_2B_6 с широкой запрещенной зоной для полупроводниковой оптоэлектроники, включая коротковолновые полупроводниковые электронные устройства, системы отображения, светодиодные технологии, рентгеновские детекторы и лазеры, а также прозрачные окна в инфракрасном диапазоне. ZnSe обладает необходимым набором физико-химических параметров, позволяющих создавать на его основе синие светодиоды и другие источники синего света [1-5]. Для дальнейшего развития техники необходимо создавать и исследовать новые материалы и низкоразмерные структуры, в том числе, на полупроводниковой основе, обладающие заранее заданными свойствами. По этой причине изучение оптических процессов, протекающих в микро- и наноструктурах ZnSe, является актуальной проблемой как научном, так и в прикладном плане.

На текущий момент, несмотря на значительный массив накопленных данных, ряд задач остается нерешенным. В частности, не проводилось детального анализа влияния умеренных доз γ-излучения на интенсивность активных мод рамановского рассеяния ZnSe. Аналогичным образом, не реализовано сравнительное исследование ИК- и Рамановских спектров микроструктурированных образцов ZnSe в условиях γ-облучения.

В настоящей работе представлен систематический анализ влияния γ-излучения в диапазоне доз 25–100 кГр на структурные и оптические характеристики микропорошков ZnSe. Данное исследование направлено на

изучение закономерностей изменения структурных и оптических свойств микропорошков ZnSe под воздействием гамма-облучения при варьировании поглощенной дозы от 25 до 100 кГ.

На рис. 1 представлены Рамановские спектры исходного и облучённых образцов микроструктур ZnSe при комнатной температуре. Рамановские спектры образцов при комнатной температуре показали основные пики в 199, 251 и 498 $см^{-1}$. Установлено нелинейное влияние дозы облучения на интенсивность раманова мод. При дозах 25 и 50 кГр интенсивность всех основных колебаний, прежде всего пика 251 $см^{-1}$, заметно увеличивается и при 75 кГр резко уменьшается: возникшие дефекты служат центрами рассеяния оптических фононов. При дозе 100 кГр наблюдается восстановление интенсивности и сужение полуширины полос. Данный аномальный подъём коррелирует с результатами рентгеноструктурного анализа и свидетельствует о реализации механизма динамического отжига дефектов. Положения всех полос при всех дозах остаются неизменными, подтверждая отсутствие фазовых переходов.

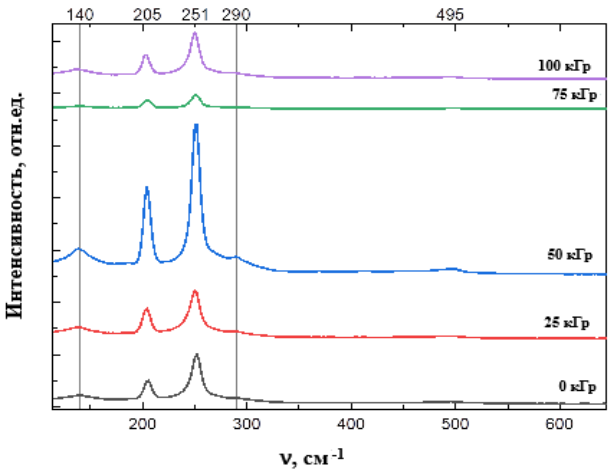


Рис. 1. Рамановские спектры микроструктур ZnSe в зависимости от дозы γ-облучения.

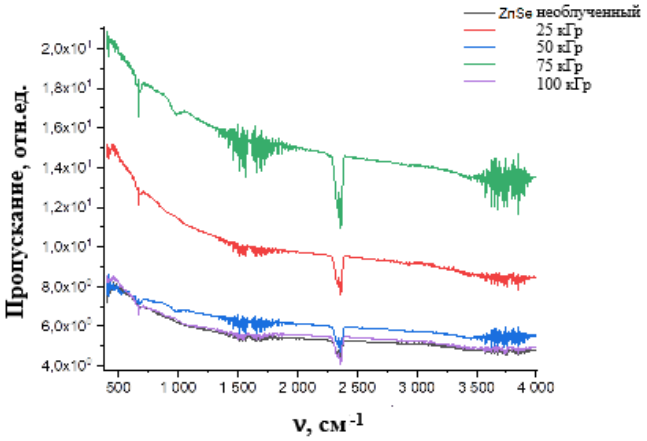


Рис. 2. ИК-Фурье-спектры пропускания исходного и облучённых дозами 25, 50, 75 и 100 кГр микроструктур ZnSe.

На рис. 2 представлены ИК-спектры пропускания в диапазоне волновых чисел 400–4000 $см^{-1}$ [1,2,5]. ИК-Фурье-спектры пропускания исходных и облученных

микроструктур селенида цинка демонстрируют постепенное снижение коэффициента пропускания в среднем ИК-диапазоне по мере роста дозы радиационного воздействия от 25 до 100 кГр. Из литературы [1,2,5] известно, что основная частота поперечных оптических фононов (TO) для объемного ZnSe лежит в районе ~ 205 $см^{-1}$ (48.8 мкм), а продольных (LO) — около 252 $см^{-1}$ (39.7 мкм). В результате исследования в спектрах мелкодисперсных порошков в дальней ИК-области наблюдаются соответствующие полосы остаточного отражения и поглощения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Saxena A. Influence of Crystalline Microstructure on Optical Response of Single ZnSe Nanowires. Ph.D. thess. – Toronto: University of Toronto, 2012. – 342 p.

2. Leanenya M.S., Lutsenko E.V., Pavlovskii V.N. et al. Luminescence and Lasing in ZnSe Micropowders at High Optical Excitation Levels // Journal of Applied Spectroscopy, 2015, 82(1):53-57. https://doi.org/10.1007/s10812-015-0063-6

3. Agal’tsov A.M., Gorelik V.S. & Rakhmatullaev I.A. Spectral, Energy, and Temporal Characteristics of Two-photon-Excited Fluorescence of ZnSe Single Crystal in the Blue Region of the Spectrum // Semiconductors, 1997, 31:1228–1230. https://doi.org/10.1134/1.1187299

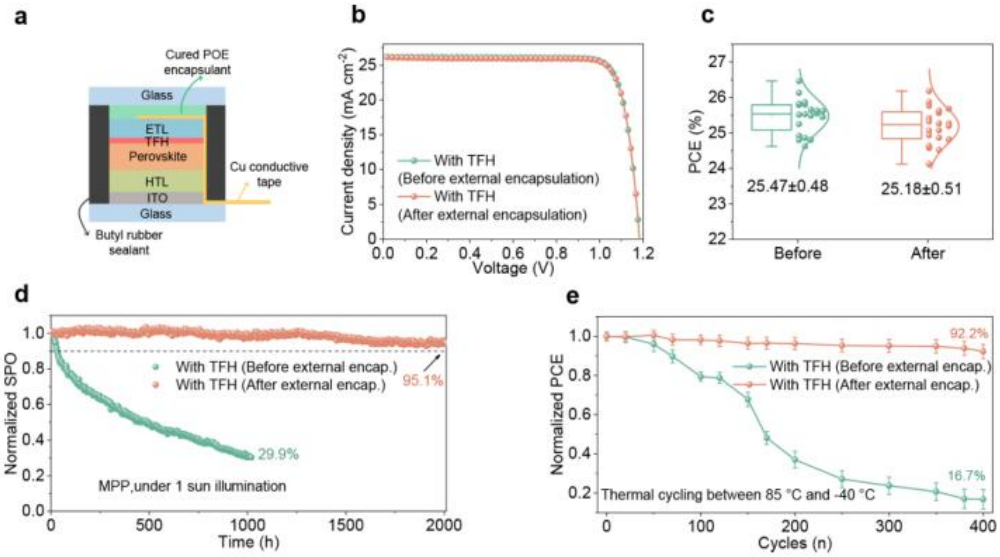
4. Skrobot M., Godlewski M., Guziewicz *E.*, Kopalko K., Phillips M.R. Tuning of Color Chromaticity of Light Emission from ZnSe Films Grown on a GaAs Substrate by Atomic Layer Epitaxy // Acta Physica Polonica A., 2006, 110(3):359-367. https://doi.org/10. 12693/APhysPolA.110.359

5. Yang Y., Zhang Y., Zhou X., Wu X., Xu S., Wu H., Guo Sh. Synthesis, Optical and Photocatalytic Properties of ZnSe Microspheres/Nanosheets // Nano Biomed. Eng, 2011, 3(2):107-114. https://doi.org/10.5101/nbe.v3i2.p107-114

TFH–POE/PIB СИНЕРГЕТИК КАПСУЛАЛАШ ОРҚАЛИ ПЕРОВСКИТ ҚУЁШ ЭЛЕМЕНТЛАРИНИНГ ТЕРМИК ВА АТМОСФЕРАВИЙ БАРҚАРОРЛИГИНИ ОШИРИШ

[1,2]Соатиллаев А.У., [1]Тажибаев И.И., [1]Рузиев Ф.М., [1]Бойназаров И.Р.
[1]У.А. Арифов номидаги Ион-плазма ва лазер технологиялари институти
[2]Наманган давлат техника университети
E-mail: a.soatillayev7@gmail.com

Перовскит қуёш элементларининг амалий қўлланишида фақат юқори самарадорлик эмас, балки узоқ муддатли термик, намлик ва операцион барқарорлик ҳам муҳимдир. Мақолада ички ҳимоя қатлами сифатида TFH ва ташқи физик барьер сифатида POE/PIB полимерли ламинатни бирлаштирган синергетик капсулалаш стратегияси таклиф этилган. Ички TFH қатлами интерфейс нуқсонлари ва кимёвий деградацияни сусайтирса, ташқи POE/PIB қатлами намлик ва кислород киришини чеклаб, термик цикллардан ҳосил бўладиган механик кучланишларни юмшатади.

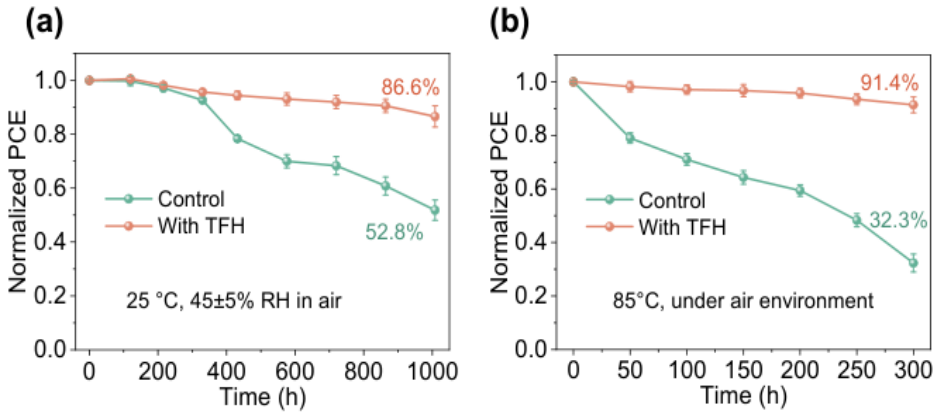


1-расм. TFH модификацияланган PSC учун ташқи POE/PIB капсулалаш схемаси, капсулалашдан олдин/кейинги J–V, MPP барқарорлиги ва термик цикл натижалари.

Ташқи капсулалашда 4 см² қопловчи шиша, 0.10 mm қалинликдаги мис ток ўтказувчи лента, юқори қисмида POE ва қирраларида PIB герметикловчи қатлам қўлланган. Оптимал ламинатлаш режими юқори плита учун 85 °C, пастки плита учун 105 °C ва 35 s ни ташкил қилган. Бу қисқа вақтли ва нисбатан паст

ҳароратли жараён стандарт вакуумли иссиқ пресслашга хос термик/вакуум таъсирини камайтиради. Supporting Information натижасига кўра 0.10 mm мис лента адгезия, контакт ва механик барқарорлик нуқтаи назаридан энг мақбул вариант сифатида танланган.

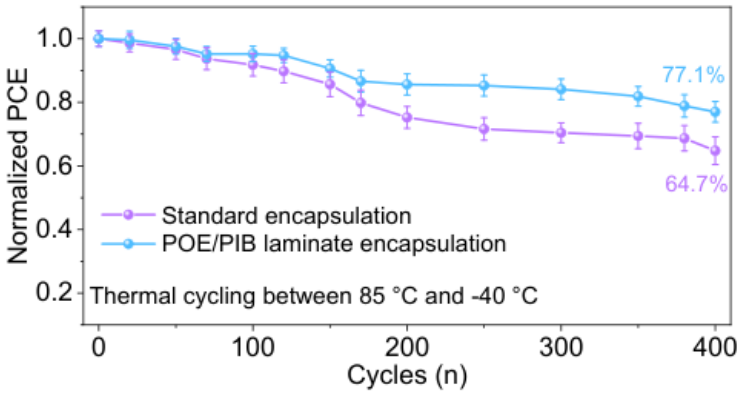
Капсулалашдан кейин самарадорликнинг пасайиши 1% дан кам бўлган. 20 та қурилманинг статистик таҳлилида VOC 1.180 ± 0.007 V дан 1.178 ± 0.006 V гача, JSC 25.65 ± 0.33 дан 25.62 ± 0.27 mA·cm^{-2} гача ва FF 82.94 ± 0.691% дан 82.77 ± 0.94% гача ўзгарган. Демак, ташқи капсулалаш жараёни электр параметрларига сезиларли зарар етказмаган. TFHнинг ички капсулалаш таъсири перовскит сиртининг гидрофоблигини оширган: сув билан контакт бурчаги 56.46° дан 91.87° гача кўтарилган ва 15 s сув таъсиридан кейин TFH намунасида 91.12° сақланган, назоратда эса 51.23° гача тушган. 85 °C ҳавода 300 h қаришда TFH модификацияланган қурилма бошланғич PCEнинг 91.4%ини сақлаган, назорат қурилмасида эса 32.3% даражагача тушиш кузатилган. 25 °C ва 45 ± 5% RH шароитида 1000 h дан кейин TFH қурилмаси 86.6% PCEни сақлаган, назоратда бу кўрсаткич 52.8% бўлган.



2-расм. Капсулаланмаган TFH ва назорат қурилмаларининг 25 °C/45 ± 5% RH ҳамда 85 °C ҳаво шароитларида PCE сақланиши графиги

1 sun, 45 °C ва узлуксиз ёритиш шароитида ташқи капсулалашсиз TFH қурилмаси 1000 h ичида PCEнинг тахминан 70%ини йўқотган, синергетик капсулаланган қурилма эса 2000 h дан кейин бошланғич PCEнинг 95.1%ини сақлаган. −40 дан 85 °C гача бўлган термик цикларда POE/PIB ламинат

капсулалаш 400 циклдан кейин бошланғич PCEнинг 77.1%ини сақлаган; стандарт капсулалашда бу кўрсаткич 64.7% бўлган. Асосий мақоладаги синергетик TFH + POE/PIB қурилма учун 400 циклдан кейин PCE сақланиши 92.2% деб қайд этилган. Бу ташқи полимер қатламнинг намлик/кислород учун барьер ва термик кучланишларни ютишга хизмат қилувчи механик буфер сифатида бир вақтда ишлашини кўрсатади.



3-расм. −40–85 °C оралиғида 400 термик цикл давомида стандарт ва POE/PIB ламинат капсулалашнинг PCE сақланиши графиги.

Хулоса ўрнида шуни айтиш мумкинки, TFH ички ҳимояси ва POE/PIB ташқи ламинатидан ташкил топган икки босқичли синергетик стратегия перовскит қуёш элементларида нуқсонлар, намлик/кислород таъсири ва термик-механик стрессларни комплекс равишда чеклайди. TFH модификацияси PCEни 24.32% дан 26.03% гача оширган бўлса, ташқи паст ҳароратли капсулалаш юқори самарадорликни деярли сақлаган ҳолда узоқ муддатли барқарорликни кескин яхшилаган. 400 термик циклдан кейин 92.2% PCE сақланиши мазкур ёндашувнинг амалий перовскит фотоэлектрикаси учун истиқболли эканини кўрсатади.

Фойдаланилган адабиётлар рўйхати

1. Wang T. et al. ACS Applied Materials & Interfaces. – 2026. – Т. 18. – №. 10. – С. 15120-15129.
2. Shi L. et al. ACS applied materials & interfaces. – 2017. – Т. 9. – №. 30. – С. 25073-25081.
3. Lv Y. et al. //ACS Applied Materials & Interfaces. – 2020. – Т. 12.

ФАЗОВАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ НАНОПЛЁНОК TiO_2, ПОЛУЧЕННЫХ ТЕРМИЧЕСКИМ АТОМНО-СЛОЕВЫМ ОСАЖДЕНИЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ TTIP И H_2O

Х.Х. Зохидов, Т.К. Турдалиев, Р.Х. Ашуров
Институт ионно-плазменных и лазерных технологий имени У.А. Арифова Академии наук Республики Узбекистан
e-mail: zokhidov@iplt.uz

Для интерпретации оптических свойств наноплёнок TiO_2 необходимо надёжно установить их фазовый состав, поскольку анатаз и рутил различаются колебательным спектром и электронной структурой. Цель работы заключалась в спектроскопической и рентгеноструктурной идентификации анатазной фазы в TiO_2-плёнках, полученных атомно-слоевым осаждением (АСО), и в сопоставлении структурных данных с положением края оптического поглощения.

Плёнки осаждали на кварцевые подложки JGS1 при 250 °C из TTIP и H_2O. Спектры комбинационного рассеяния света (КРС) регистрировали на спектрометре Renishaw InVia при возбуждении лазером с длиной волны 532 нм. Рентгеновскую дифракцию измеряли на Rigaku SmartLab с Cu Kα-излучением (λ=1,5406 Å) в диапазоне 2θ=20-60° с шагом 0,02°. Спектры оптического поглощения получали в диапазоне 250-650 нм.

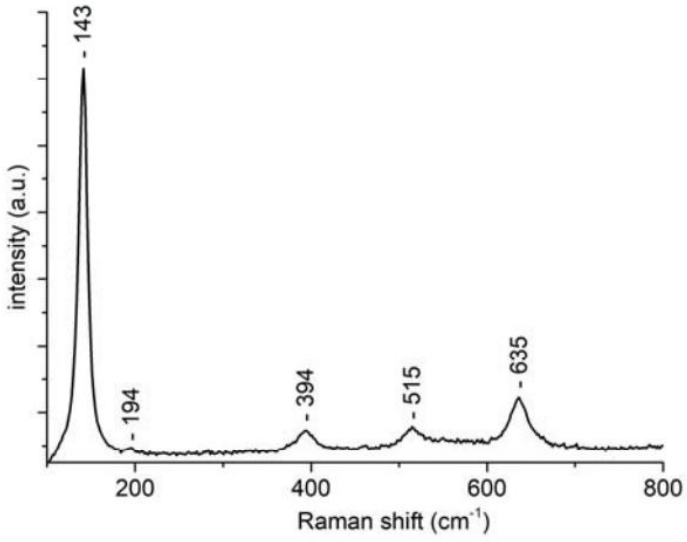


Рис. 1. Спектры КРС плёнки TiO2.

В спектре КРС зарегистрированы полосы при 143, 194, 394, 515 и 635 $см^{-1}$. Полосы 143, 194 и 635 $см^{-1}$ относятся к модам E_g, максимум 394 $см^{-1}$ - к моде B_1g, а линия 515 $см^{-1}$ представляет перекрывающийся вклад мод A_1g и B_1g. Совокупность этих максимумов соответствует спектроскопическим признакам анатаза. Характерные для рутильной модификации полосы в исследованном спектре не выявлены, поэтому КРС указывает на преобладание анатазной фазы.

Рентгеновская дифрактограмма подтверждает спектроскопическую идентификацию. Основной максимум при 2θ=25,76° соответствует плоскости (101) анатаза. Дополнительные рефлексы при 38,32° и 48,58° относятся к плоскостям (004) и (200) соответственно [3]. На дифрактограмме также присутствует широкий фон, обусловленный аморфной кварцевой подложкой. Рефлексы рутила при 27,4°, 36,1° и 54,3° не выявлены.

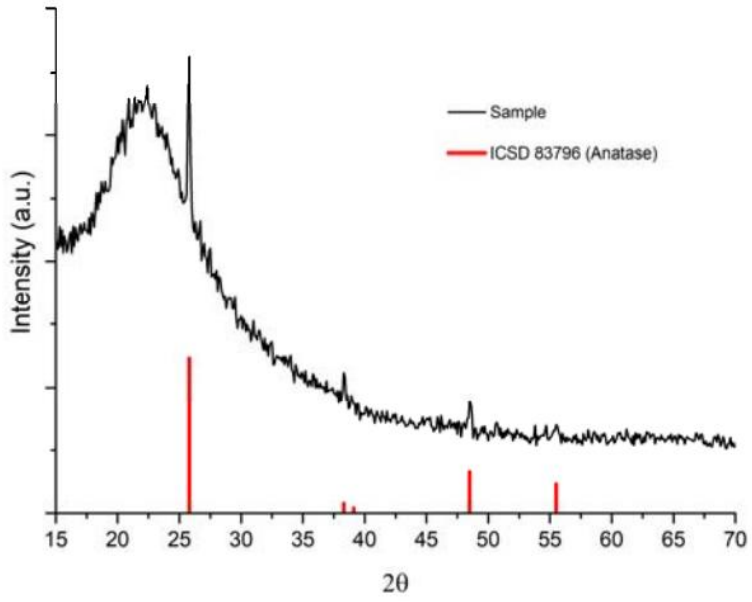


Рис. 2. Рентгеновская дифрактограмма исследуемой плёнки TiO2 (чёрная кривая) и эталонные положения пиков фазы анатаза (красные линии) согласно базе данных ICSD №83796.

Ширина дифракционных максимумов на половине высоты составила 0,19° для (101), 0,14° для (004) и 0,16° для (200). Рассчитанные по этим значениям размеры областей когерентного рассеяния равны 42,9; 60,1 и 54,5 нм соответственно. Близость относительных интенсивностей экспериментальных

рефлексов к эталонному профилю порошкового анатаза указывает на поликристаллическое строение плёнки без выраженной преимущественной ориентации кристаллитов.

Таким образом, результаты двух независимых методов согласованно подтверждают формирование анатазной фазы TiO_2. Набор рамановских полос и положение рентгеновских рефлексов соответствуют анатазу, тогда как признаки рутильной модификации не обнаружены. Термическое атомно-слоевое осаждение из тетраизопропоксида титана и воды при 250 °C обеспечивает получение поликристаллических анатазных наноплёнок на кварцевом стекле.

Литература

[1] H.M. Maltanava et al. Journal of Applied Spectroscopy 90(6), 1241-1254 (2024). https://doi.org/10.1007/s10812-024-01660-9.

[2] A.E. Maftei et al. Minerals 10(11), 988 (2020). https://doi.org/10.3390/min10110988.

[3] I.M. de Amorim Silva et al. Water, Air, & Soil Pollution 234(6), 367 (2023). https://doi.org/10.1007/s11270-023-06369-7.

[4] O. Frank, M. Zukalova, B. Laskova, J. Kürti, J. Koltai, L. Kavan. Physical Chemistry Chemical Physics 14, 14567-14572 (2012). https://doi.org/10.1039/C2CP42763J.

ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНОПЛЁНОК TiO_2 ПРИ 750, 1000 И 1250 ЦИКЛАХ ТЕРМИЧЕСКОГО АСО ИЗ TTIP И H_2O

Х.Х. Зохидов, Т.К. Турдалиев, Р.Х. Ашуров
Институт ионно-плазменных и лазерных технологий имени У.А. Арифова Академии наук Республики Узбекистан
e-mail: zokhidov@iplt.uz

Наноплёнки диоксида титана представляют интерес для УФ-фильтров, фотокаталитических покрытий и оптоэлектронных элементов, поскольку положение и форма края поглощения определяются фазовым составом, степенью структурного упорядочения и дефектными состояниями [1]. Цель работы состояла в установлении влияния числа циклов атомно-слоевого осаждения (АСО) на спектры оптического поглощения TiO_2-плёнок, сформированных на кварцевом стекле JGS1.

Плёнки осаждали на кварцевое стекло JGS1 при 250 °C и давлении 60 Па, используя тетраизопропоксид титана и воду. Были исследованы образцы после 750, 1000 и 1250 циклов. Спектры поглощения измеряли в диапазоне 250-650 нм. При принятом значении роста 0,2 нм за цикл расчётные толщины плёнок составляли приблизительно 150, 200 и 250 нм соответственно.

Спектры оптического поглощения регистрировали на спектрофотометре Metash UV/Vis 5100 в диапазоне 250-650 нм. Для всех образцов установлено интенсивное поглощение в ультрафиолетовой области при $\lambda<400$ нм и экспоненциальный характер края. Абсолютная интенсивность возрастала при увеличении числа циклов, что согласуется с увеличением количества поглощающего материала. После нормировки спектры сохраняли близкую форму, наблюдалось лишь небольшое смещение края. Следовательно, увеличение числа циклов преимущественно изменяет оптическую толщину покрытия, не вызывая резкой перестройки характера межзонных переходов.

Ширина оптической запрещённой зоны плёнок TiO_2 определена с применением функции Тауца на основе нормированных спектров поглощения с использованием выражения:

где A – постоянная, зависящая от материала, E_g – ширина запрещённой зоны полупроводника, hν – энергия фотона, n – показатель степени, определяющий тип электронного перехода. Для разрешённого непрямого перехода n = 1/2, а для разрешённого прямого перехода n = 2

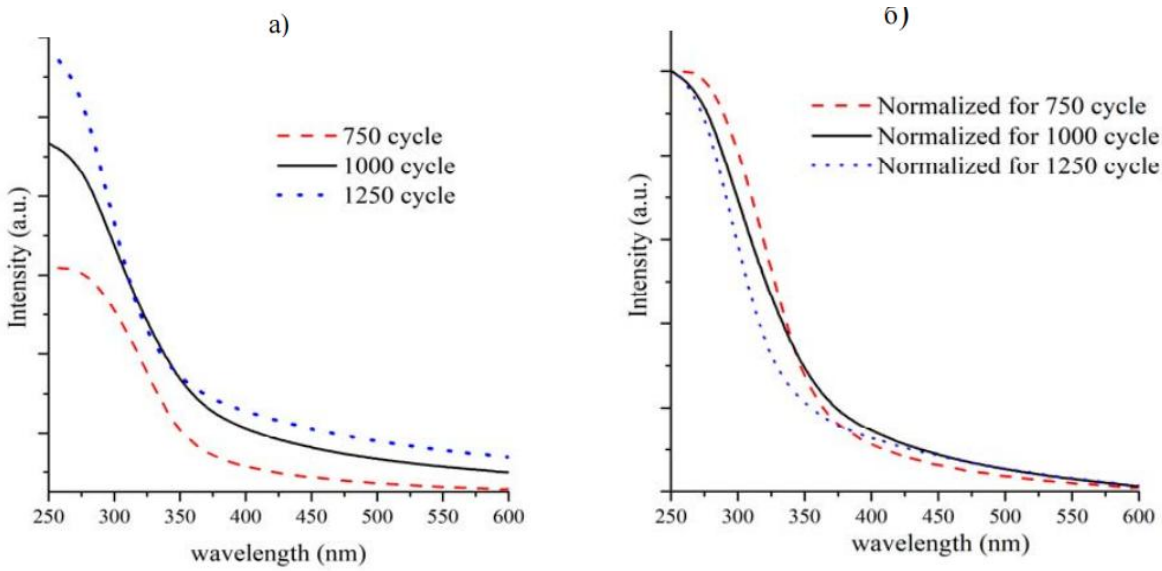


Рис. 1. Спектры оптического поглощения (а) и нормированные спектры поглощения (б).

E_g определялие на основе построения зависимости $(\alpha h\nu)^{1/2}$ от hν и экстраполяции двух линейных областей: одной, соответствующей высокоэнергетическому поглощению, и другой, характеризующей экспоненциальный край поглощения.

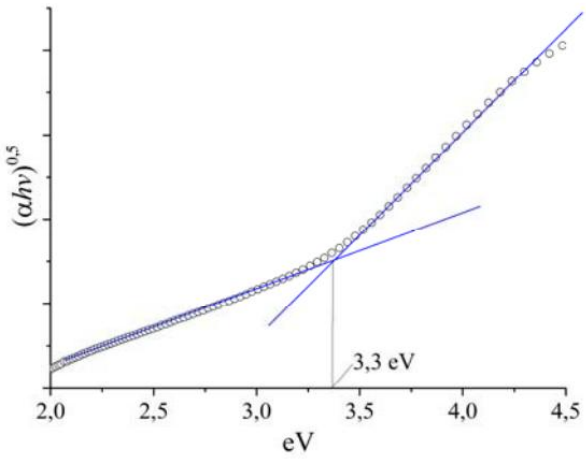


Рис. 2. Определение ширины запрещённой зоны методом экстраполяции линейных областей зависимости $(\alpha h\nu)^n$ от hν.

Экстраполяция линейных областей зависимости $(\alpha h\nu)1/2$ от энергии фотона дала E_g=3,3 эВ. Этой энергии соответствует длина волны $\lambda \approx 1240/E_g = 1240/3{,}3 \approx 376$ нм, что согласуется с наблюдаемым УФ-краем поглощения. Значение E_g характерно для анатазной модификации TiO_2. Подкраевое экспоненциальное поглощение можно связать с локализованными состояниями, формируемыми неупорядоченными областями, границами кристаллитов и кислородными вакансиями [4].

Таким образом, изменение числа АСО-циклов от 750 до 1250 обеспечивает управляемое увеличение поглощения при сохранении общей формы нормированных спектров и величины оптической запрещённой зоны около 3,3 эВ. Полученный результат подтверждает воспроизводимость оптического отклика TiO_2-покрытий и возможность настройки их УФ-поглощения посредством числа циклов осаждения.

Литература

1. A.A. Rempel. Russian Chemical Bulletin 73, 2144-2150 (2024). https://doi.org/10.1007/s11172-024-4336-1.

2. J. Zhang, Y. Li, K. Cao, R. Chen. Nanomanufacturing and Metrology 5(3), 191-208 (2022). https://doi.org/10.1007/s41871-022-00136-8.

3. A.E. Maftei et al. Minerals 10(11), 988 (2020). https://doi.org/10.3390/min10110988.

4. V.R. Akshay, B. Arun, G. Mandal, M. Vasundhara. Physical Chemistry Chemical Physics 21, 12991-13004 (2019). https://doi.org/10.1039/C9CP01351B.

UV–VIS SPECTRAL PROPERTIES OF C_{70} FULLERENE SOLUTIONS IN N,N-DIMETHYLFORMAMIDE

J.A. Yoqubjonov[1], Z. Bekmurodov[2], D.T. Sidiqaliyev[3], U.K. Makhmanov[1,2]
[1]Master's student, National University of Uzbekistan.
[2]Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan.
[3]Namangan State University.

Fullerenes are zero-dimensional nanostructures characterized by a closed, π-conjugated carbon framework and distinctive optical–photophysical properties. Among them, the C_{70} fullerene possesses a complex electronic structure and displays characteristic absorption features in the UV–visible region, owing to its elongated ellipsoidal shape and lower symmetry relative to C_{60} [1]. The optical properties of C_{70} are sensitive to the solvent environment, concentration, and intermolecular interactions, and aggregation processes can alter its absorption and light-scattering behavior [2].

N,N-dimethylformamide (DMF), a polar aprotic solvent, is a convenient medium for studying the optical and colloidal properties of C_{70} in solution. Changes in concentration within the C_{70}/DMF system can affect intermolecular interactions and aggregation processes [3–4]. Accordingly, in this work the UV–Vis absorption spectra of C_{70}/DMF solutions at concentrations of 0.03 and 0.06 mg/mL were investigated, and the effect of concentration on the spectral properties was analyzed.

For the experiments, C_{70}/DMF solutions with concentrations of 0.03 and 0.06 mg/mL were prepared as follows. Precisely weighed amounts of 0.3 and 0.6 mg of C_{70} were each added to separate glass vials containing 10 mL of DMF. The resulting samples were labeled S1 (0.03 mg/mL) and S2 (0.06 mg/mL). Each solution was stirred with a magnetic stirrer at room temperature for 45 minutes and then used for the measurements.

UV–Vis spectra were recorded on an Agilent Cary 60 spectrophotometer using a quartz cuvette with a 1 cm optical path length over the 190–1100 nm range.

Figure 1 shows the UV absorption spectra of solutions S1 and S2. The spectra reveal characteristic absorption peaks at 330, 380, and 471 nm. The band near 330 nm corresponds to strong π–π* electronic transitions within the conjugated carbon framework, with intensity increasing as a function of concentration. The peak near 380 nm is attributed to the electronic absorption of C_{70}. These peaks are less pronounced in solution S1 than in S2, consistent with its lower concentration.

This indicates that a substantial fraction of C_{70} remains optically active, while

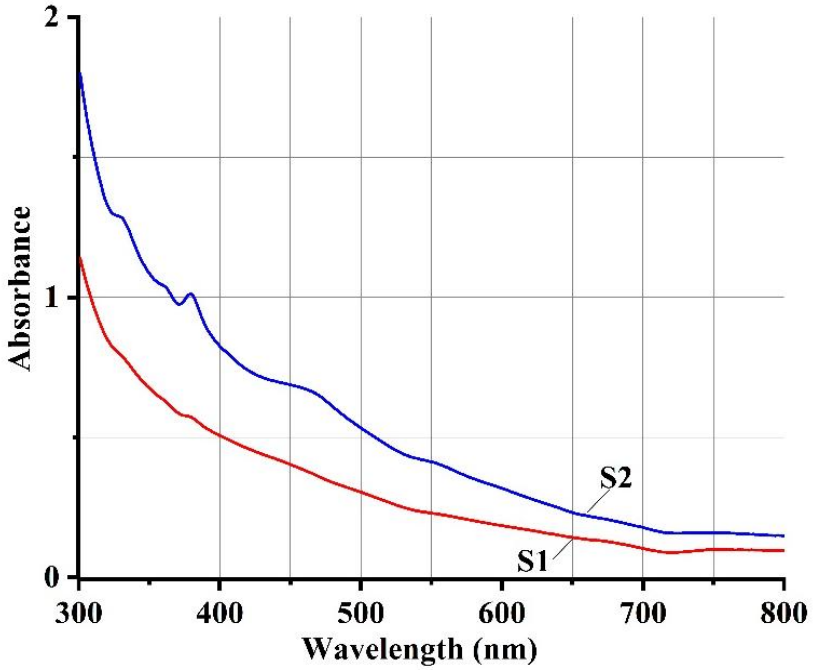


Figure 1. UV–Vis absorption spectra of C_{70}/DMF solutions at concentrations of 0.03 and 0.06 mg/mL.

the gradual broadening of the spectrum points to increasing intermolecular interaction. The broad band near 471 nm warrants cautious interpretation, as it may be associated with low-energy electronic transitions of C_{70}. The slight red shift and broadening observed with increasing concentration may be regarded as evidence of strengthening C_{70}–C_{70} interactions and the formation of nanoaggregates; however, this single feature alone cannot confirm a specific HOMO–LUMO transition or a unique cluster structure. The UV–visible spectra show that increasing the C_{70} concentration from 0.03 to 0.06 mg/mL enhances the overall absorption intensity and slightly modifies the spectral profile in the visible region. Beyond the expected concentration-dependent increase in absorption, the broad absorption feature near 471 nm and the gradually decaying tail

in the long-wavelength region point to strengthening intermolecular interactions among C_{70} molecules in DMF. These changes are consistent with concentration-driven association of C_{70} frameworks mediated by intermolecular interactions (both π–π and van der Waals interactions). Since only two concentrations were examined, and absorption in the near-ultraviolet region is comparatively strong, the observed spectral changes should be interpreted not as a quantitative aggregation law but as a qualitative indicator of aggregation-dependent electronic redistribution.

In this work, characteristic peaks at 330, 380, and 471 nm were identified in the UV–visible absorption spectra of C_{70}/DMF solutions, and an increase in absorption intensity with increasing concentration (from 0.03 to 0.06 mg/mL) was observed, with optical activity preserved throughout. The broad band near 471 nm, together with the slight red shift and spectral broadening in the long-wavelength region, points to the formation of nanoaggregates resulting from strengthened π–π and van der Waals interactions among C_{70} molecules in the DMF medium. These spectral changes qualitatively confirm the electron-redistribution processes arising from the association of C_{70} frameworks.

References:

[1]. Mchedlov-Petrossyan N.O., Marfunin M.O., Kriklya N.N. Colloid chemistry of fullerene solutions: Aggregation and coagulation. Liquids, 4, 32–72 (2024).

[2]. Marfunin N.A., Mchedlov-Petrossyan N.O. Behavior of fullerene C_{70} in binary organic solvent mixtures as studied using UV–Vis spectra and dynamic light scattering. Kharkov University Bulletin. Chemical Series, 33, 77–86 (2019).

[3]. Makhmanov U.K. et al. Behavior of C_{70} fullerene in a binary mixture of xylene and tetrahydrofuran. Liquids, 3, 385–392 (2023).

[4]. Murad, A.R.; Iraqi, A.; Aziz, S.B.; Abdullah, S.N.; Brza, M.A. Conducting polymers for optoelectronic devices and organic solar cells: A review. Polymers 12, 2627 (2020).

VERTIKAL TARTIBLANGAN TiO_2 NANOSTRUKTURALARI ASOSIDAGI FOTOELEKTRODLARNI SINTEZ QILISH HAMDA ULARNING MIKROSTRUKTURAVIY VA FOTOELEKTROKIMYOVIY XOSSALARINI TADQIQ ETISH

J.Sh. Xudoykulov[1], H.U. Mahmudjonov[1], U.A. Shaislamov[1,2]*
[1] Nanotexnologiyalarni rivojlantirish markazi, Toshkent, O‘zbekiston
[2] Fizika fakulteti, O‘zbekiston Milliy universiteti, Toshkent, O‘zbekiston
Xudoyqulovjasur905@gmail.com

Quyosh energiyasini kimyoviy energiyaga aylantirishga asoslangan fotoelektrokimyoviy (PEC) tizimlar, jumladan suvni PEC usulida parchalash, quyosh elementlari va fotokatalitik jarayonlar ekologik toza energiya texnologiyalarini rivojlantirishda muhim o‘rin tutadi [1]. Titan dioksidi (TiO_2) yuqori kimyoviy barqarorligi, nisbatan arzonligi, ekologik xavfsizligi va mos taqiqlangan zona kengligi tufayli fotoelektrod materiali sifatida PEC tizimlarda keng qo‘llaniladi [2]. Biroq nanozarrachalardan tashkil topgan TiO_2 qatlamlarida fotogeneratsiyalangan zaryad tashuvchilar donalar chegaralaridan o‘tishda sochilishi va rekombinatsiyaga uchrashi tufayli qo’llanilgan tizimning fotoelektrokimyoviy samaradorlikni cheklaydi. Bu kamchilikni kamaytirishning samarali yo‘llaridan biri vertikal yo‘nalgan bir o‘lchovli TiO_2 nanostrukturalarini shakllantirishdir [3,4].

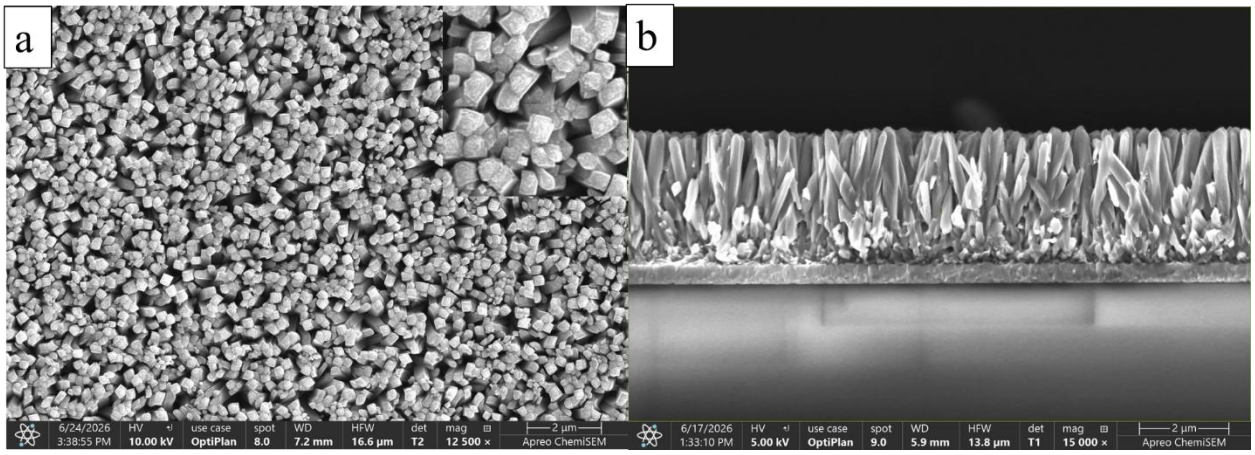
SnO_2:F (FTO) qoplangan shisha tagliklarda TiO_2 nanoustunchalarini o‘stirishning sodda va samarali usullaridan biri gidrotermal sintez bo‘lib, sintez parametrlarini o‘zgartirish orqali nanoustunchalarning morfologiyasi va o‘lchamlarini boshqarish mumkin [5]. Ushbu ishda FTO taglikda TiO_2 nanoustunchalari gidrotermal usulda sintez qilinib, ularning kristall tuzilishi, morfologiyasi va fotoelektrokimyoviy xossalari tadqiq etildi.

TiO_2 nanoustunchalari gidrotermal usulda sintez qilishda ionsizlantirilgan suv (DI suv), xlorid kislota (HCl, 30–32%), titan (IV) butoksid $Ti(OBu)_4$ va FTO qoplamali o‘tkazuvchan shisha tagliklaridan foydalanildi. Gidrotermal reaksiya eritmasini tayorlashda teng nisbatdagi DI suv va HCl aralashtirilib, unga ma’lum miqdorda $Ti(OBu)_4$ tomchilab qo‘shildi. FTO taglik joylashtirilgan gidrotermal reaktorga

tayyorlangan eritma quyildi va germetik yopilgan reaktor 150 °C da 6 soat davomida ushlab turildi.

Hosil bo‘lgan namunalarni mikrostrukturaviy va morfologik xossalari Rigaku Miniflex600 (Yaponiya) Rentgen diffraktometri (XRD) va Thermo Scientific Apreo ChemiSEM (AQSh) skanerlovchi elektron mikroskop (SEM) yordamida tahlil qilindi. Namunalarni fotoelektrokimyoviy xossalari uch elektrodli tizimda CorrTest 350M (Xitoy) potentiostat/galvanostat qurilmasida tahlil qilindi.

Gidrotermal sintez jarayonida taglik sifatida foydalanilgan SnO_2:F (FTO) va rutil fazali TiO_2 kristall panjarasi parametrlari o‘zaro yaqin qiymatga ega bo‘lganligi uchun FTO sirtida rutil fazali TiO_2 epitaksial tarzda kristallanib, substratga perpendikulyar tarzda o‘sadi. Bunda, gidrotermal eritma tarkibidagi $Ti(OBu)_4$ miqdori hosil bo‘lgan TiO_2 nanostrukturalarni o‘lchamlari va zichligini belgilaydi. Tadqiqot davomida $Ti(OBu)_4$ turli konsentratsiyalarini (0.3-1 ml) ta’siri o‘rganildi.



1- rasm. Gidrotermal usulga FTO-shisha tagligi sirtida o‘stirilgan TiO_2 nanoustunchalarining (a) yuza va (b) ko‘ndalang kesim SEM tasvirlari.

Birinchi (a) va (b) rasmlarda gidrotermal usulda sintez qilingan 1 ml $Ti(OBu)_4$ kiritilgan namunani yuza va ko‘ndalang kesim SEM tasvirlari berilgan. Yuza tasvirida (1-rasm (a)) taglik bo‘ylab zich joylashgan, o‘tkir qirrali tetragonal nanoustunchalar uchlari kuzatiladi. Bu rutil TiO_2 ga xos ko‘plab nukleatsiya markazlarining bir vaqtda faollashganidan dalolat beradi. Ko‘ndalang kesim tasviri (1-rasm (b)) nanoustunlarning taglikka deyarli perpendikulyar tarzda o‘sganligini ko‘rsatadi.

Berilgan parametrlarda o‘sgan nanoustunchalarni usunligi 2.83 μm, bo‘lib, asosida zich va yuqori qismida biroz siyraklashgan holda o‘sganini ko‘rishimiz mumkin. Turli $Ti(OBu)_4$ koncentratsiyalarida o‘stirilgan TiO_2 fotoelektrodlarni fotoelektrokimyoviy xossalari 300-800 nm diapazonli 100 mW/cm^2 intensivlikka ega bo‘lgan yorug’lik manbai ta’sirida o‘lchandi. Natijalar fotoelektrodlardagi fototok qiymati hosil bo‘lgan strukturalarni zichligi va uzunligiga chiziqli bog‘liq emasligini ko‘rsatdi.

Gidrotermal sintez usuli FTO taglikda vertikal tartiblangan rutil TiO_2 nanoustunchalarni oddiy va arzon sintez qilish usuli hisoblanadi. Gidrotermal eritma tarkibidagi $Ti(OBu)_4$ koncentratsiyasi hosil bo‘lgan TiO_2 nanoustunchalarni zichligi va o‘lchamlarini nazorat qiluvchi asosiy omillardan biri ekanligi aniqlandi. TiO_2 nanoustunchalarni zichligi va o‘lchamlari ularning fotoelektrokimyoviy xossalariga chiziqli bo‘liq emasligi aniqlandi.

Adabiyotlar

1. Grätzel M. Photoelectrochemical Cells // *Nature*. — 2001. — Vol. 414. — P. 338–344.

2. Chen X., Mao S.S. Titanium Dioxide Nanomaterials: Synthesis, Properties, Modifications, Applications // *Chemical Reviews*. — 2007. — Vol. 107, No. 7. — P. 2891–2959.

3. Mor G.K. et al. A Review on Highly Ordered, Vertically Oriented TiO_2 Nanotube Arrays // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. — 2006. — Vol. 90, No. 14. — P. 2011–2075.

4. Wang G. et al. Hydrogen-Treated TiO_2 Nanowire Arrays for Photoelectrochemical Water Splitting // *Nano Letters*. — 2011. — Vol. 11, No. 7. — P. 3026–3033.

5. Liu B., Aydil E.S. Growth of Oriented Single-Crystalline Rutile TiO_2 Nanorods on Transparent Conducting Substrates for Dye-Sensitized Solar Cells // *Journal of the American Chemical Society*. — 2009. — Vol. 131, No. 11. — P. 3985–3990.

ORGANIK QUYOSH ELEMENTLARIDA IBP QATTIQ QO‘SHIMCHASI QO’LLASHNING AHAMIYATI

D.M.O‘razqulova[1], N.O.Dilmurodova[1,2], S.Abdukarimova[1,2] V.O.Kuvondikov[1]

[1]U.A.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti
[2]Mirzo Ulug’bek nomidagi O’zbekiston Milliy Universiteti
e-mail: kuvondikov@iplt.uz

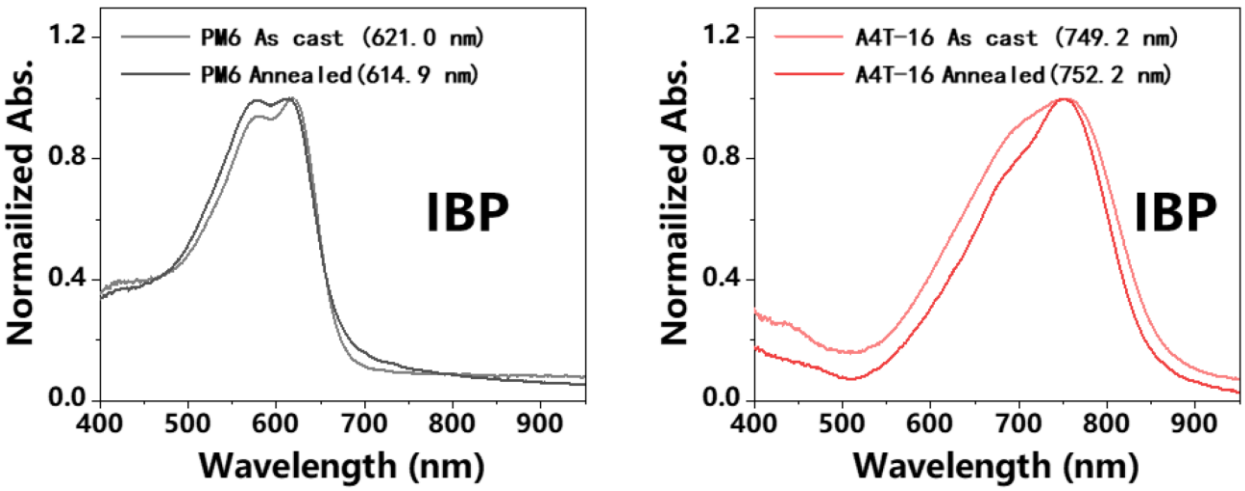
Kirish. So‘nggi yillarda yangi istiqbolli materiallarning sintez qilinishi va optimallashtirilgan fotoelement tayyorlash strategiyalarining rivojlanishi organik quyosh element (OQE)larning energiya o’zgartirish samaradorligini (PCE) 20% dan oshirib, ularni sanoatlashtirishga yanada yaqinlashtirmoqda [1,2]. Shunga qaramasdan, qo‘shimcha bilan ishlov berish muhandisligi kabi morfologik boshqaruv strategiyalari qo’llanilmasa, A4T-16 – kvartetiofen yadroli akseptor asosidagi fotoelementlarda past fill faktori va atigi PCE ~10% samaradorlikka erishilgan. Biroq, faol qatlamga qo‘shimcha donor kiritilishi sanoat nuqtai nazaridan ishlab chiqarish jarayonini murakkablashtirishi bilan birga fotoelement tannarxini sezilarli oshiradi. Shu sababli, bu turdagi donor/akseptorli OQElarni ishlab chiqishga mos, tejamkor va yuqori samarali optimallashtirish strategiya sifatida faol qatlamga qattiq qo‘shimchalar (solid additives) kiritish hisobiga OQE morfologiyasini boshqarish istiqbolli vositalardan biri sifatida qaralmoqda [3].

OQElarida yorug‘lik energiyasini yutivchi yupqa faol qatlam asosiy element bo‘lib, uning tarkibiy qism materiallarining yorug‘lik yutish xususiyatlaridan tashqari agregatsiyalanishi, kristallanishi va o‘zaro aralashib donor/akseptor fazaviy struktura hisoblanadi. Shuning uchun biz 4-iyodobifenil (IBP) qattiq qo‘shimchani kiritishning faol qatlam materiallarining absorbsion spektrlariga ta’sirini o’rganish maqsadida,

Materiallar va metodika. PM6 donor va A4T-16 akseptorlar alohida har biri 1:1.2 og‘irlik nisbatda chlorobenzolda eritilib umumiy 22 mg/mL kontsentratsiyaga

kseptor og’irligiga teng miqdorda IBP qattiq qo‘shimcha qo‘shildi va yuqori agregatsiyalanishni ta’minlash maqsadida eritmalar 50 °C da haroratda 4 soat davomida magnetli aralashtirgichda intensiv aralashtirilib materiallar to’liq erishi ta’minlandi. Tayyorlangan eritmalar UV–ozon bilan tozalangan kvarts shisha sirtiga 2000 rpm tezlikda 60 soniya davomida spin-coating qilib yotqizildi hamda taxminan 110 nm qalinlikdagi IBP qattiq qo’shimcha kiritilgan PM6 va A4T-16 yupqa

Natijalar va muhokama. Tadqiq qilingan yupqa plyonkalarni termik qizdirish jarayonida kiritilgan qattiq qo‘shimchalarning sublimatsiya kinetikasiga bog’liq ravishda donor/akseptor qatlamning morfologik shakllanishiga farqli ta’sirlar ko‘rsatdi. E’tiborga molik jihat shundaki, termik qizdirish jarayonidan so‘ng, IBP kiritilgan sof PM6 yupqa plyonkasining yutilish sohasidagi 0–0 tebranish polosasida 621 nm dan 614.9 nm gacha ko‘k siljishi kuzatildi hamda 0–0/0–1 yutilish polosalarining intensivliklari nisbati ($I_{0–0}/I_{0–1}$) sezilarli kamaydi (1- rasm). Ushbu spektral faktlar zanjirlararo stacking tartibining bir oz susayishini ko‘rsatadi. IBP kiritilib termik qizdirilgan sof A4T-16 plyonkalar yutilish spektrida esa 749.2 nm dan 752.2 nm gacha qizil siljish va $I_{0–0}/I_{0–1}$ nisbati keskin oshishi kuzatildi. Ushbu o’zgarishlar akseptorda molekulyar upakovkalanish (packing) yaxshilanganligi hamda mikrostrukturaviy tartiblanish sezilarli kuchayishini anglatadi (1- rasm). Bunday strukturaviy optimallashuv akseptor domenlarida zaryadlar harakatchanligini yanada kuchaytiradi. IBP qo‘shimchasi termik qizdirish jarayonida sublimatsiyalanib nanog’ovaklar hosil qilishi bilan birga A4T-16 akseptor mikrostrukturasi shakllanishini boshqarish mumkinligini ko’rsatadi. Ushbu yondashuvda IBP qattiq qo‘shimcha yordamida yupqa qatlamni mikrostrukturaviy optimallashtirish mexanizmlari aniqlanadi.



1-Rasm. IBP kiritilgan PM6 va A4T-16 yupqa plyonkalarining yangi tayyorlangan hamda termik qizdirilgan holatdagi absorbsion normallashtirilgan spektrlari.

Xulosa. IBP qattiq qo‘shimcha qizdirishning dastlabki bosqichida sublimatsiyalanib yupqa qatlamlarda nanomasshtabli bo‘shliqlarning hosil bo‘lishiga olib keladi hamda yuqoriroq haroratlarda issiqlik ta’sirida akseptor molekulalarining qayta kristallanishi yuz beradi. Muhim jihati shundaki, ushbu nano-bo‘shliqlar molekulalarning keyingi qayta tartiblanishi uchun qo‘shimcha bo‘sh hajm hosil qiladi va yutilish polosasining qizil tomonga siljishi bilan namoyon bo‘ladi. Ushbu spektral o‘zgarishlar π–π steking qatlamlar orasidagi masofaning qisqarishi hamda kristall tartiblilik va molekulyar upakovkalanishning oshishini ko’rsatadi. Bu strategiya faol qatlamda zaryadlar tashilishi uchun optimallashgan mikrostrukturaviy interfeys fazalar hosil bo’lishiga hamda OFEning Fill faktori qiymatining sezilarli oshishiga olib keladi.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. Sunsun Li, Longfei Jia, et.all. Chem. Engineering Journal, Vol. 540, 2026, 177233.
2. Zhang, R., Qi, L., et.all. // Chin. J. Chem., (2026) 44: 268-276.
3. Qi, Q., Wang, J., Gao, et all. // Small, Vol. 20, Issue 12, 2024, pp. 2307993

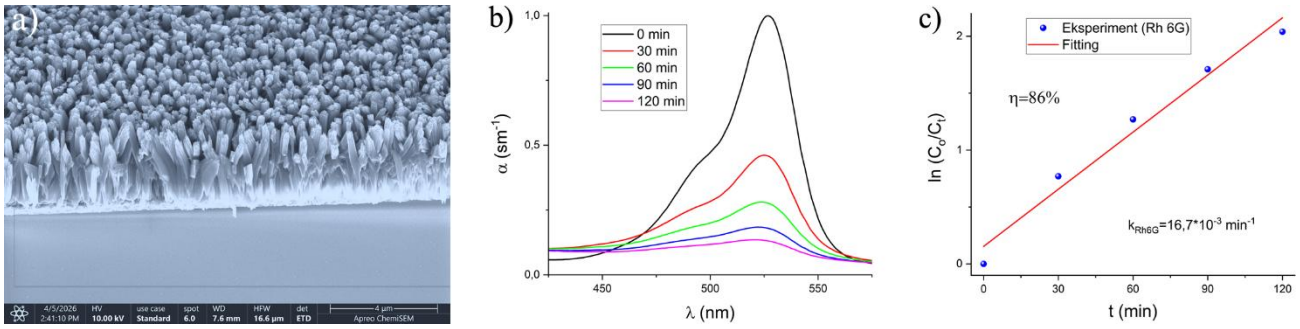
TITAN DIOKSIDI NANORODLARINING FOTOKATALITIK XOSSALARINI TADQIQ QILISH

B.K. Sobirova[1], Sh.Z. Urolov[1]
[1]O’R FA Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti
shz.urolov@gmail.com

Toza ichimlik suviga bo’lgan ehtiyojning ortib borishi bilan birga, mavjud suv zahiralarining ifloslanishi ham sezilarli darajada ortib bormoqda. Yer yuzida bir yil davomida to’qimachilik, kosmetika, oziq ovqat sanoatidagi dasturlar uchun taxminan bir million tonna organik bo’yoqlar ishlab chiqarilmoqda [1]. Belgilangan dasturda qo’llanilgach organik bo’yoq eritmalarining qoldiqlari asosan daryolar va dengizlarga oqizib yuboriladi. Ushbu oqova suvlar tarkibidagi organik ifloslantiruvchi moddalarni zararsizlantirish muhim ahamiyatga ega. Keng taqiqlangan zonaga ega metal oksidlari (ZnO, TiO_2, CuO_2…) da ultrabinafsha nur ta’sirida kuzatiladigan fotokatalitik xususiyatlardan foydalanib organik ifloslantiruvchi moddalarni degradatsiyalash orqali ularning salbiy ta’sirini kamaytirish mumkin [2].

Ushbu ishda ftor atomlari kiritilgan qalay dioksidi ($F:SnO_2$ – FTO) tagliklar yuzasida gidrotermal usulda o’stirilgan TiO_2 nanorodlaridan foydalangan holda Rodamin 6G bo’yog’ining suvdagi eritmasidaning fotodegradatsiyasi bayon qilingan. Tadqiqotlarda TiO_2 nanorodlari izopropil spirti (C_3H_8O), titan butoksid, xlorid kislota (HCl-37%) va diionlashtirilgan suv ishtirokidagi eritmada 175^oC doimiy haroratda 8 soat davomida sintez qilindi. Bo’yoq eritmasi (C=5mg/l) ning optik yutilish spektrlari UV/Vis 5100 spektrofotometri yordamida o‘lchandi. Fotokataliz natijasida bo‘yoq eritmasida konsentratsiyaning o‘zgarib borishi eritmaning optik yutilish spektridagi o‘zgarishlar orqali tahlil qilindi. Qayd qilingan optik yutilish spektrlari Meta Spec Pro va Origin 2024 dasturlarida qayta ishlandi.

Quyidagi 1a- rasmda sintez qilingan TiO_2 nanorodlarining SEM da olingan tasviri keltirilgan. Tasvirdan ko’rinadiki, nanorodlar taglik yuzasiga nisbatan biroz og’ishgan holda shakllangan. Nanorodlarning diametrlari 200-350 nm, uzunliklari 3-4 mikrometr atrofida.



1- rasm: a) TiO_2 nanorodlarining SEM da olingan tasviri, b) TiO_2 nanorodlari ishtirokida bo’yoq eritmasining fotodegradatsiyasi, c) fotodegradatsiya kinetikasi.

1b- rasmda TiO_2 nanorodlari tomonidan rodamin 6G eritmasining fotodegradatsiyasi keltirilgan. Ultrabinafsha nurlanish ta’sirida (fotokatalizatorsiz) eritma konsentratsiyasi barqarorligini saqlab qoldi. Aksincha, bo’yoq eritmasiga TiO_2 nanorodlari kiritilganda eritmaning konsentratsiyasi tez pasayib borishi kuzatildi (1b-rasm). Tadqiq qilinayotgan TiO_2 nanorodlari ~86% fotokatalitik samaradorlik namoyon qildi. Reaksiya kinetikasini tahlil qilish orqali fotodegradatsiya tezligi $16,7 \cdot 10^{-3}$ min^{-1} ga teng ekanligi aniqlandi (1c- rasm).

Tadqiqotlar ko’rsatdiki, gidrotermal usulda FTO tagliklar yuzasida sintez qilingan TiO_2 nanorodlari UB nurlanish ta’sirida kuchli fotokatalitik xususiyatlarni namoyon etadi. Ushbu ish “Bo‘yoqlar va nanozarrachalar bilan faollashtirilgan metalloorganik komplekslarning strukturaviy, optik va generatsion xarakteristikalarini tadqiq qilish” mavzusidagi FL- 8824063381- sonli fundamental loyiha doirasida amalga oshirildi.

Foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxati:

[1] Farah Maria Drumond Chequer et al. Dyes: Dyeing Process and Environmental Impact. Chapter 6. http://dx.doi.org/10.5772/53659

[2] Ch.P. Athanasekoua et al. Journal of Environmental Chemical Engineering V. 6, Is.6, 2018, P. 7386-7394. https://doi.org/10.1016/j.jece.2018.07.026

FEATURES OF FULLERENE C_{60} IN BINARY SOLUTIONS OF AROMATIC HYDROCARBONS

D.T. Bozorova[1], U.K. Makhmanov[1,2]
[1]*Institute of Ion-plasma and Laser Technologies, 100125, 33 Durmon yuli str., Tashkent, Uzbekistan.*
[2]*National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek, 100174, 4 Universitet str., Tashkent, Uzbekistan.*
email: bozorova191@gmail.com

Since its discovery, fullerenes have been the focus of attention of scientists due to their unique properties, with applications in almost all advanced fields, such as medicine, nanotechnology, and pharmaceuticals. C_{60} has been the subject of intense research across numerous disciplines. The structural and electronic properties of C_{60} have garnered significant interest due to their unique characteristics, making them promising candidates for advanced applications in photodetectors, diodes, and solar cells, with fullerenes exhibiting exceptional thermal and electrical conductivity as well as high tensile strength. Fullerenes are among the most popular electron-acceptor materials used in organic photovoltaics, owing to their superior properties such as good electron conductivity and efficient charge separation at the donor/acceptor interface. Beyond electronics, C_{60} has potential applications in biomedicine, catalysis, electronics, and photovoltaic materials, and in recent years has shown interesting biological properties that can be employed, for example, in radioprotection to prevent damage caused by radiotherapy, as well as in photodynamic therapy [1-2].

In binary solutions consisting of a strong solvent and a poor solvent, fullerenes rapidly form more stable aggregates. Changing the composition, concentration, or fullerene concentration of the liquid mixtures causes significant changes in the C_{60} solution. The solubility of C_{60} fullerene is influenced by polarity, polarizability, molecular size, and cohesive energy density of the surrounding solvent medium. Statistical analysis of C_{60} solubility data shows that increasing molar volume and solvent polarity diminish the solubility of C_{60}, whereas electron pair donation ability and polarizability enhance solubility. Aromatic solvents occupy a privileged position in this context: in benzene, toluene, bromobenzene, 1,2-dichlorobenzene, and p-xylene,

the single fullerene molecule is surrounded by several hundreds of molecules of aromatic compounds, with columns of solvent tens of nanometers long forming around the fullerene a picture consistent with large solvation shells deduced from X-ray diffraction patterns, with compressibility studies of C_{60} solution in toluene suggesting a solvation shell thickness of approximately 1 nm. [3].

Three binary solvent systems were prepared at room temperature and atmospheric pressure by volumetric mixing of toluene with each of the aliphatic or aromatic co-solvents: (i) toluene–hexane, (ii) toluene–benzene, and (iii) toluene–cyclohexane, at a series of volume fractions. For each binary solvent composition, C_{60} solutions were prepared by dissolving 0.1 mg of the fullerene powder in the corresponding solvent mixture under continuous magnetic stirring until optically homogeneous solutions were obtained. Fullerene solutions were studied by refractometry, dynamic light scattering and UV-vis spectroscopy. The results showed that mixing a poor solvent with a good solvent can change the size and stability of fullerene aggregates.

References

[1]. Jebnouni, A.; et al**.** *Journal of Industrial and Engineering Chemistry.* **2025**, *147*, 125–148.

[2]. Pesado-Gómez, C.; et al**.** *Coordination Chemistry Reviews.* **2024**, *501*, 215550.

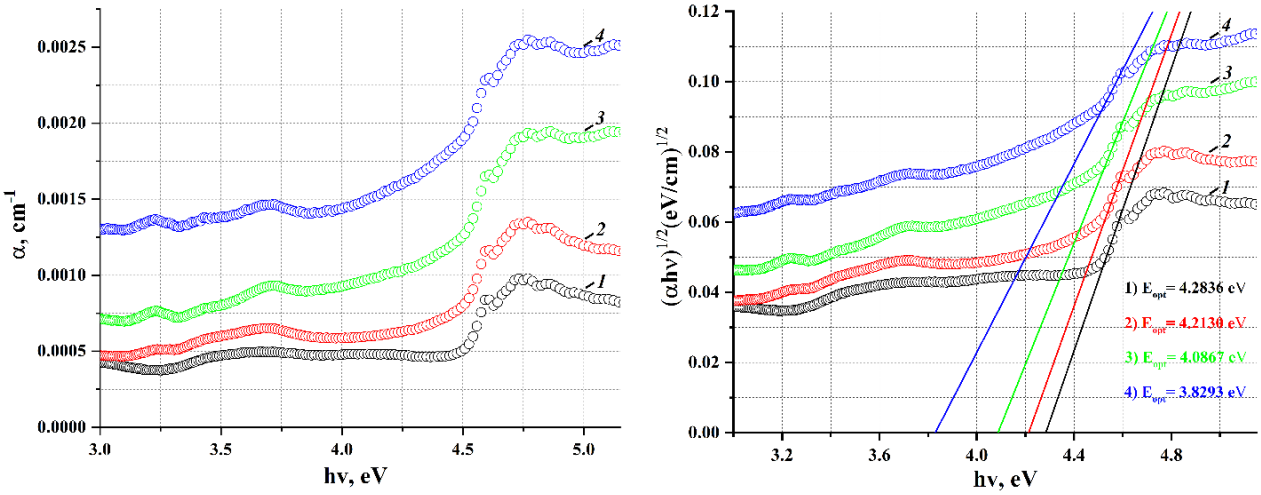
[3]. Yushchenko, S.V.; et al. *Colloids and Interfaces.* **2024**, *4*, 2.

OPTICAL PROPERTIES OF POLYSTYRENE/C_{70} THIN FILMS

U.K. Makhmanov[1], E.A. Tursunkulov[1], E.U. Kudratov[2]
[1]Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Uzbekistan Academy Sciences;
[2]School of Engineering named after Mirzo Ulugbek, Uzbekistan
E-mail: urol_m@mail.ru

In recent years, interest in polymer-based nanocomposites and their fabrication has been steadily growing. The main goal of research on composite materials is to develop new materials with specified characteristics and properties, as well as to study the physicochemical nature of these characteristics [1]. Polymer nanocomposites generally exhibit significantly better physical and chemical properties compared to their individual components. In particular, incorporating fullerene into a polymer matrix allows for the development of many new fullerene derivatives [2]. Figure 1 shows the absorption coefficients and optical bandgap values (E_{opt}) of thin films prepared from PS/C_{70}/benzene solutions with various amounts of added C_{70} fullerene. The purpose of this study is to investigate the optical properties of PS/C_{70} thin films obtained from PS/C_{70}/benzene solutions.In the experiment, Iran-manufactured GPPS (General Purpose Polystyrene) grade 1551 polymer granules complying with ASTM standards (purity >99%, average molecular weight M_v = 200,000 g/mol) were used. C_{70} fullerene crystalline powder (purity >99.8%) and benzene (purity >99%) as a solvent were employed. C_{70} fullerene and benzene reagents were purchased from Sigma Aldrich (USA). The GPPS 1551 polymer (hereinafter referred to as PS) reagent was obtained from Iran/Assalouyeh/Petrochemical Company. PS/C_{70} thin films obtained from PS/C_{70}/benzene solutions containing 98.15, 96.3, and 94.45 mass percent PS polymer and 1.85, 3.70, and 5.55 mass percent C_{70} fullerene, respectively, were studied. To prepare the PS/C70 thin films, PS/C70/benzene solutions of various concentrations were spun for 30 seconds at a speed of 2000 rpm (acceleration 100 rpm/s) using a model KW-4A spin coater (China), resulting in PS/C_{70} nanocomposite films. The thickness of the thin films based on PS and C_{70}, determined via ellipsometric measurements, ranged from ~231 to 283 nm. The electronic absorption spectra of the

investigated PS and C_{70}-based thin layers were recorded in the wavelength range of ~199–800 nm using a Cary 60 UV-Vis spectrophotometer (Agilent, USA).



A B

Figure 1. Absorption coefficient (A) and optical bandgap (B) values for PS/C_{70} composite thin films with different fullerene concentrations: 1 – PS, 2 – PS/C_{70} (C_{70} ~ 1.85 wt%), 3 – PS/C_{70} (C_{70} ~ 3.70 wt%), and 4 – PS/C_{70} (C_{70} ~ 5.55 wt%).

Interactions occurring through mutual π-π electron interaction or Van der Waals forces can be detected by studying the changes in the optical bandgap energy (E_{opt}) values of PS/C_{70} thin films. As can be seen, the absorption coefficient values increase with increasing C_{70} concentration in all studied samples (Figure 1-A). Adding C_{70} fullerene molecules to the polymer matrix does not alter the chemical structure of the polymer; however, when forming nanofilms together with the polymer matrix, it can significantly affect a number of their physical properties. Tauc and co-workers proposed and substantiated a method for determining the optical bandgap energy by using optical absorption data appropriately plotted against energy [3]. For the PS+C_{70} samples, Tauc plots showing the dependence of on photon energy in the UV-Visible absorption region were constructed using OriginPro 2018 software (Figure 2-B). Then, the linear regions of the curves in the Tauc plot were extrapolated until they intersected the energy axis. These intersection points represent the dependence of the E_{opt} values of the PS/C_{70} thin films on the C_{70} content, as well as the corresponding E_{opt} values of the films. The decreasing trend of E_{opt} with increasing percentage of C_{70} fullerene in

the PS/C_{70} matrix is clearly seen in Figure 2-B, where the addition of 5.55% C_{70} leads to a reduction in E_{opt} values from 4.2836 eV to 3.829 eV, bringing it close to the boundary of wide-bandgap semiconductors. Similar behavior has also been reported in related studies. This decrease may be partly attributed to the formation of charge transfer complexes between C_{70} fullerene and PS chains, the emergence of additional localized electronic states, and an increase in structural disorder.

The optical properties of these PS/C_{70} thin films are also important for medical sensors and environmental monitoring, industrial monitoring, as well as sensors in security systems. Composite materials help ensure the sensitivity, accuracy, and long-term performance of sensors, enabling the creation of efficient and reliable monitoring systems across various fields. Furthermore, the tunable optical bandgap of these nanocomposites offers strong potential for flexible photodetectors and organic solar cells. Overall, optimizing these PS/C_{70} thin films paves the way for cost-effective, high-performance optoelectronic devices.

REFERENCES

1. Махманов, У. К.; Jiang, X.; Аслонов, Б. А.; Турсункулов, Э. А. Особенности Взаимодействия в Растворах Полистирола и Фуллерена C_{70}.// Горение и Плазмохимия 2025, *23* (2), 123–136.
2. Roslan, R.; Ab. Rahim, M. H. Morphology, Rheology, Properties, and Applications of Fullerene-Filled Polymer Blends. In Nanofillers for Binary Polymer Blends; Elsevier, 2024; pp 223–242.
3. Tropin, T.V., Karpets, M.L., Kosiachkin, Y., Gapon, I.V., Gorshkova, Y.E., Aksenov, V.L., Evaluation of fullerenes C60 /C70 layers in polystyrene thin films by neutron and X-ray reflectometry. Fuller. Nanotub. Carbon Nanostructures. 2021. 29, 819–824.

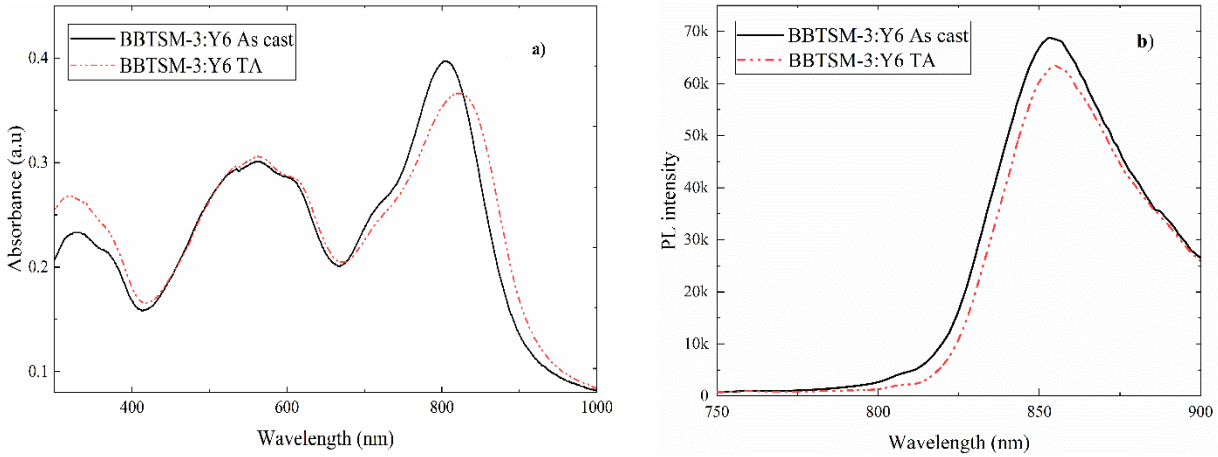
TERMIK TOBLASHNING BBTSM-3:Y6 ASOSLI ORGANIK QUYOSH ELEMENTLARI FAOL QATLAMINING OPTIK VA SPEKTROSKOPIK XOSSALARIGA TA’SIRI

Turg’unboyev A. Y., Zaxidov E. A.
U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti
turgunboevabror691@gmail.com

Quyosh energiyasi tugamaydigan va barqaror resurs sifatida so’nggi o’n yilliklarda juda kata e’tiborni tortdi [1]. Organik quyosh elementlari (OQE) arzon ishlab chiqarish narxi, yengil vazni, moslashuvchanligi va yarim shaffofligi sababli tadqiqotchi olimlar hamda sanoat vakillari tomonidan katta qiziqish bildirilmoqda. Xususan OQE larida fulleren bo’lmagan A-D-A (akseptor-donor-akseptor) malekulyar aritekturasiga ega materiallarni qo’llash orqali yuqori samaradorlikka erishilmoqda [2]. Faol qatlamdagi donor va akseptor materiallarining kristallanish xarakteristikasi turlicha bo‘lganligi sababli qatlamlar morfologiyasini boshqarish murakkab vazifadir. Faol qatlam morfologiyasini yaxshilash va yuqori samaradorlikka erishish uchun turli optimallashtrish usullaridan foydalaniladi [3]. Bunday usullardan biri bu faol qatlamni qoplashdan so’ng uni termik toblash (TA) usuli hisoblanadi. Termik toblash molekulyar qayta guruhlanishga yordam beradi, fazalar ajralishini yaxshilaydi va kristallikni oshiradi, natijada qurilma samaradorligini yaxshilaydi [4,5].

Ushbu ishda biz BBTSM-3 (Benzo Bis Thiazole Small Molecule) va Y6 kichik molekulali donor-atseptor aralashmalari asosidagi OQElarining faol qatlami yupqa plyonkalarining optik (yutilish, fotolyuminesensiya) parametrlarini tadqiq qilindik. Faol qatlamlarni olish uchun dastlab BBTSM-3 va Y6 materiallari 1:1 nisbatda (10mg:10mg) olinib, 20mg/mL konsentratsiyada trixlorometanda ($CHCl_3$) eritildi. Eritma magnetik aralashtirgich yordamida 40 °C–50 °C haroratda 1 soat davomida aralashtirildi va so‘ngra tozalangan shisha sirtiga “spin coating” usulida 3000 rpm tezlikda 30 sekund davomida qoplandi. Faol qatlamlar namunalari qo’shimcha ishlov berilmagan (As cast) va termik toblash (TA) orqali olindi. Termik toblash 100 ^oC

haroratda 10 daqiqa davomida o’tkazildi. Olingan faol qatlam plyonka namunalarining optik yutilish (absorbance) va fotolyuminesensiya (PL) spektrlari tahlil qilindi.



1-rasm. Qo’shimcha ishlov berilmagan va termik toblash orqali olingan BBTSM-3:Y6 faol qatlami plyonkasi namunalarining optik yutilishi (a) va fotolyuminesensiya (b) spektrlari.

1a-rasmda BBTSM-3:Y6 faol qatlam plyonkalarining ushbu ikki holatda optik yutilish spektri ko’rsatilgan. Grafikdan ko’rishimiz mumkin BBTSM-3:Y6 faol qatlami plyonkasiga issiqlik ishlovi berilganda Y6 akseptor sohasi yutilish spektri qizil sohaga siljishi (bathochromic shift) va yutilish diapazonining kengayishi kuzatildi. Bu faol qatlam plyonkasida J-agregatsiya kuchli ekanini ko’rsatadi. J-agregatsiyada molekulalarning dipol-dipol o‘zaro ta’siri tufayli elektron o‘tish faqat quyi energetik sathga ruxsat etilgan bo‘ladi va shuning uchun “qizil siljish” kuzatiladi - yutilish kichikroq energiyalar sohasiga siljiydi. Bu holat issiqlik ta’sirida molekulalararo π-π o’zaro ta’sirning kuchaygani hamda faol qatlam morfologiyasida kristallanish darajasining oshganini ko’rsatadi. BBTSM donor molekulalari esa o‘zaro bunday π-π kuchli ta’sir kuchiga ega emas va o‘zining yirik yassi shakli sababli spektrning donor sohasida arzimagan silshish kuzatildi. 1b- rasmda esa ushbu faol faol qatlam plyonkalarining PL spektrlari ko’rsatilgan. Termik ishlov berilgan plyonkada PL intensivligi ishlov berilmagan plyonkaga nisbatan 855nm piki sohasida sezilarli pasaygan. Bu pasayish donor va akseptor interfeysida eksitonlarning nurlanishsiz dissotsiatsiyalanib, erkin zaryad tashuvchilarga ajralish tezligi va samaradorligi

oshganini ko’rsatadi. 807nm to’lqin uzunligi maksimumida BBTSM-3 donor molekulalarining PL intensivligi kuchsiz hosil bo’lishi donor-akseptor aralashmasida uyg’otilgan holat relaksatsiyasining nurlanishsiz kanallari, xususan, BBTSM-3 molekulasidan Y6 molekulasiga zaryadlar (elektronlar) ko’chishi samaradorligi yuqori ekanligini anglatadi. Uuman olganda BBTSM-3 donor va Y6 akseptorining komplementar yutilishi quyosh spektrining ko’rinuvchi va yaqin infraqizil sohalarini keng qamrab olishni ta’minlaydi. Termik toblash (TA) Y6 molekulalarining π-π stacking kuchaytirib, yutilish spektrini qizil sohaga suradi va plyonka kristalligini oshiradi. Fotolyuminesensiya (PL) intensivligining keskin so’nishi donor-akseptor chegarasida eksitonlarning samarali ajralib, zaryadlar ko’chishi yaxshilanganini ko’rsatadi. Ushbu optik va morfologik o’zgarishlar termik toblash ishlovi BBTSM-3:Y6 faol qatlami strukturasini optimallashtirishda samarali ekanligini ko’rsatadi

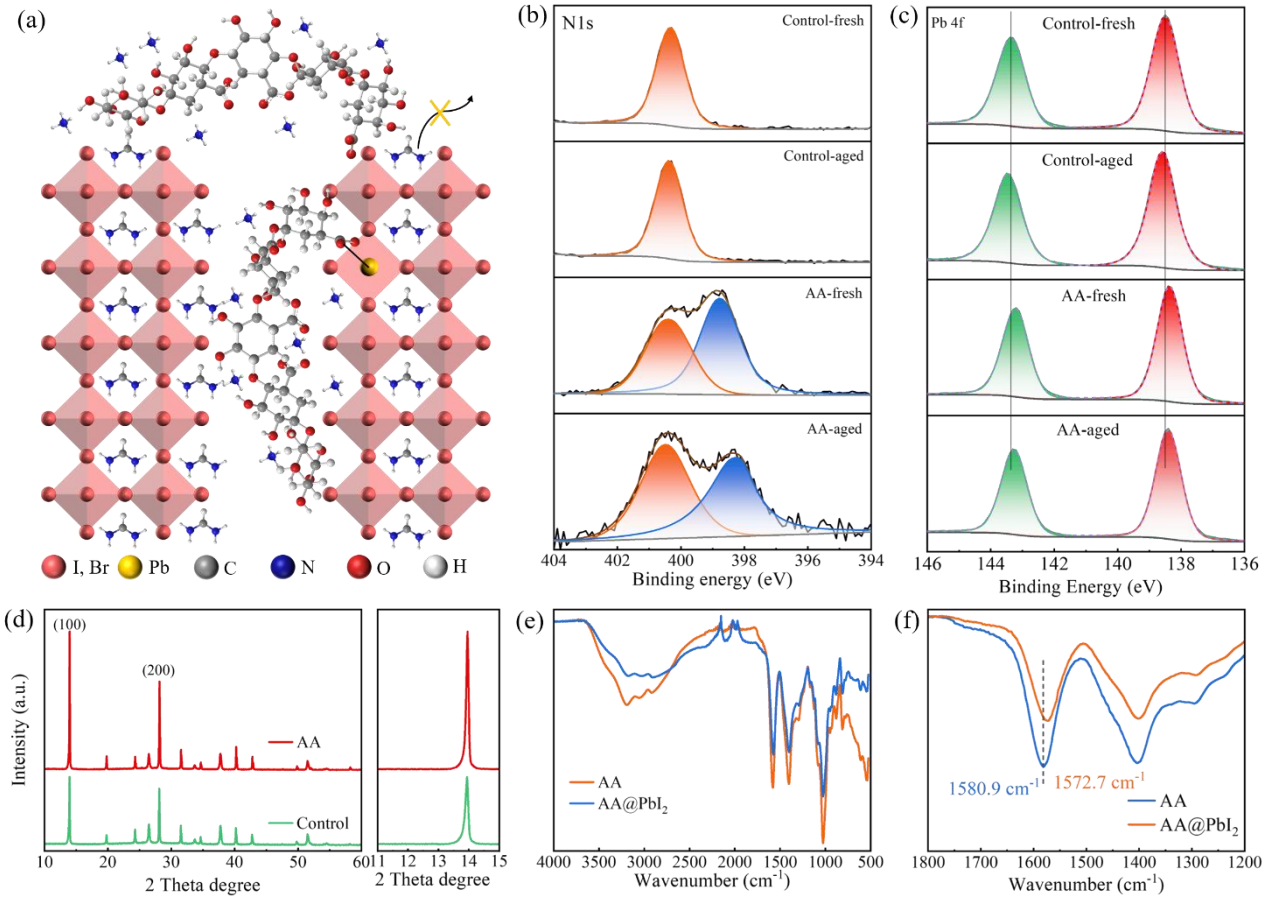
Foydalanilgan adabiyotlar ro’yxati.

1. Heydari M., Heydari A., Amini M. Solar power generation and sustainable energy: A review // International Journal of Technology and Scientific Research.-2023. - Vol. 12. - P. 342-349.
2. Han D., Wen S., Song K., Lv J., Yang C., Zhuang T., Saparbaev A., Sun M., Bao X. Synthesis and photovoltaic properties of novel conjugated molecules // Dyes and Pigments. - 2025. - Vol. 234. - Art. no. 112564.
3. Wan L., Wu W., Jiang M., Yin X., He Z., Liu J. The Application of Crystallization Kinetics in Optimizing Morphology of Active Layer in Non-Fullerene Solar Cells // Energies. - 2024. - Vol. 17, No. 9. - Art. no. 2262.
4. Li Y., Wang B., Chen L., Yuan Y., Fu J., Geng C., Wan J., Wang H. Q. Optimization of active layers for efficient binary organic solar cells // Physical Chemistry Chemical Physics. - 2025. - Vol. 27, No. 1. - P. 301-307.
5. Memon W. A., Deng Z., He F. Recent development in solid additives enables high-performance organic solar cells // EnergyChem. - 2024. - Vol. 6, No. 3. - Art. no. 100129.

АММОНИЙ АЛЬГИНАТНИНГ ПЕРОВСКИТ ҚАТЛАМИДА ДУАЛЬ ПАССИВАЦИЯ ВА КРИСТАЛЛИК ТУЗИЛИШНИ БОШҚАРИШДАГИ РОЛИ

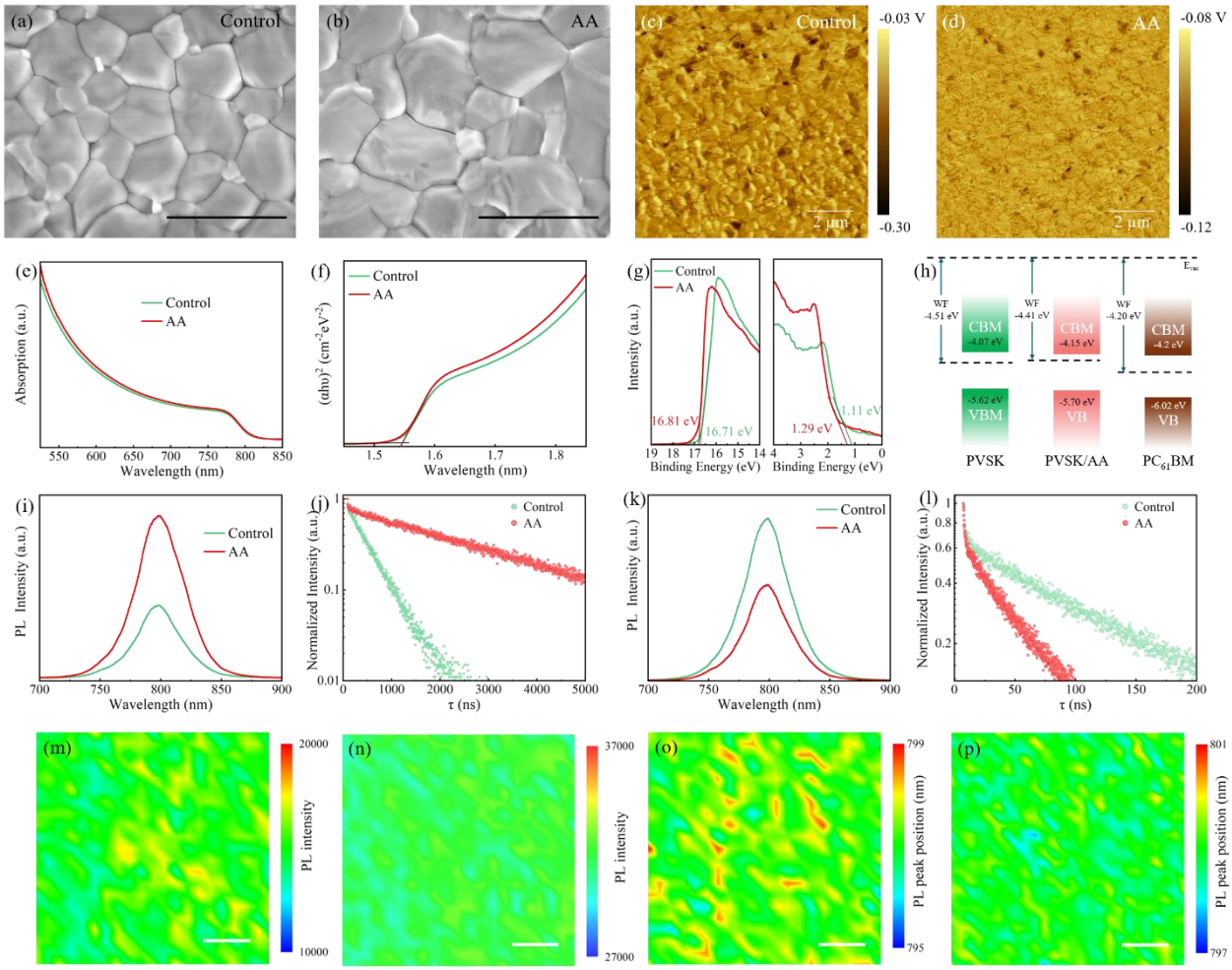
[1]Тажибаев И.И., [1]Бойназаров И.Р., [1]Турғунбоев А.Й.,[1.2]Соатиллаев А.У.
[1]У.А. Арифов номидаги Ион-плазма ва лазер технологиялари институти
[2]Наманган давлат техника университети
E-mail: ilhom_tojiboyev@gmail.com

Металл-галогенид перовскитлар юқори фотоэлектрик хусусиятларга эга бўлса-да, ионли ва юмшоқ кристалл панжараси сабабли термик ҳамда муҳит таъсирида деградацияланади. A-сайтдаги учувчан органик катионларнинг де-протонацияси ва координацияланмаган Pb^{2+} марказлари дефектлар ҳосил бўлишини кучайтиради. Ушбу ишда аммоний альгинат (AA) биополимери катион ва ноорганик панжарани бир вақтда стабиллаштирувчи кўп функцияли қўшимча сифатида ўрганилди.



1-расм. AA нинг перовскитдаги ўзаро таъсир схемаси, XPS, XRD ва FTIR натижалари.

AA занжиридаги NH_4^+ ва $–COO^-$ гуруҳлари синергик таъсир қилади: NH_4^+ формамидиний (FA^+) де-протонациясини сусайтиради, $–COO^-$ эса координацияланмаган Pb^{2+} билан боғланиб, дефектларни пассивациялайди. XPS да янги тайёрланган $FAPbI_3$–AA намунасида FA^+ ва NH_4^+ улушлари 43,77% ва 56,22% бўлди; термик қаришдан кейин 50,42% ва 49,58% қийматлар қайд этилди. Pb 4f сигналларининг пастроқ боғланиш энергиясига силжиши Pb^{2+}–COO^- ўзаро таъсирини кўрсатди.



2-расм. AA таъсирида SEM, KPFM, UV–Vis/Tauc, UPS, PL/TRPL ва PL mapping натижалари.

XRD да 13,94° ва 28,12° даги (100) ва (200) рефлекслар сақланди. AA қўшилганда (100) пик FWHM қиймати 0,1366° дан 0,1028° гача камайди, (100)/(200) интенсивликлар нисбати 1,203 дан 1,558 гача ошди. Бу кристалликнинг яхшиланиши ва (100) афзал ориентация шаклланганини

кўрсатади. FTIR да $–COO^-$ тебранишининг 1580,9 $см^{-1}$ дан 1572,7 $см^{-1}$ гача силжиши Pb^{2+} билан координацияни тасдиқлайди.

SEM да AA таъсирида доналар йириклашиб, дон чегаралари камайди; AFM бўйича сирт ғадир-будурлиги 32,34 нм дан 24,56 нм гача пасайди. KPFM ўртача сирт потенциалининг −173,7 мВ дан −11,3 мВ гача ўзгариши ва FWHM нинг 108,8 мВ дан 63,2 мВ гача торрайишини кўрсатди. 550–800 нм соҳада ютилиш бироз ошди, bandgap 1,555 дан 1,552 эВ гача деярли ўзгармади. PL интенсивлиги ошиб, TRPL ташувчи яшаш вақти 1661 нс дан 2544 нс гача узайди; $PC_{61}BM$ интерфейсида эса яшаш вақти 101,8 нс дан 40,5 нс гача қисқариб, электрон экстракцияси тезлашганини кўрсатди.

Хулоса қилиб айтганда, AA нинг NH_4^+ гуруҳлари A-сайт катионларини барқарорлаштирса, $–COO^-$ гуруҳлари Pb^{2+} дефектларини пассивациялайди. Натижада кристаллик, (100) ориентация, сирт бирхиллиги ва фотолюминесцент хусусиятлар яхшиланиб, нонрадиацион рекомбинация камаяди.

Фойдаланилган адабиётлар рўйхати

1. Huang J.; Fang M.; Cai P.; Li S.; Liu S.; Tajibaev I.; Wei M.; Zhu J.; Li Y. Sustainable Stabilization of Perovskite Solar Cells Using Multifunctional Ammonium Alginate for Over 26% Efficiency. 2026.
2. Jiang Q.; Zhao Y.; Zhang X. W.; et al. Surface passivation of perovskite film for efficient solar cells. Nature Photonics. 2019, 13, 460–466.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЕНОК NiO, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ АТОМНО-СЛОЕВОГО ОСАЖДЕНИЯ, С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЙ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ

Т.К. Турдалиев, Ф.И. Абдурахманов*

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий имени У.А. Арифова Академии наук Республики Узбекистан.

e-mail: tudaliev@iplt.uz

NiO является широкозонным полупроводниковым материалом, характеризующимся p-типом проводимости, высокой химической стабильностью и каталитической активностью. Благодаря сочетанию этих свойств NiO представляет интерес для электрохимических накопителей энергии, фотокатализа, сенсорных устройств, солнечных элементов и каталитических покрытий [1–3]. Для получения тонких пленок NiO применяются различные методы, среди которых атомно-слоевое осаждение (ALD) обеспечивает точный контроль толщины и высокую однородность покрытия. Использование плазмы в качестве реакционного агента в PEALD повышает реакционную способность процесса и позволяет получать плотные пленки при относительно низких температурах [2,3].

Спектроскопическая эллипсометрия является высокочувствительным неразрушающим методом исследования тонких пленок, позволяющим определять их толщину и оптические константы. Для пленок NiO, полученных методом PEALD, данный метод позволяет моделировать дисперсию оптических параметров и оценивать характеристики пленки [2].

В нашей работе, тонкие пленки NiO формировались методом PE-ALD с использованием никелоцена ($NiCp_2$) в качестве металлического прекурсора и кислородной ICP-плазмы в качестве окислителя. Осаждение проводилось при температуре подложки 250 °C. Исследованы образцы после 250 и 500 циклов. Оптические свойства исследовались при помощи метода спектральной эллипсометрии с использованием эллипсометра SENTECH SER 850 в диапазоне

длин волн 240-1000 нм. Измерения проводились при углах падения 50°, 60° и 70°. Экспериментальные спектры эллипсометрических параметров Ψ и Δ моделировались с использованием многослойной оптической модели, в которой дисперсия пленки NiO описывалась моделью Tauc–Lorentz.

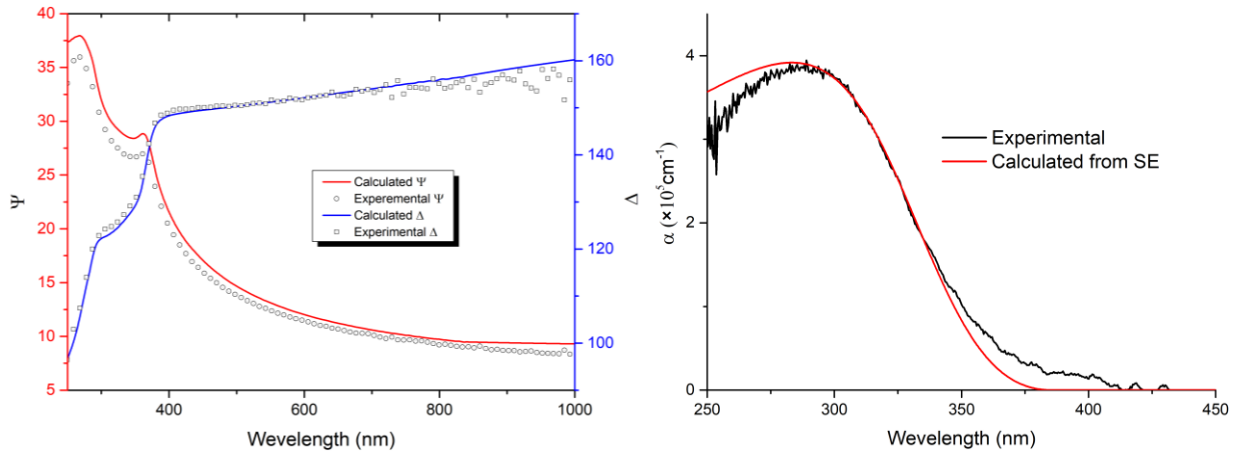


Рисунок 1. Экспериментальные и рассчитанные спектры Ψ и Δ (а); экспериментальный и рассчитанный коэффициенты поглощения α (б).

В качестве критерия качества оптической модели использовалось значение MSE между экспериментальными и расчетными эллипсометрическими спектрами Ψ и Δ. Оптимизация модели позволила получить значение MSE = 2,29. Для пленки, сформированной после 500 циклов PE-ALD, расчетная толщина составила 9,8 нм, что соответствует средней скорости роста около 0,02 нм/цикл.

Практически полное совпадение экспериментальных и расчетных спектров Ψ и Δ во всем исследуемом диапазоне подтвердило корректность выбранной модели. На основе модели Tauc–Lorentz были определены спектральные зависимости показателя преломления и коэффициента экстинкции. Коэффициент экстинкции резко уменьшается при длинах волн более приблизительно 360–380 нм, что свидетельствует о высокой прозрачности исследуемой пленки в видимой области спектра.

Для дополнительной проверки оптической модели коэффициент поглощения, рассчитанный из эллипсометрических данных, был сопоставлен с

коэффициентом поглощения, определенным независимо из спектров пропускания пленки NiO на кварцевой подложке. Получено хорошее согласие между двумя зависимостями, включая положение края фундаментального поглощения, что подтверждает достоверность полученных констант.

Энергетическая ширина запрещенной зоны определялась методом Таука по экспериментальным спектрам пропускания. Для прямого и непрямого разрешенных оптических переходов были получены значения 3,63 и 3,09 эВ, соответственно. Полученные значения согласуются с опубликованными данными для пленок NiO и подтверждают широкозонный полупроводниковый характер исследуемого материала [1,3].

Литература

[1] J. W. F. Innocent et al., “Atomic scale surface modification of TiO2 3D nano-arrays: plasma enhanced atomic layer deposition of NiO for photocatalysis,” Mater. Adv., vol. 2, no. 1, pp. 273–279, 2021, doi: 10.1039/D0MA00666A.

[2] D. Koushik et al., “Plasma-assisted atomic layer deposition of nickel oxide as hole transport layer for hybrid perovskite solar cells,” J. Mater. Chem. C, vol. 7, no. 40, pp. 12532–12543, 2019, doi: 10.1039/C9TC04282B.

[3] M. Napari et al., “Antiferromagnetism and p type conductivity of nonstoichiometric nickel oxide thin films,” InfoMat, vol. 2, no. 4, pp. 769–774, Jul. 2020, doi: 10.1002/inf2.12076.

[4] L.-Y. Xie et al., “Growth, physical and electrical characterization of nickel oxide thin films prepared by plasma-enhanced atomic layer deposition using nickelocene and oxygen precursors,” Mater. Res. Express, vol. 7, no. 4, p. 046401, Apr. 2020, doi: 10.1088/2053-1591/ab82c9.

AMORF SiO_2 NANOMATERIALLARI SIRTIDA ADSORBSIYA JARAYONLARINING IQ-FURYE SPEKTROSKOPIK TAHLILI

Tulaganov Sardor Anvvarovich
U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti
E-mail: tulaganov@iplt.uz

Yuqori dispersli amorf kremniy dioksidining adsorbsion xususiyatlari uning sirt tuzilishi, funksional guruhlari va adsorbsiyalangan suv holatiga bog‘liq. SiO_2 sirtidagi silanol guruhlari adsorbat molekulalari bilan o‘zaro ta’sirlashuvchi faol markazlar hisoblanadi [1]. Ularning holati va adsorbsiya jarayonidagi o‘zgarishlarini IQ-Furye spektroskopiyasi yordamida samarali aniqlash mumkin [2].

Ishning maqsadi texnogen xomashyodan sintez qilingan yuqori dispersli amorf SiO_2 namunalarining [3] sirt holati va bo‘yoqlar adsorbsiyasidan keyingi spektral o‘zgarishlarni IQ-Furye spektroskopiyasi yordamida o‘rganishdan iborat. Tadqiqotda Si_{Slag} va Si_{MC} namunalari A-60 markali pirogen SiO_2 bilan qiyoslandi, adsorbat sifatida Metilen ko‘k (MK) va Kongo qizil (KQ) bo‘yoqlaridan foydalanildi.

A-60, Si_{Slag} va Si_{MC} namunalarining IQ-Furye spektrlarida amorf SiO_2ga xos yutilish chiziqlari aniqlandi: 468 sm^{-1} da Si–O–Si deformatsion, 800 sm^{-1} da O–Si–O hamda 1000–1200 sm^{-1} oralig‘ida Si–O–Si valent tebranishlari kuzatildi.

SiO_2 sirtining adsorbsion xususiyatlarini tavsiflashda OH-guruhlari bilan bog‘liq spektral sohalar muhim ahamiyatga ega. 3740–3750 sm^{-1} dagi chiziq izolyatsiyalangan sirt silanol Si–OH guruhlariga, 3540–3550 sm^{-1} dagi chiziq vitsinal silanollarga, 3650–3715 sm^{-1} oralig‘idagi keng chiziq esa sorbsiyalangan suv bilan vodorod bog‘lari hosil qilgan silanollarga tegishli [2]. 1636 va 3200–3500 sm^{-1} sohalardagi chiziqlar adsorbsiyalangan suvga mos kelib, Si_{Slag} va Si_{MC} namunalarida sezilarli namoyon bo‘lgan. 3750 sm^{-1} dagi erkin ≡Si–OH guruhlari esa asosiy sorbsiya markazlari hisoblanadi.

MK adsorbentlarning sorbsion xususiyatlarini baholashda marker birikma sifatida qo‘llanadi [4]. MK adsorbsiyasida maksimal adsorbsion sig‘im A-60 uchun Q_{max} = 18 mg/g, Si_{Slag} uchun Q_{max} = 11 mg/g ni tashkil etdi. A-60ning yuqoriroq

ko‘rsatkichi uning solishtirma sirt yuzasi va sirt Si–OH guruhlari konsentratsiyasi, Si_{Slag}ning pastroq ko‘rsatkichi esa kichikroq sirt yuzasi va adsorbsiyalangan suv miqdorining ko‘pligi bilan bog‘langan. MK konsentratsiyasi 0,1 mg/ml dan yuqori bo‘lganda ikkala namunada bo‘yoqni eritmadan chiqarish samaradorligi taxminan 40 % ni tashkil etdi.

Si_{MC}da MK adsorbsiyasi kuzatilmagani sababli anion tabiatli KQ bilan tadqiqot o‘tkazildi. KQning nanoo‘lchamli metall oksid adsorbentlarida adsorbsiyalanishi adabiyotlarda ham o‘rganilgan [5]. Si_{MC}ning KQ bo‘yicha maksimal adsorbsion sig‘imi Q_{max} = 20 mg/g, yuqori konsentratsiyalarda eritmadan chiqarish darajasi esa 76 % ni tashkil etdi. Natijalar SiO_2ning adsorbsion xususiyatlari sirtning funksional holati va adsorbat tabiatiga ham bog‘liqligini ko‘rsatdi.

Adsorbsiyadan keyingi IQ-Furye spektrlarida 1200–1600 sm^{-1} sohada bo‘yoq molekulalariga xos qo‘shimcha yutilish chiziqlari paydo bo‘ldi. Si_{Slag} va Si_{MC} namunalarida 3200–3600 sm^{-1} sohadagi keng diffuzion chiziq intensivligining kamayishi va erkin silanol guruhlariga tegishli 3746 sm^{-1} dagi tor chiziq intensivligining ortishi kuzatildi.

Ushbu spektral o‘zgarishlar Si_{Slag} va Si_{MC} sirtidan fizik adsorbsiyalangan suv molekulalarining chiqarilishi va ularning bo‘yoq molekulalari bilan almashinishi bilan izohlanadi. Bu MK va KQ molekulalarining SiO_2 sirtida fizik adsorbsiyalanganligini ko‘rsatadi. Demak, adsorbsiya jarayonida sirt silanol guruhlari bilan bir qatorda, ular bilan vodorod bog‘lari hosil qilgan suv molekulalarining holati ham muhim omil hisoblanadi.

Xulosa. IQ-Furye spektroskopik tadqiqotlarda A-60, Si_{Slag} va Si_{MC} amorf SiO_2 namunalariga xos Si–O–Si va O–Si–O tebranishlari hamda turli holatdagi sirt silanol guruhlari aniqlandi. Adsorbsiyadan keyingi spektral o‘zgarishlar SiO_2 sirt holatining o‘zgarishini tasdiqladi. A-60 va Si_{Slag} uchun MK bo‘yicha mos ravishda 18 va 11 mg/g, Si_{MC} uchun KQ bo‘yicha 20 mg/g maksimal adsorbsion sig‘imlarning aniqlanishi spektroskopik xususiyatlar bilan adsorbsion faollik o‘rtasidagi bog‘liqlikni ko‘rsatdi. Olingan natijalardan kelib chiqib, texnogen xomashyodan sintez qilinadigan amorf

SiO_2ning adsorbsion xususiyatlarini boshqarishda sirt silanol guruhlari, adsorbsiyalangan suv holati va adsorbat tabiatini hisobga olish taklif etiladi. IQ-Furye spektroskopiyasidan bunday materiallarning sirt holati va adsorbsiyadan keyingi o‘zgarishlarini nazorat qilish usuli sifatida foydalanish tavsiya etiladi.

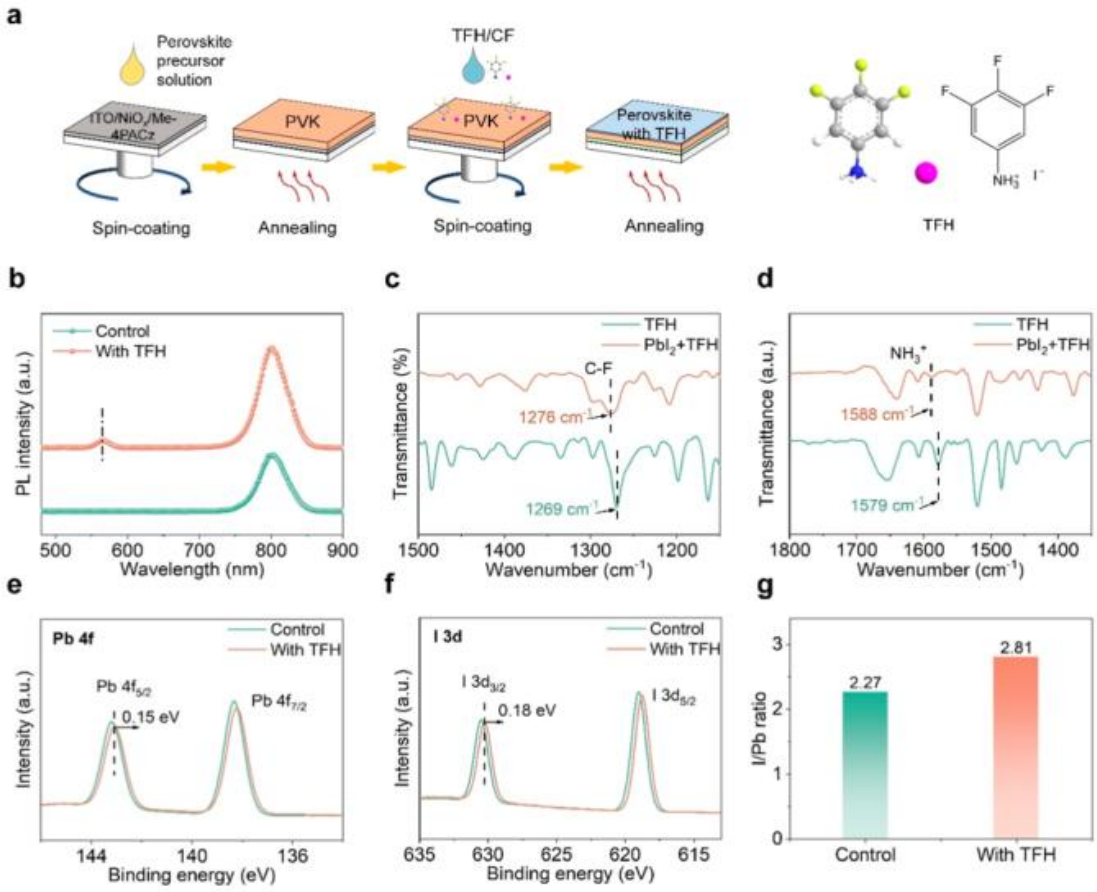
Foydalanilgan adabiyotlar

1. Zhuravlev L.T. The surface chemistry of amorphous silica. The Zhuravlev model // *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. – 2000. – Vol. 173. – P. 1–38.
2. Gun V.M., Pakhlov E.M., Skubiszewska-Zięba J., Blitz J.P. Infrared spectroscopy as a tool for textural and structural characterization of individual and complex fumed oxides // *Vibrational Spectroscopy*. – 2017. – Vol. 88. – P. 56–62.
3. Kurbanov M., Andriyko L., Panjiev J., Tulaganov S., Gun’ko V., Marynin A., Pikus S. Resource-saving synthesis of nanoscaled silicon dioxide and its textural characteristics // Journal of Nanoparticle Research. – 2023. – Vol. 25. – Article 202. DOI: 10.1007/s11051-023-05852-w.
4. Lishai N.V., Savitskaya T.A., Tsyhankova N.G., Hrynshpan D.D., Jun Ch. Research of the adsorption of a Methylene Blue enterosorbents of various nature // *Journal of the Belarusian State University. Chemistry*. – 2021. – No. 1. – P. 58–74.
5. Patil Y., Attarde S., Dhake R., Fegade U., Alaghaz M.A.N.A. Adsorption of Congo Red dye using metal oxide nano-adsorbents: Past, present, and future perspective // *International Journal of Chemical Kinetics*. – 2023. – P. 579–605.

3,4,5-ТРИФТОРАНИЛИН ГИДРОЙОДИД (TFH) ОРҚАЛИ ПЕРОВСКИТ ҚУЁШ ЭЛЕМЕНТЛАРИДА ИНТЕРФЕЙС НУҚСОНЛАРИНИ ПАССИВАЦИЯЛАШ ВА ЗАРЯД ТАШИШНИ ЯХШИЛАШ

[1]Тажибаев И.И., [1]Бойназаров И.Р., [1,2]Соатиллаев А.У.
[1]У.А. Арифов номидаги Ион-плазма ва лазер технологиялари институти
[2]Наманган давлат техника университети
E-mail: ilhom_tojiboyev@gmail.com

Ушбу ишда инвертланган перовскит қуёш элементларининг (PSC) перовскит/заряд ташувчи қатламлар интерфейсидаги нуқсонларни камайтириш мақсадида 3,4,5-трифторанилин гидройодид (TFH) асосида ички капсулалаш ёндашуви ўрганилган. TFH перовскит сиртига ишлов берилганда 2D/3D гетеротузилма ҳосил бўлиши, Pb^{2+} билан ўзаро таъсир ва йод вакансияларининг камайиши кузатилган [1,2]. Натижада заряд ташувчиларнинг рекомбинацияси сусайиб, ташиш самарадорлиги ва фотоэлектр параметрлар яхшиланган [3].



1-расм. TFH ёрдамида 2D/3D перовскит тузилмасини ҳосил қилиш ва TFH-перовскит ўзаро таъсирини кўрсатувчи PL, FTIR ва XPS натижалари.

Тадқиқотнинг асосий мақсади - 3D перовскит қатлами сиртидаги нуқсонларни TFH ёрдамида пассивациялаш ва бу ўзгаришларни структуравий ҳамда фотофизик усуллар билан боғлашдир. TFH хлороформдаги эритмадан перовскит сиртига spin-coating орқали наносуртма сифатида берилган ва кейин 120 °C да 5 дақиқа қиздирилган. Оптик, спектроскопик ва электр характеристикалар PL, TRPL, FTIR, XPS, GIWAXS, Mott–Schottky ва EIS усуллари билан баҳоланган.

TFH билан ишлов берилган намунада 570 nm атрофида қўшимча PL пикнинг пайдо бўлиши 2D перовскит шаклланганини кўрсатган. GIWAXS натижасида TFH намунасида q = 2-3 nm^{-1} соҳасидаги паст бурчакли пик кузатилган. FTIR да C-F тебраниш полосаси 1269 дан 1276 cm^{-1} гача, $-NH_3^+$ тебраниш полосаси эса 1579 дан 1588 cm^{-1} гача силжиган; бу TFH нинг Pb^{2+}/PbI_2 муҳити билан ўзаро таъсирини тасдиқлайди. XPS да Pb 4f пиклари 0.15 eV га, I 3d пиклари 0.18 eV га силжиган. Сиртдаги I/Pb нисбати 2.35 дан 2.73 гача ошган, яъни йод вакансиялари камайган.

1-жадвал. TFH модификациясидан кейин PL/TRPL, ёруғлик интенсивлигига боғлиқ JSC ва VOC, Mott–Schottky ҳамда EIS натижалари.

Параметр	**Назорат**	**TFH**
PCE, % (энг яхши қурилма)	24.32	26.03
V_{OC}, V	1.162	1.184
J_{SC}, mA·cm^{-2}	25.06	26.22
FF, %	80.23	83.85
τavg, ns	151.4	504.8
Rrec, Ω	7206	32675

TFH модификацияси ташувчи зарядларнинг норадиацион рекомбинациясини сезиларли сусайтирган. TFH билан ишлов берилган намунада PL интенсивлиги назорат намунасига нисбатан деярли икки баробар юқори бўлган. TRPL бўйича ўртача ташувчи яшаш вақти 151.4 ns дан 504.8 ns гача

узайган. Ёруғлик интенсивлигига боғлиқ V_{OC} қиялиги 1.60 дан 1.43 гача камайган, J_{SC} қиялиги эса 0.943 дан 0.961 гача ошган. Mott-Schottky таҳлилида ички потенциал 1.12 V дан 1.16 V гача кўтарилган. Қоронғу шароитда EIS бўйича серия қаршилиги 33.8 Ω дан 21.07 Ω гача камайган, рекомбинация қаршилиги эса 7206 Ω дан 32675 Ω гача ошган.

Хулоса қилиб айтганда, TFH перовскит сиртида 2D/3D гетеротузилма ҳосил қилиб, Pb^{2+} билан координацион ўзаро таъсир қилади ва йод вакансияларини камайтиради. Бу нуқсонларнинг пассивацияланиши норадиацион рекомбинацияни сусайтиради, ташувчи яшаш вақтини узайтиради ва заряд экстракциясини яхшилайди. Натижада энг яхши қурилманинг PCE кўрсаткичи 24.32% дан 26.03% гача ошган. Шунингдек, TFH модификацияси юқори ҳарорат ва намлик шароитларида перовскит қатламининг барқарорлигини оширган.

Фойдаланилган адабиётлар рўйхати.

1. Wang T. et al. Dual Defense against Interface Defects and Environmental Stress via Synergistic Encapsulation for Efficient and Stable Perovskite Solar Cells //ACS Applied Materials & Interfaces. – 2026. – Т. 18. – №. 10. – С. 15120-15129.
2. Zhao S. et al. General nondestructive passivation by 4-fluoroaniline for perovskite solar cells with improved performance and stability // Small. – 2018. – Т. 14. – №. 50. – С. 1803350.

TITAN DIOKSIDI NANOSTRUKTURALARINING MORFOLOGIK VA OPTIK XOSSALARIGA REAKSIYA MUHITINING TA’SIRI

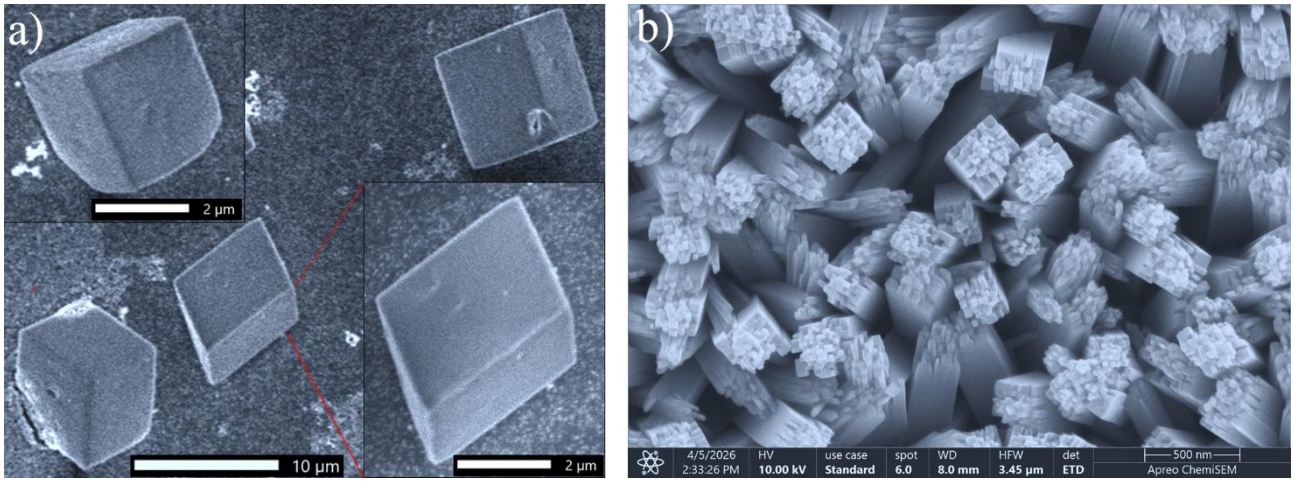
B.K. Sobirova[1], M.A. Alibekova[2], M.B. Berdaliyeva[2], Sh.Z. Urolov[1]
[1] O’R FA Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti
[2]Mirzo Ulug’bek nomidagi O’zbekiston Milliy universiteti,
sobirovabashorat0902@gmail.com

Titan dioksidi (TiO_2) taqiqlangan zonasi keng ekanligi (kristallografik fazaga bog’liq holda (3-3,5 eV) [1, 2], spektrning ko’zga ko’rinuvchi sohasida nur sindirish ko’rsatkichining yuqoriligi [1], dielektrik singdiruvchanligi katta ekanligi [2] va sirt faolligining yuqoriligi sabab turli zamonaviy qurilmalar uchun istiqbolli material sifatida baholanmoqda. Ma’lumki, TiO_2 anataz (trigonal), rutil (tetragonal), brukit (ortorombik) va amorf fazalarda uchrashi mumkin [3, 4]. Har bir kristallografik fazadagi TiO_2 o’ziga xos fizik xususiyatlarni namoyon qiladi. Sintez shartlarini o’zgartirish (o’stirish harorati, tagliklarning turi va reaksiya muhitiga o’zgartirish kiritish) orqali turlicha kristallografik faza va morfologiyaga ega materiallarni sintez qilish mumkin.

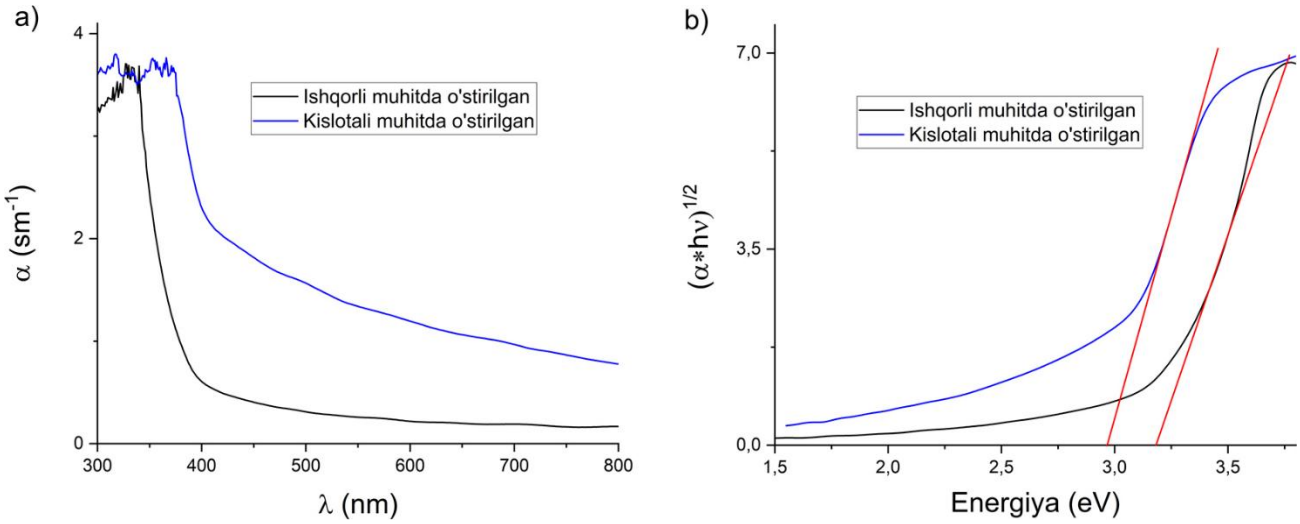
Ushbu ishda gidrotermal usulda ishqorli va kislotali reaksiya muhitlarida bevosita anataz va rutil fazadagi TiO_2 nanostrukturalarining morfologik va optik xossalari bayon qilingan. Tadqiqotlarda ishqorli reaksiya muhiti sifatida diionlashtirilgan suv, hexamethylenetetramin ($C_6H_{12}N_4$) atsetilatseton ($C_5H_8O_2$) titan butoksid ($TiC_{16}H_{36}O_4$) ishtirokidagi eritma tanlab olindi. Kislotali reaksiya muhiti sifatida esa, izopropil spirti (C_3H_8O), titan butoksid, xlorid kislota (HCl-37%) va diionlashtirilgan suv ishtirokidagi eritma tanlab olindi. Sintez jarayoni har ikki holda ham 175^oC doimiy haroratda 8 soat davomida amalga oshirildi. Tadqiqot ob’yektlarining morfologik xossalari Apreo ChemiSEM Skanlovchi Elektron Mikroskopi (SEM) yordamida, optik yutilish spektrlari esa UV/Vis 5100 spektrofotometri yordamida o‘lchandi.

Quyidagi 1a- rasmda ishqorli reaksiya muhitida sintez qilingan TiO_2 mikrostrukturalarining SEM da olingan tasvirlari keltirilgan. Tasvirlardan ko’rinadiki,

mikrokristallar asoslari parallelogram yoki to’g’rito’rtburchakdan iborat bo’lgan prizma shaklida. Kristallar asosining tomonlari 4-5 μm, balandliklari esa ~2 μm atrofida (1a- rasm). Kislotali reaksiya muhitda sintez qilingan namunalar esa, taglik yuzasiga nisbatan biroz og’ishgan nanorodlar shaklida kristallangan (1b- rasm). Nanorodlarning diametrlari 200-350 nm, uzunliklari 3-4 mikrometr atrofida.



1- rasm: a) ishqorli muhitda, b) kislotali muhitda sintez qilingan TiO_2 nanomateriallarining SEM da olingan tasvirlari.



2- rasm: a) ishqorli va kislotali muhitda o’stirilgan namunalarning optik yutilish spektrlari, b) Tauch usulida hisoblangan taqiqlangan zona energiyalari grafigi.

Sintez qilingan tadqiqot obyektlarining kristallografik fazalarini aniqlash maqsadida ularning optik yutilish spektrlari o’lchandi. Tadqiqotlar ko’rsatdiki, ishqorli reaksiya muhitida sintez qilingan namunalar ultrabinafsha sohadagi nurlanishlar (200-

340 nm) ni kuchli yutadi (2a-rasm). Kislotali reaksiya muhitida sintez qilingan nanorodlar esa spektrning 200-370 nm to’lqin uzunligidagi nurlanishlarni kuchli yutishi aniqlandi (2a-rasm). Shu bilan birga, spektrning ko’zga ko’rinuvchi sohasi (400-780 nm) da kristallografik nuqsonlar bilan bog’liq keng yutilish polosasi kuzatildi. Qayd qilingan optik yutilish spektrlari asosida Tauch usulida tadqiqot obyektlarining taqiqlangan zona energiyalari aniqlandi. Ishqorli reaksiya muhitida sintez qilingan namunaning taqiqlangan zona energiyasi ~3,2 eV (anataz kristallografik fazadagi TiO_2 ga mos [2]), kislotali reaksiya muhitida o’stirilgan nanorodlarniki esa 2,97 eV (rutil kristallografik fazadagi TiO_2 ga mos [4]) ekanligi aniqlandi (2b- rasm). Shuningdek, namunalarning Raman sochilish, Rentgen difraksion analiz tahlillari amalga oshirildi. Tahlillar optik yutilish spektrlari asosida chiqarilgan xulosalarni to’liq tasdiqladi.

Tadqiqot natijalari hexamethylenetetramin va atsetilatsetonning diionlashtirilgan suvdagi eritmasida titan butoksidni gidrolizlash orqali gidrotermal usulda anataz kristallografik fazadagi TiO_2 mikroprizmalarini, izopropil spirti, xlorid kislota (HCl-37%) va diionlashtirilgan suv muhitida titan butoksidni gidrolizlash orqali taglikka nisbatan deyarli tik yo’nalishda kristallangan TiO_2 nanorodlarini sintez qilish mumkinligini ko’rsatdi. Sintez parametrlari (reagentlar nisbati, sintez harorati va davomiyligi) ni o’zgartirish orqali namunalarning morfologik va kristallografik xossalarini boshqarish ustida tadqiqotlarimiz davom etmoqda.

Ushbu ish “Bo‘yoqlar va nanozarrachalar bilan faollashtirilgan metalloorganik komplekslarning strukturaviy, optik va generatsion xarakteristikalarini tadqiq qilish” mavzusidagi FL- 8824063381- sonli fundamental loyiha doirasida amalga oshirildi.

Foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxati:

[1] X. Jiang et al. Nanoscale 2011, 3, 3573−3577.

[2] H. Tang et al. Am. J. Anal. Chem. 5, 473–482 (2014).

[3] Zhu Z.F. et al. J. Mater. Sci. 2016, 51, 2112–2120.

[4] Shangrong Chen, Hong Li. Coatings 2025, 15, 1338.

ANALYSIS OF THE OPTICAL RESPONSE OF C_{70} IN DMF SOLUTIONS

D.T. Sidigaliyev[1], Z. Bekmurodov[2], J. Yoqubjonov[3], U.K. Maxmanov[2,3]

[1]*Namangan State University*
[2]*Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies named after U.A. Arifov*
[3]*National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek*

The photophysical and optical properties of fullerene C_{70} are sensitive to the solvent environment, concentration, and intermolecular association [1-3]. Changes in fullerene concentration may alter the relative contribution of molecular and associated C_{70} species and thereby affect their optical absorption and emission characteristics [4]. Optical methods, particularly optical absorption and photoluminescence (PL) is therefore a useful method for examining concentration-dependent changes in the excited-state behavior of fullerene solutions [5]. However, PL intensity alone cannot unambiguously distinguish molecular C_{70} from nanoscale aggregates, and complementary structural or particle-size measurements are required for such assignments.

In this work, the concentration-dependent photoluminescence behavior of C_{70} in N,N-dimethylformamide (DMF) was investigated. Two C_{70}/DMF solutions with concentrations of 0.03 and 0.06 mg/mL were prepared. Accurately weighed amounts of C_{70} (0.3 and 0.6 mg) were added separately to 10 mL of DMF. The resulting samples were designated S1 (0.03 mg/mL) and S2 (0.06 mg/mL). Each solution was stirred magnetically at room temperature for 45 min, and the measurements were performed under identical experimental conditions within 10–15 min after stirring.

Photoluminescence spectra were recorded using an RF-6000 spectrofluorophotometer at an excitation wavelength of 470 nm. Figure 1 shows the fluorescence spectra of studied solutions. The relatively intense emission band centered at ~542 nm and the weaker shoulder around 504 nm in the spectra correspond to the emission of pure DMF molecules. Therefore, the narrow emission features observed at ~504 nm and ~542 nm in the spectra of C_{70}/DMF solutions cannot be attributed solely to C_{70} fluorescence. Although weak fullerene emission or solvent-fullerene

perturbations may contribute in this region, it is predominantly interpreted as a solvent-related background contribution. The broad emission band extending from ~620 nm to ~820 nm in the spectrum is absent in pure DMF and appears only after the addition of C_{70}. Thus, this broad emission can be attributed to excited states associated with C_{70} in the DMF medium. The 0.06 mg/mL solution (S2) exhibits a significantly higher photoluminescence intensity compared to the 0.03 mg/mL solution (S1), particularly in the broad emission region.

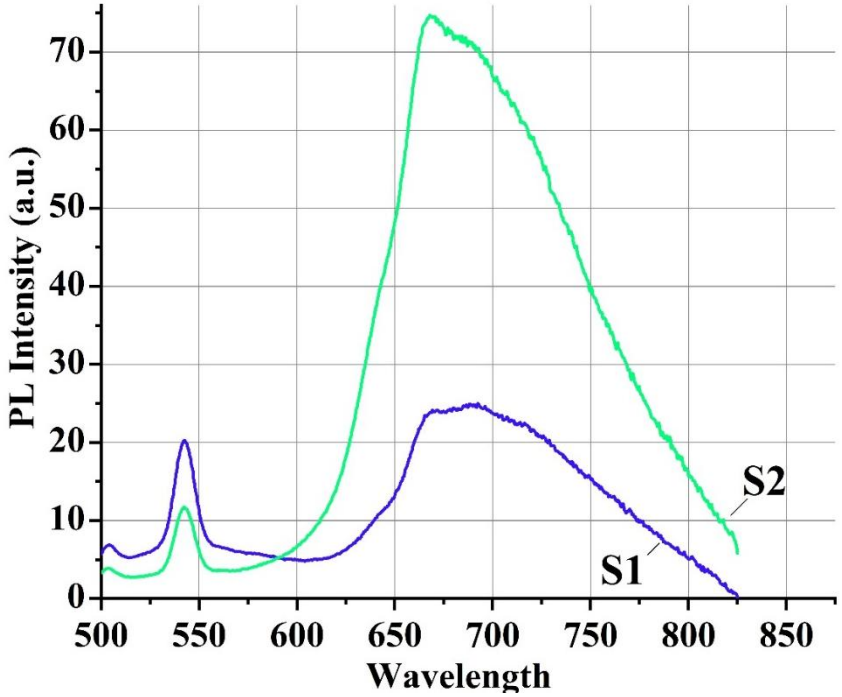


Figure 1. Photoluminescence spectra of C_{70}/DMF solutions: S1 solution (C_{70} ~ 0.03 mg/mL) and S2 solution (C_{70} ~ 0.06 mg/mL).

This indicates that increasing the C_{70} concentration from 0.03 to 0.06 mg/mL increases the contribution of optically active C_{70} species and aggregate-related emission states under these excitation conditions (Figure 1). In the C_{70}/DMF colloidal system, fullerene concentration is a decisive factor determining the optical emission intensity and the nanostructural state. Increasing the fullerene concentration from 0.03 mg/mL (S1) to 0.06 mg/mL (S2) leads to a significant increase in photoluminescence intensity and to the formation of optically active species as well as radiative aggregate

states. The S2 (0.06 mg/mL) solution exhibits the highest emission intensity, making it effective for optical and photovoltaic applications. These results fully confirm the concentration-dependent nucleation and supramolecular aggregate formation mechanism in the DMF medium.

The obtained results can be used to optimize the concentration of C_{70} fullerene in DMF-based colloidal systems for controlling their photoluminescence response. The enhanced emission observed at 0.06 mg/mL indicates that concentration tuning can be employed to obtain optically active fullerene states and radiative aggregates. These findings may be useful in the development of fullerene-based optical and photovoltaic materials where controlled light absorption and emission are required.

References

[1] Chang, X.; Xu, Y.; von Delius, M. Recent advances in supramolecular fullerene chemistry. *Chem. Soc. Rev.* 53, 47–83 (2024). https://doi.org/10.1039/D2CS00937D

[2] Mumyatov, A.V.; Troshin, P.A. A Review on Fullerene Derivatives with Reduced Electron Affinity as Acceptor Materials for Organic Solar Cells. *Energies* 16, 1924 (2023). https://doi.org/10.3390/en16041924

[3] Makhmanov, U.K.; Esanov, S.A.; Sidigaliyev, D.T.; Musurmonov, K.N.; Aslonov, B.A.; Chuliev, T.A. Behavior of C_{70} fullerene in a binary mixture of xylene and tetrahydrofuran. *Liquids* 3, 385–392 (2023). https://doi.org/10.3390/liquids3030023

[4] Mchedlov-Petrossyan, N.O.; Marfunin, M.O. Formation, Stability, and Coagulation of Fullerene Organosols: C_{70} in Acetonitrile–Toluene Solutions and Related Systems. *Langmuir* 37 (23), 7156-7166 (2021). https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.1c00722

[5] Makhmanov, U.K.; Kokhkharov, A.M.; Bakhramov, S.A.; Shukurov, A.X.; Esanov, S.A.; Bekmurodov, Z.; Musurmonov, K.N. Peculiarities of C_{70} fullerene in a binary mixture of xylene and tetrahydrofuran. *Rom. J. Phys.* 70, 617 (2025). https://doi.org/10.59277/RomJPhys.2025.70.201

OPTICAL PROPERTIES OF PANI/NI–CNT NANOCOMPOSITE DISPERSIONS STUDIED BY PHOTOLUMINESCENCE SPECTROSCOPY

U.K. Makhmanov, A.X. Shukurov, K.N. Musurmonov
Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Uzbekistan Academy Sciences, 33, Durmon Yuli St., 100125 Tashkent, Uzbekistan
a_shukurov@yahoo.com

In recent years, conducting polymers and carbon-based nanocomposites have attracted considerable attention owing to their unique electrical, optical, and structural properties, as well as their broad potential applications in organic optoelectronics, chemical and biological sensors, supercapacitors, energy-storage devices, and flexible electronics [2–4]. Among various conducting polymers, polyaniline (PANI) is particularly promising because of its relatively high electrical conductivity, good environmental and chemical stability, low cost, and ease of synthesis [3,4]. However, the performance of pristine PANI can be limited by charge-transport efficiency and the morphology of the conducting network. The incorporation of carbon-based nanostructures, such as carbon nanotubes (CNTs), represents an effective approach to improving the functional properties of PANI-based materials [1,2].

Nickel-modified carbon nanotubes (Ni–CNTs) are of particular interest because they can provide a conductive nanostructured framework, facilitate charge transfer, and promote the formation of an interconnected conductive percolation network within the polymer matrix [1,2]. In addition, the interaction between PANI chains and the surface of Ni–CNTs may lead to modifications in the electronic structure and optical response of the nanocomposite. These interfacial interactions are expected to influence electronic excitation, charge separation, and radiative and non-radiative relaxation processes [1,4].

In the present work, the optical properties of PANI/Ni–CNT dispersions prepared in dimethylformamide (DMF) were investigated using photoluminescence (PL) spectroscopy. The PL measurements were performed to examine the emission characteristics of the PANI/Ni–CNT system and to evaluate the influence of Ni–CNT incorporation on the luminescence behavior of the polymer. Changes in

photoluminescence intensity and spectral profile can provide valuable information about the interaction between PANI and Ni–CNTs, as well as possible charge-transfer and energy-transfer mechanisms occurring at the polymer–nanotube interface [1,2].

The obtained results demonstrate that the incorporation of Ni–CNTs significantly influences the optical response of PANI dispersions. The modification of the photoluminescence characteristics indicates the presence of interfacial interactions between the conducting polymer and nickel-modified carbon nanotubes, which may affect the efficiency of charge and energy transfer. These findings suggest that PANI/Ni–CNT nanocomposites are promising multifunctional materials with tunable optical and electronic properties for potential applications in optoelectronic devices, sensing platforms, and flexible electronic systems [2–4].

Photoluminescence measurements were performed to investigate the emission behavior of the nanocomposite system and to assess the influence of Ni–CNT incorporation on the optical response of PANI.

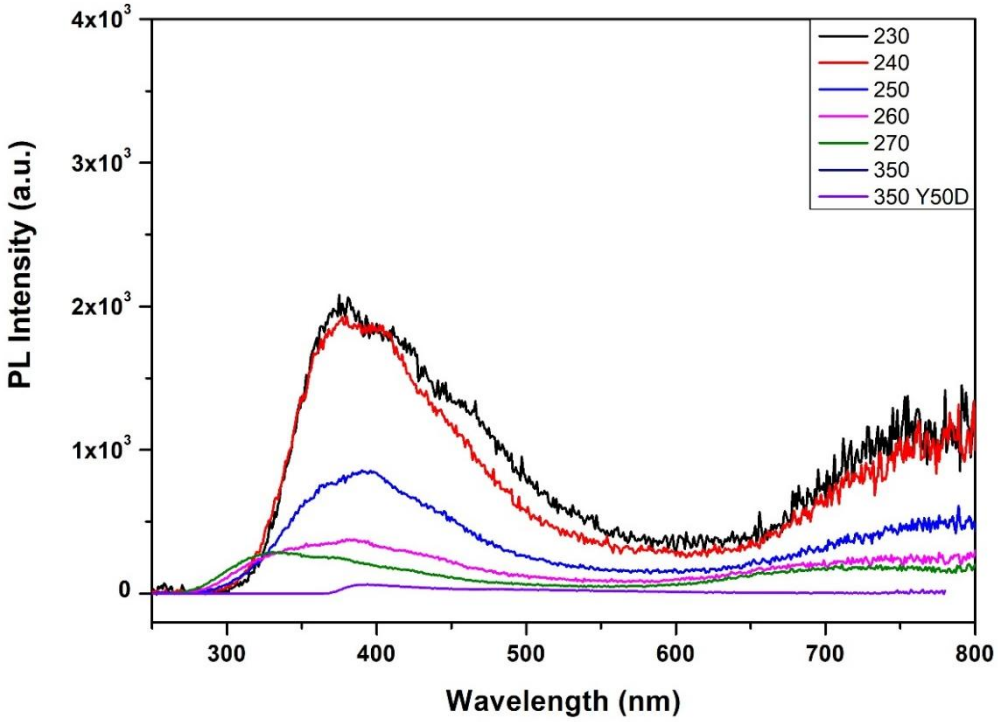


Figure 1. Photoluminescence spectroscopy of PANI/Ni–CNT nanocomposite dispersions in DMF.

Photoluminescence properties of the PANI/Ni–CNT composite were investigated using excitation wavelengths of 230–350 nm. The strongest emission was observed under 230 and 240 nm excitation, with a broad maximum centered at approximately 370–400 nm. Increasing the excitation wavelength resulted in a pronounced decrease in PL intensity, indicating that the dominant radiative transitions are associated with higher-energy electronic states. The suppression of photoluminescence at longer excitation wavelengths may also be related to enhanced non-radiative relaxation and interfacial charge-transfer processes involving Ni–CNTs. These results suggest significant electronic interactions between the PANI matrix and Ni-functionalized carbon nanotubes. Furthermore, the broad emission band suggests a distribution of electronic states within the PANI/Ni–CNT system rather than a single well-defined transition. The observed spectral behavior may arise from the combined contributions of PANI chain segments, localized defect states, and electronic states introduced by Ni–CNT incorporation.

REFERENCES

1. Sajeev, U. S., et al. The synergistic impact of multi-walled carbon nanotubes on microstructural, morphological, and optical properties of polyaniline films. ChemistrySelect, 2024. https://doi.org/10.1002/slct.202304210
2. Yim, Y.-J., et al. Carbon Nanotube/Polymer Composites for Functional Applications. Polymers, 17(1), 119 (2025). https://doi.org/10.3390/polym17010119.
3. Hasan, M. B., Parvez, M. M., Abir, A. Y., & Ahmad, M. F. A review on conducting organic polymers: Concepts, applications, and potential environmental benefits. Heliyon, 11(3), e42375 (2025). https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2025.e42375.
4. Cai, H., Liang, Y., Zhang, Q., Tang, H., & Huang, F. Progress in Conducting Polymers: Synthesis, Stability, and Ionic/Electronic Transport Properties. ChemSusChem, 19, e202501277 (2026). https://doi.org/10.1002/cssc.202501277.

ВЛИЯНИЕ γ-ИЗЛУЧЕНИЯ НА ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУР ОКСИДА ЦИНКА

З.Ш. Шаймарданов[1,3], Р.Р. Джалолов[1,3], Б.Г. Атабаев[1], Ш. Маликов[2], О.О. Аманов[2], А.М. Сарсенбаев[3]
[1]Институт ионно-плазменных и лазерных технологий, АН РУз.
[2]Институт ядерной физики, АН РУз.
[3]Национальный университет Узбекистана.

Среди наноструктурированных материалов оксид цинка (ZnO) является одним из наиболее широко изучаемых материалов. Наноструктуры ZnO считаются перспективными материалами для космических электронных устройств, γ-радиационно-стойких диодов и систем ядерного мониторинга благодаря их устойчивости к ионизирующему излучению [1-3]. Сегодня структуры ZnO синтезируются в водных растворах экономичными методами. Однако в образцах, синтезированных этим методом, могут наблюдаться различные специфические дефекты. Одна из актуальных проблем – изучение влияния γ-излучения на природу этих дефектов.

В данной работе микростержни ZnO были синтезированы гидротермальным методом, и их изображение, полученное с помощью электронного микроскопа, представлено на рисунке 1(a). Выращенные микростержни ZnO кристаллизовались в гексагональной форме, с длиной ~6-8 мкм и диаметром средней части 700-1200 нм. В кристаллической структуре наноструктур ZnO наблюдались различные специфические точечные дефекты, которые были зафиксированы в спектрах фотолюминесценции (ФЛ) наноматериалов. В наших предыдущих работах [4,5] в наноструктурах ZnO под воздействием N_2-лазера наблюдались полосы ФЛ в ультрафиолетовой области ~380-390 нм, связанные с рекомбинацией экситонов, и в видимой области ~500-600 нм, связанные с дефектами. Было изучено влияние γ-облучения в высоких дозах на спектры ФЛ наноструктур ZnO. Влияние γ-излучения на оптические свойства наноструктур ZnO ранее изучалось при относительно низких дозах [2]. На рисунке 1(b) показаны спектры флуоресценции микростержней ZnO после облучения γ-излучением в дозах 100, 200, 300 и 400 кГр. После облучения микростержней ZnO высокими дозами γ-излучения в их спектрах флуоресценции практически не наблюдалось изменений, за исключением

небольшого снижения интенсивности полосы, расположенной в ультрафиолетовой области ~380-390 нм.

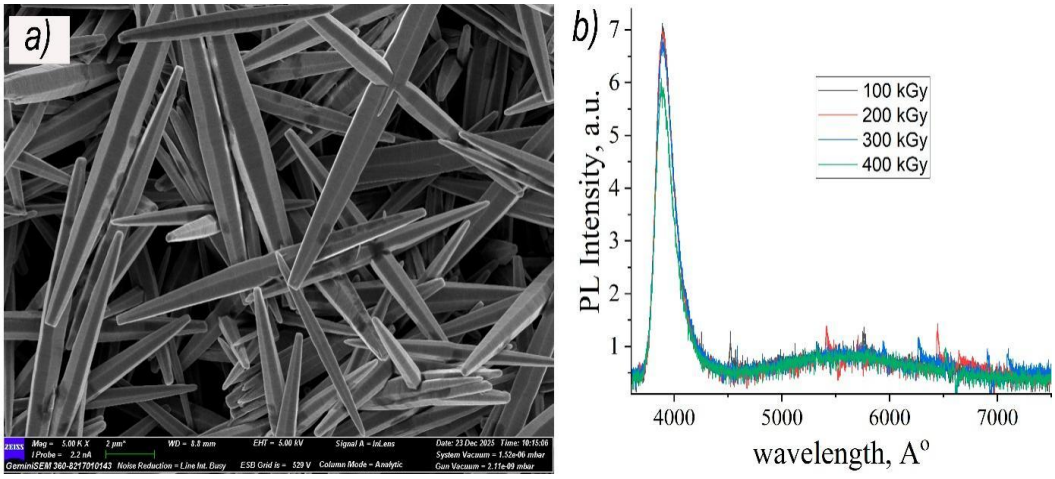


Рисунок 1. а) Изображение микростержней ZnO, синтезированных гидротермальным методом, полученное с помощью сканирующего электронного микроскопа, и б) спектры флуоресценции после облучения γ-излучением в различных дозах.

В некоторых исследовательских работах [2,3] сообщалось о устойчивых свойствах флуоресценции наноструктур ZnO, подвергнутых воздействию ионизирующего излучения, и было показано, что образование дефектов влияет на колебательные свойства больше, чем процессы рекомбинации экситонов.

Наблюдаемая стабильность флуоресценции при дозах облучения до 400 кГр указывает на потенциальное применение микростержней ZnO в радиационно-стойких фотонных устройствах, сцинтилляционных детекторах, космических оптоэлектронных устройствах, ультрафиолетовых диодах, устойчивых к гамма-излучению, и системах ядерного мониторинга.

Список использованной литературы

[1]. Él’murotova, D.B., et al. *Phys. Solid State* **51**, 456–464 (2009).

[2]. Duinong M. et al. Coatings 2022, 12, 1590

[3]. A. Reyhani et al. Optical Materials 75 (2018) 236e242

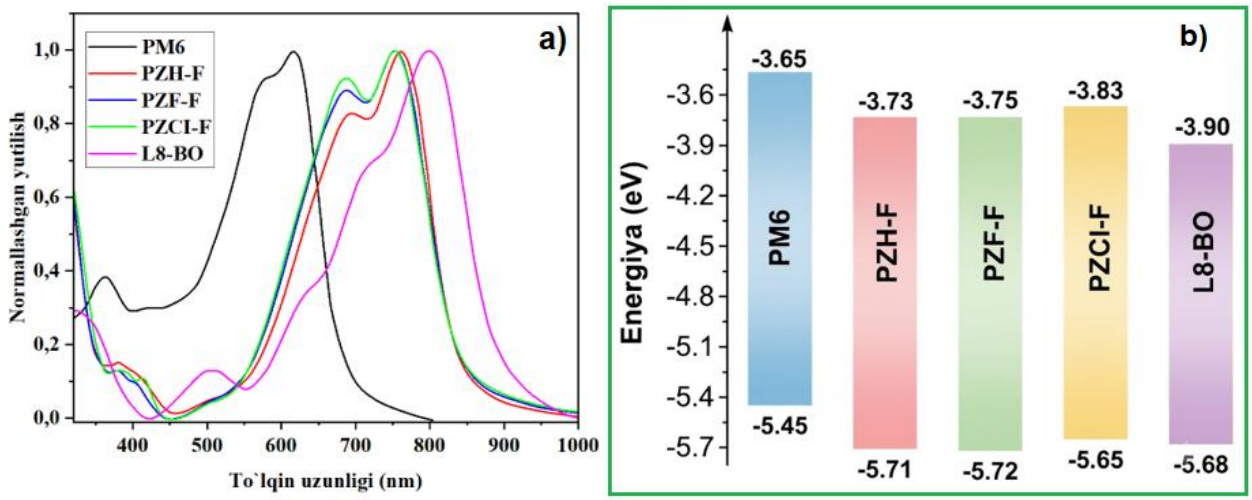
[4]. S.S. Kurbanov et al., Journal of Luminescence, 225 (2020) 117395

[5] R.R. Jalolov et al., Physica B: Condensed Matter, V 675, 2024, 415613.

PZH-F, PZF-F, PZCl-F VA L8-Bo FULLERENSIZ AKSEPTORLARNING OPTIK XOSSALARINI TADQIQ ETISH

Saidqulova A.A., Saparbayev A.A.
U.A. arifov nomidagi Ion plazma and lazer texnologiyalari instituti
E-mail: Adolatsiqdkulova08@gmail.com

Faol qatlamda qo‘llaniladigan organik materiallarning optik parametrlarini boshqarish polimer quyosh batareyalari samaradorligini oshirishning asosiy yo‘nalishlaridan biridir. Ayniqsa, fullerensiz akseptorlarning molekulyar arxitekturasi ularning absorbsion diapazoni, energetik sath kengligi qiymatlarini belgilaydi. Ushbu parametrlarga galogen atomlarini (F, Cl, Br) molekulaga kiritish orqali ta’sir etish mumkin, bu esa materialning elektron o‘tishlari va yorug‘lik bilan o‘zaro ta’sirini boshqariladigan darajada optimallashtirishga yordam beradi.



1-rasm. PM6, PZH-F, PZF-F, PZCl-F va L8-BO yupqa qatlamlarning (a) yutilish spektrlari va (b) energetik sathlari diagrammasi

1a-rasmda PZH-F, PZF-F va PZCl-F akseptor materiallarining optik xossalari PM6 va L8-BO bilan solishtirib, UV-vis yutilish spektroskopiyasi orqali o‘rganildi. Olingan spektrlardan ko‘rinadiki, PM6 asosiy yutilish maksimumi taxminan 620 nm atrofida joylashgan bo‘lib, 700 nm dan keyin yutilish keskin pasayadi. PZH-F, PZF-F va PZCl-F yupqa qatlamlarida esa asosiy yutilish piklarining uzun to‘lqinlar tomon sezilarli siljishi mos ravishda 760, 750 va 760-770 nm atrofida kuzatiladi. PZH-F spektrida 600-700 nm oralig‘ida keng yutilish zonasi shakllanib, u 760 nm dagi asosiy

pik bilan davom etgan. PZF-F va PZCl-F qatlamlarida esa 680-720 nm atrofida yelkasimon yutilishlar va 750 nm dan yuqorida aniq asosiy maksimumlar qayd etilgan. L8-BO qatlamida esa 700 nm atrofidagi yutilish yelkasi bilan birga maksimumning qariyb 800 nm ga siljishi va yutilishning 900 nm gacha cho‘zilishi kuzatiladi. Umuman olganda, PM6 dan PZH-F, PZF-F, PZCl-F va nihoyat L8-BO tomon o‘tilgan sari yutilish maksimumlarining bosqichma-bosqich uzun to‘lqinli sohaga siljishi aniq namoyon bo‘ladi. Ushbu qizil to’lqin sohaga siljish polimerlarning past energiyali fotonlarni yutish qobiliyatining ortganligini ko‘rsatadi, bu esa faol qatlam tomonidan quyosh spektrining kengroq qismini o‘zlashtirish imkonini beradi. Ayniqsa, PM6 donorning qisqa to‘lqinli sohada yutilishi bilan PZH-F, PZF-F yoki PZCl-F ning uzun to‘lqinli sohada yutilishi birgalikda faol qatlamlarda keng spektral qamrovga erishishga imkoniyat yaratadi. Olingan natijalar L8-BO eng keng va eng uzun to‘lqinli yutilish oralig‘iga ega ekanligini, PZH-F, PZF-F va PZCl-F esa PM6 ga nisbatan sezilarli darajada qizil siljigan yutilish sohasini ko’rish mumkin[1].

1b-rasmda PM6, PZH-F, PZF-F, PZCl-F va L8-BO materiallarining HOMO va LUMO energetik sathlari berilgan. Olingan natijalarga ko‘ra, PM6 donorining HOMO va LUMO sathlari mos ravishda -5.45 va -3.65 eV ni tashkil etdi. PZH-F uchun ushbu qiymatlar -5.71 va -3.73 eV, PZF-F uchun -5.72 va -3.75 eV, PZCl-F uchun -5.65 va -3.83 eV, L8-BO uchun esa -5.68 va -3.90 eV ga teng ekanligi aniqlandi. Donor sifatida ishlatilgan PM6 ning LUMO sathi barcha akseptor materiallarning LUMO sathidan yuqorida joylashganligi sababli, yorug‘lik ta’sirida hosil bo‘lgan elektronlarning PM6 dan akseptor tomonga o‘tishi uchun energetik jihatdan qulay yo‘nalish shakllanadi. PM6 va akseptorlarning LUMO sathlari orasidagi energiya farqi PZH-F, PZF-F, PZCl-F va L8-BO uchun mos ravishda 0,08, 0,10, 0,18 va 0,25 eV ni tashkil etadi. Shu bilan birga, PM6 ning HOMO sathi akseptorlarning HOMO sathlariga nisbatan yuqoriroq joylashgan bo‘lib, ular orasidagi farq mos ravishda 0,26, 0,27, 0,20 va 0,23 eV ni tashkil etdi. Bunday energetik sathlar joylashuvi PM6 akseptor interfeysida zaryadlarning ajralishi va ularning tegishli elektrodlarga tomon tashilishini ta’minlash uchun qulay sharoit yaratadi. Ayniqsa, PZCl-F ning -3,83 eV LUMO sathi PM6 ning

LUMO sathiga nisbatan yetarlicha past joylashgan bo‘lib, elektronlarning akseptorga o‘tishi uchun PZH-F va PZF-F ga nisbatan kattaroq energetik farqni ta’minlaydi. PZH-F va PZF-F da esa LUMO sathlari PM6 ga juda yaqin joylashgan bo‘lib, mos ravishda 0,08 va 0,10 eV farq kuzatildi. Energetik diagrammadan aniqlangan HOMO-LUMO sathlari asosida optik energetik oralig‘ining taxminiy qiymatlari PM6 uchun 1,80 eV, PZH-F uchun 1,98 eV, PZF-F uchun 1,97 eV, PZCl-F uchun 1,82 eV va L8-BO uchun 1,78 eV ni tashkil qiladi. Shunday qilib, PZCl-F ning energetik sathlari PM6 bilan zaryadlarning samarali ajralishi uchun muvozanatli energetik moslashuvni namoyon etadi, L8-BO esa eng kichik energetik oralig‘iga ega bo‘lib, uzun to‘lqinli yorug‘likni o‘zlashtirish xususiyatiga mos keladi. Olingan natijalar PZH-F, PZF-F va ayniqsa PZCl-F materiallarini PM6 asosidagi faol qatlamlarda akseptor sifatida qo‘llash uchun energetik jihatdan mos ekanligini ko‘rsatadi[2].

Xulosa qiladigan bo’lsak, bu akseptorlar yutilish spektrlarini sezilarli darajada qizil to’lqin uzunligi sohaga siljitish orqali quyosh spektrining past energiyali sohasini ham qamrab olish imkoniyatini yaratadi. Natijada, quyosh spektrining kengroq diapazonidan fotonlarni o‘zlashtirish hisobiga qisqa tutashuv tok zichligining ortishi kutiladi. PZH-F, PZF-F ayniqsa PZCl-F materiallari PM6 asosidagi faol qatlamlarda akseptor material sifatida nafaqat optik jihatdan samarali, balki fotovaik parametrlarining samaradorligi jihatdan ham optimal akseptor materialdir. Ushbu akseptorlarning qo‘llanilishi faol qatlamda foton yutilish samaradorligini oshirish, zaryad ajralish kinetikasini optimallashtirish va energiya yo‘qotishlarini minimallashtirish kabi yondoshishlar orqali PQElarning samaradorligini oshirish mumkin.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Li W., Liu Q., Jin K., Cheng M., Hao F. et al. Materials Chemistry Frontiers, 4 (2020), 1454–1458.

2. Ma S., Huang Q., Liang Y., Tang H., Chen Y. et al. Journal of Materials Chemistry C, 9 (2021), 13896–1390.

YUQORI HARORATDA QIZDIRISH NATIJASIDA SUN’IY OPALLARDA HOSIL BO’LGAN SEKIN DAVOM ETUVCHI LYUMINESSENSIYANI O’RGANISH

Z.Sh. Shaymardanov[1,2], A.M. Sarsenbaev[2]
[1]*O‘zR FA Ion- plazma va lazer texnologiyalari instituti*
[2]*O’zbekiston Milliy Universiteti*

Foton kristali xususiyatiga ega bo’lgan materiallar ilmiy tadqiqotchilar uchun fundamental va amaliy qo’llanilishi nuqtai nazardan alohida qiziqish uyg’otadi. Foton kristallarida mavjud strukturaviy nuqsonlar tufayli, ulardagi atomlar va molekulalardan chiqadigan spontan va induktsiyalangan nurlanishlarning intensivligi, chastotasi va qutblanishi, shuningdek, foton taqiqlangan zonasining joylashuvi yorug’likni boshqarish muammosini tug’diradi [1-3]. Ko’rinadigan yorug’lik uchun uch o’lchovli foton kristalining eng yaxshi o’rganilgan namunasi sun’iy opal bo’lib, u submikron diametrli (0,1 dan 1 mkm gacha) davriy, tartibli va zich joylashgan amorf SiO_2 sharlaridan tuzilgan.

Ushbu ishda ochiq havoda 500^0C haroratda tavlangandan keyin sun’iy opallarda yuzaga keladigan vaqt bo’yicha bir necha sekundlar davom etuvchi fosforossensiyasi (lyuminessensiyasi)ning spektral xususiyatlarini o’rganish haqida xabar beramiz. Bizning avvalgi ishlarimizda [4], ishlov berilmagan sun’iy opal namunalarida ultrabinafsha (λ=337 nm) nurlanishi ta’sirida lyuminessensiya kuzatilib, uning spektri ~400 nm va ~500 nm to’lqin uzunligi sohasida joylashgan ikkita maksimumni o’z ichiga olishi va 350÷800 nm mintaqani egallashi ydi. Ushbu lyuminessensiya 10-100 ns xarakterli vaqt bilan noeksponensial tarzda so’nishi aniqlangan edi. Spektrning tahlili bizga qisqa to’lqin uzunligi ~400 nm mintaqasida joylashgan lyuminessensiya polosasini SiO_2 sharlarining hajmida joylashgan nurlanish markazlariga tegishliligi va ~500 nm to’lqin uzunligi sohasida joylashgan lyuminessensiya polosasini SiO_2 sharlarining sirt nurlanish markazlariga tegishliligini aniqlash imkonini bergan edi. Ochiq havoda 500^0C haroratda tavlangandan so’ng, opal namunalarida lyuminessensiyaning tezkor komponenti bilan birga sekin bir necha sekund davom etuvchi komponenti paydo bo’lishi aniqlandi. Ushbu sekin davom etuvchi lyuminessensiya komponenti vakuumda 500^0C haroratda tavlangan namunalarda kuzatilmadi. Sekin davom etuvchi lyuminessensiya komponentining spektri vaqt bo’yicha lazer impulsidan 6 ms, 6,5 ms, 7 ms, 7,5 ms va 8 ms o’tgandan keyin o’lchandi. Lyuminessensiya spektrlari tezkor komponenti spektridan keskin farq qilib, ~400 nm to’lqin uzunligida joylashgan polosasi mavjud emasligi va maksimumi taxminan ~560 nm uzunligida joylashgan bitta polosadan

iborat ekanligini aniqlandi. Kuzatilgan lyuminessensiya spektrlari sharlarning o’lchamiga bog’liq emasligi aniqlandi. Opal namunalarining lazer impulsidan 6 ms, 6,5 ms, 7 ms, 7,5 ms, 8 ms o’tgandan keyin o’lchangan sekin davom etuvchi lyuminessensiya komponenti spektrlarining faqat intensivligi kamayishi aniqlandi.

Adaboyotlar tahlili, turli SiO_2 tarkibli materiallarida ~400, ~500, ~550 va ~650 nm to’lqin uzunliklarida joylashgan lyuminessensiya polosalari kuzatilgan bo’lib, ~400 nm lyuminessensiya polosasi SiO_2 materialining hajmida joylashgan nurlanish markazlariga, ~500, ~550 nm to’lqin uzunligida joylshgan lyuminessensiya polosasi sirt nurlanish markazlariga va ~650 nm to’lqin uzunligida joylashgan lyuminessensiya polosasi ko’priksiz bog’langan kislorodga Si-O tegishliligini ko’rsatadi [5,6]. Biroq, Uchino va Yamada 510 nm da ~100 μs davomiylikdagi lyuminessensiya polosasining Glinka tomonidan kuzatilgan ~500 nm sohada kuzatilganidan farq qilishini va Si-O bog’lanishlarining uzayishi bilan birga ≡Si-O-Si≡ bog’lanishlarining kuchli darajada zo’riqtirilishi natijasida taqiqlangan zonada hosil bo’ladigan energetik holatlardan elektron o’tishlar bilan bog’liqligini xabar qilishdi [7]. Ular nurlanish eksitonning avtolokalizatsiyasi bilan bog’liq deb taxmin qilishdi. Bizning tadqiqotlarimiz natijasi 560 nm atrofidagi lyuminessensiya polosasini sun’iy opalning sirt nurlanish markazlari keltirib chiqaradi deb taxmin qilish mumkin. Yuqori haroratli tavlash jarayonida adsorbsiyalangan suv molekulalari va yengilroq elementlar SiO_2 nanosferalari yuzasidan bug’lanadi va ularning o’rnini boshqa elementlar egallaydi. Bu jarayonlar uzoqroq nurlanish vaqtiga ega bo’lgan yangi sirt nurlanish markazlari ansamblini hosil bo’lishiga olib keladi.

Foydalanilgan adabiyotlar ro’yxati

1. Chutinan, S. John, O. Toader, Phys. Rev. Lett. 90 (2003) 123901.
2. S.G. Romanov, T. Maka, C.M. Sotomayor Torres, M. Muller, R. Zentel, J. Lightwave Technol. 17 (11) (1999) 2121. N. Eradat, M. Wohlgenannt, Z.V. Vardeny, A.A. Zakhidov, R.H. Baughman, Synth. Met. 116 (2001) 509.
3. S.S. Kurbanov, Z.Sh. Shaymardanov, M.A. Kasymdjanov, E.A. Zakhidov, P.K. Khabibullaev, J. Appl. Spectrosc. 72 (2005) 679. Y.D. Glinka, S.H. Lin, Y.T. Chen, Appl. Phys. Lett. 75 (6) (1999), 778.
4. Y.D. Glinka, S.H. Lin, Y.T. Chen, Phys. Rev. B 62 (7) (2000), 4733.
5. Yamada, T. Uchino, Appl. Phys. Lett. 87 (2005) 081904.

PHOTOCATALYTIC PROPERTIES OF Ag-DOPED ZnO NANOSTRUCTURES

B.N. Rustamova[1], R.R. Jalolov[1,2]
[1]Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Tashkent 100125, Uzbekistan
[2]The National University of Uzbekistan, Tashkent 100174, Uzbekistan
rustamovab777@gmail.com

Today, nearly one-third of the global population suffers from a shortage of clean drinking water. Rapid industrial development and growing chemical pollution render conventional water treatment methods increasingly ineffective. In particular, recalcitrant toxic pollutants in water, such as synthetic dyes, pharmaceutical residues, pesticides, and heavy metals—cannot be fully eliminated using simple filtration or biological methods. Photocatalytic water treatment technology emerges as a revolutionary solution to this problem. Photocatalysis is a process in which highly oxidative species (hydroxyl radicals) are generated in water under the action of solar (or ultraviolet) light and semiconductor materials. Unlike filtration, this process does not merely transfer toxic and persistent pollutants to another medium; instead, it completely degrades them into harmless substances, namely water and carbon dioxide. Among photocatalytic materials, oxides are of particular importance, with ZnO nanostructures serving as an ideal candidate for this process. To enhance the functional properties of ZnO nanostructures, doping with metal atoms is widely employed [1-2].

In this work, the photocatalytic properties of Ag-doped ZnO (AZO) nanorods were investigated. ZnO and AZO nanostructures were synthesized via the hydrothermal method under identical synthesis parameters. The optical absorption spectra of the synthesized samples were recorded using a UV-Vis 5100 spectrometer, while their photoluminescence (PL) properties were measured on an experimental setup based on an MDR-23 monochromator using a strobe integration technique for pulsed electrical signals. The photocatalytic performance of the samples was evaluated using an aqueous solution of Rhodamine 6G dye at a concentration of 25 mg/L under illumination from a DRSh-120 ultraviolet lamp.

SEM images of the synthesized ZnO and AZO structures reveal that they consist of individual nanorods formed in the hexagonal phase (Figure 1a). While pure ZnO nanorods

exhibit absorption mainly in the ultraviolet and partially in the green-red regions, AZO nanorods demonstrate strong absorption bands in the ultraviolet and partially in the violet-blue regions. This indicates a alteration in the nature of point defects within the ZnO crystal lattice upon the incorporation of Ag atoms. In the PL spectrum of ZnO nanorods, an ultraviolet emission band associated with free excitons is observed alongside a yellow emission band attributed to interstitial excess oxygen atoms (Figure 1b). The PL spectrum of AZO nanorods likewise consists of two emission bands; however, the intensity of the UV emission band increases by a factor of ~4.5, whereas the intensity of the yellow emission band remains unchanged (Figure 1b). This demonstrates that the incorporated Ag atoms actively influence recombination processes.

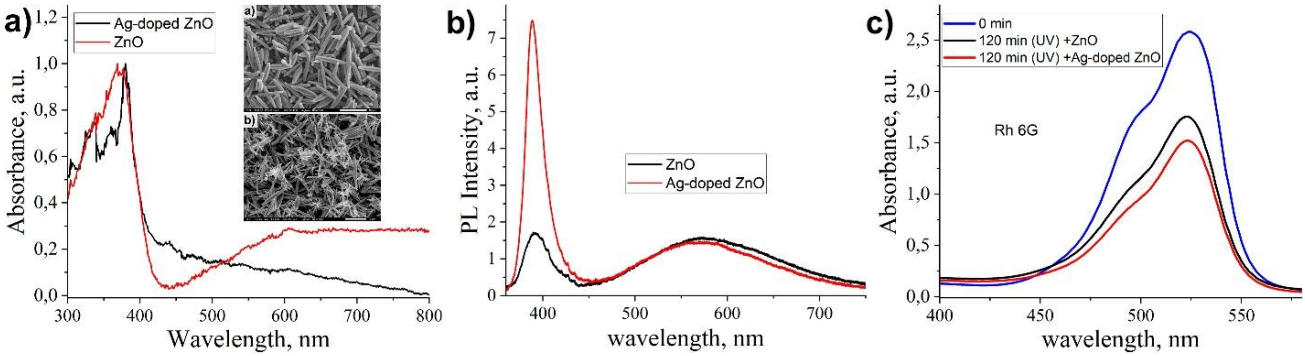


Figure 1. (a) Optical absorption spectra, (b) PL spectra of pure and Ag-doped ZnO nanostructures, and (c) evolution of the absorption spectra during the photocatalytic degradation of R6G dye mediated by these nanostructures.

The photocatalytic degradation of R6G dye mediated by ZnO and AZO nanorods is depicted in Fig.1c. As seen from the graph, doping ZnO with Ag accelerates the photocatalytic process, paving the way for the development of new prototype catalysts based on these nanostructures.

References

1. Ü. Özgür et al. J. Appl. Phys. **98** (2005) 041301.
2. Shaymardanov Z Sh, Rustamova B N, Jalolov R R Urolov Sh Z, Physica B 2023, 649 414444

ВЛИЯНИЕ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ НА СТРУКТУРНЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МИКРОПОРОШКОВ ZnO

Рахматуллаев И.А.[1], Хошимов К.Х.[2]
[1]Университет Альфраганус, Ташкент, Узбекистан
[2] Самаркандский государственный университет имени Шарофа Рашидова, Самарканд, Узбекистан
E-mail: i.rakhmatullaev@afu.uz

В настоящее время оксид цинка (ZnO) занимает одно из ведущих мест в современном материаловедении благодаря уникальному сочетанию полупроводниковых, пьезоэлектрических и оптических свойств [1,2]. Влияние ионизирующего излучения на структурные и оптические свойства ZnO активно исследуется в последние годы [3,4]. При взаимодействии ионизирующего излучения с кристаллической решёткой ZnO возникают каскадные смещения атомов, приводящие к образованию точечных дефектов: кислородных вакансий (V_O), вакансий цинка (V_{Zn}), межузельных атомов (Zn_i, O_i) и локальных микродислокаций, что коренным образом изменяет электронную структуру и оптические характеристики материала.

Несмотря на обширную базу данных, ряд вопросов остаётся открытым. В частности, систематический анализ зависимости интенсивности активных мод рамановского рассеяния вюртцитного ZnO от дозы при умеренных дозах γ-излучения до настоящего времени детально не проводился. Кроме того, сравнительное исследование Рамановских- и ИК-спектров в микроструктурированных образцах ZnO под γ-облучением системно не выполнялось.

В настоящей работе систематически исследовано влияние γ-излучения на структурные и оптические свойства микропорошков ZnO в диапазоне доз 25–100 кГр.

На рис. 1 представлены дифрактограммы исходного и облучённых при различных дозах образцов ZnO с вюртцитной структурой. В спектрах наблюдаются чёткие рефлексы, соответствующие плоскостям гексагональной

решётки вюртцита: 2θ = 31.70° (100), 34.40° (002), 36.20° (101), 47.50° (102), 56.60° (110), 62.80° (103), 66.40° (200), 67.90° (112) и 69.10° (201). Посторонних рефлексов не обнаружено. Наличие исключительно рефлексов вюртцитной фазы и их высокая интенсивность подтверждают высокую степень кристалличности исходного порошка. Установлен принципиально важный результат: интенсивность рефлексов монотонно убывает при дозах 25–50 кГр, затем аномально резко возрастает при 75 кГр и вновь снижается при 100 кГр. Данный эффект наиболее отчётливо проявляется для доминирующего рефлекса (101) при 2θ = 36.20°.

На рис. 2 представлены Рамановских спектров исходного и облучённых образцов при комнатной температуре. В спектрах идентифицированы следующие колебательные моды [1-4]: полоса при ~202 см$^{-1}$ ($2E_2$(low)); полоса при ~330–340 см$^{-1}$ (разностный фонон E_2(high)−E_2(low)); доминирующая полоса при ~435–437 см$^{-1}$ (E_2(high)), обусловленная колебаниями атомов в кислородной подрешётке; широкая полоса при ~576–582 см$^{-1}$ (A_1(LO)), связываемая с кислородными вакансиями (V_O) и межузельными атомами цинка (Zn_i); многофонная полоса при 1148 см$^{-1}$ ($2A_1$(LO) или $2E_1$(LO)).

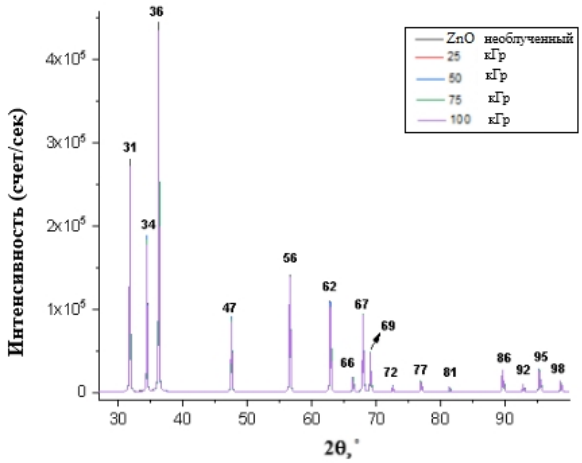


Рис. 1. Дифрактограммы порошков ZnO со средним размером 0.2 мкм до и после γ-облучения дозами 25, 50, 75 и 100 кГр.

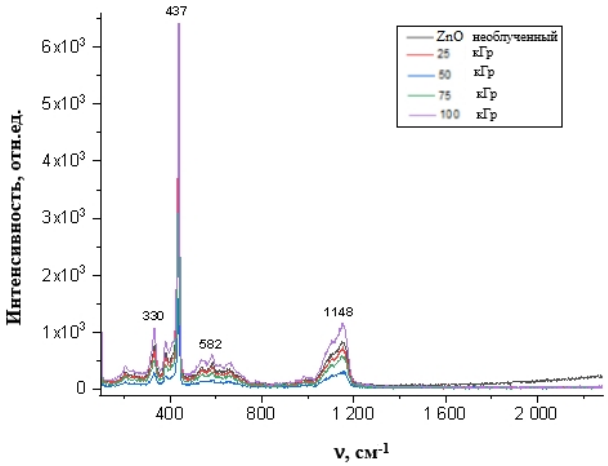


Рис. 2. Рамановские спектры порошков ZnO в зависимости от дозы γ-облучения.

В настоящей работе систематически исследовано влияние γ-излучения (25–100 кГр) на структурные и колебательные свойства микропорошков ZnO с гексагональной вюртцитной структурой. Результаты рентгеноструктурного анализа свидетельствуют о сохранении высокой фазовой чистоты и радиационной стойкости материала при всех использованных режимах облучения. Полученные результаты служат фундаментальной основой для прогнозирования радиационного ресурса оптоэлектронных приборов на основе ZnO и разработки методов «инженерии дефектов».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jin, C., Zhou, J., Wu, Z. and Zhang, J.X. Doped zinc oxide-based piezoelectric devices for energy harvesting and sensing. *Advanced Energy and Sustainability Research*, 2025, 6:2500017. **https://doi.org/10.1002/aesr.202500017**

2. Rakhmatullaev, I., Bunkin, N., Davronov, M., Tuychiev, M. and Nurmurodov, T. Microwave synthesis and study of morphology, structure and luminescent properties of zinc oxide microstructures. *Journal of Physical Science*, 2025, 36(1):27-36. **https://doi.org/10.21315/jps2025.36.1.3**

3. Mirkhani, V., Wang, Sh., Yapabandara, K., Sultan, M.Sh., Khanal, M.P., Uprety, S., Ozden, B., Hassani, E., Schoenek, B.V. and Kim, D.J. High dose gamma irradiation effects on properties of active layers in ZnO thin film transistors. *Semiconductor Science and Technology*, 2021, 36:105011. **https://doi.org/10.1088/1361-6641/ac1c4e**

4. Gurylev, V. and Perng, T.P. Defect engineering of ZnO: Review on oxygen and zinc vacancies, *Journal of the European Ceramic Society*, 2021, 41(10):4977-4996. **https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2021.03.031**

TERMIK OKSIDLANISH NATIJASIDA HOSIL BO‘LGAN NIOBIY OKSID YUPQA PLYONKALARINING RAMAN-SPEKTROSKOPIK XUSUSIYATLARI

A.R. Qodirov, M.A. Davlatov, N. Bozorova
Qarshi davlat universiteti
asilbekqodirov980@gmail.com

Niobiy–kislorod tizimida NbO, NbO_2, Nb_2O_5 va nostexiometrik NbO_x kabi bir nechta fazalar mavjud bo‘lishi mumkin. Ularning fazaviy tarkibi va xossalari kislorod miqdori hamda sintez sharoitlariga kuchli bog‘liq bo‘lganligi sababli, niobiy oksid plyonkalarini olishda fazalarni aniq nazorat qilish va ishonchli identifikatsiya qilish muhim ahamiyatga ega [1–5]. Shu sababli termik oksidlanish jarayonida hosil bo‘ladigan niobiy oksid qatlamining tarkibiy va strukturaviy holatini Raman spektroskopiyasi orqali aniqlash, shuningdek, oksid qatlamining tebranish xususiyatlariga ta’sirini o’rganish muhimdir.

Dastlab Nb yupqa plyonkalari impulsli RF magnetron purkash usulida 300W quvvatda olindi. Keyinchalik ular 600 °C haroratda atmosfera havosida termik oksidlandi. 3 va 5 daqiqa davomida bir xil sharoitda magnetron changlatish orqali olingan Nb plyonkalarini taqqoslash orqali changlatish vaqtining hosil bo‘lgan oksid qatlamlarining Raman spektrlariga ta’siri o’rganildi.

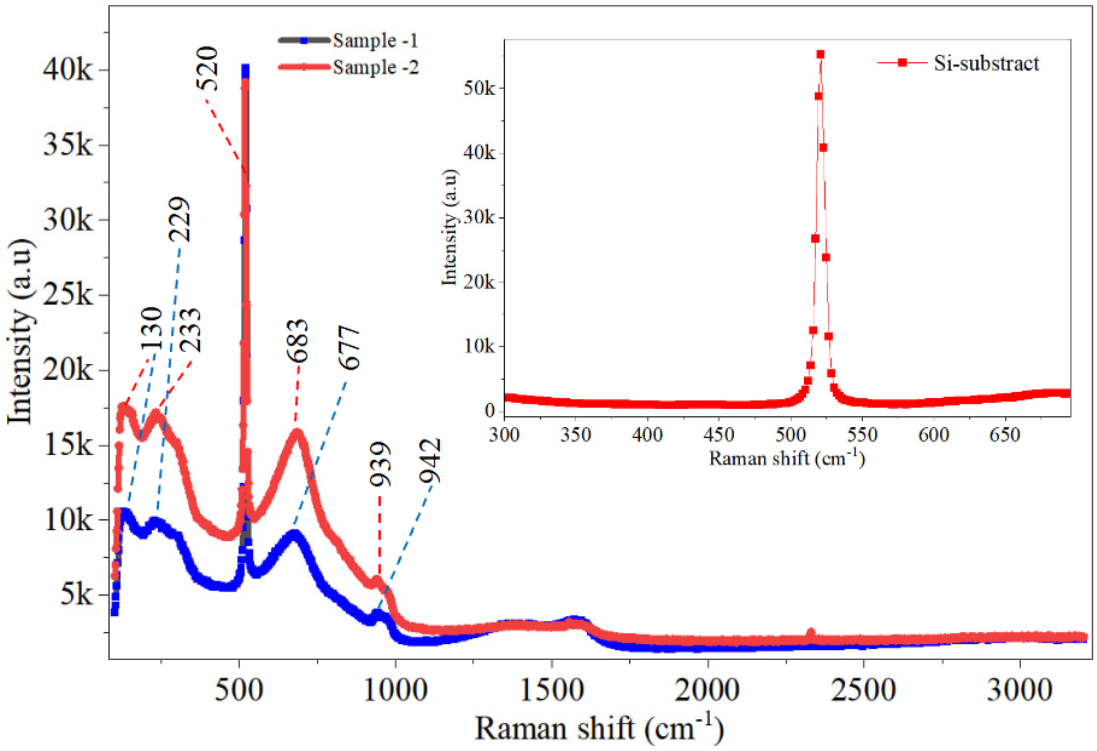
Nb yupqa plyonkalari p-tipli monokristall Si(111) tagliklariga EPOS PVD Desk Pro magnetron purkash qurilmasining RF rejimida 300W quvvatda olindi. Tagliklar izopropil spirti bilan yuvildi va ultratovushli vannada tozalandi. Plyonkalarni olish uchun diametri 76,2 mm bo‘lgan, tozaligi 99,95 % li Nb nishoni ishlatildi. Dastlabki vakuum 5×10^{-6} Torr gacha hosil qilindi. Ishchi gaz sifatida tozaligi 99,999 % bo‘lgan Ar ishlatilib, uning sarfi 40 sccm etib belgilandi, ishchi bosim esa $2{,}8 \times 10^{-3}$ Torr ni tashkil etdi. Nishon–taglik masofasi 100 mm, impulsli RF quvvati 300 W, cho‘ktirish tezligi esa 0,76 Å/s bo‘ldi. Namunalar 3 va 5 daqiqa davomida olindi.

Namunalarning Raman spektrlari 532 nm to‘lqin uzunligiga ega lazer quvvatida qayd etildi.

1-jadval. Niobiy va uning oksidi yupqa plyonkalarini hosil qilish parametrlari

Namuna hosil qilish parametri	Namuna-1	Namuna-2
Qalinligi	136 nm	228 nm
Cho‘ktirish vaqti	3 min	5 min
Rejim	Impulsli RF (100 kHz)	Impulsli RF (100 kHz)
Quvvat	300 W	300 W

Raman natijalarining o‘zaro muvofiqligini tasdiqlash uchun fazalarni identifikatsiya qilish tahlili amalga oshirildi. Raman spektrlari termik tavlash jarayonida Nb yupqa plyonkalarida Nb–O bog‘larining hosil bo‘lishi va rivojlanishini ko‘rsatdi (1-rasm). Termik ishlov berishdan oldingi namunada 131, 232, 303, 687 va 942 cm^{-1} atrofida piklar (cho‘qqilar) kuzatildi. 521 cm^{-1} dagi kuchli cho‘qqi Si tagligiga xos Raman tebranishiga mos keladi. 200–300 cm^{-1} diapazonidagi piklar Nb–O–Nb bog‘larining deformatsion tebranishlari, 680 cm^{-1} atrofidagi pik esa Nb–O poliedrlarining cho‘zilish tebranishlari bilan bog‘liq. Bundan tashqari, 900–1000 cm^{-1} sohasidagi piklar terminal Nb=O bog‘larining tebranishlari bilan mos keladi.



1-rasm. 3 va 5 daqiqada olingan hamda 600 °C da termik oksidlangan Niobiy namunalarining Raman spektrlari.

Shunday qilib, termik ishlov berishdan oldingi namunada ham ushbu xususiyatlarning mavjudligi Nb sirtida havodagi tabiiy oksidlanish natijasida yupqa NbO_x qatlami hosil bo‘lganligini ko‘rsatadi.

600 ^oC haroratda 2 soat davomida izoxron termik ishlov berilgandan so‘ng 3 daqiqalik plyonkada 130, 229, 677 va 942 cm^{-1}, 5 daqiqalik plyonkada esa 130, 233, 683 va 939 cm^{-1} dagi cho’qqilar aniqlandi. Xususan, 130, 230 va 680 cm^{-1} atrofidagi Raman cho’qqilarining birgalikda kuzatilishi adabiyotlarda keltirilgan Nb_2O_5 ning tebranish modalariga mos keladi va termik oksidlanish natijasida Nb_2O_5 fazasining shakllanishiga olib keladi. Adabiyot ma’lumotlariga ko‘ra, Nb_2O_5 128, 228 va 301 cm^{-1} dagi cho‘qqilar hamda 690 cm^{-1} atrofidagi Nb–O cho‘zilish piki bilan identifikatsiya qilinadi. Bizning natijalarimizda 680 cm^{-1} ga yaqin cho’qqisi 3 va 5 daqiqalik plyonkalar uchun mos ravishda 677 va 683 cm^{-1} da kuzatildi. Bu termik oksidlanish jarayonida Nb–O bog‘larining barqaror hosil bo‘lishini ko‘rsatadi. Taxminan 940 cm^{-1} dagi cho’qqilarning saqlanib qolishi terminal Nb=O bog‘lari kabi yuqori tartibli Nb–O turlarining mavjudligini ko’rsatadi.

Adabiyotlar

[1] Emeka N.C., Imoisili P.E., Jen T.-C. Preparation and Characterization of Nb_xO_γ Thin Films: A Review. Coatings, 2020, 10(12), 1246.

[2] Foroughi-Abari A., Cadien K.C. Growth, structure and properties of sputtered niobium oxide thin films. Thin Solid Films, 2011, 519(10), 3068–3073.

[3] Duyar Coşkun Ö., Demirel S. The optical and structural properties of amorphous Nb_2O_5 thin films prepared by RF magnetron sputtering. Applied Surface Science, 2013.

[4] Fridriksson E.G. et al. Growth of NbO, NbO_2 and Nb_2O_5 thin films by reactive magnetron sputtering and post-annealing. Vacuum, 2022, 202, 111179.

[5] Mohamed S.A., Abd El-Raheem M.M.A., Ahmed M.R. Interplay between the heat treatment and structural and optical properties of Nb_2O_5 thin films. Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 2024, 35, 1412.

VAKUUM-YOY RAZRYADI TA’SIRIDA AISI 430 PO‘LATI YUZASINING ELEMENT TARKIBI VA MORFOLOGIYASINING O‘ZGARISHI

B.R. Kaxramonov., I.X. Xudayqulov., V.N. Arustamov., G.P. Kaxramonova
O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, Toshkent, O‘zbekiston
E-mail: boburjon2285@gmail.com

Metall yuzasiga funksional va himoya qoplamalarini yotqizish jarayonida substratning dastlabki holati qoplama/taglik chegarasida hosil bo‘ladigan bog‘lanishlarning sifatiga bevosita ta’sir ko‘rsatadi. Yuzada mavjud bo‘lgan oksidli qatlamlar, adsorbsiyalangan uglerodli birikmalar, moylash materiallari qoldiqlari va boshqa texnologik ifloslanishlar qoplamaning bir jinsli shakllanishiga to‘sqinlik qilib, interfeysda nuqsonlarning paydo bo‘lishi va adgezion mustahkamlikning pasayishiga olib kelishi mumkin [1]. Vakuum-yoy razryadi metall yuzalarini tozalash va faollashtirish imkonini beruvchi yuqori energiyali plazmali usullardan biridir. Katod dog‘lari sohasida hosil bo‘ladigan yuqori energiyali ionlar oqimi ishlov berilayotgan yuzaga yo‘naltirilganda, undagi yod qatlamlarni fizik changlatish va desorbsiyalash jarayonlari kuchayadi [2, 3]. Shu munosabat bilan mazkur ishning maqsadi AISI 430 (X6Cr17) zanglamas po‘lat yuzasining vakuum-yoy razryadi ta’sirida element tarkibi va morfologiyasining o‘zgarishini eksperimental tadqiq qilishdan iborat. Ishlov berilmagan AISI 430 yuzasining EDS tahlili natijalari yuzada uglerod va sirt oksidlanishi mavjudligini ko‘rsatdi. Metall sirtiga dastlab va ishlov berilgandan keyingi element tahlili 1- jadvalda keltirilgan.

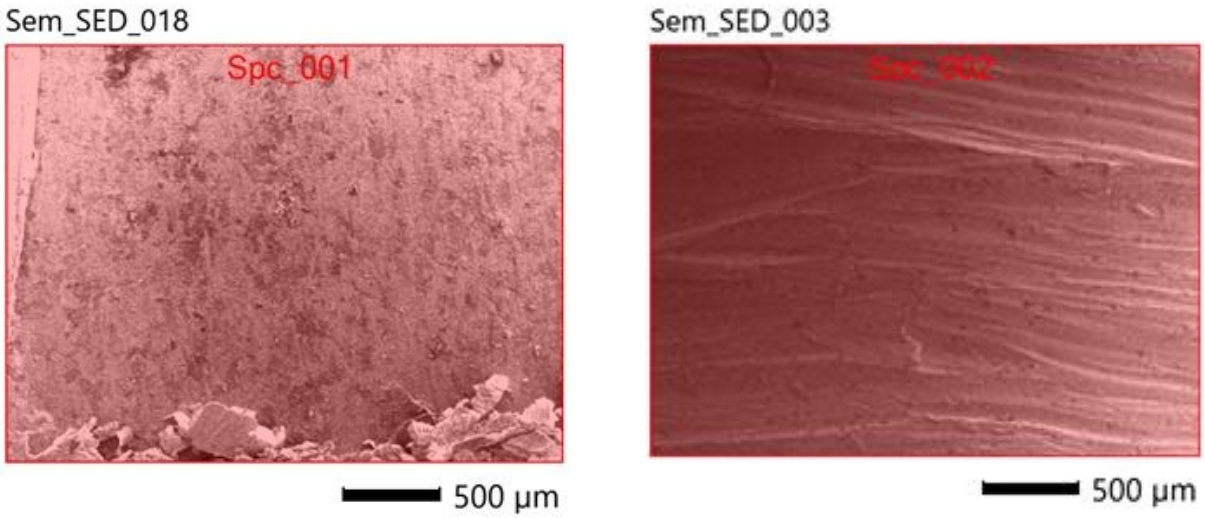
Vakuum-yoy razryadi bilan ishlov berilgandan keyin yuzaning element tarkibida sezilarli o‘zgarish kuzatildi. Uglerod miqdori 7,59 mass.%, kislorod miqdori esa 0,85 mass.% gacha kamaydi. Bir vaqtning o‘zida xrom miqdori 18,06 mass.%, temir miqdori esa 65,85 mass.% gacha oshdi. Bu o‘zgarishlar vakuum-yoy plazmasi ta’sirida yuzadagi uglerodli va oksidli ifloslanish qatlamining asosiy qismi olib talanganini ko‘rsatadi. Jadval natijalaridan ko‘rinib turibdiki, vakuum-yoy razryadi ta’sirida uglerod miqdori uch martadan ortiq, kislorod miqdori esa yigirma martadan

ziyod kamaygan. Shu bilan birga, AISI 430 qotishmasi uchun xarakterli bo‘lgan xrom va temir elementlarining yuzadagi haqiqiy tarkibi qayta namoyon bo‘lgan.

1-jadval.
AISI 430 po‘lati yuzasining vakuum-yoy razryadi ta’siridan oldin va keyingi element tarkibi.

Element	Ishlov berilmagan namuna yuzasi, mass.%	Vakuum-yoy razryadi bilan tozalangan namuna yuzasi, mass.%
C	25,42	7,59
O	23,71	0,85
Cr	0,29	18,06
Fe	41,50	65,85

SEM EDS natijalarini morfologik jihatdan ham tasdiqladi(1-rasm). Ishlov berilmagan namuna yuzasida aglomeratsiyalangan zarrachalar, oksidli zonalari va bir jinsli bo‘lmagan relef kuzatildi. Vakuum-yoy razryadi bilan ishlov berilgandan keyin esa yuza ancha silliq va bir jinsli holatga keldi.



1-rasm. AISI 430 (X6Cr17) po‘lati yuzasining SEM tasvirlari: a) ishlov berilmagan texnologik ifloslangan yuza; b) vakuum-yoy razryadi bilan ishlov berilgandan keyingi yuza.

Ionlangan fizik bug‘lanish jarayonlarida taglik yuzasini oldindan yuqori energiyali ionlar bilan bombardimon qilish yuzani tozalash va qoplama/taglik interfeysini shakllantirishning muhim bosqichlaridan biri hisoblanadi [4]. Shu nuqtayi nazardan, AISI 430 yuzasida uglerod va kislorod miqdorining keskin kamayishi

hamda metall asosiy elementlarining qayta taqsimlanishi vakuum-yoy razryadini keyingi qoplama hosil qilish jarayoni oldidan qo‘llash samaradorligini ko‘rsatadi.

Olingan natijalar vakuum-yoy razryadi asosida AISI 430 po‘lati yuzasini TiN, CrN, DLC va boshqa funksional qoplamalarni yotqizishdan oldin samarali tayyorlash, shuningdek, nanozarrachalar va nanomateriallar olish jarayonlarida namunani tayyorlashning samarali texnologik bosqichi sifatida qo‘llash imkoniyatini ko‘rsatadi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. Petrov I. et al. Microstructural evolution during film growth // *Journal of Vacuum Science & Technology A*. – 2003. – Vol. 21. – P. S117–S128.
2. Yamamoto T., Takeda K., Toh T., Tanaka J. Distribution of heat flux transported by a magnetically driven arc // *Thin Solid Films*. – 2014.
3. Yuan S. et al. Recent developments in research of double glow plasma surface alloying technology: a brief review // *Journal of Materials Research and Technology*. – 2020. – Vol. 9. – P. 6859–6882.
4. Helmersson U. et al. Ionized physical vapor deposition (IPVD): A review of technology and applications // *Thin Solid Films*. – 2006. – Vol. 513. – P. 1–24.

GRAFEN OKSIDIDA QOLDIQ SULFATNING IKKI HOLATI VA ULARNING RAMAN SPEKTRIDAGI IZLARI

Ne’matova Zumrad Zayniddin qizi, Daminov Rahimjon, Ochilov Odil
Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy universiteti Nanotexnologiyalarni rivojlantirish markazi, Toshkent, O‘zbekiston
toxirovazumrad@gmail.com

Grafen oksidini Raman spektroskopiyasi yordamida o‘rganganda tadqiqotchilar odatda 1000 dan 3000 cm^{-1} gacha bo‘lgan sohaga e’tibor qaratadilar, chunki asosiy ko‘rsatkichlar bo‘lgan D, G va 2D tasmalari aynan shu yerda joylashgan [1, 2]. Undan past chastotali qism esa ko‘pincha spektrdan kesib tashlanadi va umuman tahlil qilinmaydi. Ammo Hummers usulida grafen oksidi olishda konsentrlangan sulfat kislota ishlatiladi. Shu sababli tayyor mahsulotda qoldiq oltingugurtning bo‘lishi muqarrar [3]. Odatda uni elementar tahlil yoki infraqizil spektroskopiya yordamida aniqlashadi. Elementar tahlil faqat oltingugurt miqdorini beradi, uning qanday kimyoviy holatda ekanini esa ko‘rsata olmaydi.

Ushbu ishda namunaning Raman spektrida 400 dan 1200 cm^{-1} gacha bo‘lgan soha tahlil qilindi va qoldiq sulfat ikkita bir-biridan farqli holatda ekani aniqlandi.

Tajriba qismi. Grafen oksidi Hummers usulida sintez qilindi. Grafit va natriy nitrat aralashmasi 98 foizli sulfat kislotada muzli hammomda aralashtirildi. So‘ngra kaliy permanganat bosqichma-bosqich qo‘shildi. Reaksiya vodorod peroksid bilan to‘xtatildi va cho‘kma 1 M xlorid kislota hamda distillangan suv bilan pH qiymati 6 dan 7 gacha yetguncha yuvildi, so‘ng 50 daraja haroratda quritildi. Raman spektri Renishaw inVia spektrometrida qayd etildi. Qo‘zg‘atuvchi nurning to‘lqin uzunligi 532 nm ni, o‘lchov diapazoni 101 dan 3203 cm^{-1} gacha bo‘lgan oraliqni tashkil etdi. Tahlilga fon ayirilmagan xom spektr olindi. Fon assimetrik eng kichik kvadratlar usulida [4] va mahalliy chiziqli yaqinlashuvda ayirildi. Tasmalar pseudo-Voigt konturlari yordamida moslashtirildi.

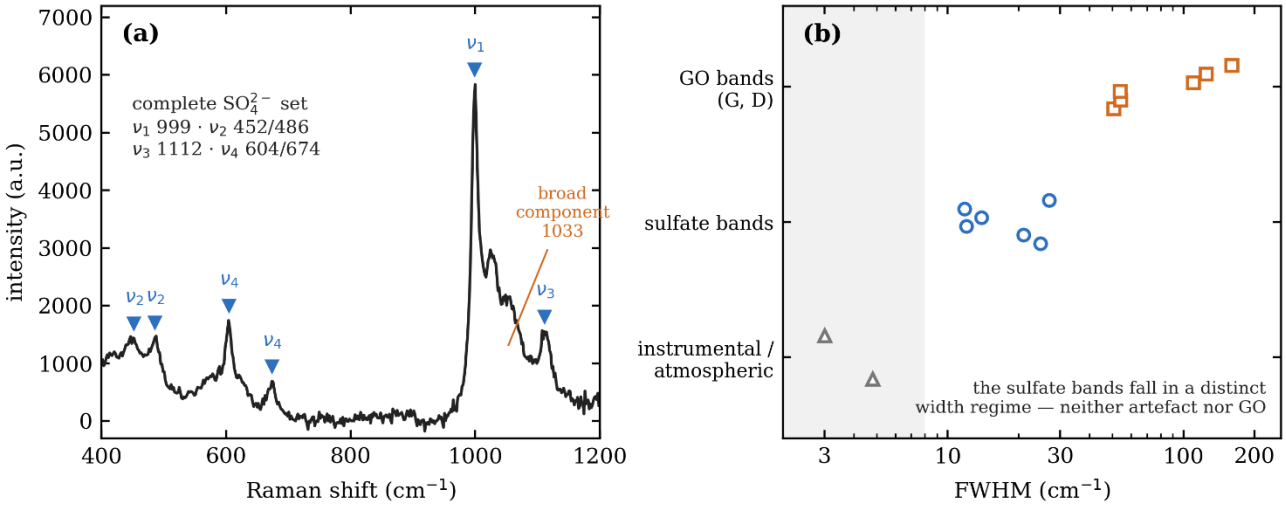
Natijalar va ularning tahlili. 400 dan 1200 cm^{-1} gacha bo‘lgan sohada oltita aniq tasma qayd etildi. Ular 1-jadvalda va 1-rasmda keltirilgan. Tasmalarning pozitsiyalari sulfat ionining to‘rtta fundamental tebranishiga mos keladi [5]. Bundan

ham muhimroq jihat ularning nisbiy intensivliklaridir. Ramanda sulfat uchun simmetrik cho‘zilish tebranishi har doim eng kuchli bo‘ladi va bizning spektrda ham 999,2 cm^{-1} dagi tasma qolganlaridan to‘rt barobardan ko‘proq kuchli chiqdi.

Tasmalarning kengligi alohida ahamiyatga ega. Asbobning ruxsat etish qobiliyati 2 dan 3 cm^{-1} gacha bo‘lgan qiymatni beradi. Atmosfera azotining chizig‘i esa 4,8 cm^{-1} kenglikda kuzatildi. Grafen oksidining o‘z tasmalari ancha keng bo‘lib, 50 dan 160 cm^{-1} gacha bo‘lgan oraliqni egallaydi [2]. Aniqlangan sulfat tasmalari 12 dan 27 cm^{-1} gacha bo‘lgan oraliqda joylashadi. Asbob artefakti bo‘lish uchun ular juda keng, grafen oksidi tasmasi bo‘lish uchun esa juda tor. Bunday kenglik kristall noorganik fazaga xosdir.

Tayinlanishi	**Pozitsiya, cm^{-1}**	**FWHM, cm^{-1}**	**Nisbiy intensivlik**
ν_1 simmetrik cho‘zilish	999,2	11,8	1,00
ν_2 deformatsiya	451,9 va 485,7	24,7 va 21,0	0,10 va 0,15
ν_3 asimmetrik cho‘zilish	1111,5	26,9	0,26
ν_4 deformatsiya	604,4 va 673,9	12,0 va 13,9	0,25 va 0,09
keng komponent	1033,0	67,6	0,53

1-jadval. 400 dan 1200 sm^{-1} gacha bo‘lgan sohada aniqlangan tasmalar.



1-rasm. (a) Namunaning 400 dan 1200 cm^{-1} gacha bo‘lgan sohadagi Raman spektri va sulfat tebranishlarining tayinlanishi. (b) Tasmalar kengligining uchta rejimi, ya’ni asbob va atmosfera chiziqlari, sulfat tasmalari hamda grafen oksidi tasmalari.

1033 cm^{-1} dagi keng komponent butunlay boshqa manzarani beradi. Uning kengligi 67,6 cm^{-1} ni tashkil etadi va bunday kenglik tartibsiz, sirtga bog‘langan

guruhlarga xos. Demak namunada oltingugurt ikkita har xil holatda mavjud. Tor tasmalar to‘liq yuvilmagan kristall sulfat qoldig‘ini, keng komponent esa sirtga kovalent bog‘langan sulfat guruhlarni ifodalaydi. Elementar tahlil usullari oltingugurtning umumiy miqdorini beradi, ammo uning holatini ajrata olmaydi. Shu sababli adabiyotda qoldiq oltingugurt ko‘pincha bir turdagi, ya’ni kovalent bog‘langan sulfat guruh deb talqin qilinadi. Bizning natijalarimiz bu talqinni aniqlashtiradi. Kamida ikkita holat mavjud va ularning nisbati yuvish sifatiga bog‘liq bo‘lishi kerak. Shu sababli grafen oksidini tavsiflashda Raman spektrini 1000 cm^{-1} dan pastda kesib tashlash to‘g‘ri emas, aks holda tozalash sifati haqidagi bevosita ma’lumot yo‘qoladi. Sulfat tayinlanishi tasma pozitsiyalari va nisbiy intensivliklariga asoslangan bo‘lib, bu standart yondashuv bo‘lsa ham isbot emas. Kation aniqlanmadi. Xulosani mustahkamlash uchun infraqizil spektroskopiya yoki rentgen fotoelektron spektroskopiya tahlili talab etiladi.

Xulosa. Grafen oksidi namunasining Raman spektrida sulfat ionining to‘rtala fundamental tebranishi to‘g‘ri intensivlik tartibi bilan aniqlandi. Tasmalar kengligi 12 dan 27 cm^{-1} gacha bo‘lib, bu ularni asbob artefaktlaridan ham, grafen oksidi tasmalaridan ham ishonchli ajratadi. 1033 cm^{-1} dagi keng komponent oltingugurtning ikkinchi, tartibsiz holatini ko‘rsatadi. Grafen oksidini Raman spektroskopiyasi bilan tavsiflashda past chastotali sohani tahlildan chiqarib tashlamaslikni tavsiya etamiz.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Dimiev A.M., Halbig C.E., Talyzin A. Chemical Reviews, 2026, vol. 126, pp. 3055-3088.

2. Ferrari A.C., Robertson J. Physical Review B, 2000, vol. 61, pp. 14095-14107.

3. Mendez-Lozano N., Perez-Reynoso F., Gonzalez-Gutierrez C. Materials, 2022, vol. 15, 7228.

4. Zhang Z.-M., Chen S., Liang Y.-Z. Analyst, 2010, vol. 135, pp. 1138-1146.

5. Nakamoto K. 6th ed. Hoboken, Wiley, 2009. 419 p.

MASS-SPECTROMETRIC INVESTIGATION OF C_{60} FRAGMENTATION AND Ba–C CLUSTER FORMATION INDUCED BY Ba^+ IONS

U.K. Makhmanov[1,2], K.N. Musurmonov[1], A.X. Shukurov[1]
[1]Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Uzbekistan Academy Sciences, 33, Durmon Yuli St., 100125 Tashkent, Uzbekistan
abduqayummusulmonov@gmail.com
[2]National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek, 4, Universitet str., 100174 Tashkent, Uzbekistan

Fullerenes represent a unique class of carbon nanostructures defined by their hollow, spheroidal cages and remarkable thermodynamic stability [1]. Since the original discovery of C_{60}, C_{70}, and higher fullerenes, these closed-cage carbon clusters have attracted extensive attention in nanomaterials science, physical chemistry, and ion–molecule reaction dynamics due to their delocalized π-electron systems, high electron affinity, and capacity to form stable molecular ions [2]. In addition, fullerenes exhibit a strong tendency toward self-assembly due to intermolecular van der Waals interactions between their π-conjugated surfaces [3]. As a result, C_{60} molecules can spontaneously organize into ordered structures such as fullerite crystals, nanowires, and two-dimensional molecular assemblies, which significantly influence their electronic, optical, and mechanical properties [4]. Owing to their exceptional structural stability and robustness under energetic interactions, these fullerene systems serve as ideal model materials for investigating collision-induced fragmentation and charge-transfer phenomena [5]. In this context, ion sputtering has emerged as an effective method for probing the stability and fragmentation behavior of fullerenes under controlled energetic bombardment [6].

At an ion energy of 1 keV, the spectrum (Figure 1) is characterized by three distinct regions. The low-mass region (m/z=15–100) contains a dense set of peaks corresponding to small carbon fragments C_n^+ (n=1–8). The dominance of these ions indicates that Ba^+ bombardment efficiently initiates cage rupture and secondary fragmentation cascades. The intermediate-mass region (m/z=120–360) includes a series of well-resolved peaks associated with C_{10}–C_{30} clusters. The appearance of both even and odd carbon numbers

suggests that fragmentation proceeds not only through direct bond cleavages but also through post-impact rearrangements of carbon atoms.

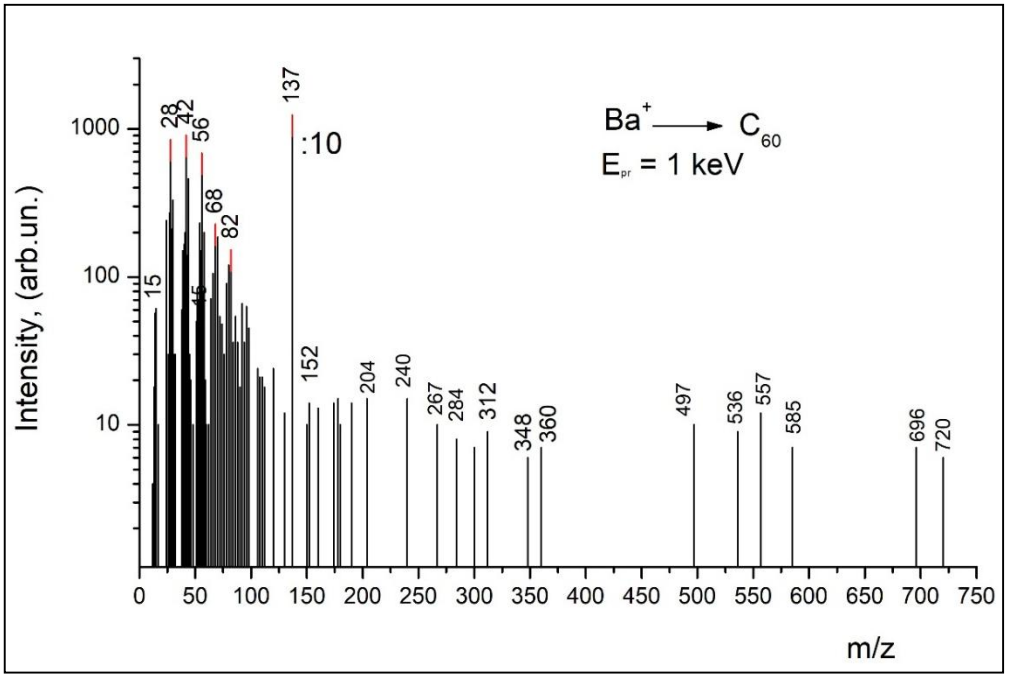


Figure 1. **Mass spectrum of C_{60} cluster ions at a bombardment ion energy of 1 keV.**

These recombined clusters are typical of moderately energetic collisions in which cage opening occurs without complete loss of structural coherence. A set of weak but resolvable peaks in the high-mass region (m/z = 497–720) indicates the presence of fragmented fullerene remnants and possibly metal–carbon species. The position of the uppermost peaks near m/z ≈ 720 demonstrates that a fraction of the C_{60} cage survives the 1 keV collision, albeit in damaged form. The intense Ba^+ signal at m/z =137 reflects sputtering and backscattering of barium ions from the target surface. In addition to the distribution of Cn^+ fragments, the 1 keV spectrum contains several peaks that cannot be explained by pure carbon clusters alone. Notably, the peaks at m/z=497 and m/z=557 match exactly the expected masses of BaC_{30}^+ and BaC_{35}^+, based on the relation m/z=137+12n. These species arise from post-collision association between Ba^+ and medium-sized carbon fragments, which are produced as the fullerene cage disintegrates. Their appearance indicates that Ba^+ participates in the chemical dynamics of the sputtering process in addition to acting as an energetic projectile. Additional weaker peaks near m/z=536 and m/z=585 lie close to the calculated masses of BaC_{33}^+ and

BaC_{37}^{+}, respectively, although slight deviations suggest contributions from overlapping C_n^{+} clusters or limits in mass resolution. Larger features at m/z=696 and m/z=720 do not satisfy the Ba–C_n mass relation and therefore originate from heavy carbon clusters rather than metal–carbon species. The presence of Ba–C_n^{+} ions provides strong evidence that metal–carbon complex formation accompanies fullerene fragmentation, especially under moderate-energy sputtering conditions where abundant carbon fragments are available for rapid post-impact association. Thus, the experiment shows that the 1 keV spectrum corresponds to a medium-energy decay regime, where the C_{60} cage opens but partially retains structural stability (m/z=720), allowing the formation of medium-sized carbon clusters and associates through recombination processes.

REFERENCES

[1] H.W. Kroto, The stability of the fullerenes C_n, with n = 24, 28, 32, 36, 50, 60 and 70, Nature, Vol. 329, Iss. 6139, 1987.

[2] S.A. Bakhramov, A.M. Kokhkharov, E.A. Zakhidov, U.K. Makhmanov, Sh.P. Gofurov, Clusterization of fullerene $C_{60/70}$ molecules in solutions and its influence on the optical and the nonlinear optical properties of solutions, J. Korean Phys. Soc., Vol. 64, Iss. 10, 2014.

[3] B. Mortazavi, Structural, electronic, thermal and mechanical properties of C_{60}-based fullerene two-dimensional networks explored by first-principles and machine learning, Carbon, Vol. 213, 2023.

[4] U.K. Makhmanov, A.M. Kokhkharov, S.A. Bakhramov, D. Erts, The formation of self-assembled structures of C_{60} in solution and in the volume of an evaporating drop of a colloidal solution, Lith. J. Phys., Vol 60, Iss. 3, 2020.

[5] Smucker J, Montgomery J.A, Bredice M, Rozman M.G, Côté R, Sadeghpour H.R, Vrinceanu D, Kharchenko V, Model of charge transfer collisions between C_{60} and slow ions, J. Chem. Phys., Vol. 157, Iss. 5, 2022.

[6] J. Laskin, T. Peres, A. Khong, H.A. Jimenez-Vazquez, R.J. Cross, M. Saunders, D.S. Bethune, M.S. de Vries, C. Lifshitz, Mass spectrometric study of unimolecular decompositions of endohedral fullerenes, Int. J. Mass Spectrom., Vol. 185, Iss. 1-2, 1999.

ГРАФЕН–MOS_2 ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ КАК ПЕРСПЕКТИВНАЯ ЭЛЕМЕНТНАЯ БАЗА ГИБКОЙ ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ

А. Х. Рамазанов, Ф.С. Мукимбоев
Национального университета Республики Узбекистан имени Мирзо Улугбека факультета “физики”, кафедры “фотоники”

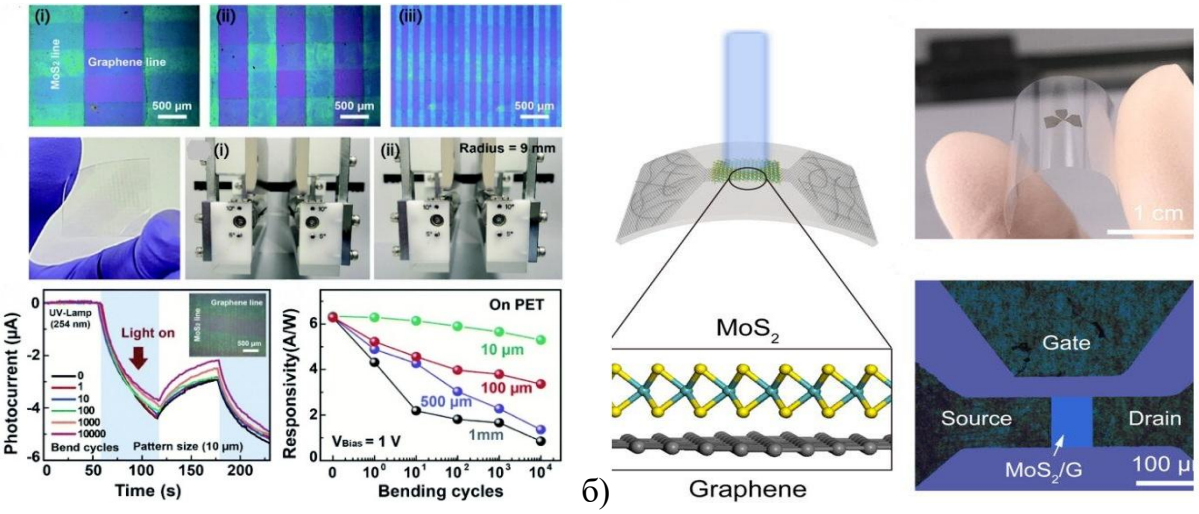
Абстракт. Современные двумерные материалы, такие как графен и MoS_2, являются перспективной основой гибкой оптоэлектроники. В работе рассмотрены электронные, оптические и механические свойства Ван-дер-ваальсовых гетероструктур графен–MoS_2 и их применение в фотодетекторах и гибких транзисторах. Показано, что сочетание высокой электропроводности и гибкости графена с полупроводниковыми свойствами MoS_2 позволяет создавать перспективные гибкие оптоэлектронные устройства. Основными проблемами остаются контактное сопротивление, дефектность, качество интерфейса и стабильность при деформации.

Актуальность. За последние несколько десятилетий миниатюризация транзисторов, соответствующая тенденциям закона Мура, позволила значительно повысить производительность вычислительных систем. Однако дальнейшее уменьшение размеров кремниевых транзисторов сталкивается с физическими и технологическими ограничениями, включая рост утечек, контактного сопротивления и сложности масштабирования диэлектриков и архитектуры устройств. Это стимулирует поиск новых материалов и технологий, способных обеспечить дальнейшее развитие электроники, в том числе создание гибких и оптоэлектронных устройств. В этом контексте двумерные материалы, такие как графен и MoS_2, представляют особый интерес благодаря сочетанию уникальных электронных, оптических и механических свойств.

Цель работы. Целью работы является обзор и анализ современных исследований графен–MoS_2 гетероструктур, их физико-химических свойств, механизмов взаимодействия компонентов и перспектив применения в гибкой оптоэлектронике.

Основная часть. Физические свойства графена и MoS_2. Графен обладает высокой электропроводностью, оптической прозрачностью и механической гибкостью, однако отсутствие запрещённой зоны ограничивает его применение в

качестве активного полупроводникового элемента. MoS_2 является двумерным полупроводником и в монослойном состоянии имеет прямую запрещённую зону и выраженные экситонные свойства, что делает его перспективным для наноэлектроники и оптоэлектроники [4]. Преимущества гетероструктуры графен–MoS_2. Объединение материалов позволяет сочетать их взаимодополняющие свойства: MoS_2 эффективно поглощает свет и генерирует электронно-дырочные пары, а графен обеспечивает быстрый транспорт носителей заряда. Это способствует повышению эффективности фотодетекторов и других гибких оптоэлектронных устройств [5].



а) б)

а) Рисунок из работы 2024 года: там показаны ***графен–MoS_2 переход, перенос фотозарядов, массив фотодетекторов и испытание при изгибе****. б) Схематическое устройство гибкого фотодетектора на основе гетероструктуры графен–MoS_2 и механизм переноса фотогенерированных носителей заряда*

Современные результаты. В 2025 году была продемонстрирована гибкая матрица рентгеновского детектора площадью 3 × 3 см² с 3600 пикселями на основе MoS_2-транзисторов и графен–MoS_2 фотодетекторов. Электронная подвижность достигала 17,31 см²/(В·с), а фоточувствительность — 9,37 А/Вт [1]. Другим важным направлением является снижение контактного сопротивления. В работе 2025 года применение графеновых контактов позволило увеличить среднюю подвижность MoS_2-транзисторов с 1,1 до 3,9 см²/(В·с), а контактное сопротивление снизить с 85,8 до 20,5 кΩ [2].

Несмотря на перспективность гетероструктур, остаются проблемы качества интерфейса, дефектности материалов, масштабирования производства и механической стабильности. Исследования показывают, что деформация может изменять

электрические характеристики гибких MoS_2-транзисторов, поэтому управление механическим воздействием является важной задачей дальнейших исследований [6].

Параметр	**Обычный MoS_2 FET**	**Graphene–MoS_2 FET**
Подвижность	1,1 см²/(В·с)	3,9 см²/(В·с)
Контактное сопротивление	85,8 кΩ	20,5 кΩ

Проблемы и перспективы. Основными проблемами графен–MoS_2 гетероструктур остаются контактное сопротивление, дефекты, качество интерфейса, масштабирование производства и механическая стабильность [6]. Перспективы связаны с улучшением качества интерфейсов и повышением устойчивости устройств к деформации.

Методы исследования. В работе проведён анализ и обобщение современных научных публикаций о графене, MoS_2 и их ван-дер-ваальсовых гетероструктурах. Рассмотрены их электронные, оптические и механические свойства, а также характеристики гибких фотодетекторов и транзисторов. Основное внимание уделено фоточувствительности, подвижности носителей, контактному сопротивлению и механической стабильности устройств. Анализ основан преимущественно на публикациях 2024–2026 гг.

Список литературы:

1. A flexible active-matrix X-ray detector with a backplane based on two-dimensional materials. Beom Jin Kim, Bangjie Shao, Anh Tuan Hoang, 22.01. 2025.
2. Scalable Graphene–MoS_2 Lateral Contacts for High-Performance 2D Electronics. Woonggi Hong Zuqing Yuan, Junlu Sun, Wenqiang Wu. 13. 10. 2025.
3. High Responsivity, Large-Area Graphene/MoS_2 Flexible Photodetectors- Domenico De Fazio, Ilya Goykhman §, Duhee Yoon, Matteo Bruna,
4. 2D MoS_2 for Next-Generation Electronics and Optoelectronics: From Material Properties to Manufacturing Challenges and Future Prospects Ruchika Thayil, Saidi Reddy Parne, C.V. Ramana. 03.03.2025.
5. A review on recent advancements in the growth of MoS_2 based flexible photodetectors. Krishan Kumar, Davinder Kaur 13.05.2024
6. Strain Engineering of a Dual-Gate Structure for Highly Flexible and Transparent MoS_2 Thin-Film Transistors with Graphene Electrodes. Mingu Kang 16.09.2025

DESIGN OF A STEAM-RESISTANT COBALT/SILICALITE-1 CATALYST FOR PROPANE DEHYDROGENATION

Muxamadqulov Shokhboz Jonibek Ugli, Ashurov Rustam Khatamovich
Arifov Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Uzbekistan Academy of Sciences.
muhammadqulovshahboz@gmail.com

The increasing demand for propylene and the growing availability of propane have intensified interest in efficient on-purpose propylene production technologies. Propane dehydrogenation (PDH) is particularly attractive because of its high potential for propylene selectivity; however, the development of catalysts that combine high activity, product selectivity, and resistance to steam-induced deactivation remains a major challenge, particularly for fast fluidized-bed (FFB) processes. In commercial FFB systems, steam is employed during catalyst stripping and transfer operations, where exposure to high-temperature water can adversely affect catalyst stability and catalytic performance. In this study, a cobalt-based catalyst supported on hydrophobic Silicalite-1 (Co/S-1) was developed as a steam-resistant alternative to conventional Al_2O_3-supported Co catalysts for propane dehydrogenation. The catalytic behavior of Co/S-1 was systematically compared with Co/Al_2O_3 and $Co–Pt/Al_2O_3$ under both steam-free and steam-containing conditions, while the interaction of water with the catalyst surfaces was investigated using in situ diffuse reflectance infrared Fourier transform spectroscopy (DRIFTS). Silicalite-1 with an average particle size of approximately 1 μm was synthesized through a hydrothermal method using a TEOS:TPAOH:H_2O molar ratio of 1.0:0.15:30. The synthesized S-1 was subsequently used as the support for Co/S-1 preparation by incipient wetness impregnation using $CoCl_2 \cdot 6H_2O$ as the cobalt precursor. Reference Co/Al_2O_3 and $Co–Pt/Al_2O_3$ catalysts were prepared using the same impregnation approach to enable a direct comparison of catalytic performance and hydrothermal stability. Propane dehydrogenation was conducted in a fixed-bed continuous-flow quartz reactor at 600 °C using a propane/N_2 feed, while short time-on-stream measurements were performed with sequential product collection at 1 s intervals. Under steam-free conditions, Co/S-1 exhibited

substantially superior PDH performance compared with Co/Al_2O_3. The Co/S-1 catalyst achieved 47.2% propane conversion with 94.2% propylene selectivity, whereas Co/Al_2O_3 showed only 7.4% propane conversion and 86.1% propylene selectivity. In addition to its higher activity and selectivity, Co/S-1 generated considerably lower amounts of CH_4 and C_2 hydrocarbons, indicating that the Silicalite-1-supported Co species preferentially promoted propane dehydrogenation while suppressing undesirable C–C bond cleavage and cracking reactions. The superior performance of Co/S-1 is attributed to the structural characteristics of the MFI-type Silicalite-1 framework, which provides a relatively confined environment for Co species and can influence their dispersion and accessibility. Furthermore, the weakly acidic and relatively inert nature of S-1 compared with alumina contributes to the suppression of undesired secondary reactions.

The hydrothermal stability of the catalysts was subsequently evaluated by exposing them to steam at 600 °C for 5 min prior to the PDH reaction. Although steam treatment decreased propane conversion over both Co/S-1 and Co/Al_2O_3, the extent of deactivation was markedly different. Co/S-1 retained a propane conversion of 29.3%, compared with 47.2% before steam exposure, corresponding to approximately 62% retention of its initial conversion. In contrast, the conversion of Co/Al_2O_3 decreased from 7.4% to only 1.5%, corresponding to approximately 20% retention of its initial activity. Importantly, Co/S-1 maintained an exceptionally high propylene selectivity of 93.6% after steam exposure, only slightly lower than its initial value of 94.2%. By comparison, the propylene selectivity of Co/Al_2O_3 decreased from 86.1% to 77.3%, accompanied by an increased contribution from CH_4 and C_2 hydrocarbons. These results demonstrate that Silicalite-1 provides substantially greater hydrothermal tolerance than conventional alumina under the investigated PDH conditions. For further comparison, $Co–Pt/Al_2O_3$ exhibited excellent initial catalytic performance, achieving 64.2% propane conversion and 99.0% propylene selectivity under steam-free conditions. However, its performance deteriorated dramatically following steam exposure, with propane conversion decreasing to only 1.8% and propylene selectivity

declining to 85.3%. The catalyst therefore retained only approximately 2.8% of its initial conversion, demonstrating severe water-induced deactivation despite its high initial activity. In comparison, Co/S-1 retained 29.3% conversion and 93.6% propylene selectivity after the same steam treatment. These findings emphasize that initial catalytic activity alone is insufficient for evaluating catalysts intended for steam-containing PDH environments and that hydrothermal stability is a critical criterion for practical catalyst development. To elucidate the origin of the different steam responses, in situ DRIFTS measurements were conducted to probe water adsorption and desorption on Co–Pt/Al_2O_3 and Co/S-1 at 600 °C. The alumina-supported catalyst exhibited intense hydroxyl-related bands associated with terminal OH groups, coordinated water, bridged hydroxyl species, and molecularly adsorbed water. Water adsorption rapidly reached saturation, while substantial hydroxyl species remained on the surface even after 30 min of N_2 purging, demonstrating strong and persistent water–alumina interactions. The presence of Co–Pt further modified the hydroxylation behavior, suggesting the formation of additional hydroxyl species associated with Co–O–Al environments and strong interactions between water-derived hydroxyl groups and the catalyst surface. Such persistent hydroxyl species can block catalytically accessible sites and contribute to the severe activity loss observed after steam exposure. In contrast, Co/S-1 exhibited substantially weaker water adsorption under identical conditions. Only weak hydroxyl-related spectral features were observed, and the adsorbed OH species decreased rapidly during subsequent N_2 purging. The hydroxyl species were almost completely removed within approximately 10 min, indicating that the interaction between water and the Silicalite-1 surface was weak and readily reversible. This weak interaction with water is attributed to the hydrophobic nature of the Silicalite-1 framework and provides a plausible explanation for the superior hydrothermal stability of Co/S-1. By limiting water adsorption and facilitating rapid desorption of water-derived hydroxyl species, the S-1 support can minimize persistent hydroxyl accumulation around Co active sites and thereby preserve the catalytic environment under steam-containing conditions.

Overall, the results demonstrate that Silicalite-1 is a highly promising support for developing steam-resistant Co-based PDH catalysts. Co/S-1 combines substantially higher activity and propylene selectivity than Co/Al_2O_3 under steam-free conditions with significantly improved resistance to steam-induced deactivation. Most importantly, the retention of 29.3% propane conversion and 93.6% propylene selectivity after high-temperature steam exposure, together with the weak and reversible water–surface interaction observed by DRIFTS, establishes a clear relationship between the hydrophobic character of S-1 and the enhanced hydrothermal stability of the Co catalyst. These findings highlight the potential of Co/S-1 as a robust catalyst for PDH processes involving steam-containing environments, particularly for fast fluidized-bed reactor configurations where resistance to water-induced deactivation is essential.

References

[1]. J. J. H. B. Sattler. et al. “Catalytic Dehydrogenation of Light Alkanes on Metals and Metal Oxides,” 2014,

[2] Y. Dai et al. pp. 5590–5630, 2021,

[3] C. Song, et al. *Chem. Eng. J.*, vol. 440, no. January, p. 135860, 2022,

[4] D. Han, et al. *Microporous Mesoporous Mater.*, vol. 352, no. December 2022, p. 112516, 2023,

[5] Q. Lin *et al.*, “Atomic layer deposition of single atomic cobalt as a catalytic interlayer for lithium−sulfur batteries,” *ACS Appl. Energy Mater.*, vol. 3, no. 11, pp. 11206–11212, 2020,

[6] S. Jonibek *et al.*, “Applied Catalysis B : *Appl. Catal. B Environ. Energy*, vol. 383, no. September 2025, p. 126036, 2026,

[7] A. S. Ivanova *et al.*, “Applied Catalysis B : vol. 97, pp. 57–71, 2010,

[8] F. Dubray *et al.*, “The challenge of silanol species characterization in,” pp. 1125–1133, 2022,

ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО И ЛАЗЕРНОГО ОТЖИГА НА СОСТАВ И СТРУКТУРУ ИОННО-ИМПЛАНТИРОВАННЫХ Si(111) И CdSe(111)

Умирзаков Б.Е., Донаев С.Б., Ширинов Г.М., Абдуваитов А.А., Мирзаева Р.С.
Ташкентский государственный технический университет им. Ислама Каримова e-mail: ruhsoramirzayeva7@gmail.com

Ионная имплантация является одним и наиболее эффективных методом целенаправленной модификации поверхностных свойств твердых тел. Бомбардировка поверхности материалов ионами низких энергии $E_0 = 0{,}5 \div 5$ кэВ сопровождается нарушением кристаллической структуры, обусловленной как смещением атомов решетки, так и накоплением атомов легирующего элемента. При этом толщина нарушенного слоя определяется как параметрами ионного пучка (тип ионов, энергия, плотность тока и т.д.), так и материалом мишени [1-2].

Для направленной модификации структуры, состава и свойств приповерхностных слоев в большинстве случаев требуется постимплантационный высокотемпературный или лазерный отжиг. В последние годы для отжига ионно-легированных полупроводников часто используется импульсные лазерные пучки. К достоинствам лазерного отжига можно отнести: локальность, термическое воздействие преимущественно на легированный слой, его чистота и малая длительность процесса воздействия. В данной работе впервые изучены влияния постимплантационного отжига на состав и профили распределения атомов легирующего элемента по глубине Si и CdSe, имплантированных иона Cd и Zn с дозой насыщения $D_H \approx 6 \cdot 10^{16}$ см$^{-2}$.

Отжиг ионно-легированных образцов осуществлялся в условиях высокого вакуума ($P \approx 10^{-7}$ Па), в том же приборе, где проводилась ионная имплантация. Методика проведения температурного прогрева и лазерного облучения описаны в работах [3-5]. Лазерный отжиг осуществлялся в основном инфракрасным излучением с длиной волны 1,06 мкм и длительностью импульсов меньше 10нс.

Прогрев при каждой температуре проводился в течение 30 мин. Измерения производились после остывания мишени до комнатной температуры.

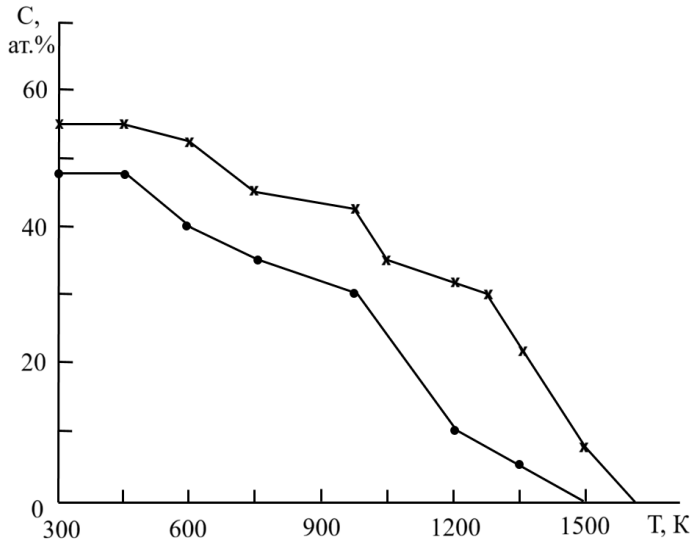
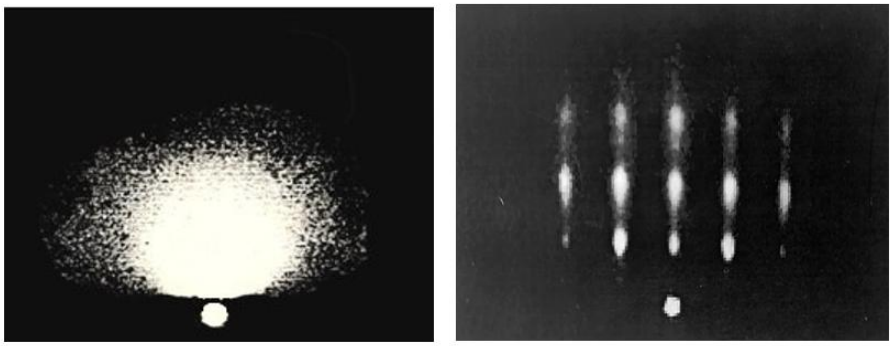


Рис.1. Зависимой концентрации C_{Ca} (кривая 1) и C_{Zn} (кривая 2) температуры для Si, имплантированных ион Ca и Zn с $E_0 = 0{,}5$ кэВ. Доза ионов $D = 6 \cdot 10^{16}$ см$^{-2}$.

На рис. 1. показано изменение поверхностной концентрации легирующих атомов в зависимости от температуры для образцов Si, легированных ионами Ca^+ и Zn^+ с $E_0 = 0{,}5$ кэВ при дозе насыщения.



а) б)

Рис.2. Электронграмма поверхности Si (111), имплантированного ионами Ca^+ с E_0 = 0,5 кэВ до (а) и после отжига при T = 1150 К.

При этом приповерхностные ион Si(111) полностью аморфизируется (рис.2,а). Видно, что кривые зависимости C(T) характеризуются тонкой структурой. Наблюдаемая структура в основном обусловлена процессами диффузии, миграции, десорбции примесных атомов образованием соединений, и

она наиболее четко выражена для кремния, легированного ионами кальция. Анализ полного спектра оже-электронов показал, что при T = 300 K поверхностных слоях в основном содержится несвязанных атомы Si, и нестехиометрических соединений типа Ca+Si. Доля последних составляла 30 - 40 %. При T ≤ 600 K с ростом температуры концентрация Ca на поверхности вследствие некоторый десорбции Ca немного уменьшается 2-5 ат.%. В интервале T ≈ 600 ÷ 750 K вследствие миграции и диффузии “избыточных” (несвязанных с кремнием) атомов кальция, концентрация последних на поверхности заметно уменьшается. В интервале T = 750 ÷ 1000 K поверхностная концентрация кальция существенно не изменяется и составляет ~ 40 ÷ 45 ат. %. При этом ~ 80% атомов Ca образует химический связь с атомами Si. Преимущественно образуется соединения типа CaSi и $CaSi_2$. Увеличение T до ~1050 K приводит к уменьшению до 35 ат. % Ca, что связано с заметным испарением атомов Ca с поверхностных слоев. В интервале T ≈ 1050 ÷ 1250 K на поверхности и в приповерхностном слое, концентрации Ca составляет ~ 30 ÷ 35 ат. % и все эти атомы входят в химическую связь Ca с атомами Si и образуется соединения типа $CaSi_2$. Результаты дифракции быстрых электронов показывать, что тонкая пленка $CaSi_2$ имеет структуру характерная для монокристаллов (рис.2, б). С дальнейшим ростом T происходит интенсивная десорбция Ca и, следовательно, его концентрация на поверхности быстро уменьшается и при T = 1350 K приближается к нулю. Аналогичные этапы происходили и в случае имплантации ионов Zn в Si. При этом соединение типа $ZnSi_2$ образовалось в интервале T ≈ 750 ÷ 900 K.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zhang C. et al. Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2021.
2. Lee K. W., et al. Materials Science in Semiconductor Processing. 2020. Vol. 117. 105164.
3. Surface and Coatings Technology. 2020. Vol. 388. 125561.
4. Allen F. I. A Beilstein Journal of Nanotechnology. 2021. Vol. 12. P. 633-664.
5. Das A., Basak D. ACS Applied Electronic Materials. 2021. Vol. 3. No. 9. P. 3693-3714.

PARTICLE-SIZE-CONTROLLED SILICALITE-1 AS A SUPPORT FOR SELECTIVE COBALT-CATALYZED PROPANE DEHYDROGENATION

Muxamadqulov Shokhboz Jonibek Ugli, Ashurov Rustam Khotamovich
Arifov Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Uzbekistan Academy of Sciences.
muhammadqulovshahboz@gmail.com

The increasing demand for propylene has stimulated the development of efficient and selective on-purpose production technologies, among which propane dehydrogenation (PDH) has emerged as an attractive alternative to conventional processes. In particular, fast fluidized-bed reactors offer significant advantages for PDH because of their short catalyst residence time, efficient heat transfer, and potential for continuous catalyst regeneration. However, the physicochemical properties and particle size of the catalyst support play a critical role in determining fluidization behavior, mass transport, active-site accessibility, and catalytic performance. In this study, Silicalite-1 (S-1) was systematically synthesized with controlled crystal sizes and employed as a support for Co-based catalysts for PDH. The objective was to establish the relationship between S-1 particle size, structural and morphological properties, and the resulting catalytic performance, while also evaluating the synthesized support against a commercially available Silicalite-1.

Silicalite-1 was synthesized using a hydrothermal method by systematically varying the TPAOH and H_2O contents while maintaining a constant TEOS concentration. This approach enabled effective control of the crystal size over a broad range, producing S-1 particles with average sizes of approximately 100, 300, 1000, 2500, and 6000 nm. Scanning electron microscopy (SEM) confirmed that the synthesized materials possessed relatively uniform particle morphologies with well-defined crystal dimensions, demonstrating the effectiveness of the synthesis strategy in controlling particle size. In contrast, SEM analysis of the commercial Silicalite-1 revealed a broad and non-uniform particle-size distribution together with comparatively poor crystallinity. X-ray diffraction (XRD) analysis further confirmed the formation of the characteristic MFI zeolite structure in all synthesized samples,

with diffraction peaks at approximately 7.9°, 8.9°, 23.0°, 23.7°, and 24.5°. The synthesized materials exhibited substantially higher crystallinity than the commercial S-1, whose characteristic diffraction peaks showed approximately 40% lower intensity. These results demonstrate that controlled hydrothermal synthesis can simultaneously provide tailored particle size, uniform morphology, and high structural crystallinity. The textural properties of the synthesized S-1 materials were also strongly dependent on crystal size. As the average particle size increased from 100 to 6000 nm, the BET surface area decreased from 481.3 to 409.6 $m^2\ g^{-1}$, while the pore volume decreased from 0.46 to approximately 0.19 $cm^3\ g^{-1}$. The smaller S-1 crystals exhibited greater nitrogen uptake, particularly at high relative pressures, which was attributed primarily to interparticle voids associated with the aggregation of smaller crystals rather than the generation of intrinsic mesoporosity within the MFI framework. Despite these changes in external textural properties, all synthesized samples retained the characteristic microporous MFI structure, indicating that particle-size modification primarily affected the external morphology and textural characteristics while preserving the intrinsic zeolite framework.

Co/S-1 catalysts were subsequently prepared by incipient wetness impregnation using $CoCl_2 \cdot 6H_2O$, and the influence of support particle size on PDH performance was systematically investigated. A pronounced and non-monotonic relationship between S-1 particle size and catalytic behavior was observed. The catalyst supported on 100 nm S-1 exhibited the highest propylene selectivity of 91.0%, although propane conversion was limited to 22.5%. Increasing the support particle size to 300 nm substantially increased propane conversion to 69.8%, but the propylene selectivity decreased markedly to 64.7%, indicating an enhanced contribution from secondary reactions and light-hydrocarbon formation. Further increasing the particle size to 1 and 2.5 μm resulted in propane conversions of 44.3% and 40.0%, respectively, while propylene selectivity increased to 82.5% and 85.9%. The 6 μm-supported catalyst exhibited 52.1% conversion with 79.9% propylene selectivity. These results demonstrate that the relationship between support particle size and catalytic performance cannot be

described by a simple monotonic trend and instead reflects the combined effects of Co-species dispersion, active-site accessibility, external surface area, and intracrystalline mass transport.

Among the synthesized supports, the approximately 1 μm S-1 was identified as particularly suitable for catalyst preparation and potential fluidized-bed applications because its particle size provides an appropriate basis for producing spherical catalyst particles of approximately 100 μm. To further evaluate the effect of support quality, a 1 wt% Co/S-1 catalyst prepared using the synthesized 1 μm S-1 was compared directly with a corresponding catalyst prepared using commercial Silicalite-1 under identical PDH conditions. The synthesized S-1-supported catalyst achieved 50.7% propane conversion with a high propylene selectivity of 95.1%, whereas the catalyst based on commercial S-1 exhibited a higher initial propane conversion of approximately 65.9% but substantially lower propylene selectivity and a greater contribution from secondary products. Thus, the higher conversion obtained with the commercial support did not translate into superior overall catalytic performance. The enhanced selectivity of the synthesized S-1-supported catalyst is attributed to its controlled particle size, uniform morphology, and high crystallinity, which can provide a more homogeneous environment for Co species and favor selective propane dehydrogenation while suppressing undesirable secondary reactions such as C–C bond cleavage. Overall, this study demonstrates that precise control of Silicalite-1 particle size and morphology is an effective strategy for tailoring the catalytic behavior of Co-based catalysts for propane dehydrogenation. The combination of SEM, XRD, and textural analyses confirms that the synthesized S-1 materials possess controlled crystal dimensions, uniform morphology, and high crystallinity, in clear contrast to the broader particle-size distribution and lower crystallinity of the commercial material. More importantly, these structural characteristics translate into a favorable activity–selectivity balance in PDH. The 1 wt% Co/S-1 catalyst supported on synthesized S-1 achieved 50.7% propane conversion and 95.1% propylene selectivity, highlighting the potential of

controlled S-1 synthesis for developing highly selective Co-based catalysts suitable for future fluidized-bed PDH applications.

References

1. Song C, Park H, Choi WC, Park YK, Park DS. Chem Eng J [Internet]. 2022;440(January):135860.

2. Qu Z, Sun Q. Advances in zeolite-supported metal catalysts for propane dehydrogenation. 2022;3095–115.

3. Thissen NFW, Verheijen MA, Houben RG, van der Marel C, Kessels WMM, Bol AA. Carbon N Y [Internet]. 2017;121:389–98.

4. Chemistry E. The synthesis of discrete colloidal particles of TPA-silicalite-1. 1994;14:557–67.

5. Hong D young, Kim HS, Zhang H, Kang SK, Tikue ET, Lee PS. Si – OH Nest and Al Distribution of Silicalite-1 Core / Al-ZSM-5. 2021;1–15.

6. Reinholdt MX, Kaliaguine S, Che R. Silicalite-1 / SPEEK composite membranes : influence of the zeolite particles loading or size on proton conductivity and water uptake w. 2011;2573–83.

7. Wu L, Ren Z, He Y, Yang M, Yu Y, Liu Y, et al. Atomically Dispersed Co 2 + Sites Incorporated into a Silicalite - 1 Zeolite Framework as a High-Performance and Coking-Resistant Catalyst for Propane Nonoxidative Dehydrogenation to Propylene. 2021;

8. Long J, Tian S, Wei S, Lin H, Shi G, Zong X, et al. Appl Surf Sci [Internet]. 2023;614(December 2022):156238.

9. Liu L, Li H, Zhou H, Liu L, Li H, Zhou H, et al. CHEMPR [Internet]. 9(3):637–49.

10. Jonibek S, Song D, Won S, Ngoc A, Cao T, Hyuk K, et al. Applied Catalysis B : 2026;383(September 2025):126036.

SYNTHESIS AND RAMAN SPECTROSCOPIC CHARACTERIZATION OF CARBON NANOTUBES ON A Si (100)/SiO_2/Al_2O_3/Fe/Ni SUBSTRATE

Mirzakandova Sokhibjamol Kholmumin kizi
Institute of Ion plasma and laser technologies, Tashkent, Uzbekistan
e-mail: sohi9093@gmail.com

Introduction. Carbon nanotubes (CNTs) are one-dimensional carbon nanostructures with unique electrical, thermal, mechanical, and physicochemical properties. These characteristics make CNTs promising for applications in nanoelectronics, sensors, composite materials, energy storage, and catalysis. Among different synthesis techniques, chemical vapor deposition (CVD) is widely used because it enables CNT growth directly on a substrate and allows the synthesis conditions to be controlled. Transition metals such as Fe and Ni are commonly used as catalysts for CNT growth. During CVD, these metals provide active sites for the decomposition of carbon-containing species and subsequent formation of graphitic carbon structures. The interaction between the catalyst and substrate also plays an important role in CNT growth. Therefore, intermediate layers such as SiO_2 and Al_2O_3 can be introduced to modify the catalyst–substrate interaction and influence the formation of catalytic nanoparticles.

In this work, a Si(100)/SiO_2/Al_2O_3/Fe/Ni multilayer structure was fabricated by physical vapor deposition (PVD) and subsequently used for CNT synthesis by CVD. The structural characteristics of the synthesized carbon material were investigated using Raman spectroscopy.

Experimental. A Si(100) substrate was used for the experiment. A 20 nm-thick SiO_2 layer was formed on the silicon surface. Subsequently, an Al_2O_3 layer was deposited by PVD at a current of 60 mA for 60 s. Fe and Ni were then deposited sequentially as catalytic layers using the same PVD system. The deposition time was 5 s for Fe and 5 s for Ni, resulting in the multilayer structure:

Si(100)/SiO_2(20 nm)/Al_2O_3/Fe/Ni.

After PVD deposition, the sample was subjected to CVD for 20 min at a voltage of 30 V to synthesize carbon nanotubes. Following the synthesis process, Raman spectroscopy was used to characterize the carbon structures formed on the substrate.

Results and Discussion. The Raman spectrum of the synthesized sample is shown in Figure 1. Three characteristic bands of sp^2-bonded carbon can be observed: the D band at approximately 1350 cm^{-1}, the G band at approximately 1580 cm^{-1}, and the 2D band at approximately 2700 cm^{-1}.

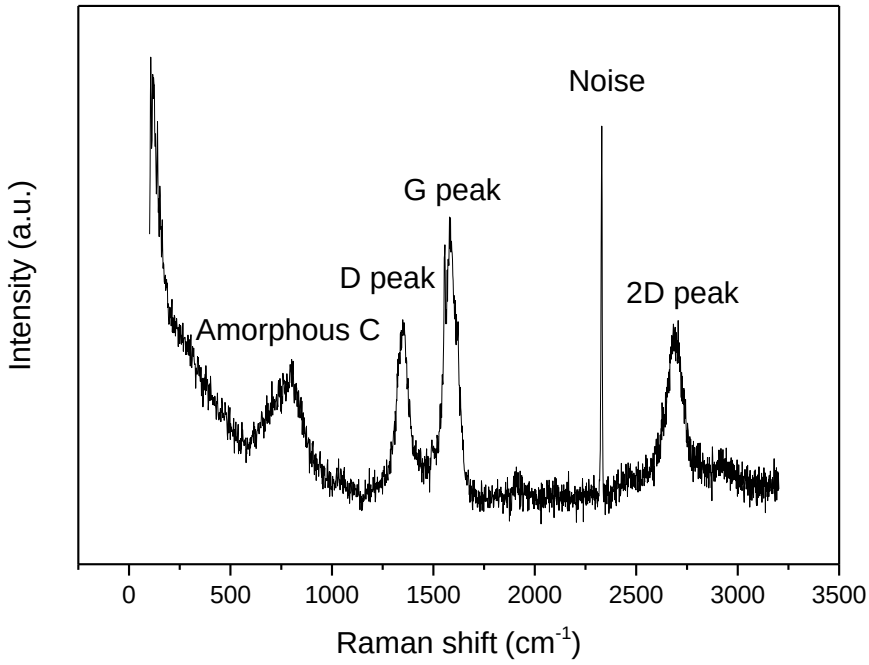


Fig. 1. Raman spectrum of carbon nanostructures grown on a Si(100)/SiO_2/Al_2O_3/Fe/Ni substrate via CVD

The D band is associated with structural defects and disorder in the carbon lattice, whereas the G band corresponds to the in-plane vibration of sp^2-hybridized carbon atoms and is characteristic of graphitic structures. In the investigated sample, the G band exhibits a higher intensity than the D band, indicating a relatively well-ordered graphitic carbon structure. Qualitatively, the spectrum therefore corresponds to an ratio below unity.

The presence of the 2D band provides additional evidence for the formation of graphitic sp^2-carbon structures. A broad contribution attributed to disordered or

amorphous carbon is also observed in the spectrum, indicating that the CVD process produced both ordered graphitic carbon and a certain amount of disordered carbon. The formation of these carbon structures can be associated with the Fe/Ni catalytic system. During CVD, the deposited Fe and Ni layers act as catalytic sites for the decomposition of carbon-containing species and the subsequent formation of graphitic carbon. The Al_2O_3 intermediate layer may also affect the interaction between the catalyst and substrate and consequently influence the formation of catalytic sites.

The Raman results confirm the formation of graphitic carbon nanostructures after the CVD process. However, Raman spectroscopy alone cannot unambiguously distinguish CNTs from other sp^2-carbon structures. Therefore, SEM or TEM characterization is required to directly confirm the nanotube morphology and determine parameters such as nanotube diameter and length.

Conclusion. A Si(100)/SiO_2/Al_2O_3/Fe/Ni multilayer catalytic system was fabricated using PVD and subsequently subjected to CVD for 20 min at 30 V. Raman spectroscopy revealed characteristic D, G, and 2D bands at approximately 1350, 1580, and 2700 cm^{-1}, respectively. The higher intensity of the G band compared with the D band indicates a relatively ordered sp^2-hybridized graphitic structure, while the D band confirms the presence of structural defects. The 2D band further supports the formation of graphitic carbon.

Thus, the Raman analysis demonstrates the formation of sp^2-hybridized graphitic carbon nanostructures on the Fe/Ni catalytic system. Complementary SEM or TEM analysis is necessary for definitive morphological confirmation of the synthesized CNTs.

ЭФФЕКТ ФАРАДЕЯ И МАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ МОНОКРИСТАЛЛА KTb_3F_{10}

Малышева М.Е., Реймбаева С.Р.
Национальный Университет Узбекистана
mariyaevg@mail.ru, reymbayeva71@mail.ru

Среди редкоземельных материалов на сегодняшний день наиболее перспективным является фторидный кристалл со структурой флюорита, активированный редкоземельными ионами тербия. Монокристалл KTb_3F_{10} был успешно введен в использование в качестве оптического изолятора в мощных лазерах. Таким образом, он рассматривается как альтернатива тербий-галлиевому гранату(TGG), который в настоящее время является основным материалом для оптических изоляторов, основанных на эффекте Фарадея [1]. Поэтому исследование магнитных и магнитооптических свойств данного редкоземельного соединения является актуальной задачей.

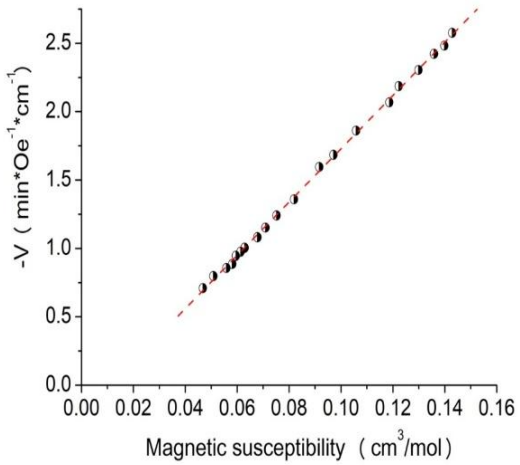


Рис.1 Зависимость константы Верде V кристалла KTb_3F_{10} от магнитной восприимчивости для длины волны 511 нм.

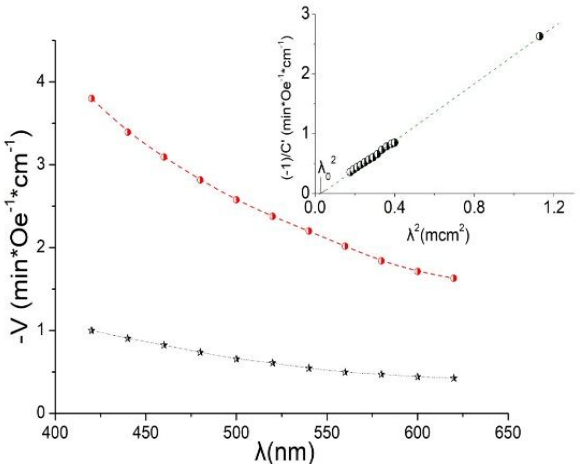


Рис.2 Дисперсионная зависмость константы Верде при температуре 300К(краная линия) и 90К(черная линия) в магнитном поле 1.25 kOe.

На рис.1 приведена зависимость константы Верде V кристалла KTb_3F_{10} от магнитной восприимчивости для длины волны 511 нм. Из анализа экспериментальной зависмости на рис. 1 следует, что в пределах

экспериментальной погрешности (~3%) данная зависмость является линейной, что позволяет представить выражение для константы Верде в парамагнитных РЗ соединениях в виде:

$$V = -\frac{\omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)}\left(\frac{2\omega_0 A}{h(\omega_0^2 - \omega^2)} + B + C_p\chi\right) \qquad (1)$$

Первый член в квадратных скобках выражения (1) – «диамагнитный» – связан с зеемановским расщеплением в магнитном поле уровней основного и возбуждённого мультиплетов РЗ иона, между которыми происходит переход. Второй член – член «смешивания» – возникает вследствие примешивания к волновым функциям основного состояния волновых функций близлежащих мультиплетов. Третий член в квадратных скобках – «парамагнитный» – обусловлен разной заселённостью подуровней основного мультиплета РЗ иона. Из анализа линейных зависимостей аналогичных рис. 1,построенных для определенного набора длин волн видимого диапазона и зависимостей, приведенных на рис 2, было получено значение коэффициента C_p=-8.8*10^3мин∗$см^{-1}$∗Oe^{-1}(формула (1)), характеризующего парамагнитный вклад в константу Верде исследуемого фторидного кристалла. Значение парамагнитной постоянной Верде C_p почти в 2 раза превышает соответствующую величину C_p, определённую из измерения ЭФ в гранате TbGaG [2]. На наш взгляд, возможной причиной подобного различия в значениях может служить существенное влияние низкосимметричного кристаллического поля на возбуждённые состояния РЗ-ионов Tb^{3+} в структуре KTb_3F_{10}. Соединение KTb_3F_{10} (KTF) кристаллизуется в структуре пространственной группы Fm-3m, Z = 8 (т.е. в структуре флюорита). Асимметричная элементарная ячейка содержит один редкоземельный катион Tb^{3+}, один анион K^+ и два различных иона фтора [3-5]. Кристаллическую структуру можно описать полианионными кластерами из шести квадратных антипризм TbF_8. Редкоземельные катионы Tb^{3+} в данной кристаллической структуре флюорита связаны с восемью ионами фтора [5], образуя квадратные антипризмы, что приводит к возникновению эквивалентных

тетрагональных оптических центров, характеризующихся точечной группой симметрии C_{4v} [5]. Благодаря воздействию лигандного (кристаллического) более низкой симметрии по сравнению с кристаллическим полем D_2 в кристалле TbGaG вырождение различных энергетических состояний ионов Tb^{3+}, легированных в матрицу KTF, снимается не полностью, а лишь частично. По-видимому, «сильное» кристаллическое поле приводит к изменению сил осцилляторов разрешённых оптических переходов и, естественно, к изменению величины их вклада в ЭФ.

Список использованной литературы

[1] M.J. Weber, “Faraday Rotator Materials For Laser Systems” ,in: Proc. SPIE 0681, Laser and Nonlinear Optical materials, (1987).

[2] D. Vojna, M. Duda, Ryo Yasuhara, O. Slezák, W. Schlichting, K. Stevens, H. Chen, A. Lucianetti, T. Mocek, “Verdet constant of potassium terbium fluoride crystal as a function of wavelength and temperature“ , Opt. Lett. **45** (7), 1683 (2020).

[3] P. Pues, F. Baur, S. Schwung, D. Rytz, R. Pottgen, C. Paulsen, O. Janka, B. Rendenbach, D. Johrendt, T. Jüstel. J. Lumin., “Temperature and time-dependent luminescence of single crystals of KTb_3F_{10}”, **227,** 117523 (2020).

[4]Karimov, D.N.; Buchinskaya, I.I.; Arkharova, N.A.; Ivanova, A.G.; Savelyev, A.G.; Sorokin, N.I.; Popov, P.A., “Growth peculiarities and properties of KR_3F_{10} (R = Y, Tb) single crystals”, Crystals, **11(3)**, 285,(2021).

[5] N.V. Podberezskaya, O.G. Potapova, S.V. Borisov, Y.V. Gatilov, “Crystal structure of KTb_3F_{10} cubic packing of the $[Tb_6F_{32}]_{14}$−polyanions”, J. Struct. Chem., **17** (5), 815 (1976).

ТАБИИЙ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРЛАРНИНГ СПЕКТРАЛ ХУСУСИЯТЛАРИ

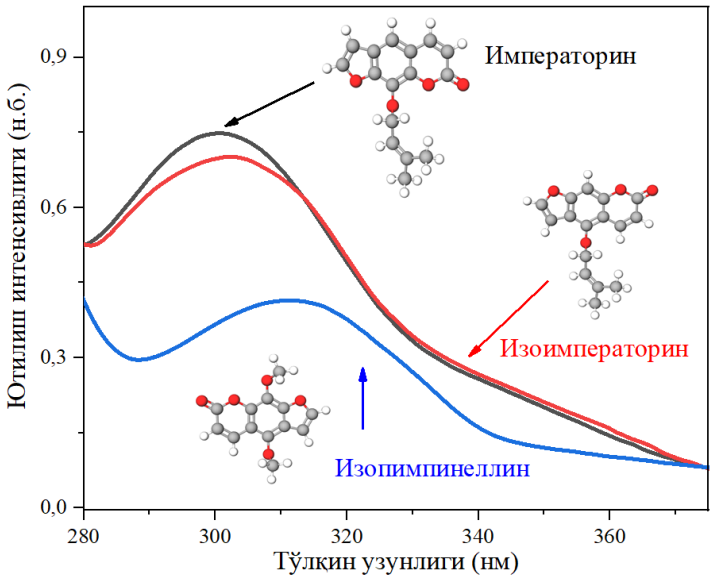
Имомов Муҳибжон Хабибжонович
Ион плазма ва лазер технологиялари институти

Фотодинамик терапия (ФДТ) фотосенсибилизатор (ФС) ва нурланиш таъсири асосида патологик тўқималарга селектив фотобиологик таъсир кўрсатувчи усул ҳисобланади. Унинг самарадорлиги фотосенсибилизаторнинг спектрал ва фотокимёвий хусусиятларига боғлиқ [1,2]. Сўнгги йилларда табиий фотосенсибилизаторлар биологик фаоллиги ва янги манбаларни излаш имконияти туфайли қизиқиш уйғотмоқда. Синтетик ФСларга нисбатан табиий келиб чиқишга эга бўлган бирикмалар паст токсиклиги ва биологик тизимларда нисбатан юқори селективлик намоён қилиши билан ажралиб туради [3]. Шу нуқтаи назардан, Apiaceae оиласига мансуб Ferula L. туркуми ўсимликларидан ажратиладиган фурокумаринлар табиий фотосенсибилизаторлар сифатида катта аҳамиятга эга [4].

Ушбу ишда Ferula assa-foetida L., F. foetidissima Regel & Schmalh. ва F. dissecta Ledeb. ўсимликларидан ажратиб олинган императорин, изоимператорин ва изопимпинеллиннинг оптик хусусиятлари ўрганилди.

Тадқиқотлар хона ҳароратида этанолда тайёрланган $1*10^{-5}$ моль/л концентрацияли эритмаларда 10 мм кварц кюветаларда амалга оширилди.
Ютилиш спектрлари Shimadzu UV-1280 спектрофотометрида, флуоресценция (ФЛ) спектрлари эса Shimadzu RF-6000 спектрофлуориметри ёрдамида қайд этилди. Оптик йўл узунлиги 10 мм бўлган кварц кюветалардан фойдаланилди. ФЛ спектрларини қайд этишда қўзғатиш тўлқин узунлиги ҳар бир бирикманинг ютилиш максимумига мувофиқ танланди.

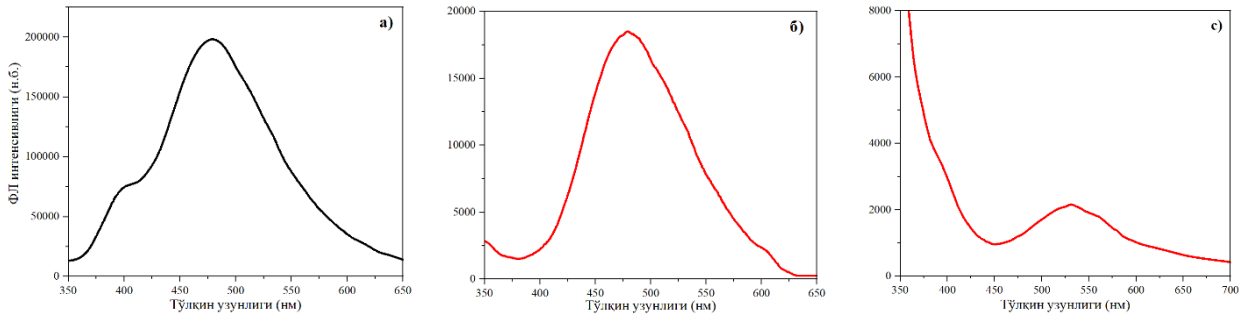
Тадқиқ қилинган бирикмаларнинг асосий ютилиш полосалари 280-320 нм соҳасида кузатилди (1-расм). Императорин ва изоимператорин учун 245-250 ҳамда 300-310 нм, изопимпинеллин учун эса 300-320 нм соҳаларда максимумлар қайд этилди.



1-расм. Императорин, изоимператорин ва изопимпинеллиннинг ютилиш спектрлари.

Кузатилган спектрал хусусиятлар фурокумарин скелетининг умумий тузилиши билан боғлиқ бўлиб, полосалар интенсивлигидаги фарқлар молекуляр тузилиш хусусиятларининг оптик хоссаларга таъсирини кўрсатади.

ФЛ спектрларида императорин ва изоимператорин учун 475-490 нм, изопимпинеллин учун эса 515-530 нм соҳаларда кенг эмиссия полосалари кузатилди (2-расм).



2 расм. Императорин (а), изоимператорин (б) ва изопимпинеллиннинг (с) флуоресценция спектрлари

Ютилиш ва эмиссия максимумлари орасидаги Стокс силжиши тахминий ҳисоблашларга кўра барча бирикмалар учун 12000-13000 $см^{-1}$ ни ташкил этиб, қўзғалган ҳолатда сезиларли геометрик релаксация жараёни кечишидан далолат беради. Изопимпинеллин спектрида 350-390 нм соҳасида кузатилган юқори интенсивлик эҳтимол Рэлей сочилиши ёки қурилманинг улуши билан боғлиқ. Изопимпинеллиннинг эмиссия максимумининг (515-530 нм) императорин ва изоимператорингa нисбатан (475-490 нм) узун тўлқин томонга силжиши унинг

таркибидаги қўшимча метокси гуруҳлари ҳисобига кенгайган π-электрон тизими билан боғлиқ бўлиши мумкин.

Асосий ютилиш полосаларининг 300-320 нм соҳасида жойлашиши ушбу бирикмаларни юзаки фотобиологик жараёнларда қўллаш имкониятини кўрсатади, бироқ UV нурланишнинг тўқималарга кириб бориш чуқурлиги чекланганлиги уларнинг чуқур жойлашган патологик ўчоқларни ФДТда қўллашини чеклайди. ФЛ хусусиятлари эса уларни оптик маркер сифатида ўрганиш имкониятини кўрсатади.

ФЛ интенсивлиги фотосенсибилизация самарадорлигини бевосита белгиламайди. ФДТ нуқтаи назаридан мазкур бирикмаларнинг синглет кислород ҳосил қилиш самарадорлиги, триплет ҳолат хусусиятлари ва фотосенсибилизация квант чиқишини қўшимча аниқлаш талаб этилади.

Ferula туркуми ўсимликларидан ажратилган учта фурокумариннинг оптик хусусиятлари ўрганилиб, уларнинг ютилиш ва ФЛ максимумлари молекуляр тузилиши билан боғлиқ ҳолда фарқланиши аниқланди. Бирикмаларнинг асосий ютилиш полосалари 280-320 нм соҳасида, ФЛ максимумлари эса мос равишда 475-490 ва 515-530 нм соҳаларда кузатилди. Ютилиш ва эмиссия орасидаги спектрал силжиш қўзғалган ҳолатдаги релаксация жараёнларидан далолат беради. Олинган натижалар мазкур табиий бирикмаларнинг юзаки фотобиологик жараёнлар ва оптик тадқиқотларда қўллаш имкониятларини кўрсатади. Бироқ уларнинг ФДТ учун ҳақиқий самарадорлигини баҳолаш учун $^1O_2$ ҳосил бўлиши, фотостабиллик ва биологик фаолликни қўшимча ўрганиш зарур.

Фойдаланилган адабиётлар

1. Correia S., et al. Pharmaceutics, 2021, 13, 1332.
2. Gunaydin G., et al. Photodynamic therapy and photosensitizers. Frontiers in Chemistry, 2021, 9, 691–697.
3. Mikulich A.V., et al. Photochemistry and Photobiology, 2024, 100(6), 1833-1847.
4. Tchaikovskaya O. N. et al. Migration of excitation energy in furocoumarins. Frontiers in Chemistry. 2021, T. 9. 754950.

PHOTOLUMINESCENCE AND OPTICAL PROPERTIES OF SOL–GEL SPIN-COATED NiO THIN FILMS ANNEALED AT 400 °C

Khudoykulov J.Sh.[1], Abdumutalov M.X.[1], Odilova N.O.[1], Azimova M.Sh.[1]*
[1]National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek, Tashkent, Uzbekistan
xjavokhir1799@gmail.com

Introduction. Nickel oxide (NiO) is one of the few intrinsically p-type wide-band-gap oxides (3.4 - 4.0 eV) and is used in transparent p–n heterojunctions, ultraviolet photodetectors and as a hole-transport layer in perovskite solar cells [1]. Its p-type conductivity originates from native non-stoichiometry: nickel vacancies (V_{Ni}) and interstitial oxygen (O_i) act as acceptors, oxygen vacancies (V_O) and nickel interstitials (Ni_i) as compensating donors [2]. These defects create intra-gap states that appear as sub-band-gap absorption and broad visible photoluminescence (PL). The effect of annealing temperature is well documented [3], whereas that of annealing duration at a fixed temperature has received far less attention. Here the absorption edge and the 300 K PL of NiO films annealed at 400 °C for 1 h and for 2 h are compared and the PL spectra are resolved into Gaussian components.

Experimental. NiO films were deposited on fused-silica (SiO_2) substrates by sol–gel spin coating: ten layers were applied successively, each dried at 250 °C for 15 min, and annealed in an open-air muffle furnace at 400 °C for 1 h and for 2 h. The absorption coefficient α from room-temperature transmission was analysed with the Tauc relation [4]

$$(\alpha h\nu)^n = A(h\nu - E_g), \qquad (1)$$

with n = 2 for a direct allowed transition; the optical gap E_g follows from extrapolating the linear part of $(\alpha h\nu)^2$ to zero. PL was excited with a 320 nm laser; the 300 K spectra, transferred to the photon-energy domain by the Jacobian transformation $I(E) = I(\lambda)\lambda^2/hc$, were fitted by a superposition of Gaussian bands

$$I(E) = \sum_i A_i \, exp\left[-\frac{(E - E_i)^2}{2\sigma_i^2}\right], \qquad (2)$$

where $FWHM_i = 2(2\ln 2)^{1/2}\sigma_i$ and S_i is the band area normalised to the total fitted area.

Results and discussion. Linear extrapolation of the absorption edge (Fig. 1a, $R^2 > 0.996$) gives E_g = 3.63 eV for the 1 h film and 3.60 eV for the 2 h film; a 0.5 h reference film of the same series gives 3.68 eV, so the gap narrows monotonically as the anneal is

prolonged. The same tendency, reported when the annealing temperature is raised [3], is ascribed to crystallite growth and densification. Both films also show a sub-band-gap absorption band at 3.06 eV (1 h) and 3.02 eV (2 h), attributed to intra-gap defect levels.

The 300 K PL spectra (Fig. 1b) consist of a single broad, structureless emission over the whole 350–610 nm interval, i.e. purely deep-level emission; prolonging the anneal shifts its maximum from 489 to 508 nm and makes the band more symmetric.

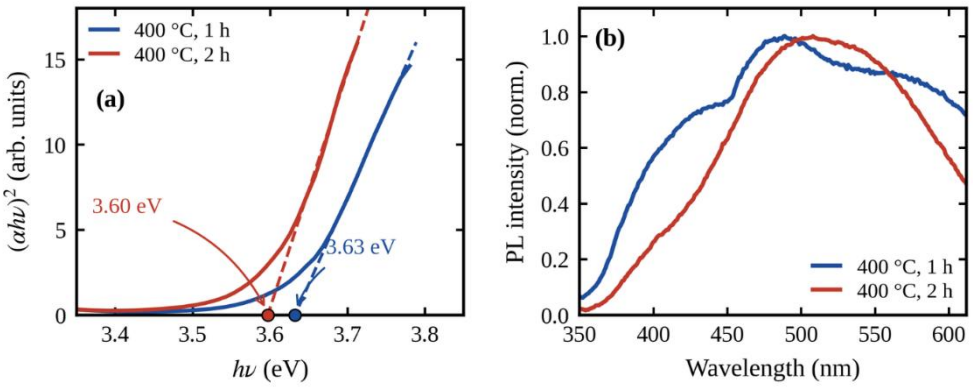


Fig. 1. (a) Tauc plots $(\alpha h\nu)^2$ with the linear extrapolations used to extract E_g; (b) normalised PL spectra measured at 300 K under 320 nm excitation.

Three Gaussians reproduce both spectra with $R^2 \geq 0.9996$ (Fig. 2, Table 1) at essentially the same energies: the same native defects are present and only their populations differ. Following the assignments established for NiO nanostructures [2], P3 (2.91–2.94 eV) is related to nickel interstitials, P2 (2.55–2.56 eV) to doubly ionised nickel vacancies and the dominant P1 (2.11–2.20 eV) to deep levels of interstitial oxygen and oxygen vacancies. P3 lies only 0.15 eV (1 h) and 0.08 eV (2 h) below the sub-band-gap absorption band, a Stokes shift small enough to place both on the same interstitial-related level.

The longer anneal halves the weight of the Ni_i band (23.7 → 12.4 %) and triples that of the V_{Ni}^{2-} band (9.6 → 30.1 %): continued oxidation in air consumes interstitial nickel and drives the film towards the cation-deficient $Ni_{1-x}O$ responsible for p-type conduction in undoped NiO [1]. P1 loses weight (66.7 → 57.5 %), shifts up by 94 meV and narrows from 0.73 to 0.50 eV, i.e. the deep-level distribution becomes more uniform, consistent with the improved crystallinity.

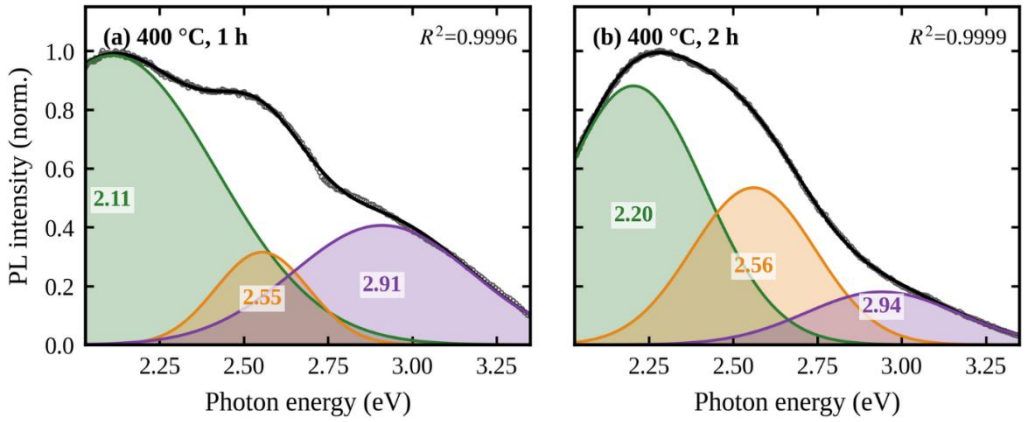


Fig. 2. Gaussian deconvolution of the 300 K PL spectra: (a) 1 h; (b) 2 h. Circles – experiment, black line – cumulative fit, shaded – individual components.

Table 1. Deconvolution parameters of the 300 K PL spectra: E_i (eV) / FWHM (eV) / S_i (%).

Band (assignment)	**400 °C, 1 h**	**400 °C, 2 h**
P1 (O_i / deep V_O)	2.11 / 0.73 / 66.7	2.20 / 0.50 / 57.5
P2 (V_{Ni}^{2-})	2.55 / 0.33 / 9.6	2.56 / 0.43 / 30.1
P3 (Ni_i)	2.91 / 0.62 / 23.7	2.94 / 0.53 / 12.4

Conclusion. Extending the anneal at 400 °C from 1 h to 2 h narrows the optical gap from 3.63 to 3.60 eV and redistributes the 300 K deep-level photoluminescence without creating new emission channels: the Ni-interstitial band is suppressed twofold, the Ni-vacancy band grows threefold and the dominant deep band narrows by 0.23 eV. Annealing in air thus shifts the defect equilibrium towards the cation-deficient, more strongly p-type state required for NiO-based UV photodetectors.

REFERENCES

1. Sato H., Minami T., Takata S., Yamada T. Thin Solid Films. – 1993. – Vol. 236, No. 1–2. – P. 27–31.
2. Gandhi A.C., Wu S.Y. Strong deep-level-emission photoluminescence in NiO nanoparticles // Nanomaterials. – 2017. – Vol. 7, No. 8. – Art. 231.
3. Ivanova T., Harizanova A., Shipochka M., Vitanov P. Materials. – 2022. – Vol. 15, No. 5. – Art. 1742.
4. Tauc J., Grigorovici R., Vancu A. Physica Status Solidi (b). – 1966. – Vol. 15, No. 2. – P. 627–637.

GROWTH, STRUCTURE, AND PHOTOCATALYTIC PERFORMANCE OF C_{60} FULLERENE NANOTUBES

*Keneshbekova Aruzhan[1], Liu Guowei[1], Wang Shunuo[1], Zhang Yang[1], Makhmanov Urol[2] and Jiang Xiaohong[1]**

[1]International Chinese-Belorussian Scientific Laboratory on Vacuum-Plasma Technology, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China

[2]Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies named after U.A. Arifov, Uzbekistan Academy Sciences, 33 Durmon Yuli str., Tashkent, 100125, Uzbekstan

**E-mail: jiangxh24@njust.edu.cn*

C_{60} fullerene nanotubes (FNTs) were prepared by mesitylene/isopropyl alcohol liquid-liquid interfacial precipitation and observed for six days. SEM revealed isolated rods on day 1, a dense network on day 2, and open-ended tubes from day 3. Their diameter remained nearly constant while the population-averaged projected length decreased. XRD and Raman spectroscopy identified crystalline molecular C_{60}, and SEM-EDS detected 99.87 wt% carbon. Representative tubes were 6.13 ± 1.93 μm long and 1.02 ± 0.35 μm wide. Following 30 min of dark equilibration, 5 mg of FNTs degraded 40% of crystal violet (CV) within 120 min under $\lambda > 420$ nm irradiation, demonstrating their visible-light photocatalytic performance.

Liquid-liquid interfacial precipitation (LLIP) drives anisotropic C_{60} crystallization at a good-solvent/poor-solvent boundary [1]. Mesitylene/IPA produces hierarchical C_{60} crystals [2], whereas post-growth dissolution generates hollow tubes in pyridine/IPA [3]. Solvent-controlled phase and morphology changes are therefore central to C_{60} self-assembly [4]. This work correlates six-day tube evolution with structure and visible-light degradation of CV.

C_{60} (10 mg) was dispersed in mesitylene (10 mL) by ultrasonication for 60 min. A 5 mL aliquot was slowly introduced into IPA (25 mL), held at 25 °C for 30 min, gently agitated, sonicated at 30 kHz for 5 min, and incubated in the dark at 25 °C. The 24 h product was designated day 1; products aged for 1-6 days were examined by SEM. Selected FNTs were cold-IPA-washed, dried, and analyzed by XRD, Raman spectroscopy, and SEM-EDS.

For photocatalysis, a 5 mg portion of the FNTs was dispersed in 50 mL of 2 mg L^{-1} CV (catalyst loading: 0.10 g L^{-1}) and dark-stirred for 30 min. Irradiation used an XPA-7 reactor with a water-cooled 500 W xenon lamp, a $\lambda > 420$ nm filter, 30 mW cm^{-2} irradiance, and a 15 cm lamp-sample distance. UV-visible spectra were recorded at defined intervals. C_0 and C_t denote the post-equilibration and irradiated concentrations. Countdown labels of 120-0 min correspond to elapsed irradiation times of 0-120 min.

SEM shows isolated rods on day 1, network formation on day 2, and open ends from day 3 (Fig. 1A). Mean diameter remained at 94-109% of the day-1 value, whereas projected length decreased to 60% on day 2 and stabilized at 65-78%. The population shift toward shorter crystals and delayed tube opening agree with post-growth core or end dissolution [3].

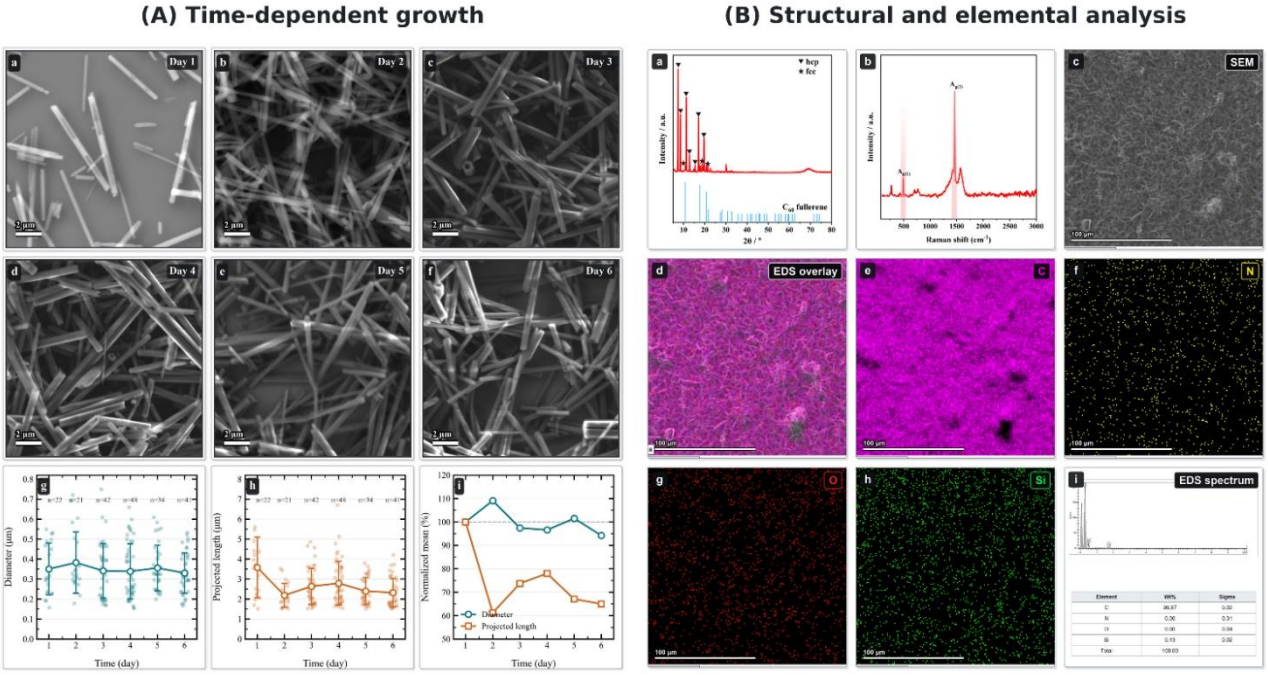


Figure 1. (A) Six-day SEM evolution and dimensions. (B) XRD, Raman, and SEM-EDS results.

XRD identifies hexagonal and face-centered cubic C_{60} (Fig. 1B), consistent with solvent-dependent phase evolution [3,4]. Raman bands at 495 and 1469 cm^{-1} correspond to the $A_g(1)$ breathing and $A_g(2)$ pentagonal-pinch modes of molecular C_{60}

[4]. SEM-EDS yielded 99.87 wt% C and 0.13 wt% substrate-derived Si; N and O were 0.00 wt%.

Selected open-ended FNTs were micrometre-scale (Fig. 2A). Wider-field length and diameter were 6.13 ± 1.93 μm (n = 17) and 1.02 ± 0.35 μm (n = 48); corresponding higher-magnification values were 5.89 ± 0.49 μm (n = 4) and 0.79 ± 0.09 μm (n = 14).

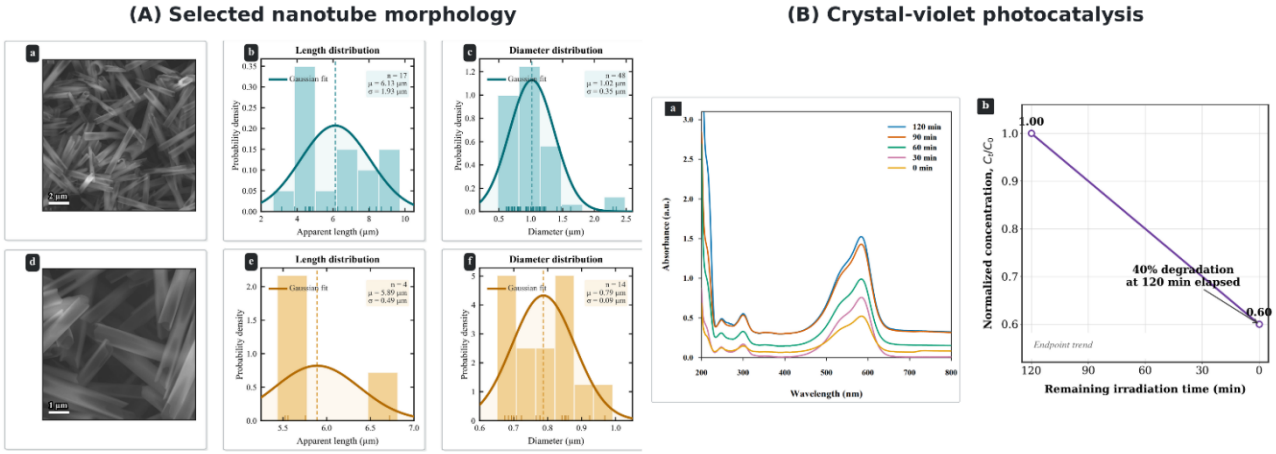


Figure 2. (A) Selected FNT morphology and size. (B) CV spectra and C_t/C_0 versus remaining irradiation time.

The 590 nm CV band decreased continuously during irradiation (Fig. 2B), and C_t/C_0 fell from 1.00 to 0.60, giving 40% degradation in 120 min. Visible-light excitation of C_{60} promotes reactive-oxygen generation [5], driving oxidation of the CV chromophore.

Mesitylene/IPA LLIP produced crystalline, open-ended C_{60} tubes averaging approximately 6.1 μm × 1.0 μm. The FNTs degraded 40% of CV within 120 min under $\lambda > 420$ nm light, demonstrating their visible-light photocatalytic activity.

REFERENCES

[1] Miyazawa K., Kuwasaki Y., Obayashi A., Kuwabara M. J. Mater. Res. 2002, 17, 83-88.

[2] Wei Z., Song J., Ma R., Ariga K., Shrestha L.K. Chemosensors 2022, 10, 16.

[3] Minato J., Miyazawa K., Suga T. Sci. Technol. Adv. Mater. 2005, 6, 272-277.

[4] Liu G. et al. Fullerenes Nanotubes Carbon Nanostruct. 2026, 34, 411-420.

[5] Moor K.J., Kim J.-H. Environ. Sci. Technol. 2014, 48, 2785-2791.

GIDROTERMAL USULDA SINTEZ QILINGAN $Cu_2O/g\text{-}C_3N_4$ GETEROTUZILMALARINING STRUKTURAVIY XUSUSIYATLARI

Jumayeva Maxfuza[1], Mamatkulov Shavkat[1*], Butanov Hakimjon[1]*
[1]O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Materialshunoslik instituti
m.jumayeva1988@gmail.com

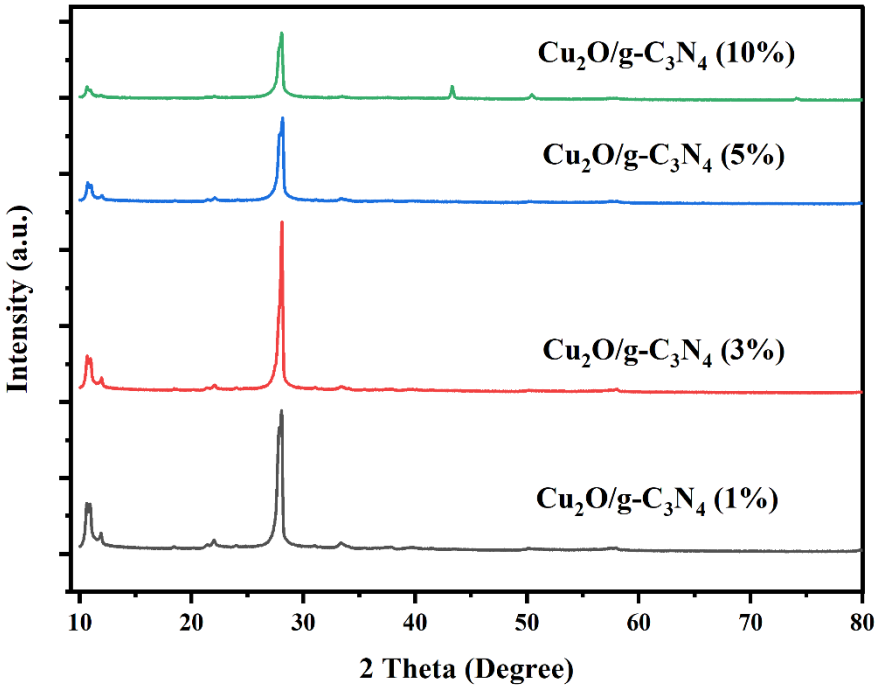
Organik bo‘yoqlar bilan ifloslangan oqova suvlarni samarali tozalash ekologik muammolardan biri hisoblanadi. Shu sababli katta solishtirma sirt maydoniga ega, yuqori fotokatalitik faollik namoyon qiluvchi va iqtisodiy jihatdan qulay nanomateriallarni ishlab chiqishga katta e’tibor qaratilmoqda. Metall oksidlari, xususan, Cu_2O, ko‘rinadigan yorug‘likka sezgirligi, nisbatan tor energetik band oralig‘i (~2,5 eV), turli morfologiyalar hosil qilishi va sodda hamda tejamkor usullar, jumladan, elektroximiyaviy va gidrotermal usullar orqali sintez qilinishi bilan istiqbolli fotokatalizatorlardan biridir. Cu_2O asosidagi nanomateriallarning organik bo‘yoqlarni, jumladan, Metil Orange (MO) ni fotokatalitik parchalashdagi samaradorligi ko‘plab tadqiqotlarda ko‘rsatilgan [1]. Biroq Cu_2Oning fotokatalitik samaradorligini oshirish va fotogeneratsiyalangan zaryad tashuvchilarining rekombinatsiyasini kamaytirish uchun uni boshqa yarimo‘tkazgichlar bilan geterotuzilma shaklida birlashtirish istiqbolli yondashuv hisoblanadi[2]. Grafitik uglerod nitridi ($g\text{-}C_3N_4$) ko‘rinadigan yorug‘likka sezgirligi, kimyoviy barqarorligi va tarkibida qimmatbaho elementlarning mavjud emasligi bilan e’tiborga loyiq. Shu bilan birga, g-C3N4da elektron-kovak juftlarining tez rekombinatsiyalanishi uning fotokatalitik samaradorligini cheklaydi [3]. $Cu_2O/g\text{-}C_3N_4$ geterotuzilmasini shakllantirish esa ushbu materiallarning afzalliklarini birlashtirib, zaryad tashuvchilarining ajralishi va fotokatalitik jarayon samaradorligini yaxshilash imkonini beradi.

Ushbu tadqiqotning maqsadi gidrotermal usulda turli miqdordagi Cu_2Oni o‘z ichiga olgan $Cu_2O/g\text{-}C_3N_4$ geterotuzilmalarini sintez qilish hamda ularning strukturaviy xususiyatlarini XRD usuli yordamida tadqiq etishdan iborat.

Sintez usuli: $g\text{-}C_3N_4$ urea asosida 550 °C da 2 soat termik polimerlanish orqali olindi. $Cu_2O/g\text{-}C_3N_4$ geterotuzilmalari 1, 3, 5 va 10 wt% Cu_2O tarkibida gidrotermal usulda sintez qilindi. Kompozitlar 180 °C haroratlarda ishlov berildi. Olingan mahsulotlar deionizatsiyalangan suv bilan yuvilib, 60 °C da quritildi**.** Namunalarning fazaviy tarkibi va kristall strukturasi XRD usuli yordamida tahlil qilindi.

3. Natijalar va muhokama. XRD natijalarida barcha $Cu_2O/g\text{-}C_3N_4$ kompozitlari uchun $2\theta \approx 28°$ sohasida $g\text{-}C_3N_4$ ning xarakterli (002) refleksiyasi kuzatildi. Cu_2O miqdorining ortishi bilan Cu_2Oga tegishli refleksiyalar asta-sekin yaqqollashib, 10 wt% namunada aniqroq namoyon bo‘ldi. Scherrer tenglamasi asosida (002) refleksiya uchun hisoblangan $g\text{-}C_3N_4$ kristallit o‘lchamlari 1, 3, 5 va 10 wt% Cu_2O uchun mos ravishda 17,01; 23,43; 17,02 va 19,06 nm ni tashkil etdi. Eng katta qiymat 3 wt% Cu_2Oli namunada kuzatilib, bunga mazkur namunadagi eng kichik FWHM qiymati (0,35°) sabab bo‘lgan. 5 wt% da FWHM ning 0,48° gacha ortishi kristallit o‘lchamining kamayishiga olib kelgan, 10 wt% da

esa 0,43° qiymatdagi FWHM natijasida kristallit o‘lchami qisman oshgan. Ushbu natijalar Cu_2O qo‘shilishi g-C_3N_4ning kristallanish/tartiblanish xususiyatlariga monoton bo‘lmagan tarzda ta’sir qilishini ko‘rsatadi. Qatlamlararo masofaning 0,317–0,318 nm oralig‘ida deyarli o‘zgarmasligi esa g-C_3N_4 ning asosiy qatlamli strukturasi saqlanib qolganligini ko‘rsatadi.



1-rasm. Turli miqdordagi Cu_2O (1, 3, 5 va 10 wt%) saqlovchi Cu_2O/g-C_3N_4 geterotuzilmalarining XRD difraktogrammalari.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Jumayeva, M., Hasanov, R., Ibodullaev, S., Tojiev, S., Saidova, S., Mirzayeva, A., ... & Mamatkulov, S. (2026). Electrochemical Synthesis of Cu2O Nanoparticles for Photocatalytic Degradation of Methyl Orange. *ChemistrySelect*, *11*(11), e06715.https://doi.org/10.1002/slct.202506715.

2. Su, Q., Zuo, C., Liu, M., & Tai, X. (2023). A review on Cu2O-based composites in photocatalysis: synthesis, modification, and applications. *Molecules*, *28*(14), 5576.

3. Farid, J., Kadhimi, H., & Al-Jubouri, A. (2026). Nanoarchitectonics of two-dimensional materials for photocatalysis: design strategies, mechanistic insights, and application pathways. *Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials*, 1-35.

OPTICAL AND RAMAN SPECTROSCOPIC STUDY OF C_{70} DISPERSION IN LLDPE/XYLENE SOLUTIONS

J.K. Jamolov[1], E.A. Tursunkulov[2], U.K. Makhmanov[1,2]
[1]National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek
[2]Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan,
j.q.jamolov@gmail.com, urolmakh@gmail.com

Solution-processable fullerene/polymer nanocomposites are attracting growing interest for optical and photoelectronic applications because the functional performance of such materials is governed primarily by the dispersion state of the nanofiller within the host matrix rather than by the filler content alone [1]. C_{70} possesses a lower molecular symmetry (D5h) than C_{60}, giving it a richer vibrational manifold and making Raman spectroscopy a potentially sensitive probe of cage integrity, matrix coupling, and aggregation state [2]. In practice, however, several C_{70} vibrational modes are only weakly Raman-active, and the extended π-conjugated shell of the fullerene produces strong photoluminescence under visible-laser excitation; therefore, this fluorescence background commonly dominates the intrinsically weak Raman signal in real samples [3]. LLDPE is a saturated, non-aromatic polyolefin that offers no covalent attachment pathway for C_{70}; therefore, any polymer–fullerene coupling must proceed through van der Waals dispersion forces and steric confinement within the free volume of the polymer. Raman spectroscopy can indirectly probe this coupling via shifts or broadening of the polymer’s C–C and C–H bands [4]. Vibrational spectroscopy, capable of resolving such weak filler–matrix interactions against a fluorescent background, is therefore essential for characterizing noncovalently reinforced fullerene/thermoplastic nanocomposites of this kind [5].

In this regard, in this study, the physical processes occurring in xylene solutions containing fullerene C_{70} and LLDPE were studied using optical spectroscopy, Raman spectroscopy, refractometry, fluorescence spectroscopy, and density measurements. The aim of this study was to determine whether the incorporation of C_{70} alters the vibrational structure of the LLDPE matrix and to establish the physical or chemical nature of the C_{70}–LLDPE interaction.

For this experiment, three C_{70}/LLDPE/xylene solutions containing 1.85, 3.70, and 5.55 wt % C_{70} relative to the polymer, at a fixed LLDPE concentration of 2.57 mg/ml (Spectra 1–3), a pure C_{70}/xylene solution (Spectrum 4), and a pure LLDPE/xylene solution (Spectrum 5) were prepared, each with a total volume of 5.25 ml. All measurements were performed at ambient temperature on freshly prepared samples to minimize aggregation over time.

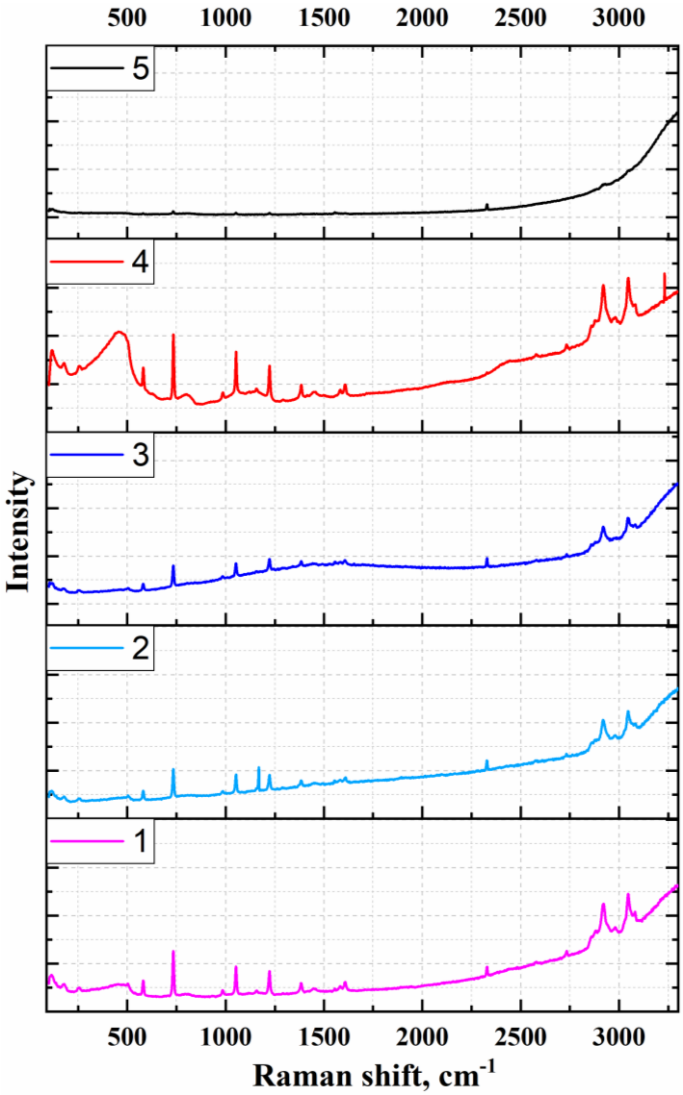


Figure 1. Raman spectra of the solutions: 1 – C_{70}/LLDPE/xylene (C_{70} ~1.85 wt %), 2 – C_{70}/LLDPE/xylene (C_{70} ~3.70 wt %), 3 – C_{70}/LLDPE/xylene (C_{70} ~5.55 wt %), 4 – C_{70}/xylene, 5 – LLDPE/xylene.

Raman spectra were recorded on an InVia Raman spectrometer (Renishaw, UK) equipped with a Cobolt CW 532 nm DPSS laser over the 0–3500 cm^{-1} range under identical instrumental conditions for all samples. Figure 1 shows the Raman spectra of the

five solutions. While the pure LLDPE/xylene solution exhibited no characteristic fingerprints, the pure C_{70}/xylene solution showed cage modes (e.g., at ~733, 1052, and 1607 cm^{-1}) hindered by a strong fluorescence background. In the composite solutions (Spectra 1–3), these cage-related modes were clearly observed and remained unchanged in position across the entire concentration range (1.85–5.55 wt % C_{70}). No new peaks or measurable frequency shifts were observed. This invariance indicates that the C_{70} cage remains structurally intact and interacts with the LLDPE matrix exclusively via weak van der Waals forces rather than covalent bonding. The rising fluorescence background with increasing C_{70} content further confirms the presence of dispersed fullerene chromophores, which is consistent with the physical confinement within the free volume of the polymer.

Results obtained confirm that C_{70} is physically dispersed within the LLDPE/xylene matrix with no evidence of covalent bond formation, a conclusion fully consistent with the saturated, non-aromatic chemical nature of LLDPE. Complementary optical, refractometric, fluorescence, and densitometric measurements further support this physical dispersion scenario.

References

[1] Makhmanov U. K.; Kokhkharov, A.M.; Bakhramov, S.A.; Shukurov, A.X.; Esanov, S.A.; Bekmurodov, Z.; Musurmonov, K.N. Peculiarities of C_{70} fullerene in a binary mixture of xylene and tetrahydrofuran. *Rom. J. Phys.* 2025, 70, 617.

[2] Reider A.M..; Kappe, M.; Schmidt, M.; Lorenz, L.; Krasnokutski, S.A.; Oncak, M.; Scheier, P.; Lushchikova, O.V. He-tagged action spectroscopy of C_{70} fullerene oligomers. *J. Chem. Phys.* 2025, 163, 184307.

[3] Qin, Y.; Xu, J.; Liang, Z.; Teng, H.; Zhan, D.; Xu, H. Raman spectroscopy of fullerenes: From C_{60} to functionalized derivatives. *Molecules* 2025, 30, 738.

[4] Das, S.; Fiedler, J.; Stauffer, O.; Walter, M.; Buhmann, S.Y.; Presselt, M. Fullerene van der Waals oligomers as electron traps. *J. Am. Chem. Soc.* 2014, 136, 12261–12268.

[5] Kausar; Ahmad, I. Nanocomposites of thermoplastic matrices with non-covalent fullerene reinforcement—Structural diversity, physical impact and potential. *J. Thermoplast. Compos. Mater.* 2024.

MODULATING THE PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF ZnO NANOSTRUCTURES VIA DOPING WITH DIVERSE ATOMIC SPECIES (Al, Ag, and S): A COMPARATIVE STUDY

R.R. Jalolov[1,2], Z.Sh. Shaymardanov[1,2], Sh.Z. Urolov[1], B.N. Rustamova[1]
[1]Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Tashkent 100125, Uzbekistan
[2]The National University of Uzbekistan, Tashkent 100174, Uzbekistan
rr_jalolov@iplt.uz

The substantial interest in zinc oxide (ZnO) as a semiconductor material stems from its high potential for applications in optical and acoustic devices, transparent ohmic contacts, transparent thin films, and heterostructure transistors [1-2]. Furthermore, as a wide direct-bandgap semiconductor with a remarkably high exciton binding energy of 60 meV, ZnO holds great promise for room-temperature laser devices. This characteristic also enables a significant reduction in the lasing threshold via a mechanism based on exciton-polariton interactions. Additionally, among tetrahedrally bonded semiconductors, ZnO exhibits the highest piezoelectric constants, which further enhances its technological importance for piezoelectric transducer devices. However, tailoring their intrinsic defect states and band edge positions is critical for specific energy and environmental applications [3-4]. Controlled doping serves as a pivotal strategy for bandgap engineering and defect state manipulation in semiconductor nanostructures. The incorporated dopant species dictate whether the physical modifications stem from localized lattice strain, surface plasmon resonance (SPR), or valence band maximum (VBM) hybridization. This work provides a comprehensive analysis of the modulating mechanisms induced by cation donor doping (Al), noble metal/acceptor modification (Ag), and anion substitution (S) on the structural, optical, and electrical characteristics of ZnO nanostructures.

Incorporation of Al^{3+} into substitutional Zn^{2+} lattice sites leads to a contraction of unit cell volume (c-axis and a-axis compression) due to ionic radius mismatch. $Al_{Zn}^{\cdot}$ donor defects generate excess free electrons in the conduction band, significantly increasing electrical conductivity. Optically, a blue-shift in the absorption edge occurs

via the Burstein-Moss effect, widening the optical bandgap. Substitutional Ag^{+} acts as an acceptor (Ag'_{Zn}), though its larger ionic radius introduces local structural distortion and potential interstitial defects (Ag_i). Metallic Ag^{0} nanoparticles deposited on the ZnO surface induce Surface Plasmon Resonance (SPR) under visible excitation. The metal-semiconductor Schottky junction acts as an electron sink, suppressing photogenerated electron-hole (e^{-}/h^{+}) recombination and maximizing photocatalytic yield. Substituting lattice oxygen (O^{2-}) with sulfur ions (S^{2-}, S_O) yields a $ZnO_{1-x}S_x$ solid solution. The higher $3p$ orbital energy level of sulfur hybridizes with the $O-2p$ states, causing an upward shift of the VBM. The bandgap narrows significantly (red-shift), extending photo-absorption well into the visible light spectrum. Furthermore, S-doping alters the concentration equilibrium of oxygen vacancies (V_O) and interstitials (O_i), modulating deep-level photoluminescence emissions.

Doping ZnO nanostructures with Al, Ag, and S offers distinct pathways for defect engineering and band structure tuning. While Al optimizes electronic transport for transparent electronics, Ag boosts carrier separation through interfacial charge transfer, and S enhances solar energy utilization by shrinking the band gap for visible-light response.

References

1. L. Schmidt-Mende, J.L. MacManus-Driscoll, ZnO – nanostructures, defects, and devices // Mater. Today 10 (2007) 40–48

2. V. Kumari, A. Mittal, J. Jindal, S. Yadav, N. Kumar, Front. Mater. Sci. 13, 1 (2019).

3. Manish Baboo Agarwal et al., Effect of Al doping on hydrothermal growth and physical properties of doped ZnO nanoarrays for optoelectronic applications, Materials Today: Proceedings 21 (2020) 1781–1786

4. Hewlett R.M., McLachlan M.A. Surface structure modification of ZnO and the impact on electronic properties, Adv. Mater., 28 (2016), pp. 3893-3921

EFFECT OF SULFUR ATOMS ON THE NATURE OF DEFECTS IN ZnO NANOSTRUCTURES

R.R. Jalolov[1,2], B.N. Rustamova[1], M.Z. Abdullayeva[2]
[1]Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Tashkent 100125, Uzbekistan
[2]The National University of Uzbekistan, Tashkent 100174, Uzbekistan
rr_jalolov@iplt.uz

Zinc oxide (ZnO) nanostructures continue to be a major focus of research due to their extraordinary properties. ZnO is a material with a large exciton binding energy (~60 meV) and a direct wide bandgap (Eg ~ 3.37 eV) [1,2]. Among various synthesis techniques, the hydrothermal method is the most widely utilized for synthesizing ZnO nanostructures. To further enhance the structural parameters and improve the photocatalytic, optical, and electrical properties of ZnO structures, the incorporation of non-metallic dopants remains a subject of intensive scientific discussion [3]. Currently, sulfur (S)-doped ZnO is being actively investigated for its high potential and efficacy in environmental remediation. Owing to the high electronegativity and the significant ionic radius mismatch between sulfur and oxygen, the incorporation of sulfur atoms into ZnO substantially alters the optical and structural properties of the host semiconductor material [4]. Therefore, the synthesis and characterization of sulfur-doped ZnO nanostructures represent a highly relevant scientific task.

S-doped ZnO nanostructures were synthesized via a hydrothermal route. Aqueous solutions of zinc nitrate hexahydrate, thioacetamide, and hexamethylenetetramine were prepared at an equal concentration of 25 mM using deionized water. Subsequently, all prepared solutions were combined and mixed using a magnetic stirrer until a homogeneous solution was formed. The resulting suspension was transferred into a Teflon-lined autoclave. Quartz substrates were sequentially placed at the bottom of the reaction vessel immersed in the prepared solution. The autoclave was tightly sealed and maintained in a thermostabilized water bath at 90 °C for 5 hours.

The surface morphology of the nanostructures was examined using a Jeol IT 210LA scanning electron microscope (SEM). Optical characterization of the samples

was performed using a UV/Vis 5100 spectrophotometer. Photoluminescence (PL) spectra of the S-doped ZnO nanostructures were recorded using a pulsed nitrogen laser as the excitation source, an MDR-23 monochromator for spectral dispersion, and a boxcar integrator for time-resolved PL signal detection.

SEM images of the undoped ZnO and S-doped ZnO nanostructures reveal that the pristine ZnO nanostructures exhibit a spindle-like morphology crystallizing in a hexagonal phase. The central region of these ZnO nanostructures shows an average diameter of 400–600 nm and an average length of 2–3 μm. Similarly, the S-doped ZnO nanostructures also crystallize in a hexagonal phase; however, they demonstrate a higher degree of spatial alignment compared to pristine ZnO. The S-doped ZnO nanostructures exhibit average diameters ranging from 350 to 600 nm and lengths of 3–5 μm (inset of Fig. 1a).

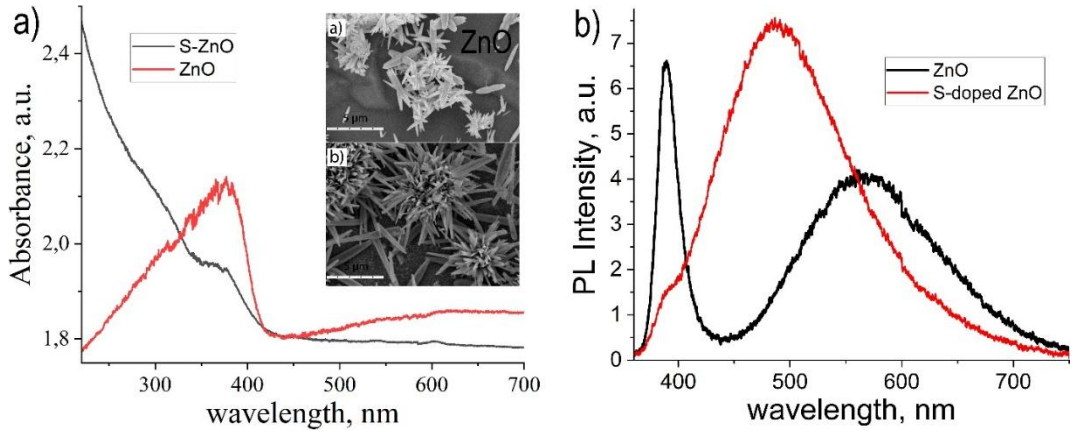


Figure 1. a) Absorption spectra of ZnO, S-doped ZnO nanostructures and their SEM images (inset); b) PL spectra of ZnO and S-doped ZnO nanostructures

The absorption spectra of pristine ZnO and S-doped ZnO nanostructures are shown in Figure 1a. The spectrum of the pristine ZnO nanostructures exhibits a minor absorption band in the visible region (~500–750 nm), which is attributed to intrinsic point defects. In contrast, the absorption spectrum of the S-doped ZnO nanostructures exhibits a distinct profile, lacking this prominent absorption band in the visible region. For both pristine and S-doped ZnO nanostructures, the absorption coefficient increases

sharply at incident photon wavelengths shorter than ~420 nm and ~440 nm, respectively.

The room-temperature photoluminescence (PL) spectra of pristine and S-doped ZnO nanostructures are presented in Figure 1b. The room-temperature PL spectrum of the pristine ZnO nanorods consists of two primary features: a narrow, intense UV emission band corresponding to near-band-edge (NBE) optical transitions, and a broad yellow defect-related emission band in the visible spectral region (Fig. 1b). Upon sulfur incorporation, a drastic transformation occurs in the PL behavior. As clearly observed from the spectrum, the intensity of the UV emission band decreases sharply, while a green emission band in the visible region becomes predominant.

Detailed analysis indicates that substitutional sulfur defects (S_O) serve as the key factor responsible for the appearance of the green emission band in S-doped ZnO nanostructures. Sulfur atoms substituting oxygen sites induce the formation of adjacent oxygen vacancies (V_O), giving rise to complex defect pairs (S_O–V_O). The association of oxygen vacancies with SO defects stabilizes them within the bulk matrix, enabling this coupled defect complex to dominate the room-temperature photoluminescence spectra of S-doped ZnO nanostructures.

In conclusion, the results obtained in this study provide valuable insights into tuning the functional properties of ZnO-based nanomaterials, paving the way for their implementation in advanced optoelectronic and photocatalytic applications.

References

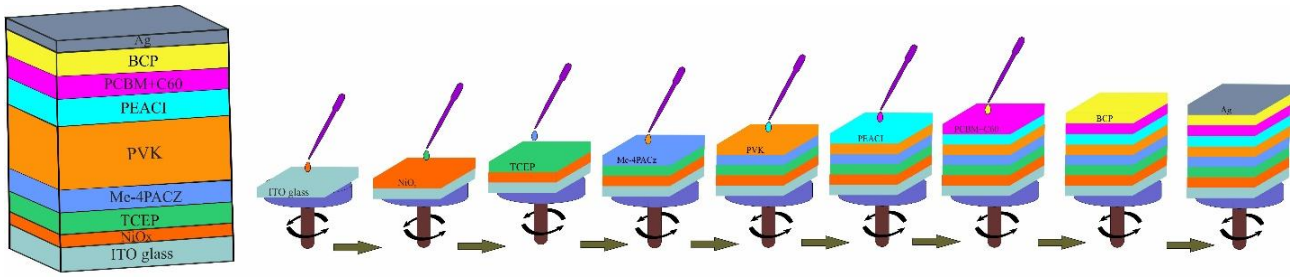
3. Ü. Özgür, Ya. I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M. A. Reshchikov, S. Doğan, V. Avrutin, S.-J. Cho, and H. Morkoç, J. Appl. Phys. **98** (2005) 041301.
4. T. W. Kang, Sh. Yuldashev and G. N. Panin, in *Handbook of Semiconductor Nanostructures and Nanodevices*, Edited by A. A. Balandin and K. L. Wang (American Scientific Publishers, Los Angeles, 2005).
5. V. Kumari, A. Mittal, J. Jindal, S. Yadav, N. Kumar, Front. Mater. Sci. 13, 1 (2019).
6. S. JanitabarDarzi, A. Mahjoub, A. Bayat, Int. J. Nano Dimens. 6, 425 (2015

NiO_x/PEROVSKIT INTERFEYSINING TCEP MOLEKULASI BILAN PASSIVATSIYALANISHINI XPS SPEKTROSKOPIYASI ORQALI TAHLIL QILISH

[1]Boynazarov I.R., [1]Tajibayev I.I., [1]Ro‘ziyev F.M., [2]Mamarajabov F.B.
[1]U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti
[2]Mirzo-Ulug’bek nomidagi O’zbekiston milliy universiteti
E-mail: ilhomboynazarov0821@iplt.uz

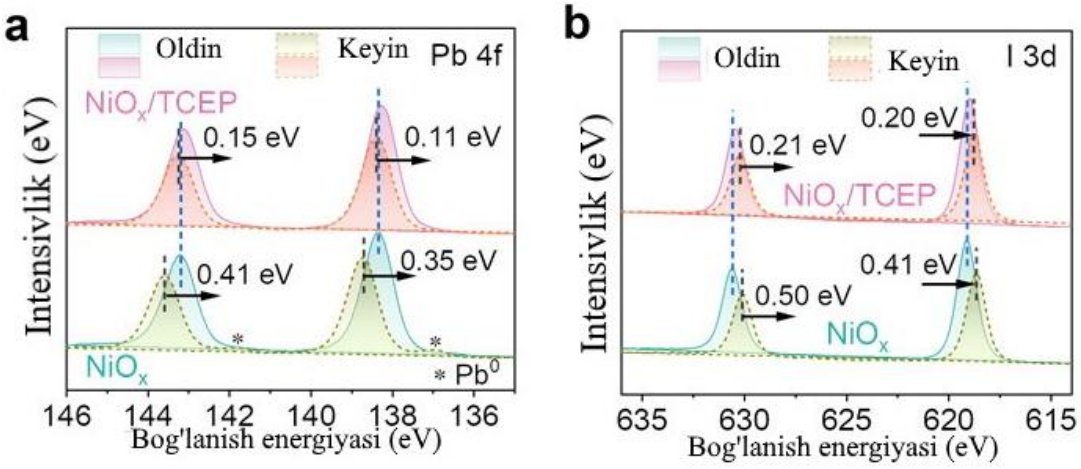
Ushbu tadqiqotda Rentgen fotoelektron spektroskopiyasi (XPS) usuli yordamida NiO_x/perovskit interfeysining TCEP molekulasi bilan passivatsiyalanish mexanizmi hamda atomar darajadagi kimyoviy o‘zgarishlar o‘rganildi. Natijalar TCEP modifikatsiyasi Pb^{2+} va I^- defektlarini samarali bostirib, metall qo‘rg‘oshin Pb^0) hosil bo‘lishining oldini olishini va interfeysdagi rekombinatsiyani keskin kamaytirishini ko‘rsatdi.

Teskari (p-i-n) strukturaga ega perovskit quyosh elementlarida (PQE) NiO_x kovak tashuvchi qatlami va perovskit faol qatlamlararo interfeysi zaryadlar rekombinatsiyasi va kimyoviy beqarorlikni belgilovchi eng kritik sohadir. NiO_x sirtidagi reaktiv Ni^{4+} ionlari hamda to‘yinmagan defektlar perovskit tarkibidagi Pb^{2+} va I^- ionlarining parchalanishiga, natijada metall qo‘rg‘oshin Pb^0 defektlari hosil bo‘lishiga olib keladi.



1-rasm. TCEP bilan modifikatsiya qilingan PQE va uning tayyorlanish jarayoni sxematik ko’rinishi.

Ushbu tadqiqotda NiO_x/perovskit interfeysida elektron zichligi taqsimotini barqarorlashtirish hamda Pb^0 defektlarini bartaraf etish maqsadida tris(2-carboxyethyl) phosphine hydrochloride (TCEP) molekulyar modifikatoridan foydalanildi. XPS orqali NiO_x va NiO_xTCEP sirtlaridagi perovskit pardalarining Pb 4*f* hamda I 3*d* yadro sathlari spektrlari qiyosiy tahlil qilindi. Yuqorida 1-rasmda TCEP bilan modifikatsiya qilingan CsFAMA asosidagi PQE ning tayyorlanish sxemasi va foydalanilgan materiallari keltirilgan. XPS tahlilida NiO_x (sof) va NiO_x/TCEP tagliklarida tayyorlangan CsFAMA perovskit plyonkalarining dastlabki hamda TCEP modifikatsiyasidan keyingi holatlari o‘rganildi (2-rasm). Sof NiO_x sirtidagi perovskitda Pb $4f_{7/2}$ hamda Pb $4f_{5/2}$ piklari 138.30 eV va 143.15 eV qiymatlarda namoyon bo‘ladi.



2-rasm. NiO_x va NiO_x/TCEP taglikka ega perovskit plyonkalarining yuqori ajratuvchanlikdagi XPS spektrlari: (a) Pb 4f va (b) I 3d yadro sathlari.

TCEP modifikatsiyasidan so‘ng ushbu piklar yuqori energiya tomonga +0.35 eV va +0.41 eV ga sezilarli siljiydi. Eng muhimi, 137.0 eV va 141.8 eV energiyalarda metall qo‘rg‘oshin (Pb^0) defektlariga tegishli ikkilamchi piklar (*) aniqlandi. Pb^0 mavjudligi interfeysda nurlanishsiz rekombinatsiya markazlarini hosil qilib, ochiq zanjir kuchlanishini (V_{OC}) pasaytiradi.

NiO_xTCEP sirtidagi perovskitda esa TCEP modifikatsiyasida Pb 4*f* piklarining siljishi minimal qiymatni (+0.11 eV va +0.15 eV) tashkil etdi. Shunisi e'tiborga loyiqki, TCEP qo‘llanilganda Pb^0 piklari to‘liq yo‘qoladi. Bu holat TCEP tarkibidagi elektron donor guruhlarning Pb^{2+} kationlari bilan kuchli koordinatsion bog‘lanish hosil qilib, Pb^0 reduksiyasini samarali bostirishini tasdiqlaydi.

I 3*d* spektrlari tahlilida esa TCEP modifikatsiyasidan so‘ng bog‘lanish energiyasi siljishining +0.41/+0.50 eV dan +0.20/+0.21 eV ga kamayishi TCEP va I^- ionlari o‘rtasida vodorod bog‘lanishi shakllanib, yod vakansiyalari hamda migratsiyasi samarali bostirilganini ko‘rsatadi.

XPS spektroskopik tahlillari TCEP modifikatsiyasi Pb^{2+} va I^- defektlari bilan kimyoviy bog‘lanib, metall qo‘rg‘oshin (Pb^0) hosil bo‘lishini to‘liq bartaraf etishini hamda interfeysial rekombinatsiyani keskin kamaytirish orqali qurilmaning fotovoltaik ko‘rsatkichlari va uzoq muddatli barqarorligini ta'minlashini ko‘rsatdi.

Foydalanilgan adabiyotlar ro’yxati

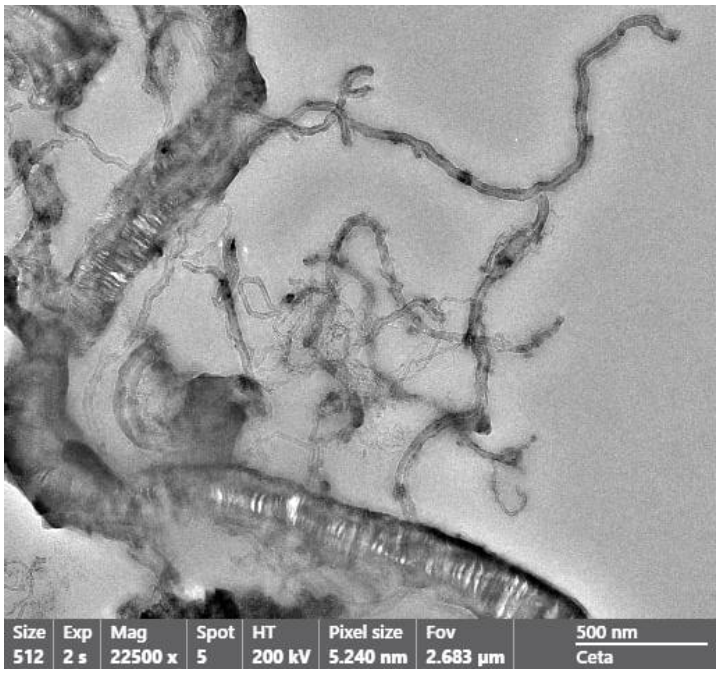
1. Al-Ashouri, et al. Science, 370(6522), 1300–1309.

2. Lin, R. et al. Nature, 603(7902), 73–78.

UGLEROD NANONAYCHALARINI METALL KATALIZATOR QOLDIQLARIDAN TOZALASHNING BIR BOSQICHLI USULI

G’ulomjanova Sevaraxon G’ofurjon qizi
e-mail: sevara@iplt.uz

Uglerod nanonaychalari (CNTs) yuqori mexanik mustahkamligi, o‘ziga xos elektr va issiqlik xususiyatlari hamda katta solishtirma sirt maydoni tufayli nanoelektronika, sensorlar, energiya saqlash, kompozit materiallar va kataliz kabi sohalarda keng qo‘llanilmoqda [1]. Ularni olish usullari orasida kimyoviy bug‘ fazasida cho‘ktirish (CVD) usuli texnologik soddaligi, yuqori mahsuldorligi va jarayon parametrlarini boshqarish imkoniyati bilan ajralib turadi [1,2]. CVD jarayonida CNTlarning hosil bo‘lishida metall katalizator muhim rol o‘ynaydi. NiO nanopartikullari CNT sintezi uchun istiqbolli katalitik materiallardan biri bo‘lib, ularning zarracha o‘lchami, morfologiyasi va kristallik xususiyatlari katalitik faollikka sezilarli ta’sir ko‘rsatadi [3]. Sol-gel usulida NiO nanopartikullarini olishda esa sintez va termik ishlov berish sharoitlariga bog‘liq ravishda metallik Ni fazasi hosil bo‘lishi mumkin. Annealing temperaturasining oshirilishi Ni fazasini kamaytirsada, zarracha o‘lchamining ortishiga olib kelishi mumkin [4]. CVD orqali olingan CNT mahsulotida nanonaychalardan tashqari amorf uglerod, grafitik uglerod va metall katalizator qoldiqlari mavjud bo‘lishi mumkin [1]. Ushbu aralashmalar CNTlarning fizik-kimyoviy xususiyatlariga salbiy ta’sir ko‘rsatadi. Shu sababli sintezdan keyingi tozalash CNT olish texnologiyasining muhim bosqichi hisoblanadi. CNTlarni tozalashda HNO_3, H_2O_2, $KMnO_4$, H_2O_2/HCl va boshqa oksidlovchi tizimlardan foydalaniladi [1]. Biroq kuchli oksidlovchi muhit CNT devorlarining shikastlanishi, nuqsonlar hosil bo‘lishi va nanonaychalarning qisqarishiga olib kelishi mumkin. Bundan tashqari, an’anaviy ko‘p bosqichli tozalash jarayonlari vaqt talab qilishi va texnologik jihatdan murakkabligi bilan ajralib turadi [1]. Shu sababli one-pot (bir bosqich) tozalash usuli istiqbolli yondashuv hisoblanadi. Ushbu usulda amorf uglerodni oksidlash va metall katalizator qoldiqlarini eritib chiqarish jarayonlarini yagona reaksion muhitda amalga oshirish mumkin. Xususan, H_2O_2/HCl tizimi yordamida uglerodli aralashmalarni oksidlash va metall katalizatorlarni eritmaga o‘tkazish imkoniyati ko‘rsatilgan [1]. Shu nuqtai nazardan, NiO nanokatalizatori yordamida CVD usulida sintez qilingan CNTlarni

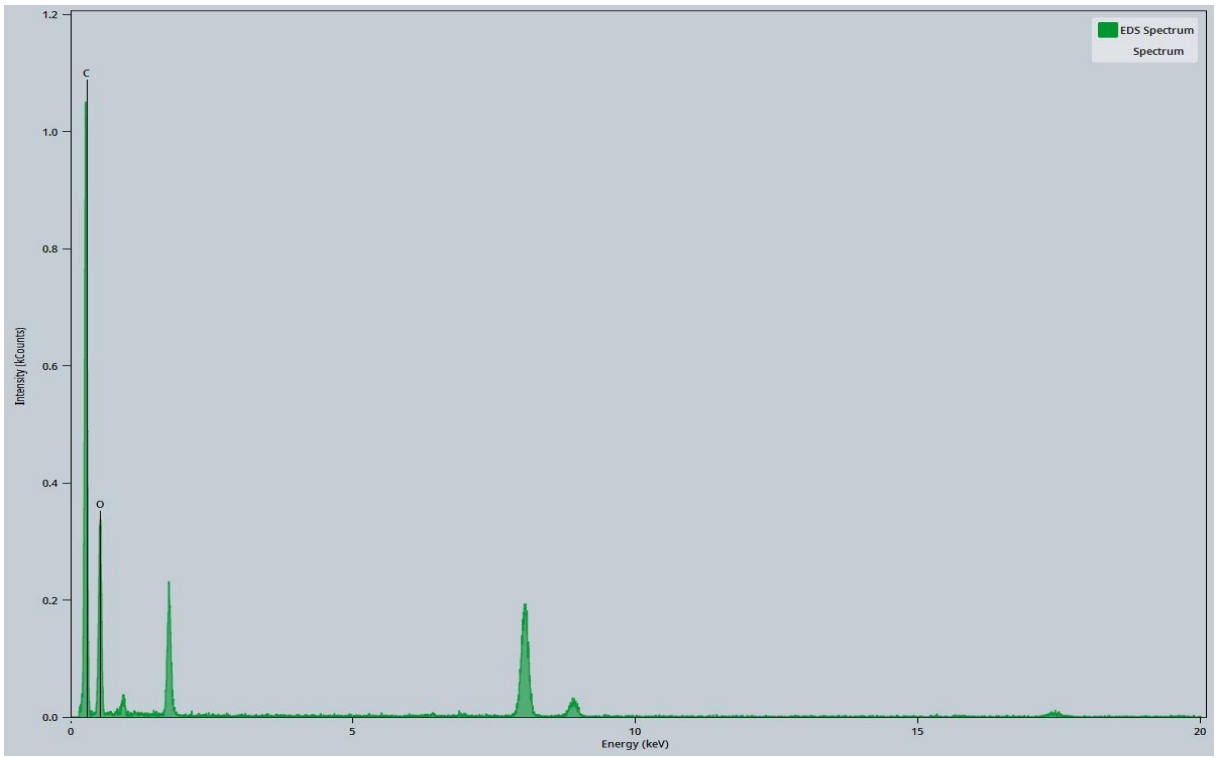


one-pot usulida tozalash, tozalash sharoitlarining amorf uglerod va Ni tarkibli katalizator qoldiqlarini chiqarish samaradorligiga hamda CNTlarning strukturaviy yaxlitligiga ta’sirini aniqlash dolzarb ilmiy-amaliy vazifa hisoblanadi.

Tajribada CVD usulida sintez qilingan uglerod nanonaychalari ochiq kolbada 20 ml HCl va 20 ml H_2O_2 eritmalarining 1:1 hajmiy nisbatdagi aralashmasi bilan ishlov berildi. Reaksiya aralashmasi 500 rpm tezlikda magnitli aralashtirgichda 60 °C haroratda 3 soat vaqt davomida aralashtirildi. Tozalash jarayonidan so‘ng suspenziyaga distillangan suv qo‘shilib, suyultirildi va filtrlash orqali uglerod nanonaychalari ajratib olindi. Filtrda yig‘ilgan namuna distillangan suv bilan yuvilib, 350 °C haroratda termik ishlov berildi. Tozalashdan keyin olingan uglerod nanonaychalari (UNT) ning morfologik xususiyatlarini aniqlash maqsadida transmission electron microscopy (TEM) usullari yordamida tadqiq qilindi.

TEM tahlilida HCl/H_2O_2 one-pot usulida tozalangan CNTlar uzun, egiluvchan va bir-biri bilan chirmashgan filamentli strukturalar shaklida kuzatildi. Ayrim sohalarda aglomeratsiyalangan uglerodli strukturalar mavjudligi namunada oz miqdorda amorf uglerod qoldiqlari saqlanganligini ko‘rsatadi.

EDS tahlili uglerodning namuna tarkibidagi asosiy element ekanligini tasdiqladi. C Kα (~0,28 keV) va O Kα (~0,52 keV) signallari mos ravishda uglerod va kislorod mavjudligini ko‘rsatadi. Si va Cu signallari, ehtimol, TEM grid yoki namuna tayyorlash bilan bog‘liq. Ni/NiO ga xos signallarning aniq kuzatilmasligi one-pot tozalash jarayonida katalizator qoldiqlari sezilarli darajada kamayganligini ko‘rsatadi.



2025-12-11T08:54:00+0100 Analysis of spectrum: EDS Spectrum

Z	Element	Family	Atomic Fraction (%)	Atomic Error (%)	Mass Fraction (%)	Mass Error (%)	Fit Error (%)
6	C	K	83.52	2.78	79.19	3.33	2.72
8	O	K	16.48	2.78	20.81	3.33	0.62

Rasm 2. Uglerod nanonaychalarining EDS spektral va elementar tahlili

Xulosa qilib aytganda, TEM va EDS tahlillari natijasida HCl/H_2O_2 one-pot usulida tozalangan uglerod nanonaychalari uzun, egiluvchan va chirmashgan filamentli morfologiyaga ega ekanligi aniqlandi. EDS natijalari namunaning asosiy qismini uglerod tashkil etishini hamda Ni/NiO katalizator qoldiqlari sezilarli darajada kamayganligini ko‘rsatdi. Olingan natijalar HCl/H_2O_2 asosidagi one-pot tozalash usulining CNTlarni tozalashda samarali ekanligini tasdiqlaydi.

Foydalanilgan adabiyotlar

[1] Mahalingam S., et al. Journal of Environmental Nanotechnology, 2012, 1(1), 53–61.

[2] Abdisaidov I.J. et al. East European Journal of Physics, 2024, Issue 3, pp. 355–358.

[3] Zorkipli N.N.M., et al. Materials Research Bulletin, 2016, 74, 194–199.

[4] Nadeem K., et al. *Ceramics International*, 2019, 45, 17289–17297.

OPTICAL PROPERTIES OF Ti-Fe-Eu-Cr-Ni NANOPARTICLES

A.A. Zaripov, B.A. G’oipov

Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies named after U.A Arifov, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, 100125, Tashkent
e-mail: goipovbunyod7@gmail.com

In this study, the optical and spectroscopic properties of multicomponent $Ti-Fe-Eu-Cr-Ni$ alloy nanoparticles obtained by the spark-plasma dispersion method were investigated. It was established that the phase composition of the synthesized nanoparticles mainly consists of the anatase and rutile modifications of TiO_2. The presence of these TiO_2 phases improves the photoelectric and catalytic properties of the sample [i]. This phenomenon is characterized by the absorption spectrum presented in Fig. 1.

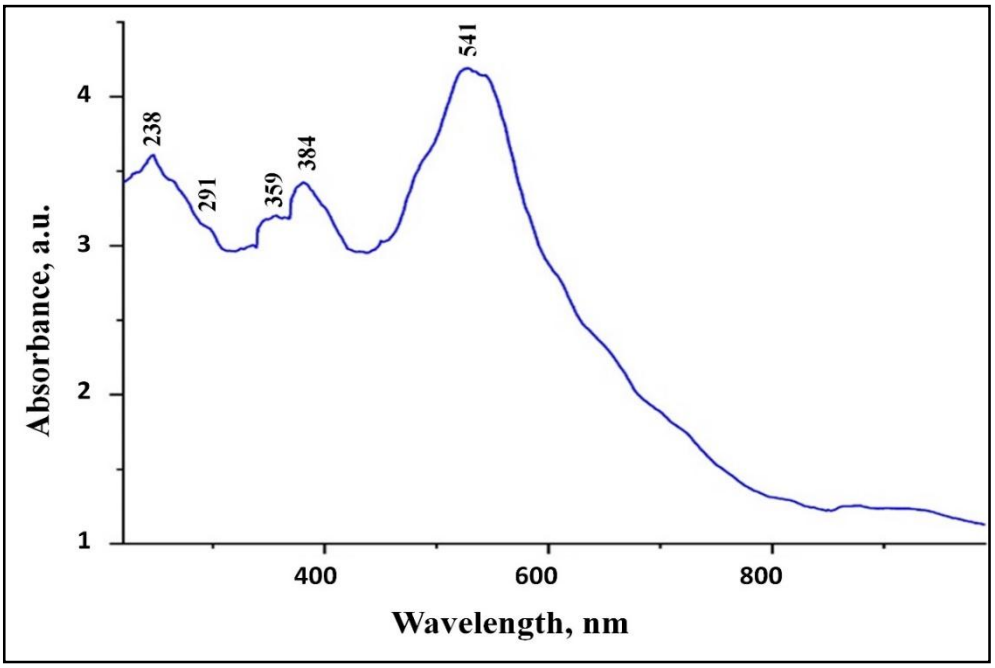


Fig. 1. UV–visible absorption spectrum of the multicomponent $Ti-Fe-Eu-Cr-Ni$ sample.

Analysis of the UV–Vis absorption spectrum of $Ti-Fe-Eu-Cr-Ni$ multicomponent nanoparticles revealed characteristic absorption bands at wavelengths of 238, 291, 359, 384, and 541 nm. Calculating the corresponding photon energies

using the equation $E = \frac{hc}{\lambda}$ yielded values of 5.21, 4.26, 3.45, 3.23, and 2.29 eV, respectively.

The strong absorption at 541 nm (2.29 eV) indicates significant optical absorption within the visible light region. Considering the presence of the $\alpha - Fe_2O_3$ phase in the sample, this absorption can be attributed to electronic transitions associated with Fe_2O_3/Fe^{3+} and interfacial electronic states. The absorption peak at 384 nm (3.23 eV) shows good agreement with the intrinsic optical absorption edge characteristic of the anatase TiO_2 phase [ii]. This result confirms the existence of the anatase TiO_2 phase in the sample and its active participation in the optical excitation of electrons from the valence band to the conduction band.

The absorption bands in the UV region at 359, 291, and 238 nm correspond to energies of 3.45, 4.26, and 5.21 eV, respectively. These features can be attributed to modified electronic energy levels within the $TiO_2/\ Fe_2O_3$ crystal lattice, as well as electronic transitions associated with the incorporated Eu, Cr, and Ni atoms.

The absorption coefficient increases sharply starting from the infrared region and reaches its maximum value at a wavelength of 541 nm. As reported by numerous researchers, this observed absorption band is characteristic of Fe_2O_3 nanoparticles. The peak position of this absorption line corresponds to the bandgap energy of $\alpha - Fe_2O_3$. Consequently, the absorption band peaking at 541 nm originates from interband optical transitions in $\alpha - Fe_2O_3$.

It should be emphasized that for a photon to excite an electron across the bandgap, its energy must satisfy the condition $h\nu \geq E_g$ If the bandgap E_g is relatively large (e.g., > 3.2 eV), the material can only absorb ultraviolet light. However, UV radiation accounts for merely 3–5% of the solar spectrum, whereas visible light constitutes approximately 43–45% [iii].

Thus, the obtained results demonstrate that while the anatase TiO_2 phase contributes to optical absorption in the UV region, the $\alpha - Fe_2O_3$ phase and the multicomponent composition induce additional absorption within the visible spectrum.

This indicates that the synthesized $Ti-Fe-Eu-Cr-Ni$ nanoparticles possess the capability to interact efficiently with both UV and visible light radiation.

Thus, the obtained results demonstrate that while the anatase TiO_2 phase contributes to optical absorption in the UV region, the $\alpha - Fe_2O_3$ phase and the multicomponent composition induce additional absorption within the visible spectrum. This indicates that the synthesized $Ti-Fe-Eu-Cr-Ni$ nanoparticles possess the capability to interact efficiently with both UV and visible light radiation.

The nanoparticles synthesized via spark-discharge plasma dispersion of the multicomponent $Ti-Fe-Eu-Cr-Ni$ alloy [iv] exhibit enhanced photoactivity across both the ultraviolet and visible light spectrums. Consequently, these $Ti-Fe-Eu-Cr-Ni$ nanoparticles serve as promising functional materials for broad-spectrum photocatalysis (water purification and hydrogen production), quantum optics and laser engineering (laser beam modulation and photosensitive element fabrication), as well as solar cells and optoelectronic devices (photodetectors and photovoltaic devices).

References

1. Mao, T., Zha, J., Hu, Y., Chen, Q., Zhang, J., & Luo, X. (2024). Research progress of TiO2 modification and photodegradation of organic pollutants. Inorganics, 12(7), 178.

2. Mishra, A., Bhatt, R., Bajpai, J., & Bajpai, A. K. (2021). Nanomaterials based biofuel cells: a review. International Journal of Hydrogen Energy, 46(36), 19085-19105.

3. Hussein, A. K. (2015). Applications of nanotechnology in renewable energies—A comprehensive overview and understanding. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 42, 460-476

4. Zaripov, A.A., Shujaat, S., Haq, S. et al. Characterization of spark-discharge–synthesized multi-element oxide nanocomposites and thermophysical performance of their water-based nanofluids for solar collectors. J IRAN CHEM SOC 23, 301 (2026).

NEBUTAMOL® PREPARATINING RAMAN SPEKTROSKOPIYASI VA SIRT IONLASHUV MASSA-SPEKTROMETRIYASI USULLARI YORDAMIDA TAHLILI

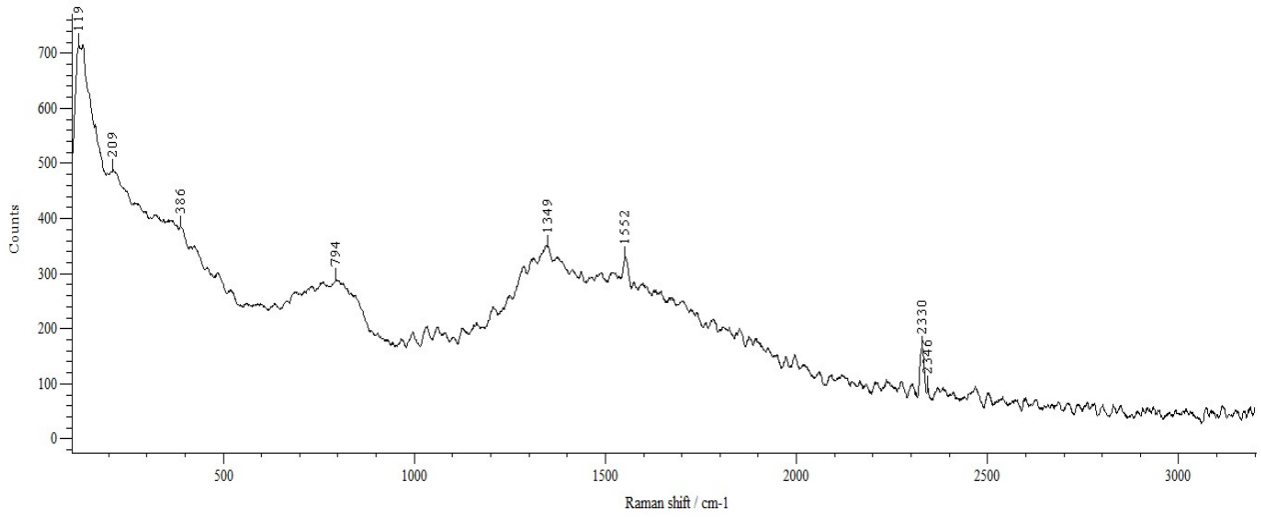
[1]Eshburiyeva M.U., [1]Isakova S.S., [1]Usmanov D.T., [2]Xayrullayeva G.
[1]O‘zR FA U.A.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalar instituti, Toshkent, O‘zbekiston
[2]Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy universiteti, Toshkent, O‘zbekiston
e-mail: eshburiyevamavjuda@gmail.com

Salbutamol — β₂-adrenomimetiklar guruhiga mansub bronxodilatator bo‘lib, Nebutamol® preparatining asosiy faol komponenti hisoblanadi va bronxial astma hamda o‘pkaning surunkali obstruktiv kasalligini davolashda keng qo‘llaniladi. Uning strukturaviy va termik xususiyatlarini fizik-kimyoviy usullar majmuasi asosida aniqlash muhim ahamiyatga ega. Salbutamolning vibratsion xususiyatlari avvalgi tadqiqotlarda o‘rganilgan [1, 2], β-adrenomimetik birikmalarning Raman spektroskopiyasi yordamida aniqlanish imkoniyatlari ham ko‘rsatilgan [3], biroq bu natijalarni sirt ionlashuvmassa-spektrometriyasi ma’lumotlari bilan qiyosiy tahlil qilish hozirgacha amalga oshirilmagan edi.

Tadqiqotda Nebutamol® preparatining Raman spektri 785 nm lazer, ×50 obyektiv va 1200 chiziq/mm difraksion panjaraga ega spektrometr yordamida 0–3200 sm^{-1} diapazonda qayd etildi. Olingan spektr avval oksidlangan volfram termoemiteri yuzasida 600–1200 K harorat oralig‘ida qayd etilgan sirt ionlashuv mass-spektrometriyasi natijalari bilan taqqoslandi; mass-spektrda m/z 58, 72, 86, 131 va 145 qiymatlarida ion cho‘qqilari kuzatilgan edi.

Nebutamol® preparatining Raman spektrida (1-rasm) 119, 209 va 386 sm^{-1} sohalarida past chastotali signallar aniqlandi, ular kristall holatdagi molekulalararo o‘zaro ta’sirlar va panjara dinamikasi bilan bog‘liq bo‘lishi mumkin. 794 sm^{-1} dagi signal molekulaning aromatik qismi bilan, 1349 va 1552 sm^{-1} dagi signallar esa aromatik skelet hamda C–C/C=C bog‘lari bilan bog‘liq tebranishlariga mos keladi [1–3]. 2330–2346 sm^{-1} oralig‘idagi ikkita kuchsiz va tor signal preparatning asosiy polosalaridan farqlanib, atmosfera tarkibidagi molekulyar azot bilan bog‘liq bo‘lishi

ehtimoldan xoli emas, shu sababli ularni fon o‘lchovlarisiz diagnostik belgi sifatida baholash tavsiya etilmaydi.



1-rasm. Nebutamol® preparatining Raman spektri

Raman spektroskopiyasi namunaning termik ta’sirsiz strukturaviy xususiyatlarini aks ettiradi, sirt ionlashuv massa-spektrometriyasida esa yuqori harorat ta’sirida ionlanish va termik parchalanish jarayonlari kuzatiladi va qayd etilgan m/z 58, 72, 86, 131 va 145 ionlarining intensivligi termoemiteri haroratiga bog‘liq ravishda o‘zgaradi. Olingan natijalar ikki usulning Nebutamol® preparatini strukturaviy hamda termik-ionlashuv xususiyatlari bo‘yicha kompleks tadqiq qilishda bir-birini to‘ldiruvchi ekanligini ko‘rsatib, mazkur yondashuvni boshqa β_2-adrenomimetiklar uchun ham qo‘llash mumkinligini tasdiqlaydi.

Adabiyotlar

1. Zahra S.T. et al. Analytical Sciences. — 2025. — Vol. 41. — P. 705–713.
2. Ali H. et al. Drug Testing and Analysis. — 2009. — Vol. 1, No. 1. — P. 51–56.
3. Izquierdo-Lorenzo I., et al. Langmuir. — 2010. — Vol. 26, No. 18. — P. 14663–14670.

NiO-SUV NANOSUYUQLIGI ISSIQLLIK O’TKZUVCHANLIGINING TASHQI ELEKTROMAGNIT MAYDONI TA’SIRIDA NANOZARRALAR KONSENTRATSIYASIGA BOG’LIQLIGINI TADQIQ QILISH

K.B. Egamberdiyev[1], B.E. Umirzakov[1,2], X.T. Bozorova[3], A.A. Abuvayitov[2]

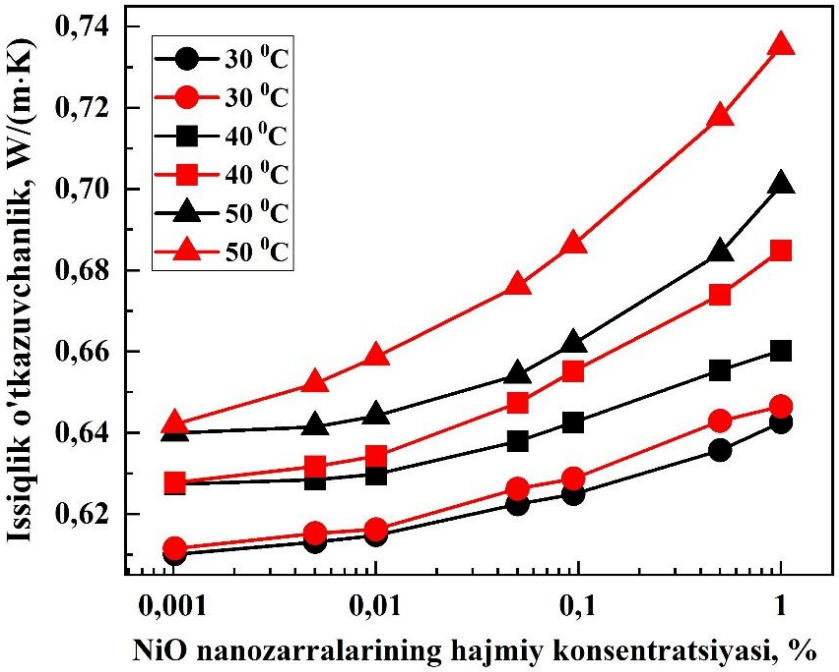
[1]O‘zR FA Ion-Plazma va Lazer Texnologiyalari instituti, Toshkent, O‘zbekiston
[2]Islom Karimov nomidagi Toshkent Davlat Texnika Universiteti, O‘zbekiston
[3]Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy Universiteti, Toshkent, O‘zbekiston
xadichabozorova98@gmail.com

Zamonaviy energetik va muhandislik tizimlarida issiqlikni samarali chiqarib yuborish muhim masalalardan biri hisoblanadi [1]. An’anaviy issiqlik tashuvchi suyuqliklar, xususan, suv va etilenglikolning issiqlik o‘tkazuvchanligi nisbatan past bo‘lib, bu yuqori issiqlik oqimiga ega qurilmalarda issiqlik uzatish samaradorligini cheklaydi [2]. Shu sababli issiqlik tashuvchi suyuqliklarning issiqlik fizikaviy xususiyatlarini yaxshilash maqsadida nanosuyuqliklardan foydalanish istiqbolli yo‘nalishlardan biri hisoblanadi [3].

Oksidli nanozarrallar orasida nikel oksidi (NiO) kimyoviy barqarorligi va yuqori issiqlik o‘tkazuvchanligi sababli istiqbolli materiallardan biri hisoblanadi. Issiqlik o‘tkazuvchanlikning ortishi nafaqat nanozarralar konsentratsiyasi va haroratning oshishi bilan bog‘liq bo‘lib, balki tashqi magnit va elektr maydonlari ta’sirida ham nanosuyuqlikning issiqlik o’tkazuvchanlik xususiyatlarini yanada oshirish imkoniyatlari mavjudligi ilmiy adabiyotlarda ko’rsatilgan [4-5].

Ushbu tadqiqot tashqi maydon elektromagnit maydon (TEM) ta’sirida suvli NiO nanosuyuqliklarining issiqlik o‘tkazuvchanligini turli haroratlarda o‘rganishga bag‘ishlangan. Issiqlik uzatish jarayonidagi konsentratsiya va haroratga bog‘liq o‘zgarishlar tahlil qilinib, tashqi maydon ta’sirida nanozarrachalar dinamikasining rolini aniqlash hamda NiO-suv nanosuyuqliklarining issiqlik uzatishni faol boshqarish imkonini beruvchi issiqlik tashuvchi muhit sifatidagi salohiyatini baholash maqsad qilingan. Ushbu tadqiqot ishida foydalanilgan NiO nanozarralari lazer ablyatsiya usuli yordamida sintez qilingan bo’lib, uning gidrdinamik o’lchami tahminan 60-75 nm

atrofida ekanligi yorug’likning dinamik sochilish usuli orqali yuqori aniqlikdagi NanoSight LM10 laboratoriya tizimida o’lchangan.



1-rasm. NiO-suv nanosuyuqliklarining issiqlik o‘tkazuvchanligining NiO nanozarrachalarining hajmiy konsentratsiyasiga bog‘liqligi.

1-rasmda NiO-suv nanosuyuqligining issiqlik o‘tkazuvchanligi NiO nanozarrachalarining hajmiy konsentratsiyasiga bog‘liq holda 30, 40 va 50 °C haroratlarda, TEM bo’lmaganda va TEM ta’siridagi sharoitlarda taqqoslangan. Natijalar barcha haroratlarda nanozarrachalar konsentratsiyasi ortishi bilan issiqlik o‘tkazuvchanlik uzluksiz oshishini, TEM ta’siridagi namunalar esa TEM ta’siri bo’lmagan namunalarga nisbatan yuqoriroq qiymatlarga ega ekanligini ko‘rsatdi. 30 °C da NiO konsentratsiyasi 0,001 dan 1,0 % gacha oshirilganda issiqlik o‘tkazuvchanlik TEM ta’sirisiz sharoitda 0,611 dan 0,643 W/(m·K) gacha, TEM ta’sirida esa 0,646 W/(m·K) gacha ortdi. 1,0 % da TEM ta’siridagi qo‘shimcha o‘sish 0,47 % ni tashkil etdi. Bu konsentratsiyaga bog‘liq ta’sir ustunligini, TEM ta’sirining qo‘shimcha hissasi esa nisbatan kichik ekanligini ko‘rsatadi. 40 °C da TEM va TEM ta’sirisiz sharoitlar orasidagi farq yuqoriroq konsentratsiyalarda yaqqolroq namoyon

bo‘lib, NiO nanozarralar konsentratsiyasi 1,0 % bo’lganda TEM ta’sirida issiqlik o‘tkazuvchanlik taxminan 3,9 % ga oshganligini kuzatishimiz mumkin. Ushbu o‘sish NiO nanozarrachalarining TEM nurlanishini yutishi, fotoinduksiyalangan zaryad tashuvchilarning relaksatsiyasi va energiyaning NiO-suv chegarasi orqali issiqlikka aylanishi bilan bog‘liq bo‘lishi mumkin. Haroratning oshishi bilan suyuqlik qovushqoqligining kamayishi va nanozarrachalar harakatchanligining ortishi ham issiqlik almashinuviga ijobiy ta’sir ko‘rsatishi mumkin. 50 °C da TEM nurlanishning eng katta ta’siri kuzatilib, 1,0 % NiO uchun issiqlik o‘tkazuvchanlik TEM ta’sirisiz sharoitdagi 0,700 W/(m·K) dan TEM ostida 0,735 W/(m·K) gacha oshdi. Nisbiy o‘sish taxminan 5,0 % ni tashkil etdi. TEM ta’sirining kuchayishi nanozarrachalar konsentratsiyasi ortishi bilan ularning optik faol sirt maydoni va foton yutuvchi markazlari sonining ko‘payishi bilan izohlanishi mumkin. Umuman olganda, NiO-suv nanosuyuqliklarida issiqlik o‘tkazuvchanlik nanozarrachalar hajmiy ulushi va harorat ortishi bilan oshdi. TEM nurlanish esa bu ko‘rsatkichni qo‘shimcha ravishda 30, 40 va 50 °C da mos ravishda 0,47 %, 3,9 % va 5,0 % ga oshirdi. Eng yuqori issiqlik o‘tkazuvchanlik 50 °C va 1,0 % NiO konsentratsiyasida kuzatildi. Kuzatilgan qo‘shimcha o‘sish NiO ning TEM nurlanishini yutishi, fotoinduksiyalangan zaryad tashuvchilar relaksatsiyasi, energiyaning NiO-suv chegarasi orqali uzatilishi hamda nanozarrachalarning braun harakati bilan bog‘liq bo‘lishi mumkin.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. GaneshKumar P. et al. Renewable and Sustainable Energy Reviews. - 2025. - T. 222. - C. 115954.
2. Eze V. H. U. Frontiers in Thermal Engineering. - 2025. - T. 5. - C. 1654815.
3. Katarkar A., Majumder B., Bhaumik S. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. - IOP Publishing, 2020. - T. 814. - №. 1. - C. 012031.
4. Kim S. H., Choi S. R., Kim D. Thermal conductivity of metal-oxide nanofluids: particle size dependence and effect of laser irradiation. - 2007.
5. Chen Z. et al. Powder Technology. - 2020. - T. 367. - C. 143-156.

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА НАНОЧАСТИЦ SiO_2 И КОНЦЕНТРАЦИИ TiO_2 НА ДИНАМИЧЕСКУЮ ВЯЗКОСТЬ ГИБРИДНЫХ НАНОЖИДКОСТЕЙ SiO_2-TiO_2 НА ВОДНОЙ ОСНОВЕ

Х.Т. Бозорова[1,2], Б.А. Аллаев[1], В.Н. Авдиевич[1], К.Б. Эгамбердиев[1], О.В. Трунилина[1], С.З. Мирзаев[1],

[1]Институт ионно-плазменных и лазерных технологий имени У.А. Арифова Академии наук Республики Узбекистан, Ташкент, Узбекистан
[2]Национальный университет Узбекистана имени М. Улугбека, Ташкент, Узбекистан
kegamberdiev@yandex.ru

В условиях интенсивного роста мирового потребления энергии и возрастающих требований к эффективности теплообмена в промышленности и энергетике, разработка новых теплоносителей с высокими теплофизическими характеристиками приобретает особую актуальность [1]. Несмотря на хорошие гидродинамические свойства традиционных теплоносителей, таких как вода, этиленгликоль и различных масел, их сравнительно низкая теплопроводность существенно ограничивает применение этих веществ в высокоэффективных системах теплообмена. В связи с этим в последние годы интенсивно развиваются исследования, направленные на улучшение теплофизических свойств данных жидкостей путем введения в них наноразмерных частиц. Развитие нанотехнологий обусловило переход от наножидкостей, содержащих один тип наночастиц, к гибридным наножидкостям, объединяющим два и более видов наночастиц [2].

Гибридные наножидкости, объединяющие преимущества различных наночастиц, превосходят традиционные наножидкости по теплопроводности, дисперсионной устойчивости и эффективности теплообмена. В частности, комбинация наночастиц SiO_2 и TiO_2 считается одним из наиболее перспективных материалов для теплообменного оборудования благодаря высокой химической стабильности, хорошей диспергируемости и эффективной теплопередаче. В настоящей работе исследовано изменение динамической вязкости систем

гибридных наножидкостей SiO_2-TiO_2 на водной основе в зависимости от размера наночастиц SiO_2 и различных концентраций наночастиц TiO_2.

В исследованиях были использованы - наночастицы SiO_2 и TiO_2 компании Evonik (Германия). Гибридные наножидкости готовили двухстадийным методом. Для обеспечения высокой агрегативной устойчивости и предотвращения образования осадка суспензии подвергались ультразвуковой обработке с использованием ультразвукового диспергатора (22 кГц) в течение 15 минут. Измерения динамической вязкости проводились на лабораторном реометре Rheostress RS600 (HAAKE, Германия).

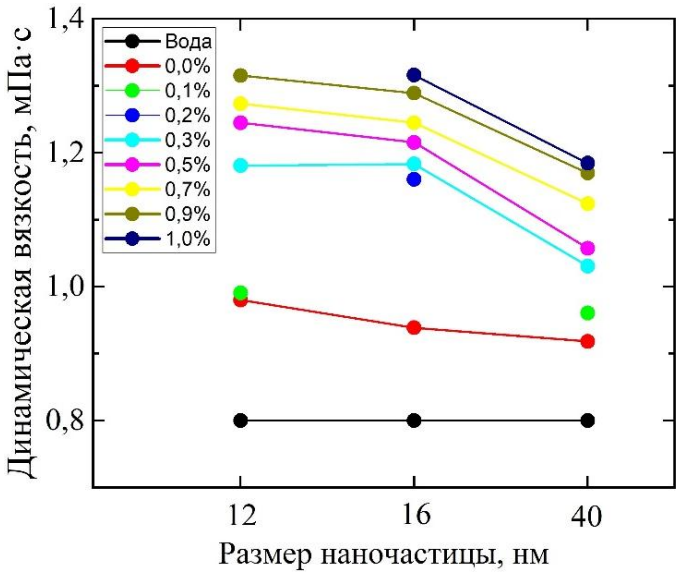


Рис. 1. Зависимость динамической вязкости гибридных наножидкостей SiO_2-TiO_2 на водной основе от размера наночастиц и концентрации.

На рисунке 1 представлены значения динамической вязкости дистиллированной воды, систем наножидкостей SiO_2-вода (12, 16 и 40 нм), а также систем гибридных наножидкостей SiO_2-TiO_2-вода с различными концентрациями TiO_2 (размер частиц TiO_2 - 21 нм). Полученные результаты показали, что динамическая вязкость системы наножидкости SiO_2-вода несколько выше по сравнению с дистиллированной водой. Это объясняется тем, что наночастицы SiO_2 создают дополнительное внутреннее трение в жидкости. Добавление наночастиц TiO_2 приводит к дальнейшему увеличению вязкости.

При повышении концентрации TiO_2 от 0,1 до 1,0 % наблюдается последовательное увеличение динамической вязкости для всех исследованных размеров наночастиц. Данный эффект обусловлен усилением межчастичных взаимодействий вследствии увеличения числа наночастиц TiO_2 в жидкости, что приводит к возрастанию внутреннего трения и гидродинамического сопротивления потоку.

Кроме того, для всех исследованных гибридных наножидкостей установлено, что при увеличении размера наночастиц SiO_2 с 12 до 40 нм динамическая вязкость уменьшается. Это объясняется тем, что наночастицы меньшего размера обладают большей удельной поверхностью и интенсивнее взаимодействуют с молекулами жидкости, вызывая более значительное увеличение вязкости. С увеличением размера наночастиц их удельная поверхность уменьшается, межчастичные взаимодействия ослабевают, вследствие чего вязкость снижается. Наибольшее значение динамической вязкости зарегистрировано для системы гибридной наножидкости с размером наночастиц SiO_2 12 нм и концентрацией TiO_2 1,0 %, тогда как минимальное значение наблюдалось для дистиллированной воды.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что реологические свойства систем гибридных наножидкостей SiO_2-TiO_2-вода в значительной степени зависят как от размера наночастиц, так и от концентрации TiO_2. В целом увеличение концентрации TiO_2 приводит к повышению динамической вязкости, тогда как увеличение размера наночастиц сопровождается ее снижением.

Литература.

1. Rahman M. A. et al. Review on nanofluids: preparation, properties, stability, and thermal performance augmentation in heat transfer applications //ACS omega. – 2024. – Т. 9. – №. 30. – С. 32328-32349.
2. Manimaran M. et al. Critical review on the stability and thermal conductivity of water-based hybrid nanofluids for heat transfer applications //RSC advances. – 2025. – Т. 15. – №. 18. – С. 14088-14125.

EFFECT OF Fe CONCENTRATION ON THE OPTICAL AND ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF $ZnFeO$ THIN FILMS

G.A. Boboqambarova, J.Sh. Xudoyqulov, M.X. Abdumutalov, X. F. Rejamatov
National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek
gulnozaabdujalolovna99@gmail.com

Fe-doped ZnO is of interest as a diluted magnetic semiconductor (DMS) and as a candidate for memristive neuromorphic devices, since Fe incorporation modifies both the band structure and the magnetic ordering of ZnO [1,2]. Oxide-based resistive switching underlies emerging neuromorphic elements [4,5]. This work compares the optical band gap and $I-V$ behavior of $ZnFeO$ thin films with 2 and 4 at.% Fe.

Films were deposited on p-type Si substrates at $420\,°C$ by USP (Fig. 1), from a $0.2\,mol/l$ solution of zinc acetate dihydrate $[Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O]$ and iron(III) nitrate nonahydrate $[Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O]$, following established USP protocols [3]. UV-Vis absorption spectra ($320-800\,nm$) were used to determine the optical band gap (E_g) via Tauc plots [$(\alpha h\nu)^2$ vs. $h\nu$]. Electrophysical and memristive properties were probed via full forward–backward $I-V$ sweeps with a source measure unit.

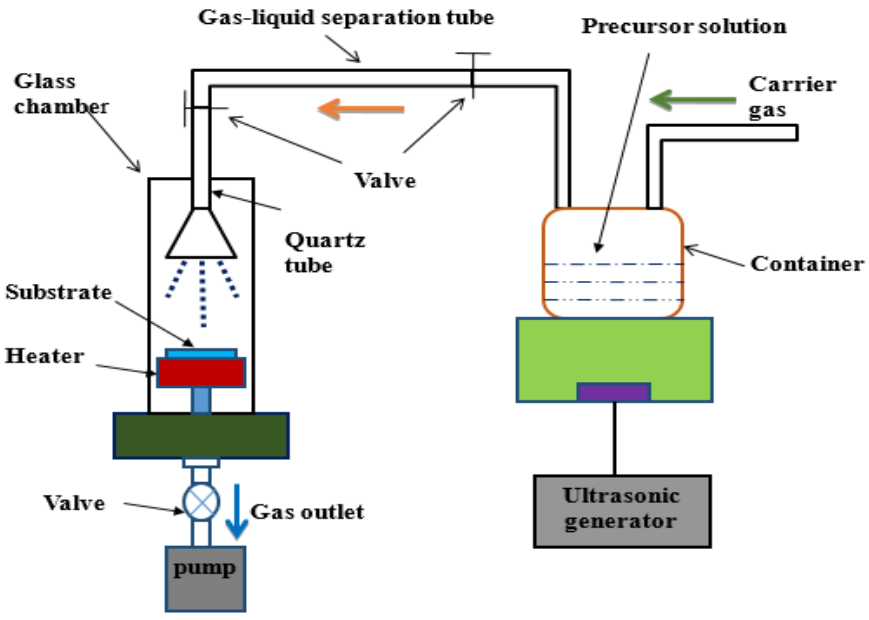


Fig. 1. Schematic diagram of the ultrasonic spray pyrolysis (USP) setup used for $ZnFeO$ thin-film deposition.

As shown in Fig. 2, the Tauc plots reveal a red shift of the absorption edge and a monotonic narrowing of E_g with increasing Fe content, consistent with Fe-related band-gap

modification reported elsewhere [1,5], attributed to hybridization of $Fe\ 3d$ states with the $O\ 2p/Zn\ 4s$ states of ZnO and to increased oxygen-vacancy density. $I-V$ measurements showed pinched hysteresis loops in all samples, confirming memristive resistive switching; the hysteresis area and HRS/LRS ratio varied with Fe content, similar to other ZnO- and SnO_2-based oxide systems [4, 5]. The concurrent variation of E_g and switching parameters points to a common origin in Fe-induced electronic states and oxygen vacancies, while the Fe dopant also introduces an $sp-d$ exchange interaction relevant to spintronic applications [2].

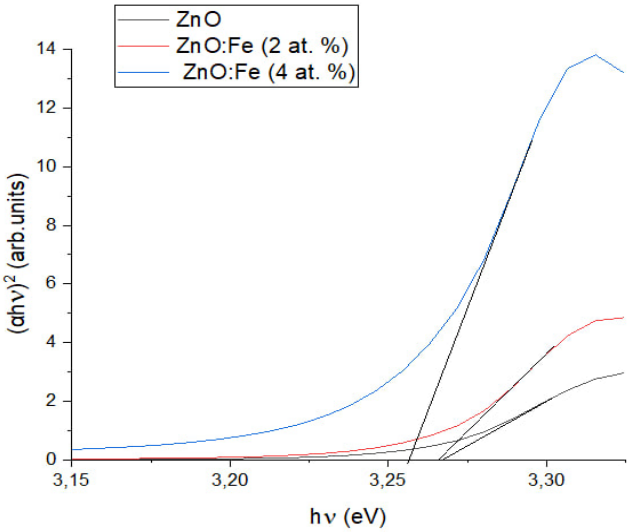


Fig. 2. Tauc plots $[(\alpha h\nu)^2$ vs. $h\nu]$ *of* ZnO *and* $ZnO{:}\,Fe$ *(2 and 4 at.%) thin films with linear extrapolation used to determine* E_g.

$ZnFeO$ thin films synthesized by USP combine tunable optical properties with reproducible memristive switching, indicating strong potential for DMS and spin-memristive neuromorphic applications. Further XRD and vibrating-sample magnetometry studies, together with higher Fe-concentration samples, are recommended to clarify the structural origin of these effects and determine the Fe solubility limit in ZnO.

REFERENCES

1. Meng, X.et al. Ceramics International, 51(21, Part A), 33630–33635 (2025).
2. Souissi, M., Schmerber, G. Applied Physics A, 132, 458 (2026).
3. Arslanov, A.O. et al. Physical Science International Journal, 29(1), 29–35 (2025).
4. Murodov, J.X. et al. East European Journal of Physics, (3), 348–352 (2025).
5. Murodov, J.X. et al. East European Journal of Physics, (2), 211–214 (2025).

C_{70} NANOSTRUCTURES AND POLYMER HYBRID SYSTEMS: FORMATION AND OPTICAL PROPERTIES

Makhmanov U.K., Kokhkharov A.M., Bakhramov S.A., Aslonov B.A.

Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Academy of Sciences of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan

E-mail: urolmakh@gmail.com

C_{70} fullerene combines an anisotropic molecular shape, a developed pi-electron system and electron-acceptor properties, making it suitable for both supramolecular self-assembly and polymer modification. This work examined how solvent composition, C_{70} concentration and substrate temperature govern formation of one-dimensional C_{70} structures, and how C_{70} affects the optical response of polystyrene (PS) and polyaniline (PANI) systems.

C_{70} solutions in toluene, o-xylene, ethylbenzene and dichlorobenzene were evaporated as microdroplets on glass or silicon substrates at controlled temperatures. Ethylbenzene/ethanol and ethylbenzene/isopropanol mixtures were used for nanotube formation. The products were characterized by SEM, TEM and vibrational spectroscopy. PS/C_{70}/benzene and PANI/C_{70} solutions in DMF or NMP were studied by UV-Vis spectroscopy, refractometry, densitometry, Raman/FTIR spectroscopy and photoluminescence.

At room temperature, C_{70}/toluene droplets formed porous quasi-spherical aggregates about 600 nm in diameter, composed of 40-45 nm subaggregates. At a constant C_{70} concentration of 1.1×10^{-3} mol/L, increasing the substrate temperature from 28 to 36 °C increased the mean nanowhisker length from 0.75 to 1.80 μm and the width from 105 to 175 nm; the aspect ratio rose from 7.1 to 10.3. At 36 °C and 1.5×10^{-3} mol/L, individual whiskers reached 28 μm in length. O-xylene produced hexagonal-section whiskers up to 10 μm long, whereas ethylbenzene yielded smooth nanowhiskers with an average aspect ratio of 22.5 [1]. In binary solvent systems, reduced C_{70} solubility promoted hollow multiwalled nanotubes with outer and inner diameters of 520-1100 and 280-400 nm. Raising the substrate temperature from 24 to 35 °C increased their characteristic length from about 1.0 to 7.5 μm [2]. These results

show that solvent-dependent supersaturation and evaporation kinetics control the transition from aggregates to anisotropic nanowhiskers and nanotubes.

In PS/C_{70}/benzene solutions, C_{70}-related absorption maxima were observed near 364, 382 and 471 nm. Increasing the C_{70} content enhanced absorption and produced small long-wavelength shifts, while storage caused spectral broadening together with changes in refractive index and density. FTIR and Raman measurements of solutions and thin films showed shifts and intensity changes of characteristic PS and C_{70} modes, consistent with predominantly noncovalent π–π, van der Waals and donor-acceptor interactions. PANI/C_{70} systems displayed an additional time-dependent response. In DMF, the hybrid photoluminescence was dominated by a blue band near 416 nm, while low-energy components appeared in the 567-760 nm region after storage, indicating supramolecular reorganization. In NMP, the initial refractive index of PANI/C_{70} solutions increased from 1.4691 to 1.4702 with increasing C_{70} concentration, consistent with increased electronic polarizability.

The results demonstrate two complementary routes for tuning C_{70}-based functional materials: control of solvent-assisted self-assembly into one-dimensional nanostructures and regulation of noncovalent interactions in polymer hybrids. The evaporating-drop method provides a simple low-energy approach to morphology-controlled C_{70} nanostructures, while PS/C_{70} and PANI/C_{70} systems exhibit concentration- and time-dependent optical responses relevant to photonic, sensing and optoelectronic applications.

References

[1] Bakhramov S.A., Makhmanov U.K., Aslonov B.A. The synthesis of C_{70} fullerene nanowhiskers using the evaporating drop method. Condensed Matter, 8(3), 62-71 (2023).

[2] Makhmanov U.K., Aslonov B.A., Esanov S.A., Shukurov A., Chuliyev T.A. Controlled synthesis of C_{70} fullerene micro/nanotubes. Romanian Journal of Physics, 69(7-8), 615 (2024).

АНАЛИЗ НАНОДИСПЕРСНЫХ ПОРОШКОВ КАРБИДА ВОЛЬФРАМА ВАКУУМНО ДУГОВОЙ ОБРАБОТКИ

Арустамов В.Н, Худайкулов И.Х, Харьяков В.Н, Кахрамонов Б.Р.
Институт ионно-плазменных и лазерных технологий имени У.А. Арифова, Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 100125, Узбекистан.

Карбид вольфрама широко используется для производства конструкционных и инструментальных материалов, благодаря высокой твердости, прочности, износостойкости, коррозионной устойчивости и термической стабильности этих свойств [1,2]. Особое внимание уделяется разработкам нанофазных материалов. Задачей исследования является исследования условий получения порошка карбида вольфрама вакуумно-дуговым методом.

Исследование условий получения нанопорошков WC путем плазмохимического восстановительного синтеза непосредственно из оксида вольфрама в плазмы дугового разряда вакуумного дугового празряда осуществлялось в коаксиальной электродной системе представленой на рис.1

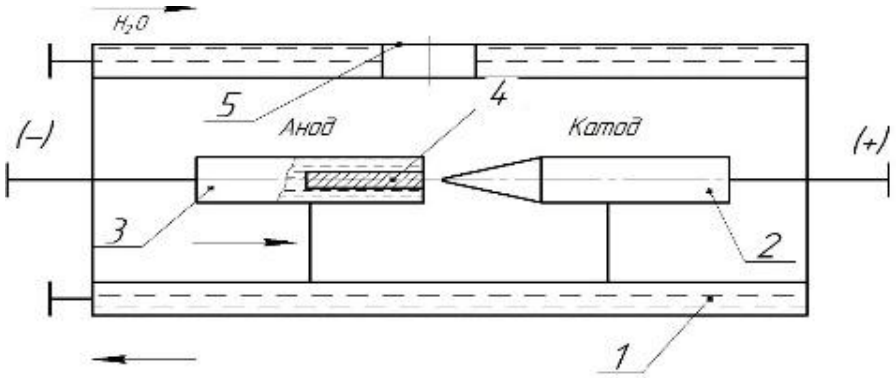
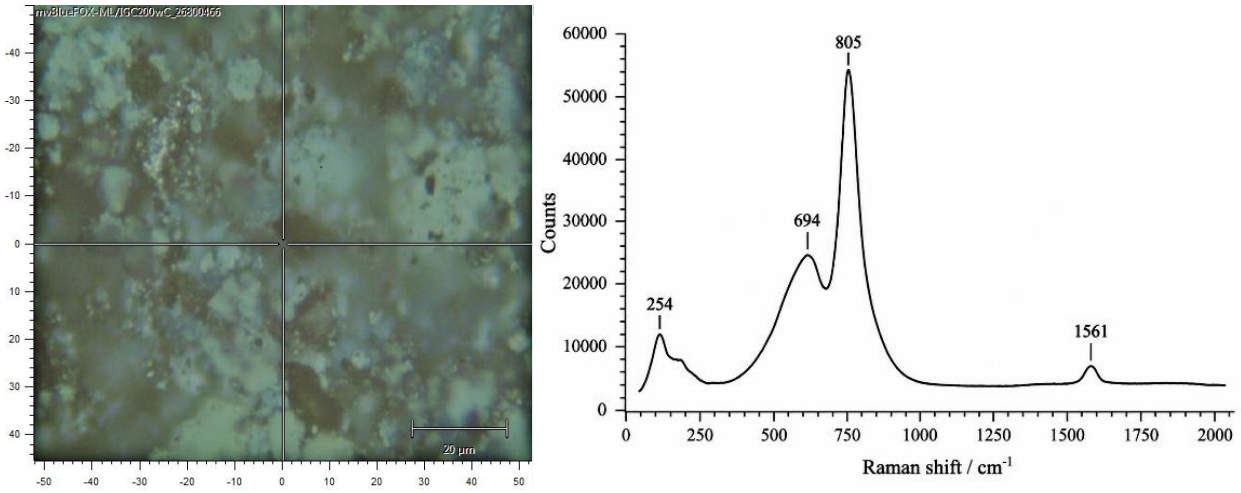


Рис.1. Электродная система реализации процесса получения нанопорошков вакумно-дуговым методом. 1-охлаждаемый экран, 2-графитовый электрод - анод, 3-графитовый электрод - катод, с размещенным в нем коаксиально композитным стержнем -4,

В электродной системе графитовый электрод катод и композитный электрод – анод зажигалась вакуумная дуга при напряжении 80-100В, ток разряда 60-200А.

Композитный электрод анод представляет собой графитовый стержень с полостью по центру и наполненой кислородсодержащим соединением вольфрама, выбранным из группы, содержащей WO_3, $W(CO)_6$, при массовом соотношении содержания графита и соединения от 1:0.5 до 1:2. Осаждение полученного эродированного потока -наночастиц осуществлялось на охлаждаемый экран. Технический результат достигается реализацией процесса синтеза наночастиц WC и W_2C, в плазме, генерируемой в катодных пятнах вакуумной дуги на отрицательном электроде катоде.



a b

Рис.2 Микрофотография порошка –а и спектр КР порошка карбида вольфрама-б, синтезированного в вакуумной дуге (мытый).

Спектр KR для синтеза промытого карбида вольфрама. виден в четырех диапазонах частот: 294 $см^{-1}$,694 $см^{-1}$,805$см^{-1}$ и 1561 $см^{-1}$. Область 294 $см^{-1}$ может иметь пик Fe_3C или (красное железо; Fe_2O_3). На частоте 1561 $см^{-1}$, конечно, образуется углеродсодержащая полоса G. 694 $см^{-1}$ и 805 $см^{-1}$ содержат полукарбид вольфрама (W_2C). На рисунке 3б полуширина этих полос и отношение интенсивностей I_G/I_D (I_G максимум интенсивности *G*-линии, I_D-максимум интенсивности *D*-линии) характеризуют степень графитизации микрочастиц углерода.

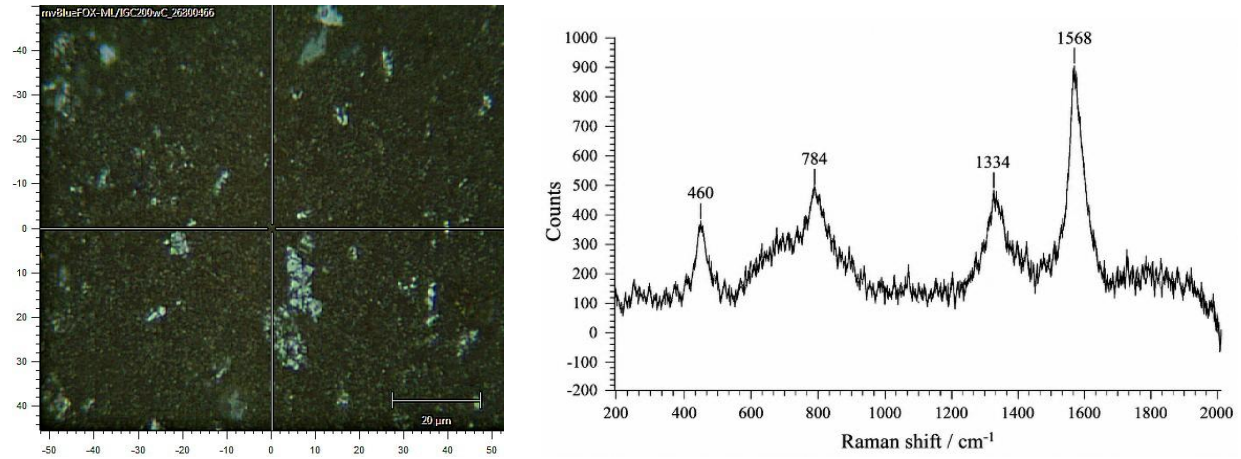


Рис.3. Микрофотография порошка и спектр -а КР порошка карбида вольфрама, синтезированного в вакуумной дуге (с сажа).-б

Малая полуширина этих линий кривой рис.3б и высокое отношение I_G/I_D = 1.18, видно, что между этими линиями D и G образуется карбид вольфрама 1334 см$^{-1}$ и 1568 см$^{-1}$ [3]. Спектр KR при 1568 см$^{-1}$ может быть представлением графена в виде G-линии.

Результаты исследования показывают, что порошок, карбида вольфрама полученый разработанным вакуумно-дуговым методом. испытанный методом дифракции рентгеновских лучей, четко показывает присутствие карбида вольфрама и семикарбида вольфрама. Также видно несколько пиков, кристаллизованных на линиях D и G в спектре комбинационного рассеяния.

ЛИТЕРАТУРА

[1]. Ren X., Miao H., Peng Zh. A review of cemented carbides for rock drilling: An old but still tough challenge in geo-engineering // International Journal of Refractory Metals and Hard Materials. 2013. № 39. – P. 61-77.

[2]. Liu Y.Zh., Jiang Y.H., Zhou R., Feng J. Mechanical properties and chemical bonding characteristics of WC and W2C compounds // Ceramics International. 2014. № 40. – P. 2891-2899.

[3]. *В.И. Подгорный,*1 *Б.З. Белашев,*2 *Р.Н. Осауленко,*1 *А.Н. Терновой* 2Получение образцов карбидов в плазме дугового разряда, *Журнал технической физики, 2013, том 83, вып. 7, сс.77-85.*

ЭПР, РАМАНОВСКАЯ И ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ АНИОННЫХ ВАКАНСИЙ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОДНЫХ МАТЕРИАЛАХ РАЗЛИЧНОГО СТРУКТУРНОГО ТИПА

Ашуров Р., Адилов М.
Институт ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А. Арифова АН РУз, г. Ташкент, Узбекистан
e-mail: r.ashurov@iplt.uz

Точечные дефекты анионной подрешётки — кислородные и халькогенидные вакансии — определяют электронную структуру, ширину запрещённой зоны и подвижность носителей заряда в наноматериалах. В оксидных и халькогенидных решётках они традиционно исследуются раздельно, и вопрос об общности их физической природы не ставился. Работа посвящена спектроскопической идентификации анионных вакансий в наноматериалах двух структурных типов и установлению связи между концентрацией дефектов, электронной структурой и барьерами миграции.

Объекты и методы. Исследованы наночастицы $Na_3V_{1,7}Fe_{0,3}(PO_4)_3$ размером 50–150 нм с каркасом NASICON (R-3c) в углеродной оболочке около 3 нм (золь-гель метод, отжиг 850 °C в 5 об. % H_2 / 95 об. % Ar) и наноструктуры «ядро–оболочка» SnSSeTe/C (контролируемый гидролиз с синхронной халькогенизацией–карбонизацией). Эталоны — $Na_3V_2(PO_4)_3$/C, SnS/C, SnSSe/C, SnSTe/C. Применены электронный парамагнитный резонанс, рамановская и рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, просвечивающая электронная микроскопия высокого разрешения. Расчёты электронной структуры выполнены методом функционала плотности в приближении обобщённого градиента.

Результаты и обсуждение. Незамещённый $Na_3V_2(PO_4)_3$/C сигнала не даёт: ион V^{3+} ($t_2g^2eg^0$, S = 1) является некрамерсовым и остаётся ЭПР-неактивным в стандартном режиме перпендикулярной поляризации. Замещённый $Na_3V_{1,7}Fe_{0,3}(PO_4)_3$/C обнаруживает сигналы высокоспинового Fe^{3+} (d^5, S = 5/2) и дефектный сигнал с g-фактором 2,003 (рисунок 2, а).

Спектры халькогенидных наноструктур содержат почти симметричную линию лоренцевой формы с тем же значением g = 2,003 (рисунок 2, б). Интенсивность

монотонно возрастает в ряду SnS/C → SnSSe/C → SnSTe/C → SnSSeTe/C, отражая рост концентрации дефектов при введении более крупных анионов ($r(S^{2-})$ = 1,84, $r(Se^{2-})$ = 1,98, $r(Te^{2-})$ = 2,06 Å).

Совпадение g-фактора для решёток различного структурного типа указывает на единый механизм локализации неспаренного электрона в анионной вакансии, не зависящий от типа решётки и природы аниона.

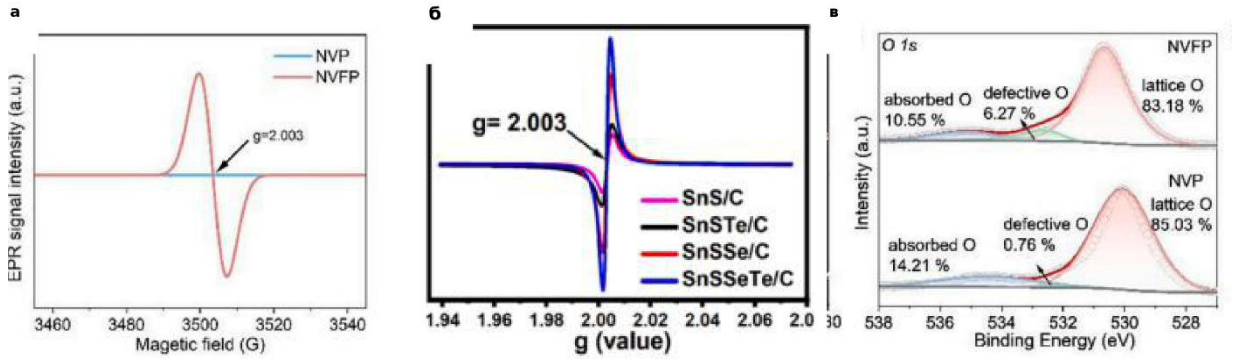


Рисунок 2 — Спектры ЭПР: а — $Na_3V_2(PO_4)_3/C$ и $Na_3V_{1,7}Fe_{0,3}(PO_4)_3/C$; б — ряд SnS/C, SnSTe/C, SnSSe/C, SnSSeTe/C; в — спектры РФЭС O 1s с разложением на компоненты решёточного кислорода, кислородных вакансий и адсорбированных частиц.

Фотоэлектронная спектроскопия. Разложение спектра O 1s даёт концентрацию вакансий 6,27 % против 0,76 % для незамещённого материала (рисунок 2, в). Совпадение выводов двух независимых методов исключает артефакт.

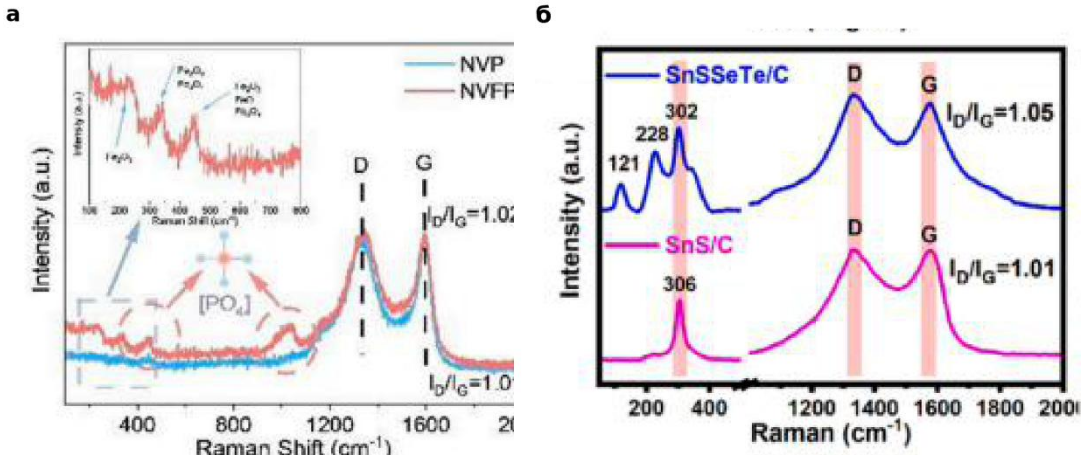


Рисунок 1 — Рамановские спектры: а — $Na_3V_2(PO_4)_3/C$ и $Na_3V_{1,7}Fe_{0,3}(PO_4)_3/C$ (на вставке — область колебаний оксидов железа); б — SnS/C и SnSSeTe/C

Рамановская спектроскопия. Спектры содержат полосы D (1350 $см^{-1}$) и G (1590 $см^{-1}$) и моды групп $[PO_4]^{3-}$ при 432 и 991 $см^{-1}$. Отношение I(D)/I(G) равно 1,02 для полианионного и 1,05 для халькогенидного материала; последнее — наибольшее в ряду, что независимо подтверждает повышенную дефектность.

Связь с электронной структурой. Рост концентрации вакансий сопровождается монотонным сужением запрещённой зоны в ряду SnS → SnSSe → SnSTe → SnSSeTe: 1,04 → 0,98 → 0,84 → 0,76 эВ при возрастании по модулю энергии адсорбции носителя от −0,85 до −1,92 эВ. Для полианионного каркаса вакансии снижают барьер миграции с 1,355 до 0,387 эВ при сокращении диффузионного канала с 3,311 до 3,019 Å. Сокращение канала на 9 % не объясняет снижения барьера в 3,5 раза, следовательно доминирует электронный механизм — перераспределение электронной плотности и ослабление связей металл–анион.

Выводы

1. Методами ЭПР, рамановской и фотоэлектронной спектроскопии установлено образование анионных вакансий в наноматериалах двух структурных типов — каркаса NASICON и орторомбического халькогенида.
2. Совпадение g-фактора дефектного сигнала (2,003) для кислородных вакансий в полианионной решётке и анионных вакансий в халькогенидной свидетельствует о единой физической природе дефекта независимо от типа решётки.
3. Установлена корреляция между концентрацией вакансий, шириной запрещённой зоны и барьером миграции; количественная оценка показывает доминирование электронного механизма над геометрическим.
4. Обоснована применимость ЭПР в сочетании с рамановской и фотоэлектронной спектроскопией как экспресс-метода контроля дефектной структуры наноматериалов. Дальнейшая работа предполагает проверку расчётных значений ширины запрещённой зоны методом диффузного отражения.

Литература

1. Bai Z., Wang R., Zong Q. et al. Chemical Engineering Journal. 2025. Vol. 523. 168804.
2. Abdel-Aziz A., Li X., Muhammad S. et al. Energy Storage Materials. 2026. Vol. 86. 104910.
3. Lu Z., Yu D., Hong Y. et al. // Materials Today. 2024. Vol. 79. P. 200–232.

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ДЕШИФРОВКИ СИГНАЛОВ ШИРОКОПОЛОСНОГО ЛИДАРНОГО ЗОНДИРОВАНИЯ АТМОСФЕРЫ

Касимов А.К., Халиков Г.А.
Институт Ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз
kasimov_a_k@mail.ru

Дистанционный мониторинг газового и аэрозольного состава атмосферы является критически важной задачей для климатического моделирования и экологического контроля. Традиционные методы дифференциального поглощения (DIAL) ограничены фиксированным набором длин волн лазерных источников [1]. Использование излучения суперконтинуума, генерируемого при филаментации ультракороткого лазерного излучения в атмосфере, позволяет проводить широкополосное зондирование. Однако обратная задача дешифровки таких сигналов является математически некорректной и осложняется сильным нелинейным затуханием сигнала с высотой и малым значением отношения сигнал/шум. В данной работе исследуется потенциал нейронных сетей для решения этой проблемы.

Принимаемая интенсивность лидарного ответа $P(z)$ на высоте z описывается классическим уравнением лазерного зондирования, модифицированным под широкополосный спектр суперконтинуума [2]:

$$P(z) = O(z) * \frac{\beta(z)}{z^2} * exp\left(2 * \int_0^z \alpha(z')dz'\right) + \xi(z) \qquad (1)$$

где, $O(z)$ — геометрическая функция перекрытия оптических осей лазера и телескопа; $\beta(z)$ — коэффициент обратного рассеяния; $1/z^2$ — фактор геометрического расхождения сферического волнового фронта; $\alpha(z)$ — коэффициент экстинкции; $\xi(z)$ — аддитивный шум фотоприемного тракта.

На больших высотах (z > 1500 м) полезный сигнал стремительно падает. Вследствие процедуры калибровки (вычитания постоянной фоновой засветки) регистрируемый сигнал приобретает симметричный знакопеременный характер, уходя в отрицательную область. Это создает экстремальные условия для

классических алгоритмов обработки, требуя применения робастных методов машинного обучения.

Архитектура нейросети построена как аналог оптико-физического тракта. Для обработки лидарных сигналов вместо классических нестабильных численных методов предложена гибридная нейросетевая архитектура Conv1D-LSTM. Каскад слоев этой сети спроектирован как прямой математический аналог узлов реальной приемной оптической системы, каждый слой, который описан ниже.

Входной калибровочный слой (StandardScaler). Принимает экспериментальные матрицы размерностью (500 x 201 x 109). Этот блок выполняет функцию электронного фильтра. Он нормирует амплитуду сигналов и центрирует их относительно нуля, что позволяет сохранить физически значимый знакопеременный шум фотоприемника на больших высотах зондирования.

Спектральный селектор на базе одномерной свертки (Conv1D), содержит 32 фильтра с размером ядра 5 вдоль оси длин волн (λ). Этот слой работает как динамический монохроматор или полихроматор. Его физическая задача — сканировать 109 каналов спектра на каждой фиксированной высоте и идентифицировать узкие линии и полосы поглощения целевых газов.

Блок высотно-временной связности (LSTM) заменяет собой физическую модель гидродинамики атмосферы. Поскольку концентрации газов и плотность аэрозолей в смежных слоях воздуха связаны законами диффузии и турбулентного переноса, они не могут изменяться хаотично с изменением координаты. Слой LSTM анализирует трассу, выступая в роли адаптивного фильтра: он удерживает пространственные тренды и эффективно демпфирует (сглаживает) высокочастотный электронный шум.

Моделирование физических процессов и валидация нейросети проводились в облачной среде вычислений. На рисунке 1 представлены результаты сопоставления исходных данных и выходов разработанной модели.

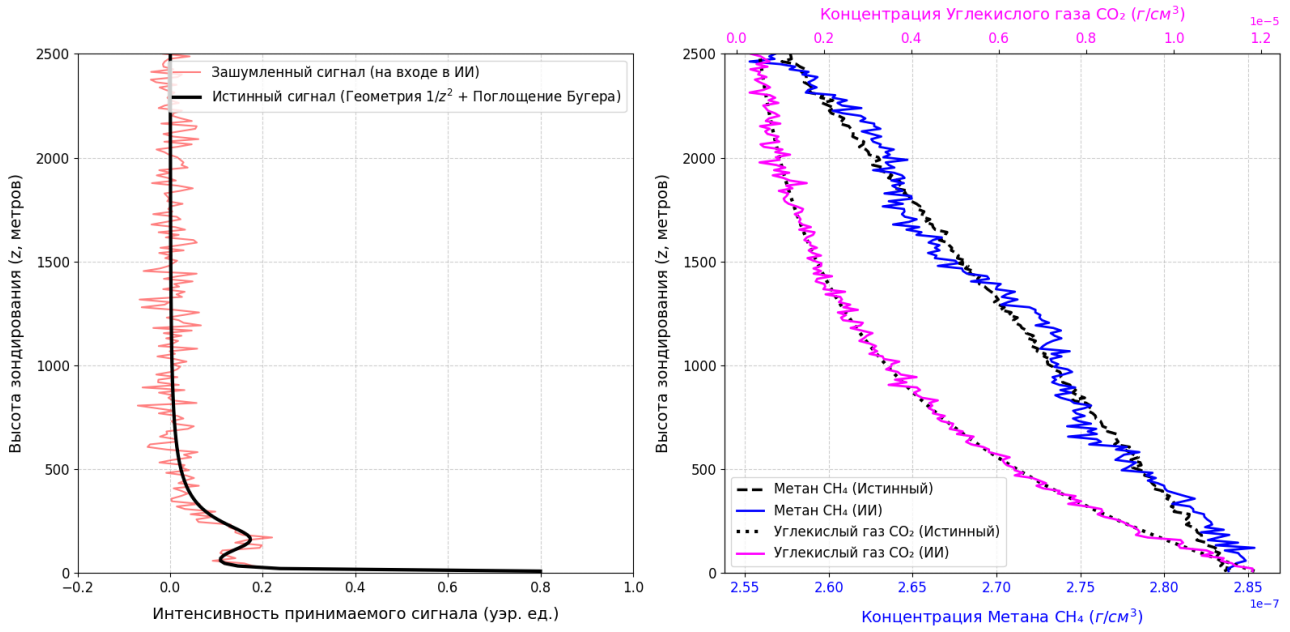


Рис. 1. Физическая модель регистрируемого зашумленного сигнала широкополосного лидара (слева) и восстановленные нейросетью вертикальные профили концентрации атмосферных газов (справа).

Как видно из левой части рис. 1, модель корректно учитывает переходный процесс геометрического перекрытия телескопа O(z) на высотах до 250 метров, а также сохраняет устойчивость к отрицательным значениям амплитуды сигнала на высотах более 1200 метров. Из правой части рис. 1 следует, что гибридная сеть с высокой точностью аппроксимирует истинные аналитические профили распределения компонентов (Газ №1 и Газ №2) по высоте, эффективно фильтруя высокочастотный шум и компенсируя падение интенсивности пучка. Разделение шкал концентраций позволило устранить взаимное маскирование газов с разными порядками физических величин.

Список литературы

1. Inversion of the planetary boundary layer height from lidar by deep learning method / J. Wang, X. Zhang, L. Chen [et al.] // Optics Express. — 2024. — Vol. 32, No. 4. — P. 5412–5428.

Accelerating greenhouse gas retrievals with neural network emulators / M. Rossi, H. Lindqvist, J. Tamminen [et al.] // Atmospheric Measurement Techniques. — 2026. — Vol. 19, No. 2. — P. 1145–1161.

МОРФОЛОГИЯ И СТРУКТУРА ПЛЕНОК ОКСИДА ЦИНКА НА КРЕМНИЕВОЙ ПОДЛОЖКЕ, ФОРМИРУЕМЫХ МЕТОДОМ ТЕРМИЧЕСКОГО РАСПЫЛЕНИЯ

Д.Ж. Асанов[1]., М.И. Маркевич[2]., Е.Н. Щербакова[3]

[1]*Нукусский государственный педагогический институт имени Ажинияза, Нукус, Узбекистан*

[2]*Физико-технический институт Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь*

[3]*Белорусский национальный технический университет. Минск, Беларусь*

dauranbek83@list.ru

Дальнейший прогресс в области создания материалов с новыми функциональными свойствами связан с целенаправленным изменением их структуры, оказывающим существенное влияние на фундаментальные физические характеристики материалов. Одним из наиболее перспективных направлений современного физического материаловедения является создание и исследование материалов, структура которых формируется из кластеров, малых кристаллитов и других структурных фрагментов, содержащих порядка 10^2-10^4 атомов. Наноструктурированное состояние может быть реализовано в материалах, размеры кристаллических зерен которых не превышают 10-40 нм. Кроме того, наноструктурированное состояние материала может формироваться в виде фрактальных структур [1-4]. Успехи современных технологий неразрывно связаны с разработкой и исследованием новых полупроводниковых материалов. Несмотря на то, что ZnO не является новым материалом для микроэлектроники и исследуется на протяжении нескольких десятилетий, в последние годы существенно возрос интерес к получению и изучению структур ZnO, в том числе наноразмерных [1].

Оксид цинка является прямозонным широкозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны около 3,37 эВ и большой энергией связи экситона, составляющей приблизительно 60 мэВ при комнатной температуре. Благодаря своим оптическим и электрическим свойствам оксид цинка представляет значительный интерес для создания полупроводниковых светодиодов и лазеров,

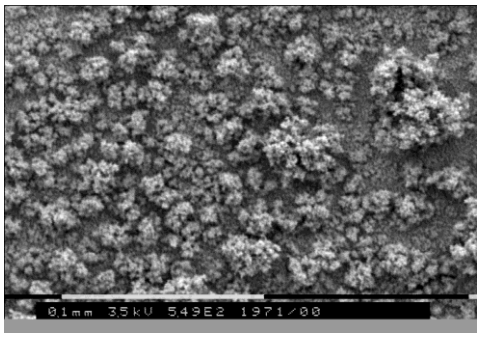
работающих в синей и ближней ультрафиолетовой областях спектра. Такие устройства могут рассматриваться в качестве потенциальной альтернативы излучателям на основе GaN. Перспективность ZnO обусловлена его высокой энергией экситонного возбуждения, относительной радиационной стойкостью и многофункциональностью. Оксид цинка обладает рядом важных физических свойств, включая пьезоэлектрические, оптические и полупроводниковые характеристики [2-4]. Материалы на основе ZnO могут использоваться при создании газовых сенсоров, солнечных элементов, фотодетекторов и устройств, работающих в ультрафиолетовой области спектра. Особый научный интерес представляют наночастицы ZnO с характерными размерами порядка нескольких десятков нанометров. Керамические материалы на основе оксида цинка в настоящее время широко применяются для производства нелинейных резисторов - варисторов, характеризующихся высоким коэффициентом нелинейности. Такие варисторы используются при изготовлении ограничителей перенапряжений и других устройств электронной техники.

Для синтеза пленок оксида цинка применяются различные методы, включая молекулярно-лучевую эпитаксию (MBE), химическое осаждение из газовой фазы (CVD), лазерное осаждение (LPD), а также различные методы химического синтеза (wet chemistry). Вместе с тем, несмотря на значительный объем экспериментальных исследований, выполненных в области получения пленок ZnO, проблема целенаправленного формирования пленок с заданной структурой и требуемыми функциональными свойствами до настоящего времени остается решенной не полностью.

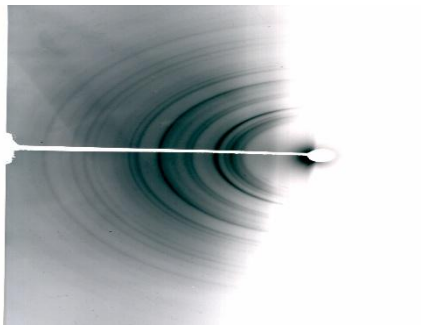
В настоящей работе представлены результаты исследования морфологии и структуры пленок оксида цинка, формируемых на кремниевых подложках методом термического испарения в атмосфере инертного газа. Для реализации процесса термического осаждения пленок оксида цинка использовалась трубчатая графитовая (танталовая) печь, нагреваемая электрическим током. В процессе исследования были установлены основные закономерности

формирования наноразмерных структур оксида цинка на кремниевых подложках при термическом испарении исходного порошка в потоке инертного газа. Для исследования параметров, синтезированных наноструктур применялись методы сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, а также рентгеноструктурного анализа. Были исследованы элементный и фазовый составы, а также изучены морфология и структура пленок оксида цинка, осажденных на подложки из монокристаллического кремния.

На рисунке 1 представлены морфология поверхности полученной пленки и соответствующая электронограмма. Как показывают результаты анализа электронограмм, на кремниевую пластину осаждались не только частицы оксида цинка, но и углеродсодержащие продукты, вероятно связанные с материалом нагревательного элемента. На структуре, представленной на рисунке 1а, наблюдаются крупные облакоподобные образования, состоящие из более мелких скоплений преимущественно округлой формы. Размер облакоподобных образований достигает примерно 10 мкм и более. Из отдельных агрегатов формируется фрактальная структура, напоминающая по своей морфологии «цветную капусту». Как правило, подобные структуры могут формироваться в результате агрегации наноразмерных кластеров, имеющих преимущественно сферическую форму.



а



б

Рисунок 1 - а) морфология поверхности кремниевой подложки с частицами оксида цинка после осаждения; б) электронограмма частиц оксида цинка.

Элементный состав осажденной пленки представлен на рисунке 2.

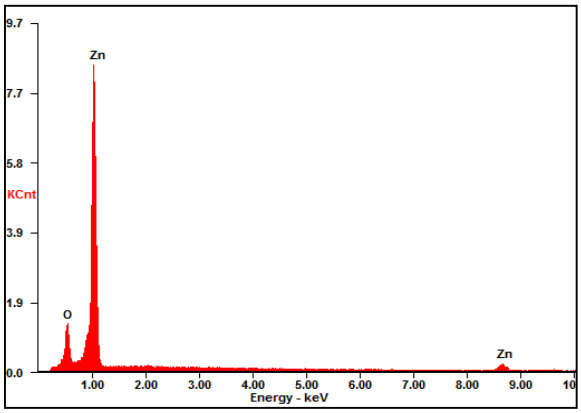


Рисунок 2 - Элементный состав осажденной пленки ZnO.

Таким образом, установлено, что методом термического испарения в атмосфере инертного газа возможно получение пленок оксида цинка на кремниевых подложках. Показано, что при осаждении формируются агрегированные структуры с фрактальной морфологией. Размеры отдельных наноразмерных структур и частиц определяются условиями процесса синтеза и агрегации.

Литература

1. Золотухин И.В., Калинин Ю.Е., Стогней О.В. Новые направления физического материаловедения. - Воронеж: Воронежский государственный университет, 2000. - 359 с.

2. Levinson L.M., Philip H.R., Mahan G.D. Evidence for parallel conduction in ZnO varistor // Advances in Varistor Technology. Ceramic Transactions. - 1989. - Vol. 3. - P. 145.

3. Бураков В.С., Буцень А.В., Мисаков П.Я., Невар Е.А., Неделько М.И., Савастенко Н.А., Тарасенко Н.В., Маркевич М.И., Чапланов А.М. Электроразрядный синтез наноразмерных структур оксидов и карбидов металлов в жидкостях // II Международная научно-техническая конференция «Современные методы и технологии создания и обработки материалов». - Минск, 2007. - С. 158-162.

4. Маркевич М.И., Камалов А.Б., Асанов Д.Ж., Нажепова С.Р. Исследование элементного состава и фазовых превращений в системе Ni-V-Pt при стационарном отжиге. Science and World, 2023, № 6(118), с. 8-10

GENERATION THIRD HARMONIC IN LASER-INDUCED PLASMAS: EXPERIMENT AND THEORY

D. B. Yusupov[1], R. A. Ganeev[2], V. V. Kim[2] and S. B. Isamov[1]

[1]Tashkent State Technical University, Tashkent 100095, Uzbekistan.

[2]New Uzbekistan University, Tashkent 100007, Uzbekistan,

We study THG in C, Ag, Ni, and plasmas, which showed specific peculiarities as functions of laser intensity, conditions of plasma formation, and distance from the ablating surface. The efficient THG up to 3×10^{-3} conversion efficiency is achieved during these studies, while the restricting factors are determined and discussed. The developed theory of THG in LIP provides a novel approach for diagnosing plasma parameters. As noted above, the obtained results and comparison of experiment and theory will make it possible to further optimise the wavelength conversion process in plasma using various advanced approaches developed for the generation of higher-order harmonics [1,2].

The most commonly used THG method in LIP is as follows. Laser plasma is created inside a vacuum chamber by focusing picosecond or nanosecond radiation from various lasers. The heating pulses are focused on the surface of various targets under study. After a certain delay from the start of laser ablation of targets, which is necessary for the plasma plume to fly away from the surface of the samples, focused radiation from a femtosecond laser is directed into it. During the interaction of an intense laser field with atoms and ions of a plasma plume, the TH of this field is generated (Fig. 1).

The used experimental conditions in the present study were as follows. The radiation of the Ti:sapphire laser (λ = 800 nm, τ = 65 fs) was focused by a 200 mm focal length spherical lens in the vacuum chamber (beam waist radius of the focused radiation w_0 = 32 μm). The intensity of the fundamental femtosecond pulse in the focal plane was adjusted in the range of $5\cdot10^{12}$ W cm^{-2} and 10^{14} W cm^{-2}. The 200 ps pulses from the same laser were focused using a 300 mm focal length spherical lens on the studied targets to heat the targets and produce the optimal plasma. The term “optimal” refers in that case to the conditions of the maximal yield of TH. The area of the focused

heating picosecond pulses was 0.4 mm, and the intensity on the surface was varied in the range between 2 GW/cm^2 and 40 GW/cm^2 depending on the used target. Carbon (C), silver (Ag), nickel (Ni) bulk targets were used during these studies for the formation of LIPs.

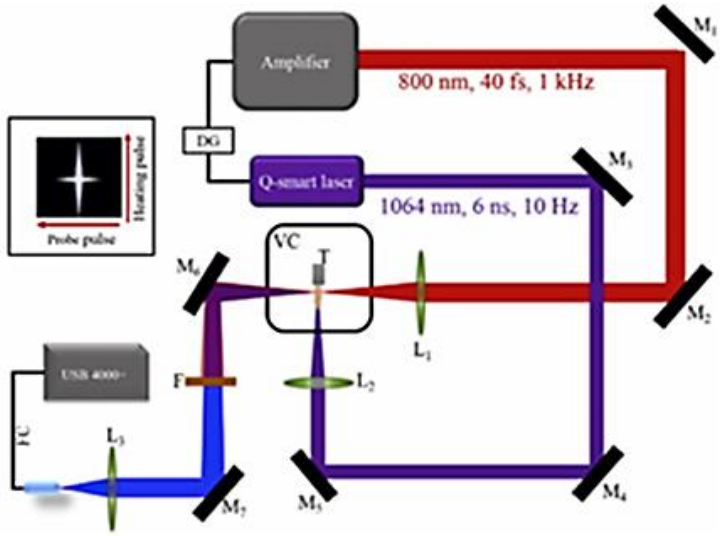


Fig.1. Experimental setups for THG in vacuum conditions of method LIP. M: mirrors, L: lenses, F: filter, T: target, VC-vacuum chamber, DG: delay generator.

In theoretical calculations, we used the following expression for the total phase mismatch Δk, which generally depends on the concentration of free electrons n in the plasma:

$$\Delta k \approx \Delta k_{elect} = \frac{e^2 n}{4 m_e c \omega}. \quad (1)$$

As can be seen from (1), Δk depends linearly on the electron concentration n and is inversely proportional to the frequency of the driving laser radiation ω. Thus, the functional dependence of the phase factor can be written as $F[\Delta k(n,\omega), L]$. We note that the plasma plume thickness L depends on the distance x from the laser radiation focal point to the target, i.e., $L(x)$. On the other hand, the nonlinear susceptibility of the plasma $\chi^{(3)}$ depends linearly on n according to the expression $\chi^{(3)} = \gamma n$, where γ is the atomic hyperpolarizability. Let us consider the THG efficiency in the plasmas of various atoms in a physically more complete form that accounts for absorption, which is described by the expression:

$$\eta_a = \left|\chi_a^{(3)}\right|^2 \left(\frac{n_{e,a}}{n_c}\right)^2 I_p^2 L_{eff,a}^2 \mathrm{sinc}^2\left(\frac{\Delta k_a L_{eff,a}}{2}\right) e^{-\alpha_a L_{eff,a}}, \quad (2)$$

where the subscript a denotes a specific atom or plasma material, I_p is the pump intensity, n_c is the critical plasma density, α_a is the absorption coefficient at the TH frequency, and $L_{eff,a}$ is the effective interaction length for third-harmonic generation in the laser-induced plasma. This represents the actual length of the region over which the ω and 3ω waves effectively interact and the harmonic accumulates coherently.

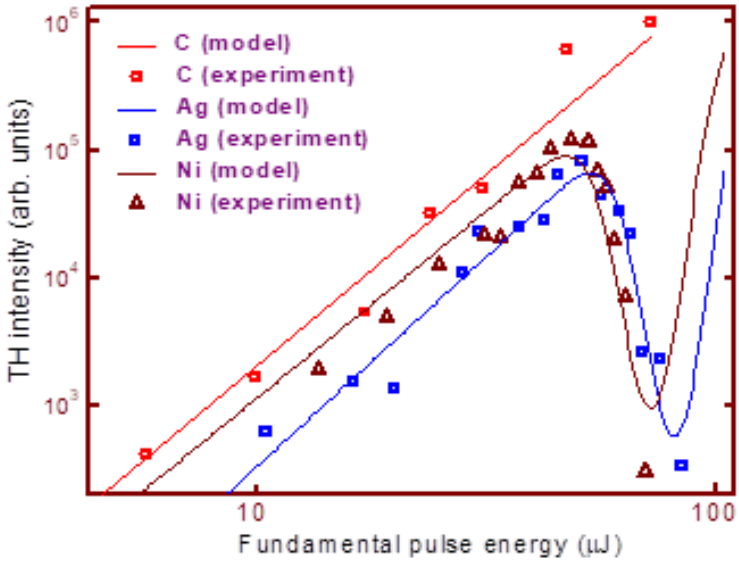


Fig. 2. The experimental (points) and theoretical (solid) dependencies of TH intensity to energy

A comparison between the theoretical curves (solid lines) and the experimental data (symbols) shown in Fig. 2 demonstrates a good overall agreement over the entire investigated range of fundamental pulse energies. These results indicate that the proposed theoretical approach adequately describes the dominant physical mechanisms governing THG in laser-produced plasmas once one considers the role of the fundamental pulses in this process.

References

1. E. Rizvanov, S. Kern, P. Nelinger and M. Grajcar, “Third harmonic-mediated amplification in TWPA,” J. Appl. Phys. 139, 074402 (2026).
2. R. A. Ganeev, “High-order harmonics enhancement in laser-induced plasma,” Scient. Reports 13, 13951 (2023).

THE ROLE OF THE FAST FOURIER TRANSFORM SPECTRUM OF AN APPLIED LASER PULSE

Umarov Otabek Abdullaevich[1,2], Karimbayev Eldor Xalmuratovich[2]
1 Department of Exact Sciences, Kimyo International University in Tashkent, Shota Rustaveli street 156, Tashkent 100121, Uzbekistan, e-mail: otabekumarov@kiut.uz
2 Institute of Fundamental and Applied Research, National Research University TIIAME, Kori Niyoziy 39A, Tashkent 100000, Uzbekistan, e-mail: eldor.karimbaev@ifar.uz

The Fourier spectrum of an ultrashort laser pulse establishes a quantitative relationship between the temporal profile of the driving field and its ability to spectrally resolve individual molecular vibrational and rotational states during laser-induced photodissociation. Here, resonance-enhanced photodissociation of NH involving the $X^3\Sigma^-$, $A^3\Pi$, and $2^3\Pi$ triplet electronic states is used as a representative system (see Ref. [1] for detail). In this work, the Fourier transforms of Gaussian laser pulses with durations of 100 fs and 260 fs are evaluated, and their full widths at half maximum (FWHM) are determined to examine how pulse bandwidth affects resonant excitation of rovibrational eigenstates.

Ultrafast laser pulses are the principal tool for controlling and probing molecular dynamics in the gas phase, including bond softening/hardening, light-induced conical intersections (LICI), and resonance-enhanced photodissociation [1–3]. A key, often underappreciated, aspect of such experiments and simulations is the frequency-domain content of the applied pulse itself. Because any finite-duration pulse has a finite spectral bandwidth, the fast Fourier transform (FFT) of the electric field determines which molecular eigenstates lying within this bandwidth can be coherently coupled by the laser. In this work, we focus specifically on the FFT spectra of the applied pump pulse (Fig. 1) and discuss the methodology for their calculation and their physical significance for molecular dynamics research.

The linearly polarized laser field used to drive the (1+1) photodissociation of NH is written in the dipole approximation as

$$E(t) = E_0 f(t) cos(\omega_L t) \quad (1)$$

where E_0 is the peak field amplitude (related to the peak intensity via $I_0 = E_0^2/8\pi\alpha_{FS}$, with α_{FS} the fine-structure constant), ω_L = 3.984 eV is the carrier (central) photon energy, and f(t) is the pulse-envelope function. To obtain the frequency-domain (FFT) spectrum of the pulse, the discretized time-domain field $E(t_i), i = 0, \dots, N-1$ is Fourier-transformed numerically:

$$E(\omega_k) = \sum_i E(t_i) e^{-\mathrm{iRkt}}, \omega_k = 2\pi k/(N\Delta t) \quad (2)$$

evaluated with the fast Fourier transform algorithm (np.fft.fft). The spectrum is normalized to its maximum,

$$S(\omega) = \left| E(\omega)/E_{max}(\omega) \right| \quad (3)$$

so that $S(\omega) \in [0,1]$.

Figure 1 presents the normalized FFT spectra of the pump laser field for two pulse durations, τ = 100 fs [panels (a) and (c)] and τ = 260 fs [panels (b) and (d)], for a carrier energy $\omega_L = 3.984$ eV and peak intensity $I_0 = 10^{13}$ W/cm². Applying Eqs. (1)-(4) to the two pulses shows that the shorter τ = 100 fs pulse produces a much broader spectral peak, with FWHM = 0.041 eV, whereas the longer τ = 260 fs pulse yields a narrower peak with FWHM = 0.016 eV – an inverse relationship expected from the time-bandwidth (Fourier) uncertainty principle, ΔE·τ ≈ const.

This demonstrates the central role of the FFT spectrum as a diagnostic and predictive tool in molecular dynamics research: (i) it quantifies the spectral resolution (bandwidth) of a given pulse duration; (ii) it predicts whether single-level or multi-level (wave-packet) excitation will occur, given the density of states in the target electronic manifold; (iii) it explains the number and position of peaks observed in the KER spectra and angular distributions of photofragments, since these peaks originate directly from the rotational/vibrational eigenstates lying within the FFT bandwidth around the nominal position ω_{NP}; and (iv) it enables the number of completed Rabi oscillations to be connected quantitatively to the pulse duration and hence to the spectral width, even though these two numbers do not always coincide once molecular rotation is included in the full two-dimensional model. FFT spectra of the laser field

are shown with its parameters: $\omega_L = 3.984$ eV, and $I_0 = 10^{13}$ W/cm^2 for two different pulse durations τ = 100 fs and 260 fs. The 100 fs pulse has a comparatively broad spectral profile, with an FWHM of 0.041 eV, and primarily accesses the resonant ν=0 vibrational level.

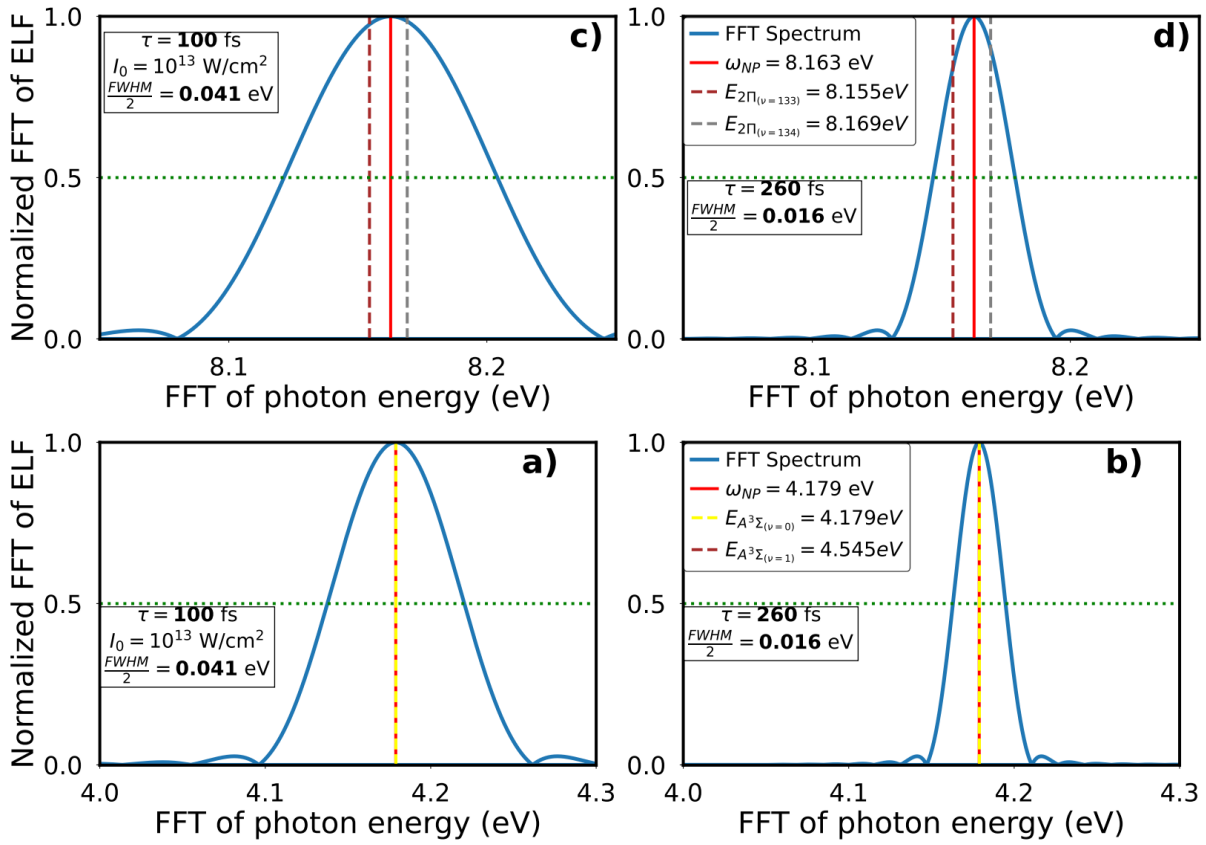


Fig. 1. In contrast, extending the pulse duration to 260 fs reduces the spectral width to 0.016 eV, allowing enhanced selectivity among individual rotational components.

References

1. Umarov O., Umarova D. Light-induced pulse-dependent photodissociation in the triplet states of NH // Optics Communications. – 2026. – Vol. 617. – P. 133415.
2. Umarova D., Umarov O., Tóth A., Csehi A. Spectral evidence of vibronic Rabi oscillations in the resonance-enhanced photodissociation of MgH+ // Phys. Rev. A. – 2024. – Vol. 110, No. 3. – P. 033112.
3. Halász G.J., Vibók Á., Cederbaum L.S. Direct signature of light-induced conical intersections in diatomics // J. Phys. Chem. Lett. – 2015. – Vol. 6, No. 3. – P. 348–354.
4. Liu Y.R., Wu Y., Wang J.G., Vendrell O., Kimberg V., Zhang S.B. Photodissociation dynamics of the NH molecule under intense VUV pulses // Phys. Rev. Res. – 2020. – Vol. 2, No. 4. – P. 043348.

СВОЙСТВА ОПТИЧЕСКИХ СОЛИТОНОВ В СРЕДАХ С ВЫСШЕЙ ДИСПЕРСИЕЙ

Цой Э. Н.
Физико-технический институт АН РУз, Ташкент, Узбекистан
e.n.tsoy@gmail.com

Зависимость показателя преломления от частоты приводит к дисперсии света, которая проявляется, в частности, в том, что волны с разными частотами распространяются с разными групповыми скоростями. В оптических волноводах, параметр дисперсии групповой скорости (ДГС) β_2 может также зависеть от частоты. Это приводит к появлению эффектов дисперсии высшего порядка. Известно, что баланс между ДГС и кубичной нелинейностью приводит к формированию устойчивых локализованных импульсов – оптических солитонов [1]. В 2016 году было показано, что оптические солитоны возможны также при распространении света в нелинейном волноводе с дисперсией только четвертого порядка [2]. Поэтому в последнее время идет активное исследование оптических солитонов в волноводах с учетом дисперсии высших порядков [3-6]. В частности, было обнаружено, что оптические солитоны в таких средах могут иметь осциллирующие хвосты, спектр таких импульсов может быть асимметричным, или содержать два максимума. Также, было получено, что скорость солитона в запаздывающей системе отсчета может быть отличной от обратной групповой скорости линейных волн на центральной частоте солитона [6].

В данной работе развита теория, которая объясняет многие свойства оптических солитонов в средах с дисперсией четвертого порядка общего вида. Также, предлагается метод для определения приближенных значений параметров солитонов. Распространение света в волноводах при учете дисперсии и нелинейности описывается следующим уравнением для огибающей электрического поля $\psi(\tau, z)$ [1,2]:

$$i\psi_z - \frac{\beta_2}{2}\psi_{\tau\tau} - i\frac{\beta_2}{6}\psi_{\tau\tau\tau} + \frac{\beta_4}{24}\psi_{\tau\tau\tau\tau} + \gamma|\psi|^2\psi = 0,$$

где τ – время в запаздывающей системе отсчета, z – продольная координата вдоль оси волновода, β_j – параметры дисперсии j-го порядка, j = 2, 3, 4, γ – параметр нелинейности среды.

Ранее было получено, что в средах с дисперсией 4-го порядка возможны солитоны с двумя пиками в спектре [3,5]. Данные солитоны называются двух-частотными (или двухцветными). Но детальные условия возникновения таких солитонов не были получены. Нами найдены условия существования одночастотных (с одним пиком в спектре) и двухчастотных солитонов. Показано, что при изменении энергии, солитон может трансформироваться из одночастотного в двухчастотный. При этом двухчастотный солитон может рассматриваться, как комбинация двух импульсов с разными центральными частотами. Интересно, что центральные частоты этих импульсов соответствуют одному значению групповой скорости линейных волн. Параметры двухчастотного солитона можно приближенно определить по параметрам составляющих его импульсов. В свою очередь параметры составляющих импульсов определяются, в основном, параметром *локальной* дисперсии групповой скорости и параметром γ.

Таким образом, в работе развит метод для приближенного вычисления параметров одно- и двухчастотных солитонов. Данный метод можно обобщить на случай дисперсии высших порядков, когда в среде будут формироваться многочастотные солитоны.

[1] G. P. Agrawal, Nonlinear Fiber Optics, 4th ed. (Academic Press, 2007).

[2] A. Blanco-Redondo, et al, Pure-quartic solitons, Nat. Commun. **7**, 10427 (2016).

[3] O. Melchert and A. Demircan, Incoherent two-color pulse compounds, Opt. Lett. **46**, 5603 (2021).

[4] J. Widjaja, et al, Phys. Rev. A **104**, 043526 (2021).

[5] J. P. Lourdesamy, et al, Nature Physics **18**, 59 (2022).

[6] E. N. Tsoy and L. A. Suyunov, Opt. Comm. **608**, 133050 (2026).

THIRD- AND FIFTH-HARMONIC GENERATION FROM CDS THIN FILMS OF VARYING THICKNESS IN THE NEAR-INFRARED REGION

F. M. Tojinazarov[1,2], V.V. Kim[2] and R. A. Ganeev[2]
[1]Arifov Institute of Ion–Plasma and Laser Technologies, Tashkent, Uzbekistan
[2]Institute for Advanced Studies, New Uzbekistan University, Tashkent Uzbekistan
furqattojinazarov@gmail.com

Low-order harmonic generation in thin semiconductor films provides a sensitive probe of nonlinear optical response and offers a route to compact frequency-conversion sources spanning the visible and near-UV. In this work, we investigate third- and fifth-harmonic generation (THG and FHG) from CdS thin films pumped by 200 fs near-infrared pulses tunable across 1900–2300 nm, generated via optical parametric amplification (Jasper 20, Fluence Technology). Six CdS films were deposited by magnetron sputtering with increasing deposition times (5, 10, 15, 20, 25, and 30 min) under fixed conditions (argon flow 8 sccm, RF power 40 W, working pressure 3-3.5 mTorr, substrate temperature 280 °C), yielding films of progressively greater thickness.

The resulting third-order emission (633-767 nm) and fifth-order emission (380-460 nm) were recorded simultaneously with an Ocean Optics SR4 spectrometer across the full pump tuning range. Both harmonic orders were observed from all six CdS films over the entire 1900-2300 nm range, with spectral positions matching the expected $\lambda/3$ and $\lambda/5$ wavelengths. The fifth-harmonic signal was undetectable from the bare glass substrate at any pump wavelength, confirming that FHG is enabled by the CdS film.

The relative yield of the two harmonics depended strongly on pump wavelength: third-harmonic emission dominated near 2100 nm, while fifth-harmonic emission became stronger at 2200–2300 nm (with a partial reversal for the thickest film at 2300 nm). The dependence of harmonic yield on film thickness and pump wavelength provides insight into the interplay among quantum-confinement effects, absorption near the CdS band edge, and phase-matched frequency conversion. These results extend the study of low-order harmonic generation in II–VI semiconductor thin films into the underexplored 1900-2300 nm region and support the use of CdS films as

accessible, readily fabricated media for nonlinear frequency conversion and thin-film nonlinear-optical characterization.

References

1. Ganeev, R.A., Kim, V.V., Shuklov, I.A., Popov, V.S., Lavrentyev, N.A., Ponomarenko, V.P., Mardini, A.A., Dyomkin, D.V., Milenkovič, T., Bundulis, A., Grube, J., Sarakovskis, A. Third harmonic generation in the thin films containing quantum dots and exfoliated nanoparticles. *Appl. Phys. B* **128**, 202 (2022).

2. Ganeev, R.A., Buriyev, Y.A., Kim, V.V., Eshchanov, B.K., Sobirov, B.R., Kodirov, M.K., Sapaev, I.B., Sadullaev, S. Nonlinear optical absorption in CdS thin films at 1030 nm and 515 nm. *Opt. Quantum Electron.* (2025).

3. Bundulis, A., Shuklov, I.A., Kim, V.V., Mardini, A., Grube, J., Alnis, J., Lizunova, A.A., Razumov, V.F., Ganeev, R.A. HgTe QD synthesis and characterization. *Nanomaterials* **11**, 3351 (2021).

4. Ganeev, R.A., Popov, V.S., Zvyagin, A.I., Lavrentyev, N.A., Mirofyanchenko, A.E., Mirofyanchenko, E.V., Shuklov, I.A., Ovchinnikov, O.V., Ponomarenko, V.P., Razumov, V.F. Bi_2Te_3 nanoparticle exfoliation and characterization. *Nanophotonics* **10**, 3857 (2021).

LED END-PUMPED Dy:YAG YELLOW LASER

Shermatova Feruza, Payziyev Shermakhamat, Begimqulov Sherzod
U.A. Arifov Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies
feruza.shermatova@iplt.uz

Yellow lasers near 580 nm are of interest for ophthalmic, biomedical, and photonic applications [1, 2]. Conventional approaches, such as second-harmonic generation, sum-frequency generation, and Raman-laser frequency doubling, typically require nonlinear frequency conversion, which can increase system complexity and introduce efficiency and stability limitations. Direct emission from rare-earth-doped laser media offers a simpler alternative. In particular, Dy^{3+}-doped materials can generate yellow radiation via the $^4F_{9/2} \rightarrow {}^6H_{13/2}$ transition. In this work, we present a numerical study of a compact LED-end-pumped Dy:YAG single-crystal laser emitting at 582.7 nm based on Monte Carlo photon tracing.

The absorption spectrum of 2% Dy:YAG was integrated into the simulation model (Fig. 1a). The conical pump chamber configuration is schematically illustrated in Figure 1b. A Ø3 mm × 30 mm Dy:YAG laser rod was end-pumped using a blue LED with a peak emission at ~447 nm.

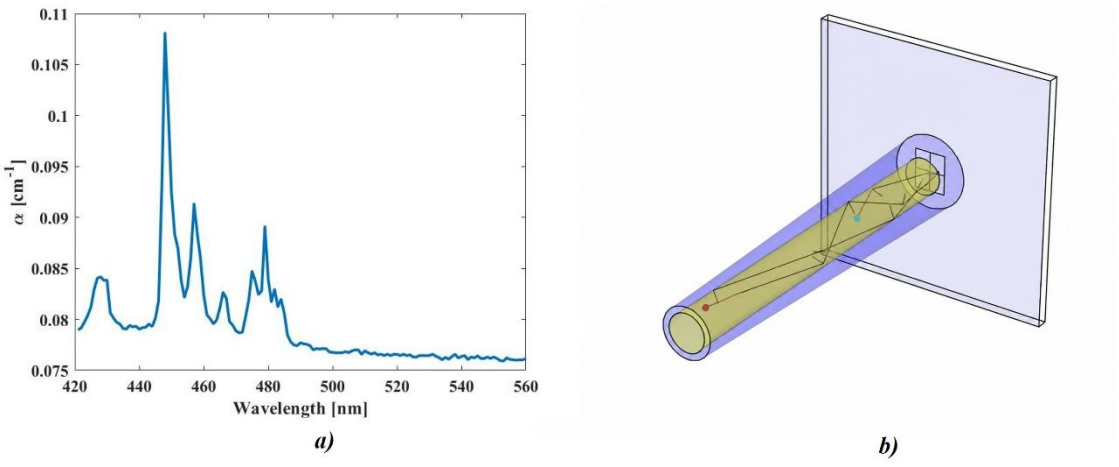


Figure 1. *a) absorption spectrum of Dy:YAG [3]; b) general view of pumping chamber*

The simulated absorption efficiency was 15.28%, primarily due to the relatively low absorption coefficient of Dy:YAG. The corresponding spatial distribution of absorbed pump power within the crystal was also obtained (Fig. 2a). Using this distribution together

with space-dependent continuous-wave (CW) rate equations and the Dy:YAG laser parameters listed in Table 1, the laser output power was subsequently calculated (Fig. 2b).

Table 1. Laser parameters of Dy:YAG

Parameters	**Dy:YAG**
Dy dopant concentration (at. %)	2
Fluorescence lifetime (µc)	688
Stimulated emission cross section (cm^2)	2.66×10^{-21}
Emission wavelength (nm)	582.7
Refractive index	1.85
Active ion concentration (cm^{-3})	2.78×10^{20}
Quantum yield (%)	68.87
Internal loss (cm^{-1})	0.0048

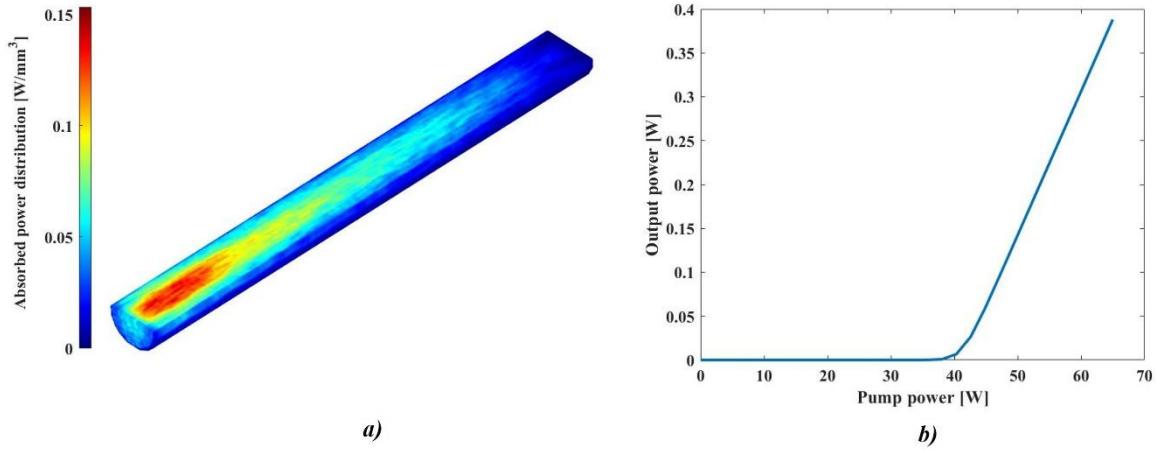


Figure 2. a) absorbed power distribution within Dy:YAG; b) laser output power versus LED optical power

The preliminary analysis indicates the potential for yellow laser operation at 582.7 nm with an output power of 0.39 W and an optical-to-optical efficiency of 0.6%. Future work will focus on investigating thermal effects and alternative LED-pumping configurations of the Dy:YAG laser medium.

1. Iovino, Claudio, et al. Ophthalmology and therapy 12.3 (2023): 1479-1500.

2. Mohamed, Essam-Elden M. et al. Journal of cosmetic dermatology 18.6 (2019): 1675-1679.

3. Ju, Qiaojun, et al. Optica Publishing Group, 2017.

OPTICAL HIGH HARMONIC GENERATION IN A ONE-DIMENSIONAL RELATIVISTIC ATOM

Matchonov Quvonchbek Po‘lat o‘g‘li
Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston milliy universiteti
kuvonchbekmatchonov@gmail.com

Optical high-harmonic generation (HHG) is a nonlinear optical phenomenon in which an intense laser field induces the emission of radiation at frequencies that are integer multiples of the fundamental laser frequency. Under a strong laser field, an electron can tunnel out of an atom, gain energy while being accelerated by the oscillating electric field, and subsequently return to the parent ion. Upon recombination, the electron releases its acquired energy in the form of a high-energy photon, resulting in the generation of high-order harmonics. High harmonic generation on a one-dimensional relativistic hydrogen-like atom in graphene interacting with external monochromatic field is studied by solving the Dirac equation. We choose as the external optical electromagnetic field a linearly polarized electromagnetic potential with field strength ϵ (that is, the amplitude of the electric field) and frequency ω_0 given by

$$V(x,t) = x\epsilon\cos\omega_0 t \tag{1}$$

Such system can be described in terms of time-dependent Dirac equation as

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + V\right)\Psi \tag{2}$$

where $\hat{H}_0$ is the Hamilton operator of a free one-dimensional hydrogen-like atom when the external field does not affect it. We seek the solution of Eq. (2) by expanding in terms of complete set of eigenfunctions of unperturbed atom given by

$$\Psi = \sum C_n(t)\psi_n \tag{3}$$

where $C_n(t)$ is the expansion coefficient.

Eigenfunctions of unperturbed atom are obtained by solving the Dirac equation as following

$$\begin{pmatrix} -i\,\partial_x & i \\ -i & i\,\partial_x \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} = \left(E + \frac{\alpha}{a+|x|}\right)\begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} \quad (4)$$

Substituting (3) into the Eq. (2), using orthonormalization condition give us a system of the first order ordinary differential equation as

$$i\dot{C}_n(t) = C_n(t)E_n + \epsilon\cos\omega_0 t \sum_m C_m(t)V_{mn} \quad (5)$$

where E_n - eigenvalues of the unperturbed atom and

$$V_{mn} = \int_0^\infty x\psi_n^\dagger(x)\psi_m(x)dx\,. \quad (6)$$

Detailed description of the high harmonic generation in quantum regime can be found in [3]. The main physical characteristics of such process is the average dipole moment which is given by [3]

$$\langle d(t)\rangle = -\langle\Psi(\vec{r},t)|x|\Psi(\vec{r},t)\rangle \quad (7)$$

The spectrum of high harmonic generation (HHG) is characterized by the quantity [3]

$$I(\omega) = |<d(\omega)>|^2 = \left|\frac{1}{T}\int_0^T e^{-i\omega t} < d(t) > dt\right|^2 \quad (8)$$

where T is the total duration of interaction.

Solving Eq. (5) numerically allows us to determine the wave function of a one-dimensional relativistic hydrogen-like atomic electron interacting with the external optical electromagnetic field.

References

[1] L. Brey and H. A. Fertig, Phys. Rev. B 73, 235411 (2006).

[2] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Perez, K.S. Novoselov, A.K. Geim, Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009).

[3] R.W. Boyd, Nonlinear Optics, 3rd ed., Academic Press (2007).

[4] D. Novikov, Phys. Rev. B 76, 245435, (2007).

[5] V.R. Khalilov and Choon-Lin Ho, Mod. Phys.Lett. A 13, 615, (1998).

[6] C. A. Downing and M. E. Portnoi, Phys. Rev. A, 90052166 (2014).

[7] M.Lewkowicz, H.C. Kao and B. Rosenstein, Phys. Rev. B. 84, 035414, (2011).

ANALYSIS OF THE SURFACE OXIDE LAYER ON Ti-6Al-4V ALLOY POWDERS USING RAMAN SPECTROSCOPY

B.A. G’oipov, A.A. Zaripov

Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies named after U.A Arifov, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, 100125, Tashkent
e-mail: goipovbunyod7@gmail.com

In this abstract, the surface layer structure and oxide phase configurations of Ti-6Al-4V alloy powder used in Additive Manufacturing (AM, e.g., EBM, DED, SLM) were analyzed based on Raman spectroscopy results. Ti-6Al-4V (Grade 5) alloy is widely utilized as a primary raw material in the aerospace, automotive, chemical, and medical sectors due to its high strength-to-weight ratio, excellent corrosion resistance, and superior biocompatibility [v]. The morphological characteristics of these powder particles—such as shape and size—along with the nature of the surface oxide layer (including amorphous, anatase, or rutile TiO_2 phases), significantly influence the quality, densification, and mechanical performance of the final manufactured components.

Raman spectroscopy is one of the most surface-sensitive techniques for probing chemical bonding and lattice vibrational modes in the oxide layer, as each TiO_2 distinct phase exhibits characteristic phonon vibration frequencies [vi]. Complementarily, confocal microscopy enables high-precision visual assessment of the morphological features of the powder particles, including their shape, size, and sphericity (Fig.1).

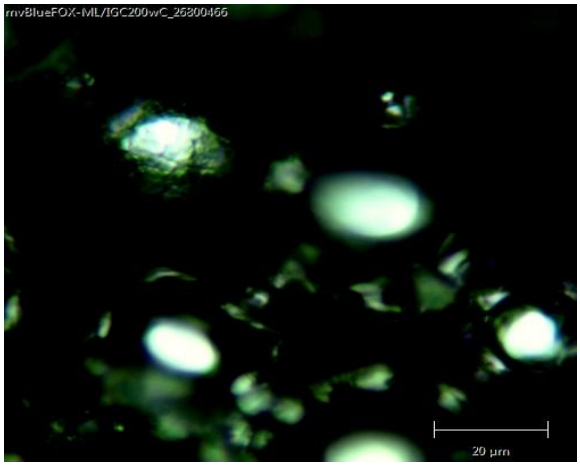


Fig. 1. Confocal microscopy image of Ti-6Al-4V alloy powder particles (×200, scale bar — 20 µm).

The image acquired via microscopy reveals that the powder particles exhibit a spherical or quasi-spherical morphology, with an average size of approximately 20 μm. Concurrently with this imaging analysis, the surface oxide layer of the powder particles was evaluated using a Raman spectrometer equipped with a 532 nm laser (Fig. 2).

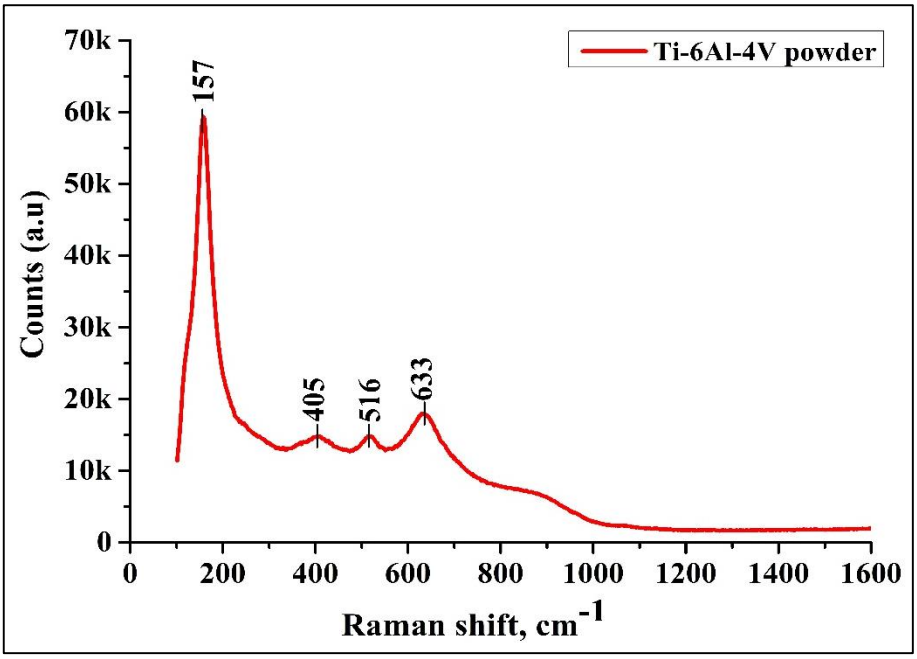


Fig. 2. Raman spectrum of Ti-6Al-4V alloy powder (532 nm laser, ×50 objective lens, 1800 sm^{-1}/mm grating).

Intense peaks were observed in the acquired spectrum at approximately 157, 405, 516, and 633 cm^{-1}. In the region above 1000 cm^{-1}, the baseline remains virtually flat, with no significant vibrational modes detected.

The recorded peaks at 157 cm^{-1} and 633 cm^{-1} $B1_g$, alongside the peak at 516 cm^{-1} $A1_g$, correspond to the anatase phase of titanium dioxide, whereas the peak at 405cm^{-1} is associated with the vibrational modes of V_2O_5 [vii, viii].

The phase state of the surface oxide layer holds practical significance: the anatase TiO_2 layer exhibits higher photocatalytic activity and biocompatibility compared to the rutile phase, which can positively enhance the surface bioactivity of implants and other medical devices fabricated from this powder [4]. Furthermore, the thickness and

composition of the oxide layer on the powder particle surfaces are known to influence the melting and densification behavior during additive manufacturing, as well as the mechanical properties of the final part governed by oxygen content.

Conclusion. The confocal microscopy imagery revealed that the powder particles possess a spherical or quasi-spherical morphology with a narrow size distribution. Analysis of the spectral bands recorded at 157, 405, 516, and 633 cm^{-1} in the Raman spectrum demonstrated the formation of a thin anatase-type TiO_2 oxide layer on the particle surfaces. These findings indicate the feasibility of utilizing the surface characteristics of Ti-6Al-4V powder for additive manufacturing technologies and the production of medical implants.

References

1. Dudek, M., Wawryniuk, Z., Nesteruk, M., Rosowski, A., Cichomski, M., Kozicki, M., & Święcik, R. (2022). Changes in the laser-processed Ti6Al4V titanium alloy surface observed by using Raman spectroscopy. Materials, 15(20), 7153. https://doi.org/10.3390/ma15207153

2. Taudul, B., Tielens, F., & Calatayud, M. (2023). On the origin of raman activity in anatase TiO2 (nano) materials: an ab initio investigation of surface and size effects. Nanomaterials, 13(12), 1856. https://doi.org/10.3390/nano13121856

3. Гоипов, Б. А., Зарипов, А. А., & Ашуров, Х. Б. (2026). Влияние состава электролита на формирование порошков микрочастиц методом элетроэрозионно-электрохимической обработки. Журнал технической физики, 96(8), 1578-1585. DOI: 10.61011/JTF.2026.08.63361.15-26

4. Б. А. Гоипов, А. А. Зарипов, Х. Б. Ашуров. Влияние состава электролитов на свойство порошка Ti-6Al-4V.Электронная обработка материалов, 62(4), 55-65 https://doi.org/10.52577/eom.2026.62.4.55

NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES OF THE THIN FILMS CONTAINING $CuGaS_2$ NANOCRYSTALLITES

Y.A. Buriyev,[1,2*] Sh.R. Kamalov[1], V.V. Kim[2] and R.A. Ganeev[2]
[1]*Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Uzbekistan Academy of Sciences, Tashkent 100125, Uzbekistan*
[2]*Institute for Advanced Studies, New Uzbekistan University, Tashkent 100007, Uzbekistan*
[*]*buriev.y.a@gmail.com*

$CuGaS_2$ is one of the most important ternary compounds, which has promising potential for applications in light-emitting devices and radiation detection [1–3]. The crystal structure of $CuGaS_2$ compounds shows a chalcopyrite structure. $CuGaS_2$ nanocrystallies (NCs) with a broad size distribution have been synthesized by a few groups [2,3].

An 80 nm thick $CuGaS_2$ NCs thin film was fabricated by layer-by-layer spin coating onto a glass substrate measuring 20 × 20 mm² with a thickness of 0.15 mm. The elemental composition of the film was determined by energy-dispersive X-ray spectroscopy, which revealed that NCs consisted of 30.0 wt.% Cu, 31.6 wt.% Ga, and 38.4 wt.% S. Transmission electron microscopy showed the presence of nanocrystals with two distinct morphologies. The smaller particles exhibited spherical and rhomboidal shapes, whereas the larger particles were predominantly rhomboidal, with an average size of 14.5 nm. The optical band gap of NCs was estimated to be 2.56 eV from the Tauc plot. Open-aperture Z-scan measurements were carried out at a wavelength of 1030 nm using 200 fs laser pulses. At a pulse energy of 30 μJ, nonlinear absorption associated with three-photon absorption (3PA) and saturable absorption (SA) was observed. The corresponding nonlinear absorption coefficients were determined by fitting the theoretical model to the experimental data using Equation (1).

$$T_{3PA+SA}(z) = (1 - \beta_{3PA} I_0^2 L_{eff}/3^{3/2}(1 + z^2/z_0^2)^2) \times (1 + I_0/I_{sat}(1 + z^2/z_0^2)) \qquad (1)$$

The 3PA coefficient and saturation intensity of the $CuGaS_2$ NCs thin film under 1030 nm excitation were determined to be 6×10^{-19} $cm^3\,W^{-2}$ and 5×10^{12} $W\,cm^{-2}$, respectively.

Under excitation at 515 nm, SA was found to dominate the nonlinear optical response over other processes. By fitting the experimental OA Z-scan data using Equation (2), the saturation intensity at 515 nm was determined from measurements performed at a pulse energy of 5 μJ.

$$T_{SA}(z) = 1 + I_0/I_{sat}(1 + z^2/z_0^2) \qquad (2)$$

For the 80 nm thick $CuGaS_2$ NCs film, the saturation intensity at 515 nm was found to be 6×10^{11} $W\,cm^{-2}$.

Reference:

[1] P. Prabukanthan et. al. Cryst. Growth Des. 7 (2007) 618–623.
[2] J.Q. Hu, et al. Solid State Commun. 121 (2002) 493–496.
[3] J. Xiao et al. J. Solid State Chem. 161 (2001) 179–183.

ГЕНЕРАЦИЯ СУПЕРКОНТИНУУМА ПРИ ФИЛАМЕНТАЦИИ И ОПТИМИЗАЦИЯ ВТОРИЧНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ АТМОСФЕРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

[1]Юсупова Ю.О, [2]Касимов А.К.
[1)]Национальный университет Республики Узбекистан
[2)]Институт Ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз
yulduzyusupova400@gmail.com

Дистанционный оптический мониторинг состава атмосферного воздуха и экспресс-анализ промышленных загрязнений требуют создания направленных лазерных источников, сочетающих высокую пространственную когерентность с ультраширокim спектральным диапазоном. Уникальным физическим инструментом для решения данных задач является процесс филаментации мощного ультракороткого лазерного излучения. Филаментация возникает в результате динамического квазиустойчивого баланса между керровской самофокусировкой светового пучка и дефокусирующим действием лазерно-индуцированной низкоплотной плазмы, образующейся вследствие многофотонной и туннельной ионизации молекул воздуха.

Одним из наиболее фундаментальных нелинейно-оптических следствий филаментации является генерация когерентного излучения широкого спектрального состава — суперконтинуума (или «белого лазера»). Использование филамента как протяженного источника направленного белого света непосредственно в открытой атмосфере открывает принципиально новые горизонты для оптического зондирования. Лидары на суперконтинууме (White-Light LIDAR) позволяют отказаться от сложных систем перестраиваемых лазеров и осуществлять одновременный прецизионный мониторинг концентраций десятков различных химических соединений.

Для исследования спектрально-временной эволюции лазерного излучения используется обобщенное нелинейное уравнение Шрёдингера (NLS) для комплексной огибающей светового поля $A(z, t)$, дополненное уравнением динамики электронной плотности плазмы $\rho(t)$:

$$\frac{\partial A}{\partial z} = \frac{1}{2ik_0}\nabla_\perp^2 A - i\frac{\beta_2}{2}\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + i\frac{\omega_0}{c}\left(n_{2\,eff} * |A|^2 + n_{plasma}\right)A - \frac{\alpha_{ion}}{2}A \qquad (1)$$

Численное моделирование реализовано модифицированным методом расщепления по физическим процессам (Split-Step Fourier Method).

Численный эксперимент проведен для исходного гауссова импульса с центральной длиной волны $\lambda_0 = 800$нм и длительностью на полувысоте $\tau_{FWHM} = 45$фс. Полученные результаты представлены на рис.1.

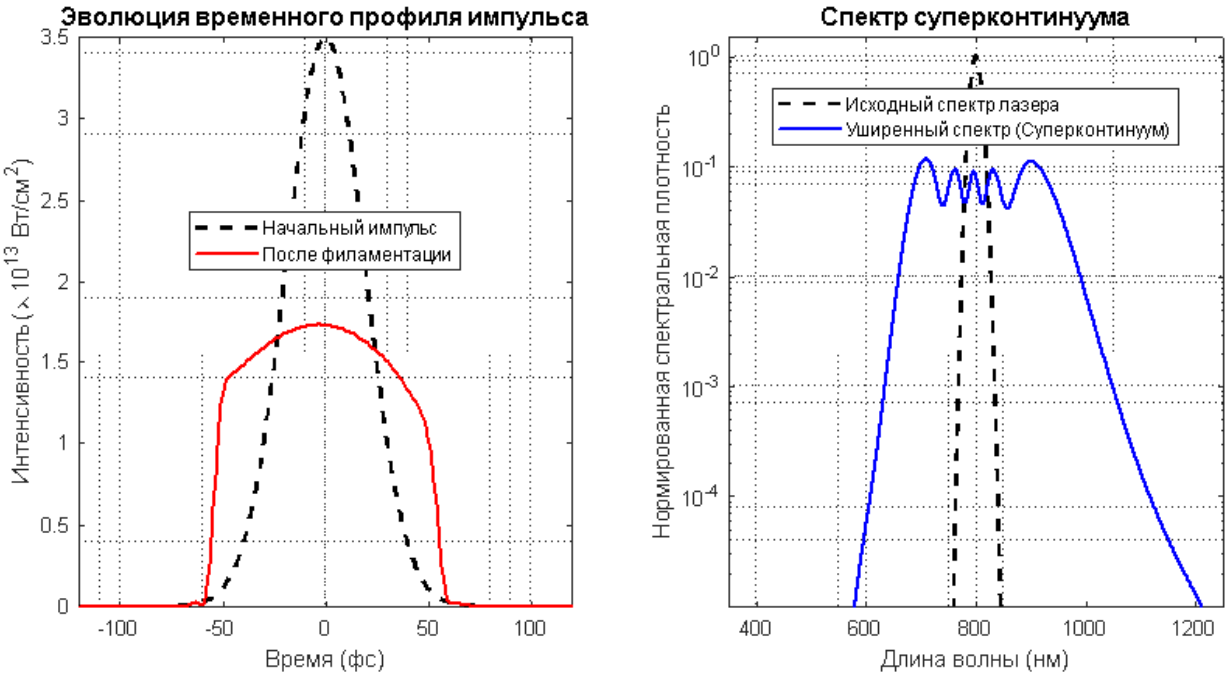


Рис.1. Изменения временного профиля импульса (левый рисунок) и спектр суперконтинуума (правый рисунок).

На временном профиле импульса (Рис. 1, слева) зафиксирован режим плазменного ограничения интенсивности. Под воздействием лазерно-индуцированной плазмы пиковая интенсивность импульса жестко стабилизируется («прижимается») на физическом пороге порядка $1.7*10^{13}$Вт/см², препятствуя дальнейшему неконтролируемому нарастанию интенсивности. При этом исходная гладкая гауссова форма импульса трансформируется в асимметричный П-образный профиль с плоской вершиной и крутыми боковыми фронтами в диапазоне от -50 до +50 фс.

Асимметрия временного профиля обусловлена тем, что плазма рождается взрывообразно на переднем фронте и в центре импульса, резко обрубая его интенсивность, в то время как на заднем хвосте спад происходит более полого за счет запаздывающего рамановского отклика воздуха. При этом принципиально важно, что полная длительность импульса по его основанию практически не изменяется, оставаясь зажатой в пределах исходного фемтосекундного масштаба.

На спектре излучения (Рис. 1, справа) наблюдается асимметричное расширение центральной линии лазера (800 нм) с формированием развитого спектрального плато суперконтинуума, охватывающего диапазон от 600 до 1150 нм.

Появление широкого набора новых частот при неизменной длине импульса по основанию объясняется тем, что генерация новых спектральных компонент происходит за счет фазовой самомодуляции (ФСМ) непосредственно на крутых внутренних фронтах поля. Величина частотного сдвига прямо пропорциональна скорости изменения интенсивности во времени $\Delta\omega \sim {\partial I}/{\partial t}$. На короткой дистанции естественная дисперсия групповых скоростей воздуха не успевает пространственно растащить вновь рожденные частоты, благодаря чему уширенный «белый» импульс сохраняет свою ультракороткую фемтосекундную структуру.

Литература

1. Hou Z., Sun Z., Wang T.-J., Leng Y. et al. Understanding the mechanism of pulse cumulative effect on supercontinuum generation from femtosecond laser filaments in air // Optics Communications. – 2025. – Vol. 574. – Art. 131015.

2. Geints Y. E., Babushkin P. A., Kabanov A. M., Khoroshaeva E. E. Numerical Study of High-power Laser Pulse Filamentation in Gaseous Media // Atmospheric and Oceanic Optics. – 2025. – Vol. 38, No. S1.

ЭФФЕКТ КИРКЕНДАЛЛА И ЗАКОН ФИКА

К.А. Турсунметов.

Национальнқй университет Узбекистана

Известно, что согласно эффекту Киркендалла, в системах происходит преимущественная диффузия атомов легкоплавящегося компонента. Он наблюдал сдвижения границы двух контактирющих металлов с разными температурами плавления.

Нами исследованы многочисленные сплавы металлов с относительно легкоплавящегося металлами и установлены, что при их нагревании атомов легкоплавящегося металлов накапливаются на поверхности сплава, образуя разные пленки разного характера [1, 2].

Следовательно, был показан роль эффекта Киркендалла в процессах активирования и работа различных термоэлектронных катодов, в каторых основную роль играет пленки Ba, BaO или Cs [3].

В данной работе изучен процесс атомов бария в никеле, т.к. механизм работы барий-никелевых (BN), L, M-катодов, а также для катодов из сплавов основан диффузию атомов бария изнутри, образуя на поверхности пленки или островки атомов Ba и BaO [3].

Диффузия атомов бария в никелевой пластинке исследована Дж.Ричардсоном и Ф.Виском методам меченных атомов Ba [4]. При этом пластинка Ba^{140} прикренилась к пластинке Ni, нагревалась в вакууме при 1248 K в течении 48 часов. Затем, шлифуя никелевой пластинки, проведены послойный анализ количество меченых атомов Ba и построен график опосительного распределения атомов бария по толщине никелевой пластинки. Этот график-кривая распределения атомов бария в катоде приведена на рис.1.

Как видно и рисунка, распеределения атомов бария по толщине никелевого катода имеет сложный характер, в котором концентрация атомов бария на поверхности и в приповерхностном слое во многом болще чем в обьеме никелевого катода.

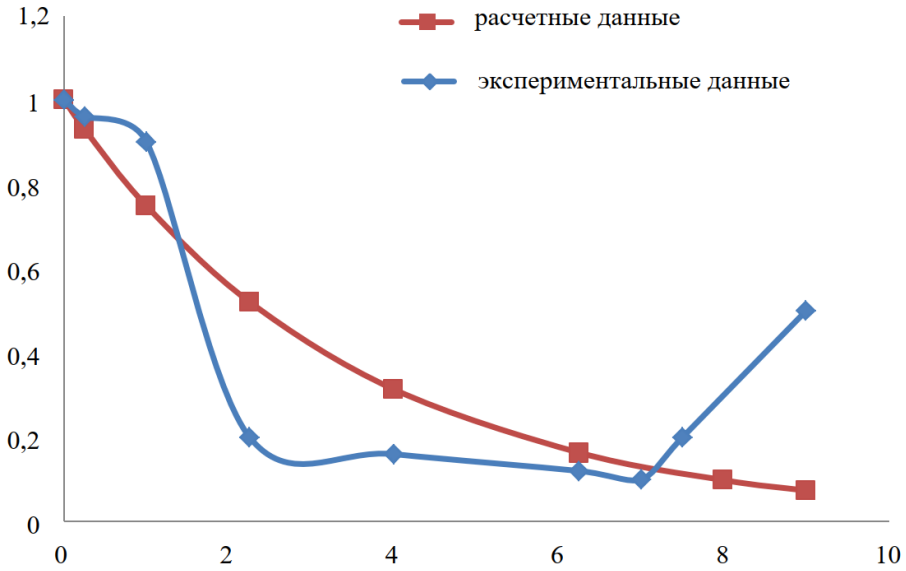


Рис. 1. Зависимость распределения атомов бария в никеле в результате диффузии при $T = 1250$ К.

Теоретический расчет диффузии по закону Фика, проведенный нами показывает другую зависимость. Зависимость относительной концентрации атомов бария, полученная теоретически приведена на рис.1 (кривая 2). Как видно из рисунка, зависимость распределения атомов бария по глубине никелевого катода не подчиняется закону Фика. Это обьясняется эффектом Киркендалла, согласно которого, атомы легкоплавящегося компонента в результате термодиффузии накапливаются на границе метал-вакуум, т.е. на поверхности металла. На основе этого формируются и работает почти все термоэлектронные катоды.

Из этих результатов, можно утвердить, что для диффузии атомов Ba в обьеме металла, не всегда выполняется закон Фика.

Литература

1. К.А. Турсунметов. Электронная техника. Сер. 1. 2021. В.4.С.67.
2. К.А. Турсунметов. Доклады АН РУз. 1992. 6-7. С.34.
3. Б.П. Никонов и др. Термоэлектронные катоды. М. Энергия. 1971.
4. J.F. Richardson and F.A. Vick. В кн. “Эффективы термокатоды”. 1.4. 1969. №1. С.-306.

ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭПОКСИДНЫХ КОМПОЗИТОВ С ВЫСОКИМ СОДЕРЖАНИЕМ КАРБИДОВ, НИТРИДОВ И БОРИДОВ (TiC, B_4C, Mo_2C, SiC, ZrC, CrC, TiB_2, TiN)

Д.Старокадомский[1,2], М.Решетник[3], А.Хора[1], О.Качоровская[4]

[1] Институт химии поверхности им.акад.А.А.Чуйко, НАН Украины, г.Киев
[2] Институт геохимии и минералогии рудообразования им.М.П.Семененка НАНУ, г.Киев, Украина, epoxidian@gmail.com
[3] Национальный научно-природоведческий музей НАНУ, г.Киев
[4]НТУУ «Киевский Политехнический Институт им.Игоря Сикорского»

Исследовано влияние микронанодисперсных карбидов (TiC, B_4C, Mo_2C, SiC, ZrC, CrC), борида (TiB_2) и нитрида титана (TiN) на свойства высоконаполненных ими композитов на базе эпоксидной смолы (Epoxy 520). Проанализированы полученные образцы по физико-механическим (прочность на сжатие, микротвердость, адгезия) и химическим (химстойкость, термо- и огнестойкость) свойствам. Данные наполнители при высоких концентрациях (50 и 66 мас.%) существенно укрепляют эпоксидные композиты и усиливают резистентность к агрессивным воздействиям, в некоторых случаях наблюдается рост показателей в 10 раз (огнестойкость, стойкость в ацетоне). Выявлены эффекты укрепления ряда композитов после деструктирующего прогрева (с B_4C), выдержки в перекиси (Mo_2C) и серной кислоте (с TiC). Результаты можно считать практически важными, учитывая актуальность создания пожаро-огнестойких, химически-резистентных и укрепленных материалов.

Для изготовления образцов использована чешская эпоксидная смола Epoxy 520, отвердитель ПЭПА (в соотношении 5:1). Концентрация наполнения составляла 66 мас% (2/3 композиции) – что близко к максимально возможной концентрации (после которой композиция уже не формуется или саморассыпается). Как видно из таб.1, наполнение по-разному влияет на плотность. Ненаполненный полимер имеет плотность 1 г/см^3 (как и плотность воды). После наполнения, плотность возрастает в 1,6-1,9 раза (особенно для Mo_2C). Лишь образец с B_4C формирует рыхлый (после прогрева 250^{o}C – вспененный) композит, поэтому его плотность не возрастает так сильно (таб.1).

Сильный прогрев ожидаемо снижает плотность или деструктирует образцы (таб.1).

Таблица 1. Плотность (г/см^3) после разных режимов термообработки

	Ненап.	TiN	Mo_2C	TiB	TiC	B_4C	SiC
20-25 ^oC	1	1.98	2.06	1.99	1.72	1.39	1.55
75 ^oC	1	1.93	2	1.87	1.75	1.39	1.64
250 ^oC	0.9	1.95	Дестр.	1.96	1.69	1.27	1.52

Эпоксидный полимер обладает высокой прочностью при сжатии - примерно 1000 кг/см^2 (то есть кубик 1 см^3 выдержит легковой автомобиль или два фортепиано), которую сложно усилить простым наполнением. Как видно из таблицы 2, добавление высоких (50%) и даже пороговых (65%, когда композиты уже тяжело замешиваются) концентраций таких наполнителей почти никогда существенно не снижают прочность на сжатие. А более чем в половине случаев они давали еще более крепкие композиты чем ненаполненный (который сам по себе достаточно крепок). Среди исследуемых образцов наиболее устойчивым к сжатию оказался композит с боридом титана TiB (рост прочности почти на треть), а также композиты (50 – 65%) с SiC и 65% TiN. Единственный «провальный» показатель у композита с B_4C. Но именно он после жесткого прогрева 275^{o}C укрепляется до 320 кгс/см^2, то есть является термоусиливающимся композитом. Остальные композиты после 275^{o}C значительно теряют в прочности или деструктируют (образец с Mo_2C). Для создания термостойких прочных материалов перспективны композиты из TiB, TiC и SiC (таб.2).

Таблица 2. Прочность (кгс/см^2) при сжатии («-» - нет данных)

	Ненап.	SiC	TiN	TiC	TiB	ZrC	CrC	Mo_2C	B_4C	*TiN*	*SiC*
75^{o}C 1-2 дня	660	740	720	665	840	720	690	630	150	*620*	*730*
275^{o}C 1-2 часа	440	310	120	310	480	-	-	дестр	320	-	-

Зафиксирован рост микротвёрости по Шору при наполении SiC и TiN. Эти же наполнители дают рост и микротвёрдости по Бринеллю, хотя при этом демонстрируют высокую хрупкость. Этот недостаток пропадает после жёсткой

термообработки (275°C), после которой хрупким становится (и обугливается) уже ненаполненный образец. Сохранение прочности при уменьшении хрупкости (или появлении пластичности) при таких высоких температурах можно считать новым (нехарактерным для чистых или органо-наполненных полиэпоксидов) эффектом - следствием наполнения термостойкими дисперсиями.

Из таблицы 3 видно, что все данные наполнители при 66 мас.% очень усиливают огнестойкость. Особенно устойчивыми являются B_4C, имеющие огнестойкость на порядок выше ненаполненного (который вообще не удалось разгореть). Это говорит об очень высокой перспективности создания на базе таких композиций эко- и пожаробезопасных материалов или покрытий.

Таблица 3. Время воспламенения t1 и время t2 начала устойчивого горения (разгорания) композитов

	H	Mo_2C	TiB	B_4C	SiC	TiC	TiN
t_1, сек	1	4	8	10	9	7	5
t_2, сек	1.5	6	10	>13	11	8	7
Эффект от начала горения	Дым, быстрое разгорание	Активное разгорание с искрами	Тяжело загор., самозатух., мало дыма	Очень тяжело горит, без дыма	Тяжело розгор., самоза-тух., белый дым	Постепен. разгор., серый дым	Постепен. разгор., серый дым

Выводы. 1. Предложенные наполнения дают вязкие массы, которые после отверждения превращаются в хорошо формующиеся композиты. 2. Морфология композиций отражает агрегативное распределение микрочастиц, сравнительно хорошо встраиваемых в надмолекулярную структуру эпоксидной смолы. При этом в композиции встречаются нано-микро- и мезофрагменты наполнителя. 3. Наполнение в большинстве случаев увеличивает прочность при сжатии, модуль упругости при сжатии и изгибе, стойкость к истиранию, адгезию. Ряда композитов укрепляется после деструктирующего прогрева (с B_4C). 4. После наполнения огнестойкость композитов возрастает в 3-8 раза – особенно для TiB, B_4C, SiC (которые очень трудно поддаются горению).

ОРГАНИК БИРИКМАЛАРНИНГ ТЕРМОДЕСОРБЦИОН СПЕКТРЛАР ТАҲЛИЛИ

Қурбонова С [а], Рахмонов Ғ.Т.[б]
а) Гулистон давлат университети, б) Ўзбекистон Миллий университети
E-mail: qurbonovasohiba22@gmail.com

Органик бирикмалар сиртий ионлашиш (СИ) нинг асосий қонуниятлари аниқлангандан сўнг нафақат СИ ҳодисасининг ўзи ҳақида тасаввурлар кенгайди, балки унинг амалда қўлланилиши имкониятлари ниҳоятда кенгайди: заррачаларнинг қаттиқ жисм сирти билан ўзаро таъсири характеристикалари, турли структураларда кўп атомли заррачаларнинг физик-химиявий характеристикаларини аниқлаш методларидан то физиологик фаол моддаларнинг, шу жумладан хона температурасида кичик босимли буғлар (масалан, героин, морфин ва бошқалар)нинг юқори ажратувчанлик ва юқори сезгирликда ($10^{-12} - 10^{-11}$ дан) аниқлаш имконини берувчи метод ва қурилмаларни ишлаб чиқиш ва яратиш имконини берди.

Ҳозирги вақтда молекулаларнинг айниқса органик бирикмаларнинг сиртий ионлашиши жараёнларининг кинетик характеристикаларини ўрганиш асосан СИ нинг ностационар методлари ёрдамида амалга оширилар эди [1]. Аммо-лекин “термодесорбцион сиртий ионлашиш спектрометрия” (TDSI)си методи молекулаларнинг сиртий ионлашиш жараёнлари кинетик характеристикаларини ўрганиш мақсадларида қўлланилмаган.

Тадқиқотлар СИ детектори ва “Исковуч” деб номланувчи TDSI спектрометрияси қурилмасида олиб борилди. Термодесорбцион методларда температурани десорбция содир бўладиган ҳароратларгача кўтариш орқали сиртга дастлаб адсорбцияланган заррачаларнинг боғланиш энергияларини тўғридан-тўғри аниқлаш имконияти мавжуд. Агар температура доимий тезлик билан кўтарилиб борилса, у ҳолда дастлаб кичик фаоллашиш энергиясига эга бўлган зарррачалар, сўнгра юқори ва янада юқорироқ фаоллашиш энергияларига эга бўлган заррачалар десорбциялана бошлашади [2]. Агарда фақат биттагина

фаоллашиш энергияси мавжуд деб фараз қилинса ва десорбция тезлиги учун адсорбцияланган заррачалар концентрациялари бўйича биринчи тартибли дифференциал олинса, у ҳолда бирор T_p температурада десорбция тезлиги чўққиси қуйидаги

$$\frac{E}{RT_p} = \frac{\nu}{\beta}\exp\left[-\frac{E}{RT_p}\right] \qquad (1)$$

тенглама орқали аниқланади, бу ерда $E-$ фаоллашиш энергияси, $R-$универсал газ доимийси, $\nu-$ экспонента олди кўпайтувчиси, $\beta-$қиздирилиш тезлиги. Экспоента олди кўпайтувчиси ν одатда 10^{13} га тенг деб қабул қилинади ва бу ҳолда десорбция фаоллашиш энергияларини аниқлаш мумкин. Кейинги такомиллаштирилган методларда экспонента олди кўпайтувчисини эътиборга олиш шарт эмаслиги кўрсатиб берилди. Ушбу такомиллаштирилган методларда максимал чўққиларга мос келувчи температура қиздирилиш тезлиги билан қуйидаги тенглама орқали боғланган:

$$\ln\left(\frac{\beta}{T_p^2}\right) = A - \left(\frac{E}{RT_p}\right) \qquad (2)$$

бу ерда $A-$доимий катталик. Қиздириш тезлигини ўзгартирган ҳолда турли температураларга мос келувчи чўққиларни олиш мумкин ва улар орқали фаоллашиш энергиялари катталиклари аниқланади. E катталикни ўлчаш аниқлигини ошириш учун қиздириш тезлигини камида икки тартибга ошириш зарур, бу эса экспериментал қийинчиликларга олиб келади.

Мазкур иш термодесорбцион спектрометрия қонуниятларини физик-химиявий сиртий ионизацион тадқиқотларда қўллаш методларига бағишланган бўлиб, унда бир неча органик бирикмаларнинг термодесорбция фаоллашиш энергиялари юқоридаги усулларда аниқланди.

Адабиётлар

1. G.T. Rakhmanov et al. Technical Physics Letters, 2022, Vol. 48, No. 10.

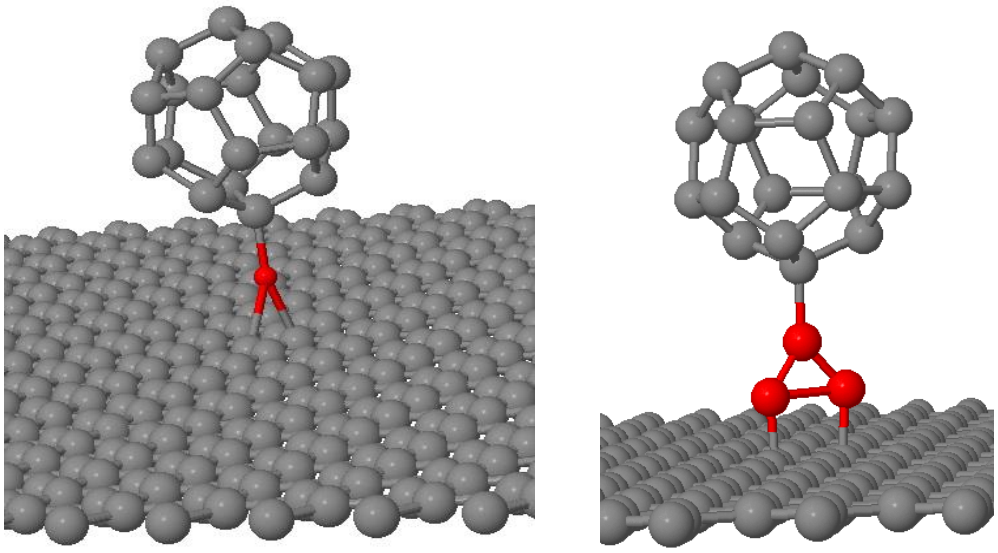
2. С. Моррисон. Химическая физика поверхности твердого тела. Изд.”Мир”, Москва, 1980г. 488 стр.

GRAFEN SIRTIGA BOG'LANGAN FULLEREN $C_{20}+C_1$ VA $C_{20}+C_3$ NING PRESESSIYA HARAKATINING HARORATGA BOG'LIQLIGI

Sh. Aminov[1], I.D. Yadgarov[2], I.Z. Urolov[3].
[1]Termiz davlat universiteti
[2] Ion-plazma va lazer texnologiyalari institute
[3]O’zbekiston Milliy Universiteti

So'nggi yillarda grafen o'zining ajoyib mexanik xususiyatlari tufayli nanomateriallar ishlab chiqarishda asosiy nomsod materiallardan biri bulib ba'zi an'anaviy materiallarning cheklovlarini yengib o'tishda juda muhim ahamiyat kasb etmoqda. Tadqiqotchilar grafenga energiya yutuvchi material sifatida katta e'tibor bilan qarashmoqda va grafen yaratilayotgan nanokompozit materiallarning xususiyatlarini samarali ravishda yaxshilashi imkonini bermoqda.

Ayrim kimyoviy birikmalarda, husisan uglevodlar, masalan, etan (C_2H_6) yoki butan (C_4H_{10}) molekulasida C−C bog’lar atrofida mos ravishda CH_3 va CH_2-CH_3 strukturalarning aylanma harakati kuzatiladi. Shunungdek grafen sirtida C_1 va C_3 uglerod klasterlari orqali adsorbsiyalangan $C_{20}@C_1$, $C_{20}@C_3$, uglerod klasterlari bilan C− C yakka bog’lanish hosil qilib birikkanda bog’ bo’ylab o’tuvchi o’q atrofida aylanma harakat qilish bilan birgalikda presetsion harakatlarni ham amalga oshirishi aniqlandi.



1-rasm. C_{20} fulleren molekulasi C_1 va C_3 uglerod klasterlari orqali grafen sirtida adsorbsiyasida aylanma harakati

Ushbu harakatlar faqatgina C_1 va C_3 ugelrod klasterlari ekzodrillangan hollarda bir vaqtda yaqqol kuzatilishi mazkur uglerod klasterlari fulleren molekulalari bilan yakkalik bog’lar hosil qilgandagina mumkin bo’lib, ular fulleren molekulari bilan birdan oshiq C-C bog’lar hosil qilib birikkanda, masalan qo’shbog’li ekzodrillanish holatlarida kuzatilmaydi. Bu paytda fulleren molekulalarining C-C bog’ bo’ylab o’tuvchi o’q atrofida aylanma harakati kuzatilmaydi, ammo yuqorida aytib o’tilgan hollardagi presetsion harakatga o’xshash harakat kuzatiladi. Ana shunday holat C_2 uglerod klasteri ekzodrillangan fulleren molekulalari bilan ham kuzatildi. Fulleren molekulalariga ekzodrillanayotgan C_n uglerod klasteridagi atomlar soni uchdan ortganda, masalan, to’rt yoki beshga teng bo’lganda fulleren molekulalarining kremniy taglik sirtida adsorbsiyalanishi kuzatiladi va bunday holatlarda na C-C bog’ atrofida fulleren molekulasining na aylanma harakati, na presetsion harakat kuzatiladi.

Tizim temperaturasi 10 K qadam bilan oshirib borilganda fulleren molekulalarining C-C bog’ bo’ylab o’tuvchi AB o’q atrofidagi aylanma harakati jadallashib, ya’ni ushbu harakatning chastotasi ortib borishligi aniqlandi. Shuningdek, fulleren molekulalarining presetsion harakat chastotasining ham tizim temperaturasiga bog’liqligi tizim temperaturasini 10 K qadam bilan oshirib borish orqali tadqiq qilinganda temperaturaning qaralayotgan sohasida ushbu harakat chastotasining o’zgarishsiz qolishi aniqlandi .

Fulleren molekulasining C-C bog’ atrofidagi aylanma haraktining chastotasi ortib borishining asosiy sababi, tizim temperaturasining ortishi natijasida tizim ichki energiyasi ortib boradi, jumladan, fulleren molekulasining qaralayotgan o’q atrofidagi aylanma harakatining ham kinetik energiyasi ortishi, bu esa o’z navbatida aylanma harakat chastotasining ortishiga sabab bo’ladi, negaki qattiq jism mexanikasiga ko’ra qattiq jism kinetik energiyasi uning presetsion harakat burchak tezligi yoki chastotasi bilan quyidagicha $E \sim \omega^2 \sim \nu^2$ bog’lanishga ega bo’ladi.

ИССЛЕДОВАНИЯ РАССЕЯНИЯ ИОНОВ Ar^+ С ДЕФЕКТНОЙ ПОВЕРХНОСТИ InP(001)<110>

И.Дж.Ядгаров[2], М.У.Отабаев[2]
Институт Ионно-плазменных и лазерных технологии АНРУз
[2] Ургенчский государственный университет

В настоящее время метод компьютерного моделирования широко используется при изучении механизмов и закономерностей процессов рассеяния ионов, распыления поверхностей, подвергнутых ионному облучению. Следует отметить, что для выявления особенностей малоуглового рассеяния ионов низких энергий (1,0-5,0 кэВ) идеальными поверхностями двухкомпонентных полупроводниковых монокристаллов, еще достаточно неизучены.

При малых значениях энергий ионно-атомные столкновения на поверхности твердого тела можно рассматривать как изолированные парные столкновения и их последовательности. В области низких энергий траектории сталкивающихся частиц определяются в первом приближении силами упругого взаимодействия атомов. Это кулоновские силы взаимодействия ядер и электронов атомов. Они действуют на атомных расстояниях между взаимодействующими частицами. Следовательно, для расчета траектории налетающего иона необходимо рассмотреть его взаимодействие с совокупностью атомов кристаллической решетки одновременно. Однако, при не очень низких энергиях столкновения иона с атомом кристалла можно ограничиться рассмотрением изолированных парных столкновений частиц. Подтверждением тому, что атомы решетки свободны при столкновениях.

Нами изучены энергетические распределения рассеянных ионов Ar+ с дефектной поверхности InP (001)<110> при скользяших углах падениях. В наших расчетах мы рассматривали периодические дефекты.т.е.отсуствие одного поверхностного атом через определенный количество атомов. Периодическое введение точечных дефектов приводит к нарушению трансляционной симметрии идеальной поверхности InP. В результате: -изменяется локальное атомное окружение. Атомы, расположенные непосредственно около дефекта, испытывают изменение числа ближайших соседей и межатомных расстояний. Это приводит к

локальной релаксации поверхности. -возникают области повышенной потенциальной энергии. Дефект изменяет распределение межатомного взаимодействия и, следовательно, потенциальный рельеф поверхности. Для налетающего иона это означает, что траектория движения вблизи дефекта может существенно отличаться от траектории над идеальной частью поверхности. -изменяется процесс рассеяния ионов. При исследовании такой поверхности методом ионного рассеяния (например, для Ne^+ или Ar^+) дефекты становятся центрами дополнительного рассеяния.

На рис.1. представлены спектры рассеяния ионов Ar^+ от поверхности InP(001) при различных значениях углах падения $\psi=3^0,5^0,7^0$ и $E_0=3$ и 5 кэВ. Эти графики позволяют сравнить энергетическое распределение рассеянных ионов при различных начальных энергиях $E_0=3$(а) и 5 кэВ (б). При $E_0=3$ кэВ и $\psi=3^0$, кривая имеет относительно широкий максимум в области 2,93–2,95 кэВ. При $\psi=5^0$ максимум красной кривой располагается около 2,92 кэВ. В данном случае спектр является более узким и выраженным по сравнению с кривой для $\psi=3^0$. При $\psi=7^0$ форма синей кривой существенно изменяется: интенсивность возрастает в области 2,85–2,90 кэВ.

При 5 кэВ основная часть спектра расположена в энергетическом диапазоне примерно 4,75–4,95 кэВ. При $\psi=3^0$ наиболее выраженный максимум наблюдается около 4,92 кэВ и кроме того, 4,82 кэВ наблюдается дополнительный максимум. При $\psi=5^0$ основной максимум смещается в область 4,85 кэВ. При $\psi=7^0$ максимум располагается около 4,82 кэВ. Таким образом, при $E_0=5$ кэВ увеличение угла падения приводит к смещению основного спектрального максимума в сторону меньших энергий. Одновременно изменяется форма спектра, и в отдельных случаях наблюдается формирование нескольких выраженных максимумов. При малых углах падения ионы движутся по поверхности InP практически по касательной. Поэтому значительную роль могут играть каналирование, последовательные столкновения и эффект перефокусировки. Изменение угла падения от $\psi=3^0$ до $\psi=7^0$ изменяет геометрию взаимодействия ионов с атомными рядами поверхности и,

следовательно, траектории движения ионов. В результате изменяются вероятность столкновения иона с поверхностными атомами, величина потери энергии и характер распределения рассеянных ионов по энергии. Изменение угла падения приводит к смещению спектральных максимумов и перераспределению их интенсивности. Особенно заметные изменения наблюдаются при малых углах падения, что может быть связано с направленным характером рассеяния ионов, каналированием и эффектом перефокусировки вблизи атомных рядов поверхности InP(001).

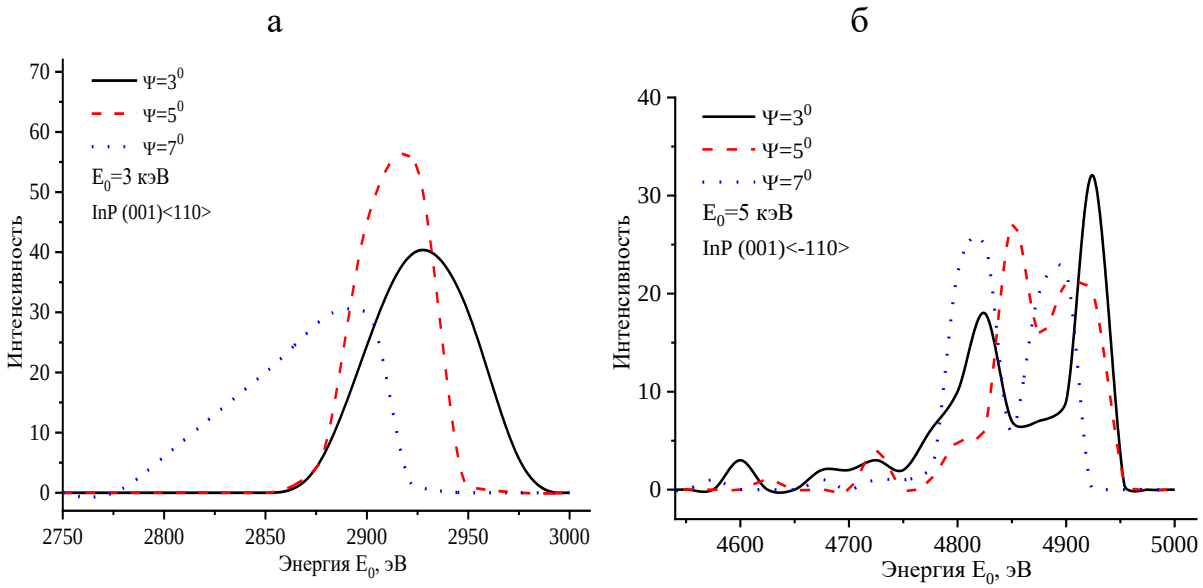


Рис.1. Энергетические спектры рассеяния ионов Ar^+ от поверхности InP(001) <110> при различных значениях углах падения $\psi=3^0,5^0,7^0$ и E_0=3 и 5 кэВ.

Основной результат, представленный на данных графиках, заключается в том, что энергетический спектр рассеянных ионов существенно зависит как от начальной энергии иона, так и от угла его падения на поверхность.

Для E_0=5 кэВ спектр преимущественно формируется в области 4,8–4,95 кэВ, тогда как при E_0=3 кэВ он располагается в области 2,85–2,98 кэВ. Изменение угла падения от $\psi=3^0$ до $\psi=7^0$ приводит к изменению положения, ширины и интенсивности спектральных максимумов.

METAN PLAZMASI RADIKALLARI ORQALI Ni NANOZARRALARI BARQARORLIGINI BOSHQARISH: MOLEKULYAR DINAMIKA TAHLILI

Kamoladdin Egamberdiev[1,2], Dilfuza Xusanova[1], Zuhra Iskandarova[3], Sirojiddin Mirzayev[1], Umedjon Xalilov[1,3]

[1]O‘zR FA U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, Toshkent, O‘zbekiston

[2]Islom Karimov nomidagi Toshkent Davlat Texnika Universiteti, Toshkent, O‘zbekiston

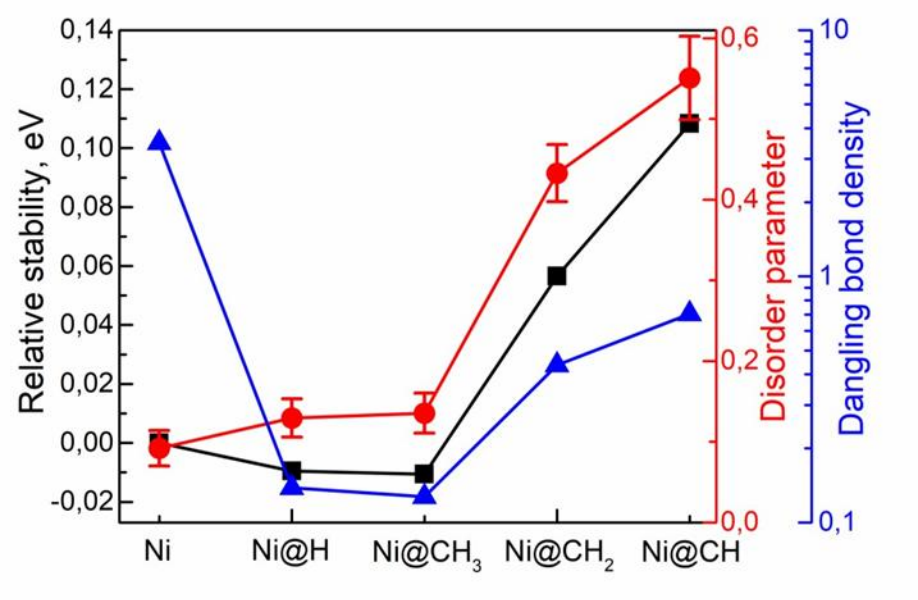
[3]Denov tadbirkorlik va pedagogika instituti, Denov, O‘zbekiston

Nikel nanozarralarining katalitik va boshqa funksional xossalari ularning birlamchi o‘lchami hamda sirt holatiga bevosita bog‘liq. Biroq, sub-5 nm Ni nanozarralari yuqori sirt energiyasi tufayli strukturaviy qayta tashkil topish va agregatsiyaga moyil bo‘lib, bu ularning funksional xususiyatlarining pasayishiga olib keladi [1]. Plazma ishtirokidagi sintez hamda sirt modifikatsiyasi nanozarralarning birlamchi o‘lchamini saqlash va sirt holatini boshqarishning istiqbolli yo‘nalishi hisoblanadi [2]. Shunga qaramay, metan plazmasidan hosil bo‘luvchi H, CH, CH_2 va CH_3 radikallarining o‘ta kichik o‘lchamli Ni nanozarralari strukturaviy va termodinamik barqarorligiga individual ta’siri atomistik darajada yetarlicha aniqlanmagan.

Mazkur ishda 1 nm o‘lchamli Ni_{55} nanozarrasining H, CH, CH_2 va CH_3 radikallari bilan funksionallashgandagi strukturaviy hamda termodinamik evolyutsiyasi ReaxFF reaktiv kuch maydoniga asoslangan molekulyar dinamika (MD) usuli yordamida o‘rganildi [3, 4]. Hisoblashlar LAMMPS dasturiy paketida 300 K haroratda amalga oshirildi. ReaxFF yondashuvi Ni–H–C tizimlaridagi reaktiv sirt jarayonlarini, jumladan, kimyoviy bog‘larning uzilishi va hosil bo‘lishini modellashtirish imkonini beradi [3]. Turli radikallar ta’sirini qiyosiy baholash uchun har bir Ni_{55} nanozarrasiga 42 ta adsorbat joylashtirildi. H, CH, CH_2 va CH_3 radikallari bilan funksionallashgan Ni nanozarralarining strukturaviy tartibsizlik parametric (d) hosil bo‘lishning molyar Gibbs erkin energiyasi (ΔG_m), ochiq bog‘lanishlar zichligi (γ) dagi farqlar 1-rasmda umumlashtirilgan. Nanozarralarning nisbiy agregatsiyaga moyilligi ushbu uch ko‘rsatkichni birlashtiruvchi agregatsiya indeksi A orqali baholandi:

$$A = \frac{1}{3}(\Delta G_{m,norm} + d_{norm} + \gamma_{norm})$$

Bu yerda $\Delta G_{m,norm}$, d_{norm} va γ_{norm} mos ravishda normallashtirilgan termodinamik barqarorlik, strukturaviy tartibsizlik va ochiq bog‘lanishlar zichligi ko‘rsatkichlaridir; ularning qiymatlari [0, 1] oraliqqa keltirilgan.



3-rasm. H, CH, CH_2 va CH_3 radikallari bilan funksionallashgan Ni nanozarralarining strukturaviy tartibsizlik parametri (d), hosil bo‘lishning molyar Gibbs erkin energiyasi (ΔGm) va ochiq bog‘lanishlar zichligi (γ) bo‘yicha qiyosiy tavsifi.

Hisoblashlar H va CH_3 bilan funksionallashgan nanozarralarda Ni metall karkasi nisbatan saqlanishini ko‘rsatdi. Ni@H va Ni@CH_3 tizimlarida *d* qiymatlari mos ravishda 0.1295 va 0.1354 ni, ΔG_m qiymatlari esa -9.6 va -10.6 meV ni tashkil etdi. Shu bilan birga, ochiq bog‘lanishlar zichligi mos ravishda 0.138 va 0.127 gacha kamaydi. Bu natijalar H va CH_3 radikallari Ni sirtidagi to‘yinmagan koordinatsion markazlarni passivlashtirib, nanozarralararo o‘zaro ta’sirni susaytirishini ko‘rsatadi. CH_3 qoplami qo‘shimcha ravishda sterik to‘siq hosil qilib, bevosita Ni–Ni kontaktlarining yuzaga kelishini cheklashi mumkin [4].

CH va CH_2 radikallari bilan funksionallashuv esa nanozarraning amorflanishga o‘xshash strukturaviy qayta tashkil topishiga olib keldi. Ni@CH_2 va Ni@CH tizimlarida *d* qiymati mos ravishda 0.4329 va 0.5509 gacha oshdi, ΔG_m esa +56.6 va +108.3 meV ni tashkil etdi. Ushbu holat CH hamda CH_2 radikallarining Ni sirtiga kuchliroq bog‘lanishi va past lateral harakatchanligi bilan bog‘liq bo‘lib, lokal deformatsiyalar hamda to‘yinmagan koordinatsion markazlarni yuzaga keltiradi [5]. Taklif etilgan agregatsiya indeksi Ni@H tizimida agregatsiyaga moyillik eng past, Ni@CH tizimida esa eng yuqori ekanini ko‘rsatdi.

Natijalar metan plazmasi radikallari orqali ultrasmall Ni nanozarralari sirt holatini maqsadli boshqarish uchun miqdoriy “tuzilish-barqarorlik” bog‘lanishini belgilaydi. Taklif etilgan agregatsiya indeksi plazma-funksionallashgan nanozarralarning nisbiy agregatsiyaga moyilligini termodinamik, strukturaviy va sirt-reaktivlik mezonlari asosida kompleks baholash imkonini beradi. Metan plazmasida H va CH_3 radikallarining nisbatan yuqori, CH hamda CH_2 radikallarining esa past konsentratsiyada mavjudligi mazkur atomistik natijalar bilan uyg‘un bo‘lib, bunday muhit Ni nanozarralarining birlamchi o‘lchami va kristall tartibini saqlash uchun qulay sharoit yaratishi mumkinligini ko‘rsatadi [6].

ADABIYOTLAR

[1] Phan, H. T. et al. Journal of Physical Chemistry C 2019, 123(27), 16495–16507.

[2] Wang, Z.; et al. ACS Catalysis 2018, 8(3), 2093–2110.

[3] Zou, C.; et al. Acta Materialia 2015, 83, 102–112.

[4] Somers, W.; et al. Applied Catalysis B: Environmental 2014, 154, 1–8.

[5] Li, J.; et al. Journal of Molecular Catalysis A: Chemical 2012, 365, 103–114.

[6] Hash, D. B.; et al. Journal of Applied Physics 2003, 93(1), 750–752.

Ni/NiO va Si/SiO_2 YADRO-QOBIQ NANOZARRALARIDA ENERGETIK BARQARORLIK VA KUCHLANISH TAQSIMOTINI ATOMISTIK MODELLASHTIRISH

K. Egamberdiyev[1,2], D. Xusanova[1], U. Turayeva[3], S. Mirzayev[1], U. Xalilov[1]
[1]*O'zR FA U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, Toshkent, O'zbekiston.*
[2]*Islom Karimov nomidagi Toshkent Davlat Texnika Universiteti, Toshkent, O‘zbekiston*
[3]*Buxoro davlat universiteti, Buxoro, O'zbekiston*

Yadro-qobiq (core-shell) arxitekturasiga ega nanozarralar, xususan Si@SiO_2 va Ni@NiO tizimlari nanoelektronika hamda energiya saqlash sohalarida o'ziga xos xususiyatlari tufayli keng qo'llaniladi [1, 2]. Bu tuzilmalarda qobiq qatlami yadroni mexanik degradatsiyadan himoya qiluvchi va kiruvchi faza o'zgarishlarini oldini oluvchi muhim passivlashtiruvchi qatlam vazifasini bajaradi [3]. Tabiiy (material@oksid) va teskari (oksid@material) yadro-qobiq nanozarralari o'rtasidagi energetik barqarorlik farqlarining atomistik kelib chiqishi haligacha yetarlicha o'rganilmagan. Xususan, teskari arxitekturalarda (NiO@Ni va SiO_2@Si) faza chegarasidagi kuchlanish (interfacial strain) va panjara mos kelmasligi (lattice mismatch) qanday qilib zarracha barqarorligini pasaytirishi to'liq ochib berilmagan. Ushbu muammoni hal qilish uchun LAMMPS dasturida ReaxFF reaktiv kuch maydonidan (reactive force field) foydalanilgan holda molekulyar dinamika (MD) simulyatsiyalari amalga oshirildi [4]. Tadqiqotda umumiy diametri 4-5 nm (yadro radiusi r_{core} = 1.5-1.6 nm, qobiq qalinligi d_{shell} = 0.6-1.5 nm) bo'lgan to'rtta turli nanostruktura (Ni@NiO, NiO@Ni, Si@SiO_2, SiO_2@Si) 0.1 K gacha sovitildi.

Modellarning qobiq va umumiy hajm nisbati quyidagi formula orqali hisoblandi:

$$V_{shell}/V_{tot} = 1-(r_{core}/(r_{core}+d_{shell}))^3 \quad (1)$$

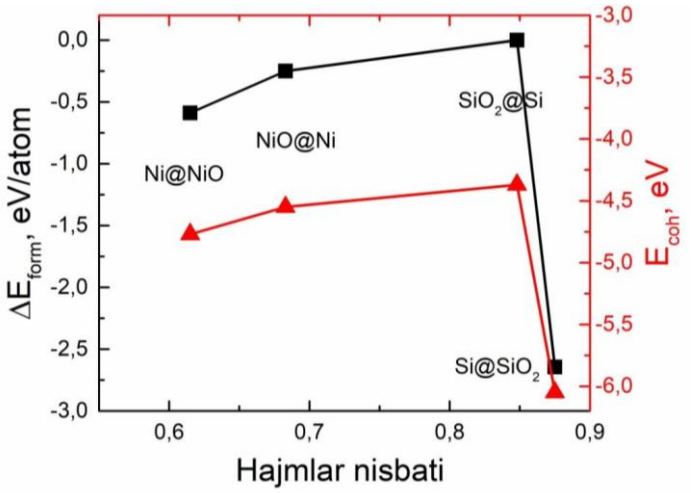
Nisbiy energetik barqarorlikni baholash uchun har bir atomga to'g'ri keluvchi hosil bo'lish energiyasi (ΔE_{form}) quyidagicha aniqlandi:

$$\Delta E_{form} = (E_{NP} - \sum N_i \mu_i)/N \quad (2)$$

Bu yerda E_{NP} – nanozarraning umumiy potensial energiyasi, N – jami atomlar soni, N_i va μ_i mos ravishda i elementning atomlar soni va tayanch energiyasi.

Natijalar shuni ko'rsatdiki, ikkala tizimda ham tabiiy material@oksid konfiguratsiyalari (Ni@NiO va Si@SiO_2) teskari tuzilmalarga qaraganda energetik jihatdan ancha afzal va barqarordir. Ni@NiO nanozarrasida kogeziya energiyasi E_{coh} = -4.77 eV/atom va hosil bo'lish energiyasi ΔE_{form} = -0.91 eV/atom ni tashkil etdi. Uning teskari analogi NiO@Ni uchun bu ko'rsatkichlar mos ravishda -4.55 eV/atom va -0.57 eV/atom bo'lib,

Ni@NiO ning 0.34 eV/atom ga barqarorroq ekanligini ko'rsatdi. Si/SiO_2 tizimida esa bu farq ancha sezilarli bo'lib, tabiiy Si@SiO_2 uchun E_{coh} = -6.05 eV/atom va ΔE_{form} = -2.96 eV/atom gacha yetdi. Teskari SiO_2@Si da bu qiymatlar faqatgina -4.37 eV/atom va -0.32 eV/atom ni tashkil etdi. Bu Si@SiO_2 konfiguratsiyasining teskari struktura ustidan ~2.64 eV/atom farq bilan juda yuqori energetik afzalligini isbotlaydi. Aksincha, teskari tuzilmalarda (NiO@Ni va SiO_2@Si) kristalli qobiq qatlami oksid yadrosiga moslashishga majbur bo'lgani sababli kuchli cho'zilish-siqilish (tensile-compressive) kuchlanishlari kuzatildi.



1-rasm. Ni va Si asosidagi yadro-qobiq nanozarralarining barqarorlik / kuchlanish taqsimoti.

Radial kuchlanish tahlillariga ko'ra, eng yuqori kuchlanish gradienti SiO_2@Si da (faza chegarasida +3.5 GPa dan -5.8 GPa gacha) aniqlandi. Ni@NiO esa interfeysda eng silliq kuchlanish profilini (+2 GPa dan -2.5 GPa gacha) namoyish etib, qobiq mos kelmaslikni qanday qilib muvaffaqiyatli yumshatishini tasdiqladi.

Olingan natijalar shuni tasdiqlaydiki, oksid fazasining joylashuvi yadro-qobiq nanozarralarining energetik va mexanik barqarorligini belgilovchi asosiy omil hisoblanadi. Oksid qobiqlari Si va Ni asosidagi barqaror nanostrukturalar uchun bir vaqtning o'zida sirtni passivlovchi va chegaraviy kuchlanishlarni yutuvchi qatlam vazifasini bajaradi.

ADABIYOTLAR

1. Stark, W. J.; Stoessel, P. R.; Wohlleben, W.; Hafner, Chemical Society Reviews 2015, 44 (16), 5793-5805.
2. Muzzio, M.; Li, J.; Yin, Z.; Delahunty, I. M.; Xie, J.; Sun, S. Nanoscale 2019, 11 (41), 18946-18967.
3. Xu, Z.-L.; Liu, X.; Luo, Y.; Zhou, L.; Kim, J.-K. Progress in Materials Science 2017, 90, 1-45.
4. Thompson, A. P.; et al. Computer Physics Communications 2022, 271, 108171.

ELECTRONIC STRUCTURE OF PERYLENE TRIMERS IN BASIC π-STACKING CONFIGURATIONS: A DFT STUDY

D. Husanova[1], A. Azamjonov[1], S. Mirzaev[1], U. Khalilov[1,2]
[1]Arifov Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan
[2]MOSAIC research group, University of Antwerp, Antwerp, Belgium
E-mail: dilfuzahusanova75@gmail.com

The electronic structure and charge-transport behavior of solid-state perylene-based materials are strongly governed by intermolecular packing, particularly by the relative displacement, rotation and orientation of neighbouring π-conjugated molecules [1, 2]. These packing-dependent interactions determine the frontier-orbital splitting and intermolecular electronic couplings that are central to charge transport in organic semiconductors. Nevertheless, the quantitative relationship between specific π-stacking geometries and the resulting electronic-structure descriptors remains incompletely understood. In our work, dispersion-corrected DFT calculations were employed to determine the HOMO-LUMO gap, frontier orbitals, effective inter-layer transfer integrals and relative stability via single-point evaluations [3].

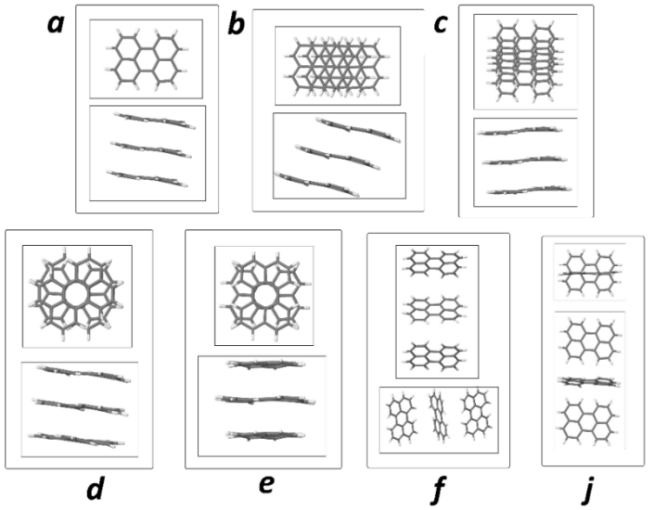


Figure 1. The seven perylene-trimer configurations studied: a) cofacial, b) longitudinally displaced, c) transversely displaced, d) 30°- and e) 90°-rotated, f) herringbone, j) T-shaped.

Five of the configurations (cofacial, displaced and rotated) are “face-to-face” arrangements with a steady inter-layer distance of ~3.40 Å. In contrast, the tilted

herringbone and perpendicular T-shaped motifs exhibit larger center-to-center separations of 5.65 Å and 6.20 Å, respectively (Figure 1). The HOMO-LUMO gap varies from 0.70 eV (cofacial) to 1.61 eV (30°-rotated and herringbone) based solely on geometry (Figure 2a). This is driven by inter-molecular π-orbital overlap: maximal overlap produces the smallest gap, while displacement or rotation reduces overlap and widens the gap (Figure 2b).

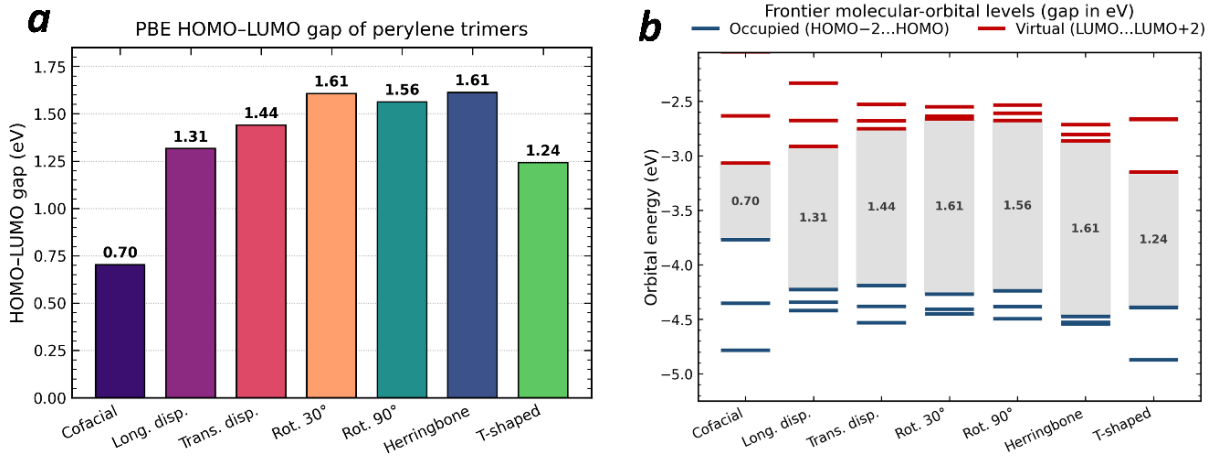


Figure 2. a) PBE HOMO–LUMO gap calculated for the seven trimer configurations; b) distribution of frontier molecular-orbital levels for each configuration.

Analysis of the energetic and electronic properties reveals a critical stability-conductance trade-off. Specifically, the cofacial configuration exhibits the strongest inter-layer coupling ($|t| \approx 360$ meV) but is energetically the least stable (+787 meV relative to the 30°-rotated state) (Figure 3). This highlights a physical trade-off that while perfect π-overlap maximizes bandwidth, it disrupts the balance between Pauli repulsion and dispersion forces, making the ideal conductive geometry thermodynamically unfavorable [4]. Consequently, displaced and herringbone motifs provide an optimal stability-transport compromise ($|t|$ = 25-205 meV), which explains their dominance in real perylene crystals over fully cofacial arrangements. Furthermore, these specific structural configurations govern charge-carrier selectivity. A longitudinal slip is strictly electron-selective (t_e = 205 meV $\gg$ t_h = 68 meV), while a transverse slip is hole-selective (t_h = 120 meV > t_e = 79 meV), allowing for targeted n-type or p-type material engineering.

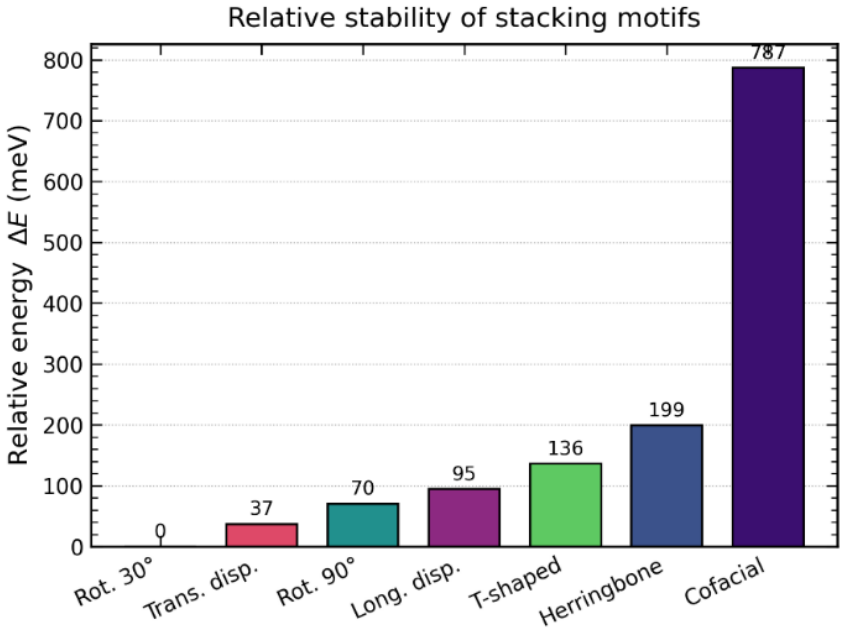


Figure 3. Relative energy ΔE of the trimer configurations, ranked from most stable (30°-rotated) to least stable (cofacial).

In addition to these parallel arrangements, CH–π contacts found in the T-shaped motif also exhibit high inter-layer coupling (|t|≈170-173 meV), suggesting that charge transport can efficiently proceed through 3D inter-columnar pathways [5]. Ultimately, packing geometry serves as a control parameter for electronic properties, revealing a fundamental trade-off between maximal orbital overlap and thermodynamic stability, which guides the rational design of organic semiconductors.

References

1. Brédas J. L., et al. “Charge-transfer and energy-transfer processes in π-conjugated oligomers and polymers” *Chemical Reviews*, 2004, 104, 4971.

2. Coropceanu, V., et al. “Charge transport in organic semiconductors”. *Chemical Reviews*, 2007,107(4), 926.

3. Grimme S., et al. “A consistent and accurate ab initio parametrization of DFT-D for the 94 elements H-Pu” *J. Chem. Phys*, 2010, 132, 154104.

4. Schreiber F. “Organic thin films: from monolayers to molecular crystals” *Progress in Surface Science*, 2000, 65, 151.

5. Würthner F. et al. “Perylene bisimide dye assemblies as archetype functional supramolecular materials” Chemical Reviews, 2016, 116, 96.

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ СТЕКОЛ СИСТЕМЫ $(Bi_2O_3–2B_2O_3)$ + βNaOH В ИНТЕРВАЛЕ 300–680 К

Д.С. Кучакшоев, А.Г. Джабаров, А. Холов
Физико-технический институт им. С. У. Умарова, НАН Таджикистана, пр. Айни 299/1, Душанбе 734063, Республика Таджикистан
k.davlat@mail.ru

В последние годы боратные стёкла привлекают значительное внимание благодаря сочетанию низкой температуры плавления, высокой оптической прозрачности, хорошей термической стабильности и возможности целенаправленной модификации структуры путём введения различных оксидных добавок, что позволяет регулировать их физико-химические и функциональные свойства [1].

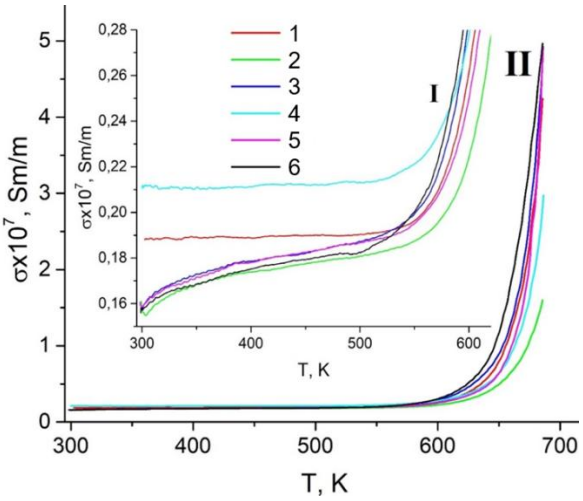


Рис. 1. Температурная зависимость электропроводность стекло состава $(Bi_2O_3+2B_2O_3)$+βNaOH с: 1-0%; 2-1%; 3-2%; 4-4%; 5-8% и 6-12% концентрациями NaOH.

В работе исследовано влияние содержания NaOH на температурную зависимость электропроводности стёкол состава $(Bi_2O_3–2B_2O_3)$ +βNaOH в интервале температур до 680 К. К предварительно синтезированному стеклу $Bi_2B_4O_9$ добавляли β молей NaOH, плавили при 1050 К в платиновом тигле с выдержкой 7 ч и быстро охлаждали в керамическом тигле [2]. Температурные зависимости электропроводности измеряли на специализированной экспериментальной установке, описание которой приведено в работах [3].

Из рисунка 1 видно, что для большинства образцов рост удельной электропроводности начинается сразу после нагрева. Исключение составляют образцы 1 и 4, у которых до температур 500–540 К электропроводность

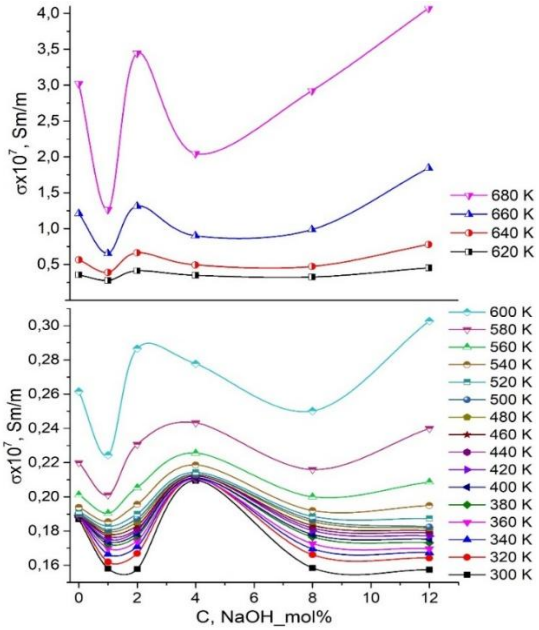


Рис. 2. Изотермы удельной проводимости в зависимости от концентрации NaOH в стеклах $(Bi_2O_3+2B_2O_3)+\beta NaOH$ в интервале температуре 300 – 680 К.

практически не изменяется. Введение NaOH оказывает заметное влияние на электропроводность в низкотемпературной области. При добавке 1 мол% NaOH наблюдается её минимальное значение, при увеличении концентрации до 4 мол% электропроводность достигает максимума, а дальнейшее повышение содержания NaOH до 8 и 12 мол% приводит к её снижению. При температурах выше 550 К для всех образцов наблюдается резкий рост электропроводности, обусловленный увеличением подвижности носителей заряда. На рисунке 2 представлены изотермы удельной электропроводности стекол в зависимости от содержания NaOH. До 540 К характер изменения электропроводности сохраняется для всех исследованных составов. Наибольшая электропроводность в этой области наблюдается у исходного стекла $Bi_2B_4O_9$ (образец 1), не содержащего натрия. Добавление 1 мол% NaOH приводит к её уменьшению, при 2–4 мол% наблюдается увеличение, при 8 мол% – снижение, а при 12 мол% – повторный рост. Аналогичное поведение ранее было отмечено при исследовании теплоёмкости и рентгенофазового состава.

В интервале 300–540 К значения электропроводности изменяются незначительно, что свидетельствует о слабой температурной активации процесса переноса заряда. При температурах выше 540 К характер проводимости изменяется: максимальные значения электропроводности достигаются для образцов с содержанием 2 и 12 мол% NaOH, что, вероятно, связано со структурными изменениями стекла и ростом подвижности носителей заряда.

Во время нагрева и прохождения электрического тока наблюдалось потемнение и помутнение образцов, что свидетельствует о модификации их структуры. Высокотемпературный участок температурной зависимости электропроводности является линейным в координатах lnσ–1/T, что позволяет определить энергию активации процесса проводимости по уравнению Аррениуса: $W = -\left(\frac{dln\sigma}{d(1/T)}\right)R$.

Полученные зависимости использованы для расчёта энергии активации проводимости исследованных стекол.

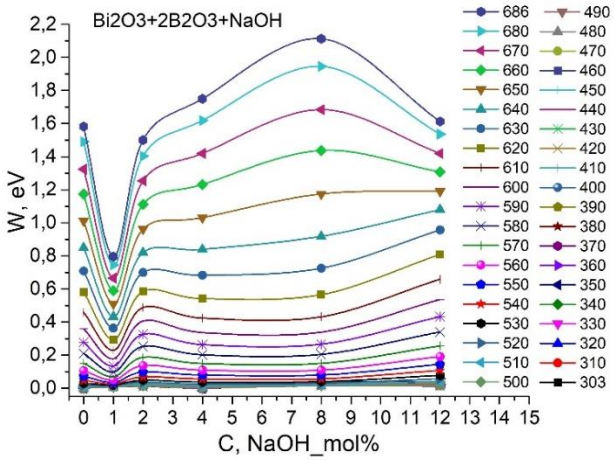


Рис. 3. Энергия активации всех типов стекол в зависимости от концентрации Bi_2O_3 и NaOH при первом и вторичном нагреве.

Приведенные на рисунке 3 зависимость энергия активации от концентрации NaOH для стекол состава $(Bi_2O_3+2B_2O_3)$ +βNaOH показывают, что энергия активация для этого состава почти не меняется и колеблются в интервале от 1.58 до 2.11 эВ. Из этого следует, что добавка NaOH до 12 мол % мала влияет на энергию активации исходную стекло. Здесь можно подтвердить, что изменения содержание щелочных металлов приводить к изменению энергию активации. Энергия активация не постоянная, но можно связать с определённым типом проводимости. В образце наблюдается сложный процесс проводимости, вместе одного участка будет ещё другие участки, будут набор таких процессов, который по характеру проводимости могут отличатся. Поэтому разброс энергии активации может быть связано с сложный процесс проводимости.

Ввиду сказанного, при нагревании некоторых образцов кроме переноса ионов натрия через его объём в направлении катода происходит их захват структурными ловушками молекулярной сетки, образованной B, Bi и O. В этом

случае электрическое поле играет роль доставщика ионов натрия в те области молекулярной сетки, где возможно образование ионной связи натрия с благоприятно расположенными атомами кислорода, и куда из-за большой вязкости расплава и дефицита времени при формовании образца такая доставка была невозможна.

Таким образом, исследование электропроводность в стеклах позволяет определить энергию активации процесса проводимости и вклад ионной проводимости при низких температурах. Максимальные значения электропроводности соответствует термической активации ионов натрия из различных связанных состояний, имеющих разные энергии связи.

Литературы:

1. Abid M., El-Hars F., Belfaquir M., Laourayed M., Bakkali S., Hafid M., Taibi M. (2023) Structure – properties study of sodium bismuth borate glasses, Mor.J. Chem., 11(2),566-578. https: //doi.org/10.48317/IMIST. PRSM/morjchem-v11i1.31823.

2. Кучакшоев Д.С., Джабаров А.Г., Холов А. Рентгенофазовый анализ стёкол ($2Bi_2O_3$–B_2O_3) и (Bi_2O_3–$2B_2O_3$) с различной концентрацией NaOH в формовочной смеси. Доклады НАН Таджикистан, 2022, том 65, №1-2 стр. 69-74.

. Кучакшоев Д.С., Джабаров А.Г., Холов А., Мавлонов Х. Экспериментальная установка для исследования электрических свойств твёрдых тел при высоких температурах. Физико-технический институт им. С.У.Умаров НАНТ. VII Международной конференции Современные проблемы физики. – Душанбе, 2020, с. 90-92.

ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ CaF_2:SrF_2 и CaF_2:YbF_3

М.Х. Ашуров, И. Нуритдинов, С.Т. Бойбобоева, С.М. Утаров
Институт Ядерной Физики АН РУз. пос. Улугбек, Ташкент, 100214, Узбекистан
utarov@inp.uz

Материалы, легированные редкоземельными элементами, широко используются в люминесцентном освещении, лазерной технике и медицинской визуализации благодаря высоким оптическим характеристикам и квантовой эффективности [1–3]. Оптические свойства ионов Yb^{3+} в монокристаллах CaF_2 и SrF_2 хорошо изучены [1–3], тогда как сведения о состоянии Yb^{2+} остаются ограниченными. Несмотря на это, монокристаллы CaF_2:YbF_3 обладают рядом технологических и спектроскопических недостатков. В частности, их получение требует строгого соблюдения условий кристаллизации, поскольку отклонение от оптимальных параметров приводит к образованию ячеистой структуры и ухудшению лазерных характеристик [2]. Одним из перспективных подходов к созданию материалов с заданными свойствами является использование многокомпонентных кристаллических систем. Технология выращивания кристаллов CaF_2 - SrF_2 - YbF_3 более проста и воспроизводима по сравнению с MeF_2:YbF_3(M_e=Ca,Sr), что способствует повышению эффективности лазерных устройств [2]. В настоящей работе проведено сравнительное исследование люминесцентных центров иттербия в монокристаллах твёрдых растворов CaF_2 - SrF_2 - YbF_3 и кристаллах CaF_2 - YbF_3 при комнатной температуре.

Спектр поглощения ионов Yb^{2+} в кристаллических образцах CaF_2 - YbF_3 характеризуется четырьмя интенсивными полосами в УФ-области с максимумами при: A_1=228 нм, A_2=263 нм, A_3 = 274 нм, A_4 = 365 нм [4]. Положение этих полос практически не изменяется в монокристалле твёрдого раствора $65CaF_2$:$30SrF_2$:$5YbF_3$ [5]. При возбуждении на полосе 228 нм (наиболее интенсивный пик) в необлучённом кристалле CaF_2:YbF_3 с концентрацией 0.1 мол % иттербия наблюдается спектр фотолюминесценции (ФЛ) в диапазоне 270–450 нм (рис.1). Из рис.1 следует, что спектры фотолюминесценции, зарегистрированные

при возбуждении на длинах волн 230, 235 и 240 нм, имеют близкую форму и характеризуются широкой полосой излучения в области 270–450 нм.

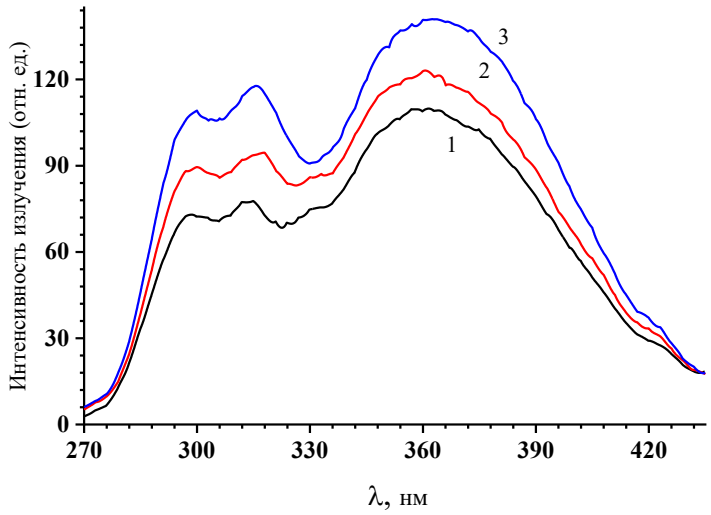


Рис.1 Спектры люминесценции необлученного кристалла CaF_2 –YbF_3 (0.1 мол % YbF_3) при комнатной температуре при возбуждении на длине волны (1) 230 нм, (2) 235 нм, (3) 240 нм.

При низкой концентрации примеси наиболее интенсивная полоса располагается около 360 нм, однако при увеличении содержания YbF_3 её интенсивность уменьшается и при дальнейшем росте концентрации до 1 мол% полностью исчезает. Снижение интенсивности и исчезновение полосы около 360 нм при увеличении концентрации иттербия связано с повышением межионного взаимодействия, образованием кластеров, нарушением симметрии решётки, передачей энергии на центры тушения и фононы, самоабсорбцией и безызлучательными процессами [6,7].

Форма спектров ФЛ кристаллов $65CaF_2$:$30SrF_2$:$5YbF_3$ аналогична спектрам CaF_2 - YbF_3 и представляет собой широкую полосу, образованную наложением нескольких компонент. Максимумы полос возбуждения ФЛ смещены относительно кристаллов CaF_2 - YbF_3, что может быть связано с различием ионных радиусов Ca^{2+} и Sr^{2+}. Согласно анализу полос поглощения оптических центров Yb^{3+}, ионам Sr^{2+} энергетически выгодно находиться в ближайшем окружении тетрагональных и тригональных центров [3]. Увеличение радиуса основного катиона ($R_{Sr} > R_{Ca}$) ()

изменяет параметры решётки и локальное кристаллическое поле, вызывая штарковское расщепление уровней и смещение максимумов поглощения в коротковолновую область.

При возбуждении в области 230–240 нм формируется широкая полоса излучения в диапазоне 200–450 нм, обусловленная наложением нескольких компонент, связанных с различными типами центров Yb^{2+}. Основной вклад в спектр вносят изолированные центры (≈290–320 нм), релаксированные центры (≈320–380 нм) и парные центры Yb^{2+} - Yb^{3+} (≈400–430 нм) [6].

Сравнение люминесцентных спектров образцов $65CaF_2{:}30SrF_2{:}5YbF_3$ с монокристаллами CaF_2 - YbF_3 показало, что при одинаковой концентрации иттербия их интегральная интенсивность существенно выше. Это связано с более «гибкой» решёткой смешанной матрицы CaF_2 – SrF_2: ионы Sr^{2+} увеличивают локальное пространство вокруг ионов Yb^{3+}, обеспечивая более равномерное распределение активаторов и уменьшая образование неэффективных кластеров. Таким образом, введение SrF_2 в матрицу CaF_2 – YbF_3 приводит к повышению интенсивности ультрафиолетовой люминесценции и снижению концентрационного тушения. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности кристаллов $CaF_2{:}SrF_2{:}YbF_3$ для создания УФ-излучающих и сцинтилляционных материалов.

Литература

[1] Lyapin A.A. et al. Optical Materials. 2013, V. 35, № 10. P. 1859–1864.

[2] Basiev T.T. et al. Quantum Electronics 2007, V. 37, №. 10. P. 934–937.

[3] Ushakov S. N. et al. Optics and Spectroscopy 2020, V.128, №. 5, P. 600–604.

[4] Nicoaraa I. et al . Journal of Crystal Growth 2008, V. 310. P. 2026–2032.

[5] Ashurov M. Kh. et al. Inorganic Materials, 2022, V. 58, №. 8, P. 886–892.

[6] D.S. McClure, C. Pedrini. Phys. Rev. B 32 (1985) 8465-8468.

[7] Z Barandiarán, L. Seijo, J. Chem. Phys. 2014, 141, 234704.

BSO, BGO VA LGS KRISTALLARIDA RAMAN-NATH DIFRAKSIYASI YORDAMIDA AKUSTIK TO‘LQIN TEZLIGINI ANIQLASH

Axmedjanov Farxad Rashidovich, Ulashov Asror Axmad o‘g‘li
O‘zR FA U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti
e-mail: ulashovasror9@gmail.com

Hozirgi kunda rivojlanib borayotgan zamonaviy optoelektronika va lazer texnikasida akustooptik effekt asosida ishlaydigan qurilmalar ya’ni modulyatorlar hamda deflektorlar keng qo‘llaniladi. Qurilmalar samaradorligi ko‘p jihatdan akustik to‘lqin tezligi va akustooptik sifat koeffitsienti M_2 ning fazoviy anizotropiyasiga bog‘liq. So‘nggi yillarda M_2 anizotropiyasini ekstremal sirtlar usuli orqali tahlil qilish rivojlanmoqda. Bu usul asosan $LiNbO_3$ hamda langasit (LGS) va katangasit (CTGS) kristallari [2] uchun qo‘llanilgan, ammo bunda optik aktivlik hisobga olinmagan. BGO, BSO, kvars va LGS esa aynan optik aktivlikka ega kristallar hisoblanadi va bu jihat ushbu kristallarda M_2 anizotropiyasini qayta ko‘rib chiqishni taqozo etadi. Ushbu ishda dastlabki qadam sifatida BGO, BSO va LGS kristallarida akustik to‘lqin tezligini Raman-Nath difraksiyasi asosida eksperimental aniqlash natijalari keltirilgan.

Kristallda tarqalayotgan ultratovush to‘lqini davriy mexanik kuchlanish (u) hosil qiladi:

$$\Delta\alpha_{ij} = p_{ijkl}u_{kl} \tag{1}$$

Natijada kristall ichida sindirish ko‘rsatkichining davriy o‘zgarishi hosil bo‘ladi, undan o‘tayotgan yorug‘lik esa Raman-Nath rejimida bir nechta difraksiya tartibiga bo‘linadi. Akustik to‘lqin tezligi V quyidagi Grin Kristoffel tenglamasidan aniqlanadi:

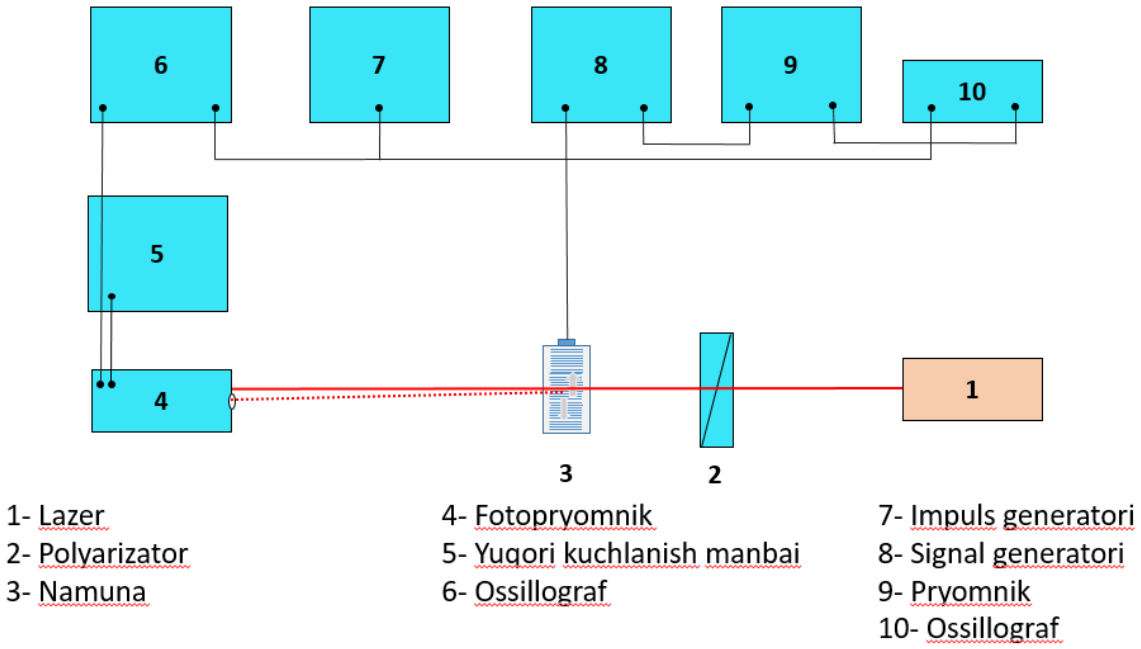
$$V = \sqrt{\frac{C_{eff}}{\rho}} \tag{2}$$

bu yerda C_{eff}-mos yo‘nalishdagi effektiv elastik doimiy, ρ-zichlik. Berilgan akustooptik o‘zaro ta’sir ifodasi uchun effektiv fotoelastik koeffitsient p_{eff} kiritilib, akustooptik sifat koeffitsienti quyidagicha yoziladi:

$$M_2 = \frac{n^6 p_{eff}^2}{\rho V^3} \tag{3}$$

Izotrop va anizotrop difraksiya turlari uchun p_{eff} turlicha bo‘lib, M_2 ning yo‘nalish bo‘yicha ekstremal sirti quriladi [2]; optik aktiv kristallarda esa qutblanish elliptik shaklga o‘tgani sababli bu anizotropiyani qayta hisoblash talab etiladi.

O‘lchov qurilmasining tuzulish sxemasi 1-rasmda keltirilgan: qizil rangi He-Ne lazer (1) nuri polyarizator (2) orqali namuna (3) ichidan o‘tayotgan ayni bir vaqtda signal va impuls generatorlarida (7, 8) shakllantirgan impuls pyezoplastinkaga uzatilib, akustik to‘lqin qo‘zg‘atadi. Akustik to‘lqin fronti bilan Raman-Nath rejimida difraksiyalangan nur fotopriyomnik (4) orqali qayd etilib yuqori kuchlanish manbai (5) orqali 1-ossillografda (6) tasvirlanadi; hamda ushbu signal pryomnik (9) orqali 2-ossillografda (10) kuzatib boriladi. 1- va 2-ossilograflardagi kuzatilayotgan grafiklar ustidagi hisob-kitoblar orqali akustik to‘lqin tezligi topiladi.



1-rasm. Raman-Nath difraksiyasi asosida akustik to‘lqin tezligini o‘lchash qurulmasining sxemasi.

Bu qurilma shuningdek, difraksiyalangan signal amplitudasining kamayishini kuzatish orqali so‘nish koeffitsientini ham aniqlash imkonini beradi. Raman-Nat difraksiyasi yordamida BSO, BGO va LGS kristallarida <100> yo‘nalishi bo‘yicha akustik to‘lqin tezligi o‘lchandi ($\lambda = 632{,}8$ nm, qizil He-Ne lazer). Tushayotgan yorug‘lik to‘lqinining

qutblanish tekisligi, namuna uzunligi, o‘lchangan vaqt va har bir kristall uchun 632,8 nm dagi sindirish ko‘rsatkichi 1-jadvalda keltirilgan.

1-jadval. Tadqiq etilgan kristallarning akustooptik parametrlari (n qiymatlari [1,3] asosida)

Kristall	$\vec{q}$	$\vec{k}$	**L, mm**	**Δt, μs**	***V*, km/s**	**n**	**λ, nm**
$Bi_{12}SiO_{20}$	<100>	<001>	11,09	3,24	3,42	2,54	632,8
$Bi_{12}GeO_{20}$	<100>	<001>	28,8	7,93	3,63	2,55	632,8
$La_3Ga_5SiO_{14}$	<100>	<001>	11,43	1,99	5,73	1,91	632,8

Natijalardan ko‘rinadiki, LGS kristalida tezlik (5,73 km/s) BGO va BSO ga nisbatan sezilarli yuqori. Bu LGS ning kvarsga o‘xshash qattiq panjarasi bilan izohlanadi (ya'ni atomlar orasidagi bog‘ kuchli); BGO va BSO esa sillenit tuzilishiga xos yumshoq elastik xossalari tufayli deyarli teng va past tezlikka ega. Olingan qiymatlar adabiyotdagi ma’lumotlar bilan mos keladi [1].

Raman-Nath difraksiyasi usuli yordamida BSO, BGO va LGS kristallarida <100> yo‘nalishi bo‘yicha akustik to‘lqin tezligi adabiyotlardagi natijalarga mos holda yuqori aniqlikda aniqlandi. Xulosa qilib aytganda, olingan natijalar optik aktivlikni hisobga olgan holda M_2 anizotropiyasining ekstremal sirtlarini qurish uchun asos bo‘lib xizmat qiladi.

Adabiyotlar

1. Dieulesaint E., Royer D. Elastic Waves in Solids I: Free and Guided Propagation. Berlin: Springer, 1996. 435 p.

2. Buryy O., Demyanyshyn N.M., Mytsyk B.G., Andrushchak A.S., Sugak D. Acousto-optic interaction in LGS and CTGS crystals // Optics Continuum. 2022. Vol. 1, Issue 6. p. 1314-1323.

3. Konstantinova A.F., Golovina T.G., Nabatov B.V. et al. Experimental and theoretical determination of the optical rotation in langasite family crystals // Crystallography Reports. 2015. Vol. 60, №6. p. 907-914.

EFFECT OF TECHNOLOGICAL FACTORS ON THE PERCOLATION THRESHOLD IN DOPED SILICATE GLASS

Tursunova Rushana Muhammadjon qizi, Soliyev Muxammadyor Vaxobjon o‘g‘li
National University of Uzbekistan
muhammdyorsoliyev@gmail.com

Abstract. This paper investigates the electrical properties of thick-film composite resistors based on a B34E lead-silicate glass matrix doped with RuO_2, focusing on the influence of RuO_2 concentration and firing temperature. The dependence of electrical resistance on RuO_2 content was analyzed across a temperature range of $1023 - 1173\,K$. The results demonstrate that resistance decreases monotonically with increasing RuO_2 concentration, exhibiting the sharpest variation within the critical percolation threshold region ($p_c \approx 7 - 9\,mass\,\%$), which is attributed to the formation of continuous conductive clusters among the dispersed phase particles. Furthermore, elevating the firing temperature reduces the resistance by an additional factor of $5 - 9$ due to improved glass wetting and enhanced interparticle contacts. These findings provide a quantitative description of the conduction mechanism in the B34E – RuO_2 system, establishing a practical framework for the technological control of thick-film resistor parameters.

Keywords: B34E lead-silicate glass, RuO_2, composite resistor, percolation threshold, electrical conductivity, thick-film technology.

The electrical conduction mechanism in these composite materials is interpreted within the framework of percolation theory: when the concentration of the conductive phase particles reaches a specific critical limit – known as the percolation threshold – a continuous conductive cluster forms within the insulating matrix, resulting in a sharp drop in the electrical resistance of the system.

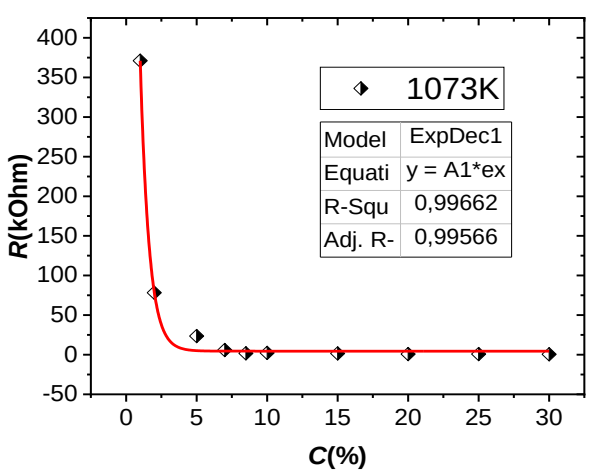
Matrix Material: Powdered lead-silicate B34E glass was used in the experiments.

The resistive pastes were applied onto an Al_2O_3 ceramic substrate (96% purity) in a standard rectangular geometry using a screen-printing technique.

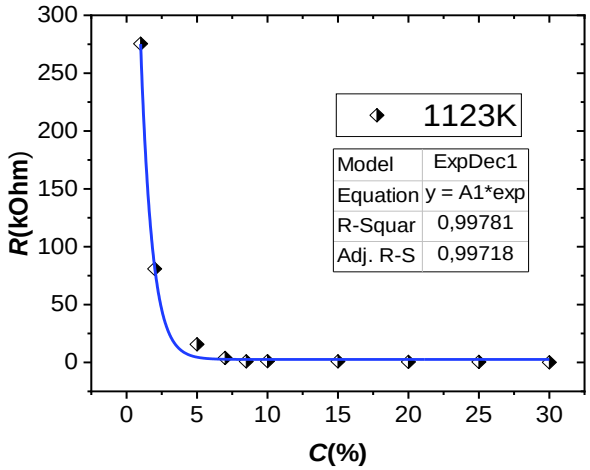


Figure 1. Thick-film resistor based on doped silicate glass. 1 - contact layer, 2 - resistive layer, and 3 - ceramic substrate.

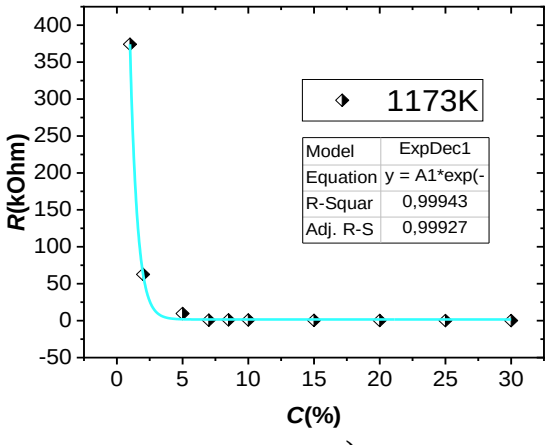
The samples were initially dried at 423 K and subsequently fired in a conveyor furnace for 10 minutes at peak temperatures of $1073K$, $1123K$, and $1173K$.



a)



b)



c)

Figure 2. Concentration dependence of electrical resistance ($C = 1\% - 30\%$) for resistors based on doped silicate glass

In the vicinity of the percolation threshold ($C > C_c$), the effective electrical resistance $R(C)$ and conductivity $\sigma(C)$ follow a universal power-law scaling relation:

$$R(C) = R_0 \cdot (C - C_c)^{-t} \quad (1)$$

$$\sigma(C) = \sigma_0 \cdot (C - C_c)^{t} \quad (2)$$

where: C – concentration of the conductive dopant, C_c – percolation threshold, t – critical exponent of electrical conductivity, R_0 and σ_0 – pre-exponential scaling factors determined by the microstructure and intrinsic conductivity of the conductive phase.

Conclusion

The electrical properties of doped silicate glass resistors were evaluated across a concentration range of $C = 1\% - 30\%$ under various annealing temperatures. The experimental results conform to classical percolation theory, displaying a sharp drop in electrical resistance near the critical concentration threshold C_c. Increasing the heat treatment temperature from $1073\,K$ to $1173\,K$ significantly reduces the matrix viscosity, facilitating the formation of a continuous conductive network and shifting C_c toward lower dopant concentrations. This temperature-dependent shift is governed by a thermal activation process, demonstrating that optimizing annealing conditions allows precise control over the resistor's electrical performance and percolation threshold.

References

1. Efros A. L., Shklovskii B. I. Critical behaviour of conductivity and dielectric constant of percolation systems // Physica Status Solidi (b). – 1976. – Vol. 76, No. 2. – P. 475–485.
2. Stauffer D., Aharony A. Introduction to Percolation Theory. – 2nd ed. – London: Taylor & Francis, 1994. – 192 p.
3. Pike G. E., Seager C. H. Percolation modeling of powder mixtures: Application to thick-film resistors // Journal of Applied Physics. – 1977. – Vol. 48, No. 12. – P. 5152–5169.

AKUSTIK TO‘LQINLAR TEZLIGI VA SO‘NISH KOEFFITSIENTINI WILLIAMS-LAMB USULIDA ANIQLASH

Axmedjanov Farxad Rashidovich, Tursunov Ixvoliddin baxtiyor o‘g‘li
ixvoliddin33@gmail.com

Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, Toshkent, O‘zbekiston

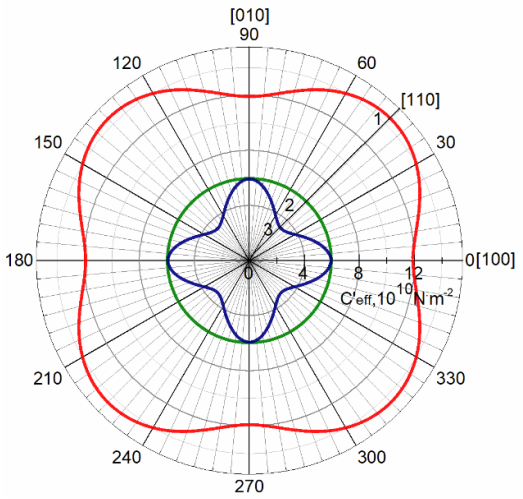
Ushbu tadqiqotda biz akustik to‘lqinlarning tezligi va so‘nish koeffitsentini bir vaqtning o‘zida aniqlash imkonini beruvchi Williams-Lamb usulidan foydalandik [1, 2]. Usulda vaqt bo‘yicha siljitilgan ikkita zondlovchi radioimpuls tomonidan qo‘zg‘atilgan ikkita akustik impuls signalining superpozitsiyasidan foydalaniladi. Akustik signallar interferensiyasi natijasida hosil bo‘lgan umumiy aks-sado impulsining amplitudasi ushbu impulslarni to‘ldirib turgan tebranishlar orasidagi faza farqiga va namuna uzunligi L ga bog‘liq bo‘ladi. Ushbu tebranishlar chastotasini o‘zgartirish orqali, umumiy impuls amplitudasi minimum yoki maksimumga erishadigan chastota qiymatlarini va mos ravishda ularning farqi $\Delta\nu$ ni aniqlash hamda akustik to‘lqinlar tezligini ~0,1% aniqlikda quyidagi munosabatdan topish mumkin [1]:

$$V = 2L \cdot \Delta\nu \qquad (1)$$

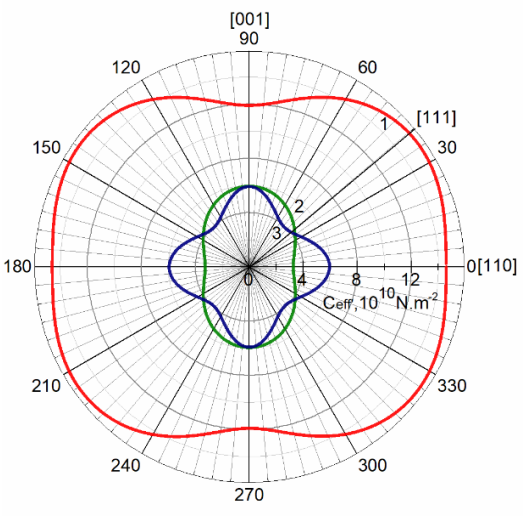
Kristallarda har bir yo‘nalish bo‘yicha akustik to‘lqinlarning tarqalish tezligi va so‘nish koeffitsentini effektiv elastik doimiylik c'_{eff} yordamida ifodalash mumkin, uning qiymatlari [3, 4] dagi elastiklik tenzori komponentalari asosida hisoblanadi:

$$c'_{eff} = \rho V^2 \qquad (2)$$

1- va 2-rasmlarda keltirilgan diagrammalardagi 1, 2 va 3 raqamli egri chiziqlar mos ravishda bitta bo‘ylama va ikkita ko‘ndalang akustik to‘lqinga tegishli effektiv elastik doimiyni ifodalaydi.



1-rasm. Kremniy kristalining (001) tekisligida effektiv elastik doimiylik c'_{eff} ning kristallografik yo‘nalishga bog‘liqligi.



2-rasm. Kremniy kristalining (110) tekisligida effektiv elastik doimiylik c'_{eff} ning kristallografik yo‘nalishga bog‘liqligi.

Natijalarga ko‘ra, c'_{eff} qiymati asosiy kristallografik yo‘nalishlar ([100], [110], [111]) atrofida maksimal, oraliq yo‘nalishlarda esa minimal bo‘ladi; bu anizotropiya, o‘z navbatida, akustik to‘lqinlar tezligi va so‘nish koeffitsentining tarqalish yo‘nalishiga bog‘liq holda o‘zgarishini izohlaydi. Olingan eksperimental natijalar nazariy hisob-kitoblar bilan yaxshi mos tushib, Williams–Lamb usulining nafaqat izotrop, balki anizotrop muhitlarda ham yuqori aniqlikda o‘lchov o‘tkazish imkonini berishini tasdiqlaydi.

Adabiyotlar

1. Truell R., Elbaum C., Chick B.B. Ultrasonic Methods in Solid State Physics. Academic Press, New York and London, 1969.

2. Akhmedzhanov F.R., Kurbanov J.O., Boltabaev A.F. Attenuation of acoustic waves in single-domain and polydomain LiTaO3 crystals. Sensors & Transducers, 246, No.7, 43–47 (2020).

3. Nye J.F. Physical Properties of Crystals. Oxford University Press, New York, 2005.

4. R. E. Nyunxem, “Properties of Materials.” (Oxford University Press Inc., New York, 2005). p 390.

ВЛИЯНИЕ НЕЙТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЕ НА ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ, СВОЙСТВА КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ РЕАКТОРА

С.А. Байтелесов, Ф.Р. Кунгуров, Г.Н. Турдиева
Институт ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан,
ул. Хуросон 1, пос. Улугбек, г. Ташкент, 100214, Узбекистан
С.А. Байтелесов baytel@inp.uz
Ф.Р. Кунгуров fkungurov@inp.uz
Г.Н. Турдиева turdievagulbaxor5@gmail.com

Нами было исследовано влияние реакторного излучения на микротвердость и элементный состав и структуру авиалов САВ-1 и АМГ-2. Для этой цели образцы этих сплавов облучали нейтронным потоком реактора ВВР-СМ Института ядерной физики АН РУз при флюенсах $\approx 10^{18}$ и $\approx 10^{19}$ нейтрон/см^2. Для определения элементного состава и структуры этих образцов они исследовались на рентгеновском микроанализаторе “Jeol” JSM 5910 IV. Производился анализ зависимости микротвердости от остальных физических параметров.

Радиационной повреждаемости облучаемых сплавов связаны с возбуждением их электронной и атомной подсистем, с протеканием ядерных реакций и со смещением атомов кристаллической решетки из первоначальных равновесных положений.

Возбуждение электронной и атомной подсистем играет особую роль в образовании радиационных дефектов в ионных кристаллах и в полупроводниках.

В результате ядерных реакций в облученных твердых телах образуются новые атомы примеси - трансмутанты, изменяющие их физико-механических характеристики.

При нейтронном облучении наблюдается падение пластичности и повышение механической прочности реакторных материалов, в частности конструкционных материалов оболочек твэлов, опорной решетки, донышко горизонтальных каналов и бакареакторов. Все это следует учитывать при

конструировании ядерных реакторов и при оценке их эксплуатационных характеристик, экономичности и безопасности работы.

Данный работа содержит результаты исследования влияния облучения на свойства сплавов алюминия САВ-1 и АМГ-2. Результаты получены при облучении только быстрыми нейтронами, энергия которых в большинстве случаев была выше 1 Мэе.

Определение изотопного состава

С использование рентгеновском микроанализаторе “Jeol” JSM 5910 IV получены данные содержания элементов Mg, Al, Fe, Si и Cu для авиалов САВ-1 и АМГ-2 до облучения и после облучения при флюенсе 10^{19} нейтрон/см^2 соответственно.

В таблице1 приведено содержание элементов Mg, Al, Fe, Si и Cu для конструкционных материалов типа АМГ-2 до облучения и после облучения соответственно флюенсом 10^{19} нейтрон/см^2. Заметим, что в таблице даны результаты измерений для тех точек, которые не попадают в области локальных образований нерастворимых фаз.

Таблица 1. Элементный состав основных примесей (в %) исследованных образцов конструкционных сплавов до и после облучения их нейтронами.

Образец исходный	№ анализ	Mg	A1	Si	Mn	Fe	Cu	Сумма
АМГ-2	4	2,81	96,72	0,00	0,21	0,27	0,00	100,00
АМГ-2	5	2,77	96,65	0,00	0,27	0,25	0,07	100,00
АМГ-2	6	2,82	96,72	0,00	0,24	0,23	0,00	100,00
Среднее		**2,80**	**96,70**	**0,00**	**0,24**	**0,25**	**0,02**	**100,00**
Образец облученный	№ анализ	Mg	A1	Si	Mn	Fe	Cu	Сумма
АМГ-2	4	1,23	97,51	0,58		0,68	0,00	100,00
АМГ-2	5	1,56	97,204	0,56		0,68	0,00	100,00
АМГ-2	6	1,71	97,32	0,57		0,31	0,09	100,00
Среднее		**1,50**	**97,34**	**0,57**		**0,56**	**0,03**	**100,00**

Из сравнения приведенных в таблице данных следует вывод о том, что нейтронное облучение привело к изменению элементного состава всех образцов.

Сравнение этих результатов показало, что радиация привела к уменьшению содержания элементов Mg, Al, Cu при одновременном увеличении содержания Fe и Si в облученных материалах. На отснятых растровых картинах образцов САВ-1 и АМГ-2 видны локальные образования (нановключения) в виде белого пятна нерастворимых интерметаллических фаз типа Al-Mg-Si-Fe с размерами от 1 до 10 мкм . Эти нановключения особенно хорошо видны, например, для элемента Si. Измерение содержаний выше приведенных элементов в этих областях показало, что оно значительно отличается от основного материала.

Из сравнения приведенных в таблице данных следует вывод о том, что нейтронное облучение привело к изменению элементного состава всех образцов. Надо отметить тот факт, что для Mg эффект свелся почти к двукратному уменьшению содержания, в то же время для остальных элементов он оказался обратным.

После облучения на растровых картинках видно, что поверхность сплавов окисляется, нерастворимые фазы раздробляются и рассеиваются по объему образца, становясь практически равномерными по всему объему. Это особенно характерно для элементов железа и магния, а также кремния.

Список литературы

1. Сборки тепловыделяющие ИРТ-4М. Каталожное описание 0019.20.00.000 ДКО, НЗХК, Новосибирск, 2004.
2. J.R. Deen, W.L.Woodruff, Инструкция пользователя WIMS-ANL вер. 6, ANL/TD/TM99-07, Аргоннская Национальная Лаборатория, Аргонн, Иллинойс, февраль 2004.

TEMPERATURE DEPENDENCE OF ATTENUATION COEFFICIENT OF ACOUSTIC WAVES IN Si

I.Sh. Toshpulatov[1], V.N. Avdiyevich[1]

Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies

e-mail: ibrat.toshpolatov96@gmail.com

Introduction. In recent years, there has been increased interest in the linear and nonlinear elastic properties of crystals used in optical signal processing devices such as modulators, deflectors, acousto-optic filters, etc. [1, 2].

Sample preparations and research methods. A study of pure silicon (Si) was conducted. The sample, corresponding to the length of 0.589 cm, 0.587 cm, and 1.391 cm, respectively, has a parallelepiped shape with a [110] direction of 1^0 of accuracy with directional. Measurements were carried out in the temperature range from 300 to 410 K. To determine the attenuation coefficient of acoustic waves, a modified Williams-Lamb phase-pulse method was used. The block diagram of the experimental set-up is shown in Figure 1.

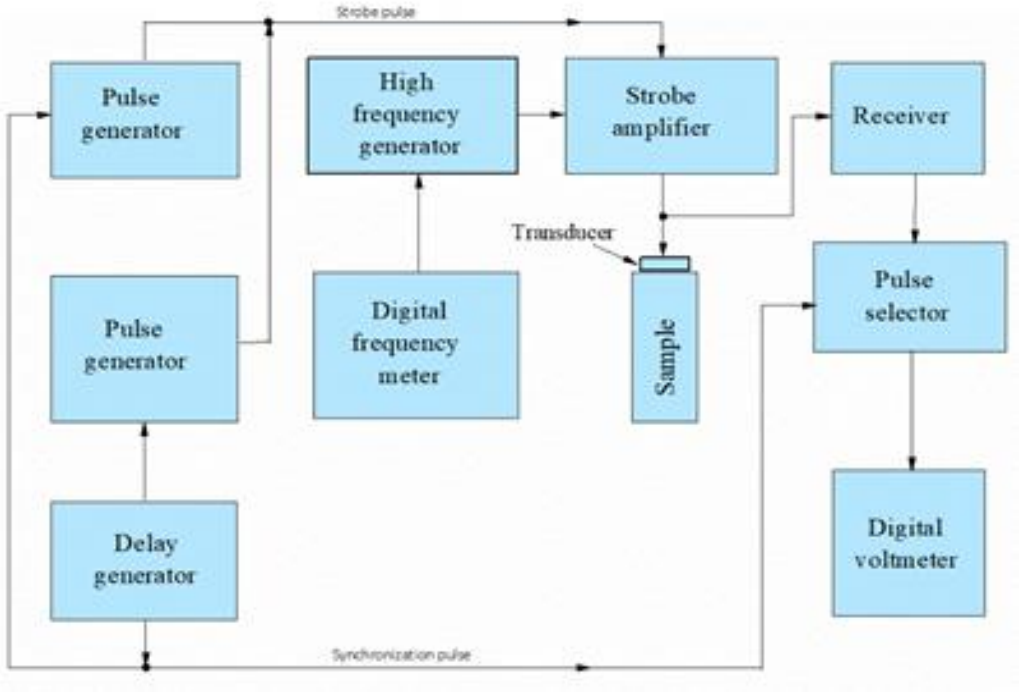


Fig.1. Block diagram of a measuring system for determining the characteristics of acoustic waves.

The attenuation coefficient of acoustic waves was determined from the measured values of the amplitudes of adjacent pulses A_1 and A_2 and the length of the sample L_0:

$$\alpha = \frac{20lg\left(\frac{A_1}{A_2}\right)}{2L_0} \quad (1)$$

When determining the acoustic wave attenuation coefficient, various types of acoustic energy loss, caused by so-called geometric factors, were taken into account. In general, the true attenuation α (in dB / cm units), taking these factors into account, is written as:

$$\alpha = \alpha_{exp} - \alpha_d - \alpha_n, \quad (2)$$

Here α_{exp} is the experimentally determined attenuation from relation (2), α_d–diffraction losses, the contribution of which is large at low frequencies, and α_n– apparent attenuation caused by the non-parallelism of the reflecting faces. The values of α_d and α_n are determined by the expressions [3]:

$$\alpha_d = 1.7\frac{V}{a^2 \cdot \nu}, \quad (3)$$

$$\alpha_n = \frac{8.68\pi^2\nu^2a^2\theta^2n}{V^2L}, \quad (4)$$

where a is the diameter of the piezoelectric transducer, θ is the angle between the reflecting faces, and n is the number of reflections.

Results and discussions. The characteristic surfaces of velocity and attenuation of acoustic waves can be constructed if all independent real (c'_{ijkl}) and imaginary (c''_{ijkl}) components of the complex elasticity tensor c_{ijkl}[4]:

$$c_{ijkl} = c'_{ijkl} + ic''_{ijkl} \quad (5)$$

Si has their own internal symmetry, resulting from the cube's elasticity tensor, and the three independent components of the real and imaginary parts must be known.

Figure 2 was obtained at a frequency of 30 MHz. The acoustic wave attenuation coefficient versus temperature dependence was between them from room temperature to 410 K. The graph shows a decimal fraction on a logarithmic scale. The result

obtained in the literature is taken from the graph, and the result is suitable for the temperature.

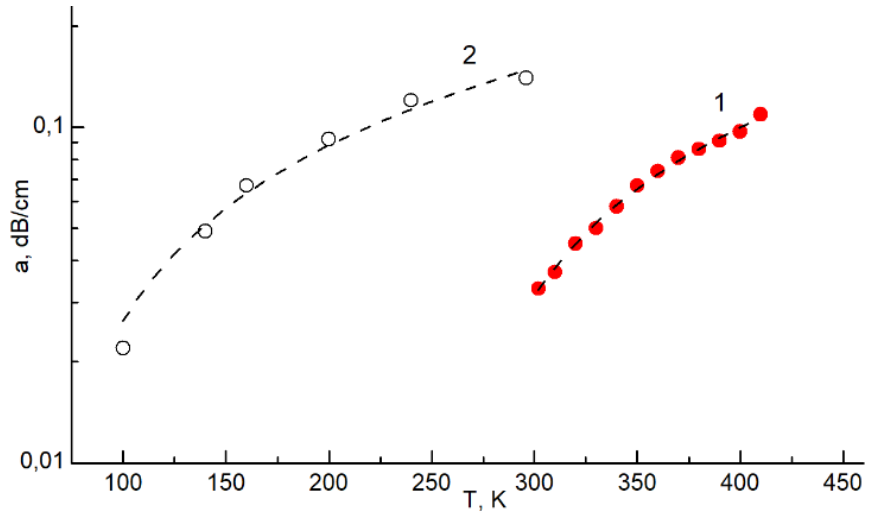


Fig.2. Temperature dependence of the attenuation coefficient of acoustic waves propagating along [110] at frequencies of 30 MHz (1) and 72 MHz (2) in Si crystals.

Conclusion. It is evident that in the [110] direction of the Si crystal, the propagation of acoustic waves velocity slightly decreases with increasing temperature, the temperature from 300 K to 410 K increases in the [110] direction of the Si crystal, the propagation of acoustic velocity decreases by 0.3%. With an increase in temperature to 410 K, thermal expansion of the crystal and increased vibrations of atoms cause a decrease in the speed of sound waves by 0.3%.

Literature

1. Y.V. Gulyayev., V. V. Proklov., G. N. Shkerdin. Hard v telax sveta sound with Diffraction. Zrelishe Physicheskiy Nauka, 1978, 21(1). p 29-57.
2. V.Y. Lyamov. In crystals acoustic voln polarization effekti i mutual effects of anisotropy. Moscow: MGU named after M V University Publisher: Lomonosov, 1983. p 224.
3. F. R. Axmedjanov., S. Z. Mirzayev., U. A. Saidvaliyev. Vismut. silikat v crystallax elastichniy anisotropy parameters. Segnetoelektriki, 2020, 556(1): 23-28.
4. F. R. Axmedjanov, V. V. Lemanov, A. N. Nasirov. In acoustic crystals attenuator poverxnosti JTF Pisma, 1980, 6(10):589-592.

БЛОХОВСКИЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ АТОМНОЙ ПРИМЕСИ В ДИПОЛЯРНОМ КОНДЕНСАТЕ БОЗЕ-ЭЙНШТЕЙНА

Б. Х. Турманов[1,2], S. R. Adxamov[2]
[1]Физико-технический институт имени С.А. Азимова АН РУз.
[2]Национальный Университет Узбекистана имени Мирзо Улугбека.

Известно, что при ускорении электрона слабым электрическим полем в периодическом потенциале он выполняет периодические колебания, которые называются блоховскими осцилляциями [1]. Обычно эти колебания в твердых телах можно обнаружить по электромагнитному излучению, возникающему в результате движения электронов в периодическом потенциале. Это явление не ограничивается поведением электронов в твердых телах, а может быть наблюдено путем ускорения произвольной квантовой частицы в периодическом потенциале. Конденсат Бозе-Эйнштейна (КБЭ), размещенный на оптической решетке, является идеальной платформой для наблюдения блоховских осцилляций и очень хорошо изучен как теоретически, так и экспериментально. Однако вместо отдельной квантовой частицы там изучается динамика макроскопического объекта, т.е. солитонов.

В данной работе мы теоретически и численно исследуем блоховские осцилляции одной атомной примеси, погружённой в холодный квантовый газ, состоящий из разреженных бозонов. При определённых условиях такие квантовые газы могут образовывать стационарные пространственно-периодические структуры, называемые когерентными кристаллами [2-3]. Теперь, если в эту систему ввести одиночный фермион или бозон другого типа, эта частица взаимодействует с атомами конденсата. В результате когерентный кристалл действует как эффективный периодический потенциал для атомной примеси. Динамика КБЭ описывается уравнением Гросса-Питаевского, а динамика отдельного атома, введенного в него, — линейным уравнением Шредингера:

$$i\psi_t + \frac{1}{2}\psi_{xx} + q|\psi|^2\psi + \gamma|\psi|^3\psi + g\cdot\psi\cdot\int_{-\infty}^{+\infty} R(|x-x'|)\,|\psi(x',t)|^2 dx' = 0, \qquad (1)$$

$$i\phi_t + \frac{1}{2}\phi_{xx} + F \cdot x \cdot \phi + \alpha |\psi|^2 \phi = 0. \qquad (2)$$

Оба приведенных выше уравнения представлены в безразмерной форме, которая не учитывает обратное влияние одиночной примеси на КБЭ. Мы записываем периодическое структурное решение уравнения Гросса-Питаевского, полученное вариационным приближением в форме $\psi = A + a\cos(k_r x)$, и подставляем его в уравнение (2). В этом случае данная функция действует как эффективный периодический потенциал $V_{eff}(x) = -\alpha|\psi|^2 = -\alpha\left(A + a\cos\left(k_r x\right)\right)^2$ для атомной примеси. Найдено, что примесь под воздействием слабой постоянной силы *F* совершает блоховские осцилляции. Также было установлено, что частота колебаний и импульс примеси зависят от параметров конденсата.

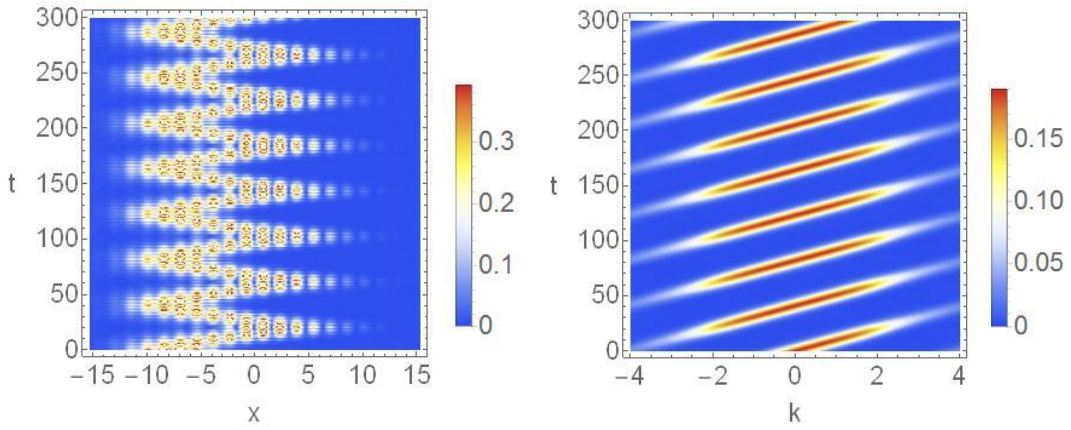


Рисунок 1: Блоховские осцилляции атомной примеси, ускоренной в эффективном периодическом потенциале в координатном и импульсном пространстве. Здесь локализованный волновой профиль атомной примеси сформирован с использованием дополнительного гармонического потенциала $V_{par}(x, t=0) = 0.01 \cdot \left(x + L/4\right)^2$.

Использованная литература:

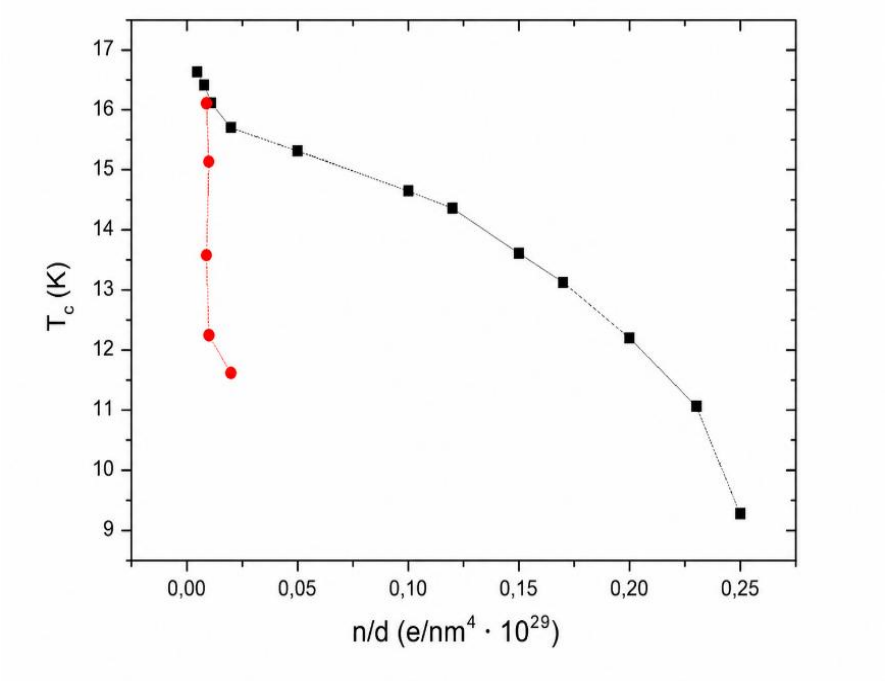
1. F. Bloch, Z. Phys. 52, 555–600 (1929).
2. B. K. Turmanov et al. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 54, 145302 (2021).
3. Biagioni, G. et al. Nature 629, 773–777 (2024).

O‘TA O‘TKAZUVCHAN NbN NANOPLYONKALARDA KRITIK HARORATGA TA’SIR ETUVCHI OMILLAR

Temirov O.F., Ahadov A.A. Djurayev D.R.
Buxoro davlat universiteti

Biz o‘ta yupqa epitaksial NbN plyonkalarida zaryad tashuvchilar zichligi n va plyonka qalinligi d ning o‘ta o‘tkazuvchi kritik harorat T_c ga ta’siri tahlil qildik. Tahlilda Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT) modeli hamda Simonin modeli qo‘llanib, qalinlik va zaryad tashuvchilar zichligining birgalikdagi roli baholandi. Natijalar T_c ning plyonka qalinligi va zaryad tashuvchilar zichligiga sezilarli darajada bog‘liqligini ko‘rsatdi. Tadqiqotda BKT modeli orqali kvazi-ikki o‘lchamli NbN plyonkalardagi o‘ta o‘tkazuvchanlik qattiqligi va uyurma–antiuyurma juftlari dinamikasi, Simonin modeli orqali esa plyonka qalinligining kamayishi natijasida kritik harorat T_c ning pasayishi tahlil qilindi [2]. Ushbu yondashuvlar asosida T_c ning qalinlik d, zaryad tashuvchilar zichligi n va parametrlariga bog‘liqligi adabiyotdagi tajriba natijalari bilan taqqoslandi [3, 4].

Natijalar tahliliga ko‘ra, plyonka qalinligi d kamayishi bilan kritik temperatura T_c izchil pasayadi [3], ayniqsa o‘ta yupqa sohada bu pasayish keskinlashadi. Qalinlik ortganda T_c asta-sekin hajmiy holatga xos qiymatlarga yaqinlashadi. Zaryad tashuvchilar zichligi n ortishi bilan kritik temperatura Tc ham izchil oshadi [4]. Shuningdek, qalinlik d ortishi bilan n zaryad tashuvchilar zichligi ham ortishi kuzatiladi [4]. T_c ning ga bog‘liqligi esa bu ikki omilning birgalikdagi ta’sirini ko‘rsatib, ushbu parametrlar ortishi bilan T_c ning kamayishini tahlil natijalari ko‘rsatdi. Tahlil natijalari o‘ta yupqa NbN plyonkalarida o‘lcham effekti, zaryad tashuvchilar zichligi n, tartibsizlik va ikki o‘lchamli o‘ta o‘tkazuvchanlik fluktuatsiyalarining muhimligini ko‘rsatadi [1, 2, 3, 4].



1-rasm. O‘ta o‘tkazuvchi kritik harorat T_c ning zaryad tashuvchilar zichligi n va plyonka qalinligi d nisbatiga bog‘liqligi [3, 4].

Tahlil natijalari T_c ning faqat geometrik qalinlik bilan emas, balki zaryad tashuvchilar zichligi bilan ham chambarchas bog‘liqligini ko‘rsatadi [2, 3, 4]. BKT va Simonin modellari asosidagi yondashuv o‘ta yupqa NbN plyonkalarida qalinlik hamda elektron omillarning o‘zaro bog‘liq ta’sirini izohlash imkonini beradi [1, 2, 5].

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Mondal M., et al. Phys. Rev. Lett. 106 047001.

2. Simonin J. 1986 Surface effects on the superconducting phase transition in thin films Phys. Rev. B 33 7830.

3. Zhang L., You L., Wu X., Jiao J., Lv C., Guo Q., Zhang W., Liu X., Li H., Wang Z. and Xie X. 2019 Appl. Supercond. 29 1–5.

4. Chockalingam S. P., Chand M., Jesudasan J., Tripathi V. and Raychaudhuri P. 2008 Superconducting properties and Hall effect in epitaxial NbN thin films Phys. Rev. B 77 214503.

5. Kosterlitz J. M. and Thouless D. J. 1973 Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems J. Phys. C: Solid State Phys. 6 1181.

ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕТЕРИНАРНОГО ПРЕПАРАТА ГАЛОПЕРИДОЛА МЕТОДОМ ТЕРМОИОННОЙ ЭМИССИИ НА ПОВЕРХНОСТИ ОКИСЛЕННОГО ВОЛЬФРАМА

Ш.Т. Тоиров, С.С. Исхакова
Институт Ионно-плазменных и Лазерных Технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан

Метод термоионной масс-спектрометрии (ТЭ) представляет значительный интерес для химико-токсикологического анализа и ветеринарно-санитарного контроля, особенно при обнаружении азотсодержащих органических соединений и лекарственных средств [1, 2]. Галоперидол, являющийся производным бутерофенона и содержащий третичный амин в пиперидиновом кольце (4-[4-(4-хлорфенил)-4-гидрокси-1-пиперидинил]-1-(4-фторфенил)-1-бутанон), широко применяется в качестве психоактивного и нейролептического препарата, а также в ветеринарной практике для седатации и коррекции поведения животных [2, 3]. Ввиду высокой биологической активности соединений данного класса актуальной задачей является определение их термоионизационных характеристик и каналов фрагментации при поверхностной ионизации без привлечения кинетических измерений.

Метод термоионной эмиссии в стационарных условиях позволяет исследовать закономерности образования ионов непосредственно при термодесорбции с поверхности термоэмиттера в условиях высокого вакуума [4]. Преимуществом метода является высокая селективность к легкоионизируемым азотсодержащим молекулам, отсутствие необходимости предварительной химической дериватизации и низкий предел обнаружения.

Эксперименты проводились на статическом масс-спектрометре МИ-1201 с магнитным анализатором в условиях высокого вакуума ($p = 1 - 3 \times 10^{-6}$ Па). В качестве термоэмиттера использовалась лента из окисленного вольфрама размерами $1 \times 16 \times 0.02$ мм. Интенсивность ионных токов исследовалась в зависимости от температуры эмиттера ($T = 800 - 1700$ К) при стационарном испарении исследуемого вещества.

В масс-спектре термоионной эмиссии галоперидола установлены основные каналы термоионизации и идентифицированы характерные фрагментарные ионы. Установлено, что наиболее интенсивные пики соответствуют легкоионизируемым фрагментарным ионам с m/z 334 и m/z 338, образующимся в результате гетеролитического разрыва связей при адсорбции молекул на нагретой поверхности оксида вольфрама [4]. В стационарном режиме сняты температурные зависимости ионного тока $I^+(T)$ для указанных ионов.

Таблица 1. Термоионизационные характеристики и масс-спектрометрические параметры ионов галоперидола при стационарной поверхностной ионизации на WO_x

Ион (m/z)	**Предполагаемая структура/Канал образования**	**Tmax (К)**	**Потенциал ионизации Vi (эВ)**	**Относительная интенсивность (%)**
m/z 334	$[M - H_2O - F]^+$/Обезвоживание и дефторирование	1150	6.75 ± 0.08	100
m/z 338	$[M - HCl]^+$/ Дегидрохлорирование фрагмента	1220	6.88 ± 0.10	65

Анализ температурных зависимостей $I^+(T)$ показал, что в области высоких температур термоэмиттера ($T > 1100$ К) ионный ток достигает максимальных значений, после чего наблюдается спад, обусловленный изменением коэффициента покрытия поверхности и термической диссоциацией адсорбированных частиц. Оценка эффективных потенциалов ионизации V_i исследуемых ионов из уравнения Саха-Лангмюра при известной работе выхода окисленного вольфрама ($\varphi \approx 6.8 - 6.9$ эВ) подтверждает их высокую степень ионизируемости ($V_i \leq \varphi$).

Таким образом, исследование поверхностной ионизации галоперидола в стационарных условиях позволило определить ключевые масс-спектрометрические параметры и ионизационные свойства молекул без необходимости проведения кинетических измерений. Полученные результаты могут быть использованы при разработке высокочувствительных масс-спектрометрических методик селективного анализа и идентификации микроколичеств ветеринарных и фармацевтических препаратов в биологических объектах.

Литература

[1]. Usmanov D.T., Asrorov M.A., Akhmedov S.M., Khasanov U. Surface ionization mass spectrometry of nitrogen-containing bioactive compounds on oxidized tungsten thermoemitters // *International Journal of Mass Spectrometry*. – 2022. – Vol. 475. – Art. ID 116820. DOI: 10.1016/j.ijms.2022.116820

[2]. Khelfi A., Azzouz M., Abtroun R. et al. Determination of Chlorpromazine, Haloperidol, Levomepromazine, Olanzapine, Risperidone, and Sulpiride in Human Plasma by LC-MS/MS // *International Journal of Analytical Chemistry*. – 2018. – Vol. 2018. – Art. ID 5807218. DOI: 10.1155/2018/5807218

[3]. Smith M.A., Miller R.J., Davis K.L. Recent advances in mass spectrometric quantification of veterinary neuroleptic agents and therapeutics // *Journal of Veterinary Pharmacology and Therapeutics*. – 2021. – Vol. 44, No. 5. – P. 612–625. DOI: 10.1111/jvp.12984

[4]. Khasanov U., Iskhakova S.S., Radjabov A.S., Akhmedov S.M., Toirov S.T., Kholmatov A.S., Usmanov D.T. Mass Spectrometric Study of Heterogeneous Reactions of Transformations of Molecules of Butyrophenone Derivatives During Adsorption on a Hot Surface of Tungsten Oxide // *Journal of Mass Spectrometry*. – **2025**. – Vol. 60, No. 12. – Art. e5193. DOI: 10.1002/jms.5193

KREMNIYLI QUYOSH ELEMENTI I-V XUSUSIYATIGA HARORATNING TA’SIRINI SUPERELLIPS MODELI ASOSIDA TAHLIL QILISH

Sh.X. Tadjibayeva, N.N. Abdurazakov, N.A. Mirzaalimov, R. Aliev
Andijon davlat universiteti, Kondersirlangan muhitlar fizikasi kafedrasi o‘qituvchisi,
shtadjiboyeva@gmail.com

Quyosh elementlarining nominal quvvati standart test sharoitida (STC, 25°C, 1000 W/m²) belgilanadi, biroq real ishlash jarayonida panel yuzasi 60–70°C gacha qizib ketishi mumkin. Harorat ortishi natijasida quyosh elementining qisqa tutashuv toki (I_{sc}) qisman ortadi, lekin ochiq zanjir kuchlanishi (V_{oc}) ning sezilarli drajada pasayishi kuzatiladi. Ushbu xolat chiqish quvvatining haroratga bog‘liq kamayishiga olib keladi. Superellips modeli yuqori aniqlik va hisoblash jihatdan soddaligi sababli quyosh elementlarning I-V xususiyatini tavsiflashda keng qo‘llaniladi [1, 2]. Mavjud ishlarda superellip modelidagi shakl koeffitsienti m o‘zgaramas qiymat shaklida olingan. Bu esa haroratning egri chiziq shakliga ta’sirini e'tiborsiz qoldiradi. Mazkur tadqiqotda fizik asoslangan bir diodli model etalon sifatida qo‘llanib, har bir harorat uchun uning FF qiymatiga mos keluvchi m topildi. Superellips modeli quyidagi matematik tenglama yordamida ifodalanadi:

$$(V/V_{oc})^{\mathrm{m}} + (I/I_{sc})^{\mathrm{m}} = 1$$

bu yerda m — shakl koeffitsienti bo‘lib, u I-V egri chizig‘ining “ideal” to‘g‘ri burchakka yaqinlik darajasini belgilaydi. V_{oc} va I_{sc} ning haroratga bog‘liq o‘zgarishi quyidagi formulalar orqali hisoblandi:

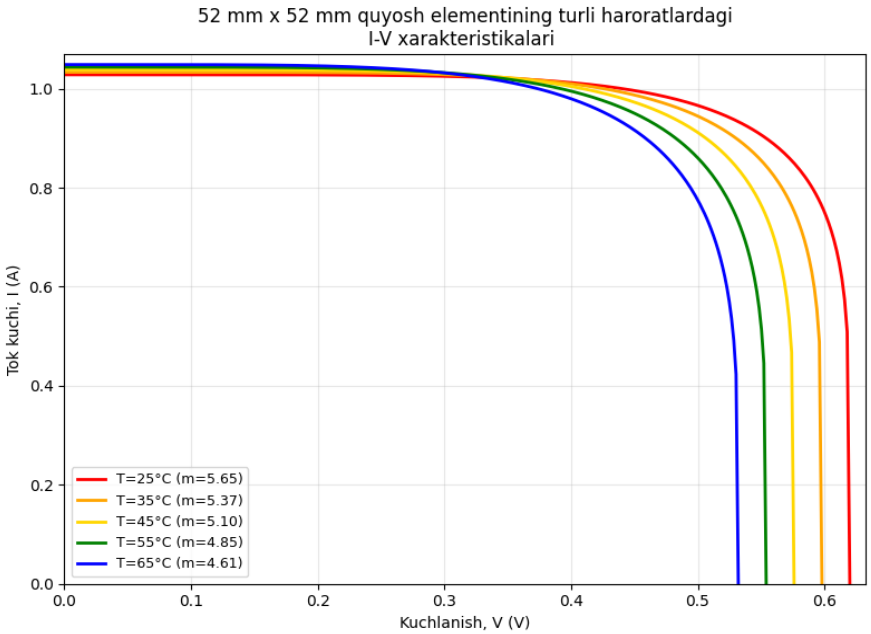
$$V_{oc}(T) = V_{oc}(T^0) + \beta(T - T^0),\ \ I_{sc}(T) = I_{sc}(T_0)[1 + \alpha(T - T_0)]$$

IEC 60891 standartga asosan tipik koeffitsientlar $T_0 = 25°C, \beta \approx -2.2\ mV/°C, \alpha \approx +0.05\%/°C$ qiymatlarda olinadi. Shakl koeffitsienti m ni har bir harorat uchun asoslash maqsadida bir diodli model etalon sifatida qo‘llanildi:

$$I = I_{ph} - I_0[\exp((V + IR_s)/(nVt)) - 1] - (V + IR_s)/R_{sh}\ (I_{ph} = I_{sc}(T),$$

$$n = 1.3,\ \ R_s = 0.01\ Om,\ \ R_{sh} = 1000\ Om,\ \ Vt = kT/q).$$

Teskari to‘yinish toki $I_0(T) = I_0(T_0)(T/T_0)^3 exp[(qEg/(nk))(1/T_0 - 1/T)]$ standart fizik model bo‘yicha hisoblandi ($E_g = 1.12\ eV$). Bu tenglama I ga nisbatan yopiq yechimga ega emas, shu sababli Nyuton-Raphson iterativ usuli qo‘llanildi; haqiqiy $V_{oc}(T)$ ham mustaqil ravishda shu usul yordamida hisoblandi [3].



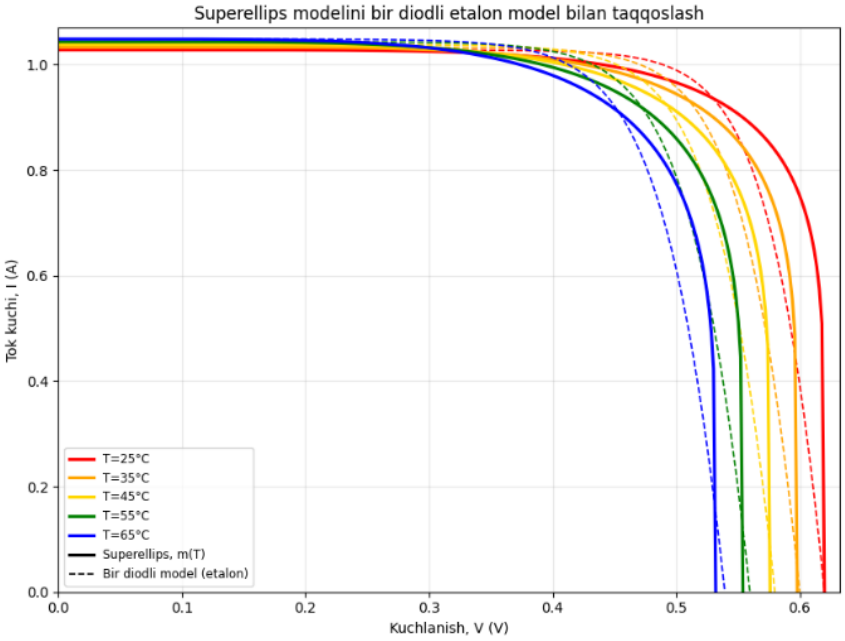
1-rasm. Moslashtirilgan m(T) bilan hisoblangan I-V xarakteristikalari, T=25–65°C.

Superellips tenglamasi masshtabga nisbatan invariant xususiyatga ega: agar V va I mos ravishda V_{oc} va I_{sc} ga nisbatan normallashtirilsa, to‘ldirish koeffitsienti FF faqat m ning qiymatiga bog‘liq bo‘lib qoladi. Shu xususiyatdan foydalanib, har bir harorat uchun

$$FF_{superellips}(m) = FF_{etalon}(T)$$

tenglamasi bisektsiya usulida m bo‘yicha yechildi; FF, m ga nisbatan monoton o‘suvchi bo‘lgani sababli yechim yagona bo‘ldi. Simulyatsiya Python dasturlash tilining NumPy va Matplotlib kutubxonalaridan foydalangan holda amalga oshirildi. 25–65°C oraliqda moslashtirilgan m qiymatlari 5.652 dan 4.606 gacha o‘zgardi. Bu qiymatlarga o‘tkazilgan chiziqli regressiya $m(T) = 6.294 - 0.0262 \cdot T$ tenglamasini berdi ($R^2 = 0.999$), bu m ning haroratga deyarli mukammal chiziqli bog‘liqligini ko‘rsatadi. m ning harorat ortishiga bog‘liq kamayishi superellips modelida ham o‘z aksini topib, I-V egri chiziqni “ideal to‘rtburchak” shaklidan uzoqlashtiradi, ya’ni FF ni pasaytiradi. m ning haroratga bog‘liq o‘zgarshini inobatga olib qurilgan I-V egri chiziqlar (1-rasm) etalon model bilan yuqori aniqlikda mos keldi. Quyosh elementiniifodalashning bir diodli modeli va taklif etilgan superellips modelda maksimal quvvat bo‘yicha o‘rtacha xatolik 0.68%, eng katta og‘ish (65°C da) 1.37% ni tashkil etdi. Superellips egri chiziqlarining bir diodli etalon model bilan mosligini vizual tekshirish uchun ularni bitta grafikda tasvirlash orqali taqqoslandi (2-rasm). Grafikda taqqoslanayotgan haroratlar uchun har ikki model qiymatlari deyarli ustma-ust tushishini ko‘rish mumkin.

Ushbu natija superellips modelining $m(T)$ ni hisobga olgan sharoitda bir diodli fizik modelni yuqori aniqlik bilan takrorlay olishini tasdiqladi.



2-rasm. m(T) asosida hisoblangan superellips modeli va bir diodli etalon model asosida aniqlangan I-V xususiyat grafigi.

Ushbu tadqiqot natijalari superellips modelidagi shakl koeffitsienti tasodifiy tanlanadigan parametr emas, balki quyosh elementining fizik xususiyatlaridan kelib chiquvchi, haroratga bog‘liq, bashorat qilinadigan miqdor ekanligi isbotladi. Aniqlangan $m(T)$ ning chiqishli formulasi quyosh elementlari uchun P_{max} ni iterativ bir diodli hisoblashni bajarmasdan, faqat ikkita parametr yordamida to‘g‘ridan-to‘g‘ri hisoblash imkonini beradi. Etalon sifatida qo‘llanilgan bir diodli model faraziy R_s, R_{sh}, n parametrlariga asoslanganligi sababli, natijalarni real eksperimental o‘lchovlar bilan solishtirish keyingi tadqiqotlarning vazifasi sifatida belgilab olindi.

ADABIYOTLAR

1. Olayiwola, T. N., Choi, S.-J. Superellipse model: An accurate and easy-to-fit empirical model for photovoltaic panels. Solar Energy, 262, 111749 (2023).

2. IEC 60891:2021. Photovoltaic devices — Procedures for temperature and irradiance corrections to measured I-V characteristics.

3. De Soto, W., Klein, S. A., Beckman, W. A. Improvement and validation of a model for photovoltaic array performance. Solar Energy, 80(1), 78–88 (2006).

PARAMETERS OF THE GENERIC QUARTIC SOLITONS

[1]*Suyunov L.A.*, [2]*Tsoy E.N.*
[1]*Karshi State University, Department of Theoretical and Experimental Physics,*
lasuyunov@gmail.com
[2]*Physical-Technical Institute of the Uzbek Academy of Sciences, Theoretical Physics Laboratory,*
e.n.tsoy@gmail.com

Parameters of stationary solitons in general quartic media have not been sufficiently investigated. In the present work, we perform a detailed study of the soliton parameters in such media. In particular, the role of cubic dispersion on the soliton shape and parameters is analyzed. The dynamics of light in nonlinear dispersive media is described by the following equation [1-3]:

$$i\psi_z - \frac{\beta_2}{2!}\psi_{\tau\tau} - i\frac{\beta_3}{3!}\psi_{\tau\tau\tau} + \frac{\beta_4}{4!}\psi_{\tau\tau\tau\tau} + \gamma|\psi|^2\psi = 0, \qquad (1)$$

where $\psi(\tau,z)$ is the envelope of the electric field, τ is the time in the retarded frame, z is the propagation distance, β_j is the parameter of dispersion of the j-th order, j = 2, 3, and 4, and γ is the Kerr nonlinearity parameter.

The dispersion relation of linear waves is obtained by substituting the field in the form $\psi(\tau, z)\sim\exp[i(\eta(\omega)z - \omega\tau)]$ into Eq. (1) at $\gamma = 0$:

$$\eta(\omega) = \frac{\beta_2}{2!}\omega^2 + \frac{\beta_3}{3!}\omega^3 + \frac{\beta_3}{4!}\omega^4. \qquad (2)$$

Here $\eta(\omega)$ is the wave number, and ω is the frequency of a linear wave. Then $\eta_1(\omega) \equiv \eta'(\omega) = 1/v_g$ and $\eta_2(\omega) \equiv \eta''(\omega)$ are the inverse of the group velocity and the second-order dispersion parameter of linear waves at ω, respectively.

We look for solutions of Eq. (1) in the following form:

$$\psi(\tau, z) = u(\xi)e^{i\mu z}, \;\; \xi = \tau - z/V, \qquad (3)$$

where $1/V$ is the pulse velocity in the retarded frame, and μ is the wave number. Then the equation for the stationary profile $u(\xi)$ is written as

$$-i\frac{1}{V}u_\xi - \frac{\beta_2}{2!}u_{\xi\xi} - i\frac{\beta_3}{3!}u_{\xi\xi\xi} + \frac{\beta_4}{4!}u_{\xi\xi\xi\xi} + \gamma|u|^2u = \mu u. \qquad (4)$$

Equation (4) is a nonlinear eigenvalue problem with two unknown parameters μ and V, which is solved by the accelerated imaginary time evolution (AITE) method [4].

The analysis of the parameters of stationary optical pulses in the general quartic media are presented. Considering symmetries of Eq. (1), all important cases, including normal, anomalous, and zero GVD parameters for both focusing and defocusing media, have been studied. It is shown that the wave number μ increases with energy E_0. More importantly, the dependence $\mu(E_0)$ is monotonic, therefore solitons are stable for the parameters presented. Our study also indicates that stationary solitons can be unstable for large $|\beta_3|$. The soliton width a_{ex} defined as in Ref. [1] decreases with the energy. For large E_0, function $a_{ex}(E_0)$ behaves like $\sim E_0^{-1/3}$. For moderate E_0, function $a_{ex}(E_0)$ for $\beta_2 > 0$ is proportional to $\sim E_0^{-1}$. An increase of $|\beta_3|$ results typically in the increase of both μ and a_{ex} at given E_0 and $1/V$.

We demonstrate that in the presence of cubic dispersion, stationary pulses are usually chirped. The chirp can also be induced in media with quadratic-quartic dispersion when the central frequency of a soliton is not zero [5, 6]. This is the result of the absence of the Galilean invariance of Eq. (1), when $\beta_4 \neq 0$. The complex-valued profile $u(\xi)$ of stationary solitons has an even amplitude and an odd phase. For such a profile, a stationary soliton is a superposition of coherent plane waves with equal phases. Therefore, parameters of stationary solitons and properties of their spectra in media with quartic dispersion have been studied in this work.

References

1. G. P. Agrawal, Nonlinear Fiber Optics, 4th ed. (Academic Press, 2007).
2. N. Akhmediev, et al, Opt. Commun. **110**, 540 (1994).
3. A. Blanco-Redondo, et al, Nature Commun. **7**, 10427 (2016).
4. J. Yang and T. I. Lakoba, Stud. Appl. Math. **120**, 265 (2008).
5. J. Widjaja, et al, Phys. Rev. A **104**, 043526 (2021).
6. W. Liu, et al, Opt. Express, **33**, 38562 (2025).

INVESTIGATION OF THE NATURE OF HALOGEN BONDING IN PhX (X = Cl, Br, I)-1,4-DIOXANE COMPLEXES USING DFT

[1]*J.N. Sulaymonov*
[1]*Engineering physics institute of Sharof Rashidov Samarkand state universit*
jurabeksulaymonov900@gmail.com

Halogen bonding (XB) is a directional noncovalent interaction formed between the electrophilic region of a halogen atom and an electron-rich nucleophilic site of another molecule [1]. Its formation is attributed to the presence of a region of positive electrostatic potential, known as the σ-hole, located along the extension of the C-X bond [2]. Halobenzenes (PhX, X = Cl, Br, I) are considered fundamental model systems for investigating halogen bonding. The increase in the polarizability of the halogen atom in the order Cl < Br < I results in a corresponding increase in halogen-bond strength [3]. Owing to the presence of an oxygen donor atom, 1,4-dioxane forms directional C-X···O halogen bonds with halobenzenes.

In the present work, the nature of halogen bonding in PhX-1,4-dioxane complexes was investigated using quantum chemical methods. All quantum chemical calculations were carried out with the Gaussian 16 software package employing the ωB97X-D density functional and the def2-TZVP basis set [4]. The optimized structures were confirmed to correspond to true local minima by vibrational frequency analysis. Donor-acceptor orbital interactions were analyzed using Natural Bond Orbital (NBO) analysis [5], intermolecular interactions were examined using the Noncovalent Interaction (NCI) method, and the topological properties of the electron density were investigated within the framework of the Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM). The PhCl, PhBr, and PhI complexes with 1,4-dioxane were successfully optimized, and no imaginary frequencies were observed for any of the structures. Upon complex formation, the X···O intermolecular distance decreased from 3.29465 Å to 3.11556 Å, while the C-X···O bond angle increased from 176° to 178°. In addition, the ν(C-Cl) stretching frequency exhibited an anomalous blue shift of +1.46 cm^{-1}, whereas the ν(C-Br) and ν(C-I) stretching frequencies showed red shifts of -0.55 and -1.89 cm^{-1}, respectively. These results indicate that the strength of the halogen bond increases in

the order PhCl < PhBr < PhI. NBO analysis revealed the presence of *LP(O)→σ*(CX)* donor-acceptor interactions in all complexes. Upon replacing the halogen atom in the order Cl→Br→I, the total second-order stabilization energy, ΣE(2), increased from 0.68 to 2.33 and 3.11 kcal·mol^{-1}, respectively.

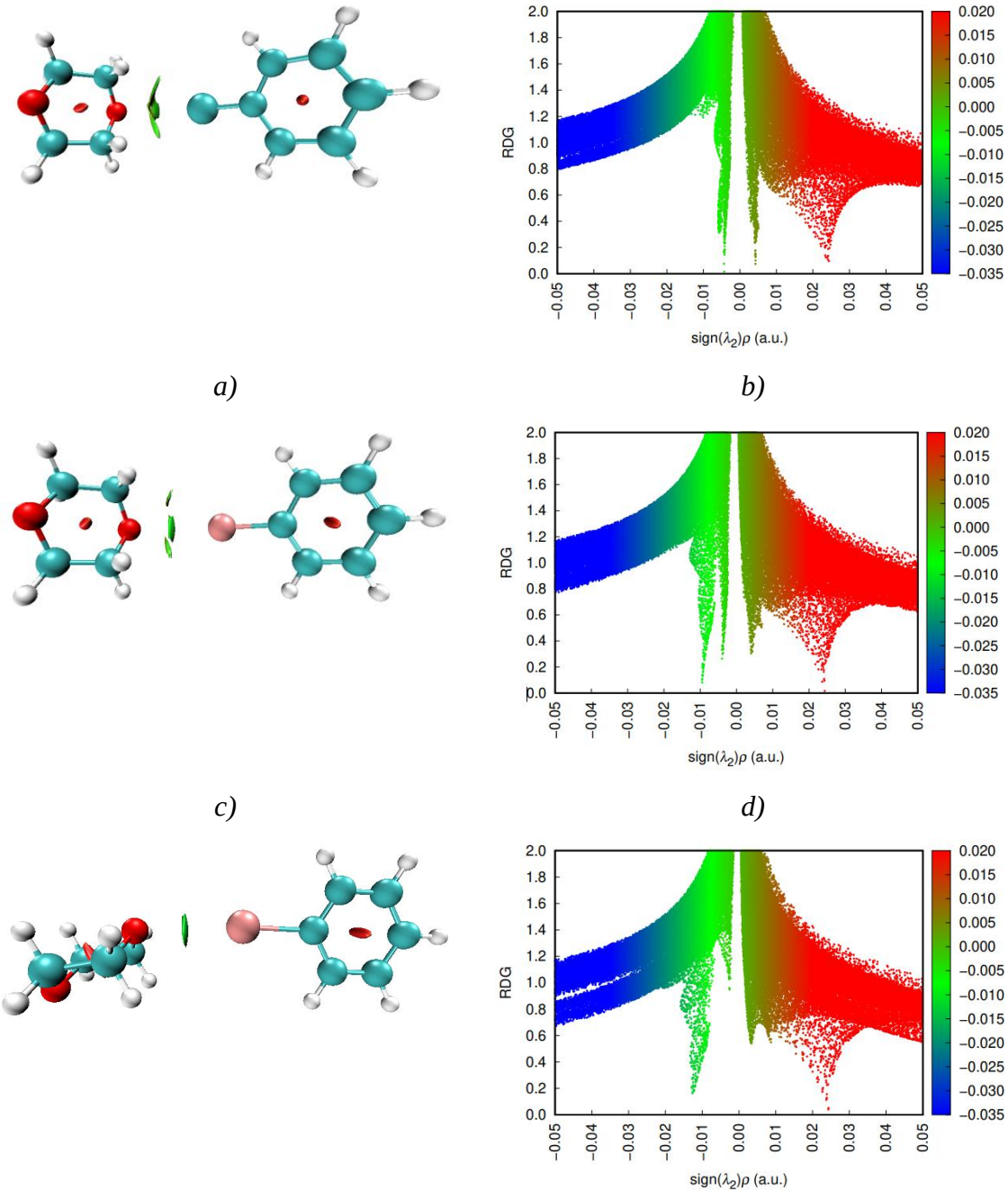


Figure 1. NCI isosurfaces (a, c, e) and the corresponding sign(λ₂)ρ-RDG plots (b, d, f) for the PhCl···1,4-dioxane, PhBr···1,4-dioxane, and PhI···1,4-dioxane complexes.

Simultaneously, the energy gap between the donor and acceptor orbitals decreased, whereas the F(i,j) value, which characterizes orbital overlap, increased. These findings indicate enhanced electron-density transfer from the oxygen lone pair to the σ*(C-X) antibonding orbital, resulting in a progressively stronger electronic contribution to the halogen bond.

The NCI-RDG analysis confirmed the presence of weak but directional intermolecular interactions along the C-X···O axis in all complexes. The progressively more pronounced green isosurfaces from PhCl to PhI indicate a gradual strengthening of the halogen bond. QTAIM analysis further revealed the presence of a bond critical point (BCP) in all complexes. The increase in electron density at the BCP together with the positive value of the Laplacian confirms that the C-X···O interaction is a closed-shell noncovalent interaction. The geometric, NBO, NCI, and QTAIM analyses are in good agreement and consistently demonstrate that the strength of the halogen bond increases in the order PhCl < PhBr < PhI**.**

The DFT calculations performed for the PhCl, PhBr, and PhI complexes with 1,4-dioxane demonstrated the presence of halogen bonding and its dependence on the nature of the halogen atom. Geometric parameters, vibrational spectra, NBO, NCI, and QTAIM analyses confirmed that the donor-acceptor interactions and the strength of the halogen bond increase upon changing the halogen atom in the order Cl→Br→I. The obtained results provide a theoretical basis for the design of halogen-bond-based supramolecular systems.

REFERENCES

[1] Politzer, P., et al. 2013. *Phy.Ch. Chemical Physics*, *15*(27), 11178-11189.
[2] Scholfield, M. R., et al. 2013. *Protein Science*, *22*(2), 139-152.
[3] Legon, A. C. (2010). *Physical Chemistry Chemical Physics*, *12*(28), 7736-7747.
[4] Auffinger, P., et al. 2004. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, *101*(48), 16789-16794.
[5] Doust Mohammadi, M., & Abdullah, H. Y. (2022). *Structural Chemistry*, *33*(2), 363-378.

NATURE OF HALOGEN BONDING IN PHX-DMF (X=Cl, Br, I) COMPLEXES: EXPERIMENTAL AND THEORETICAL (DFT) CONSISTENCY

[1]A. Jumabaev, [1]A.A. Absanov, [1]H.A. Xushvaqtov, [1]J.N. Sulaymonov

[1]Sharof Rashidov Samarkand State University, Department of Engineering Physics, Samarkand, Uzbekistan.

jurabeksulaymonov900@gmail.com

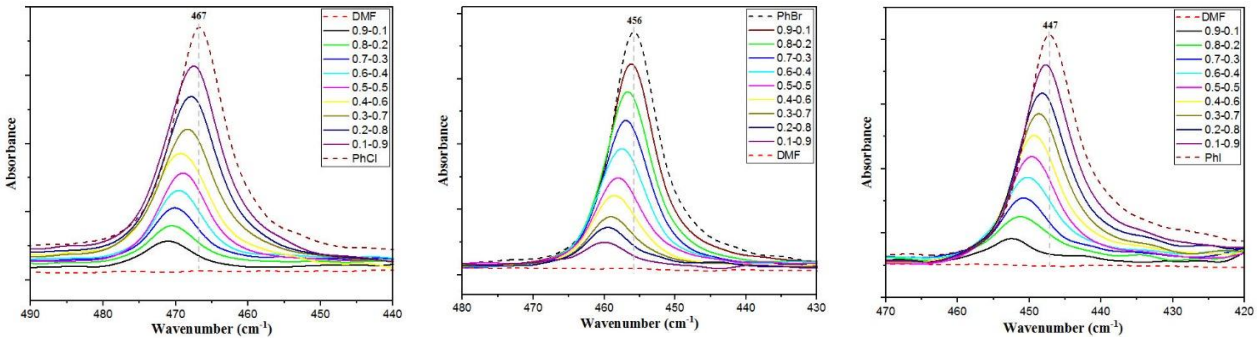
Halogen bonding (XB) has been widely recognized in recent years as an important and independent type of noncovalent interaction. Similar to hydrogen bonding (HB), halogen atoms can also act as electrophilic centers that interact with electron-donating centers [1]. Politzer et al. [2] demonstrated that halogen bonding is noncovalent in nature and argued that its essence is manifested in the competition between the electrophilic region of the halogen atom, i.e., the σ-hole, and the electron-rich (nucleophilic) center of the neighboring molecule.

In this work, the intermolecular interactions in binary mixtures of chlorobenzene (PhCl), bromobenzene (PhBr), and iodobenzene (PhI) formed with dimethylformamide (DMF) were studied in a comprehensive manner using infrared (IR) spectroscopy and density functional theory (DFT, ωB97X-D/def2-TZVP) methods.

In Fig. 1(a,b,c), systematic frequency shifts in the region of the C-X valence (X-sensitive) vibrations [3] characteristic of halobenzenes were observed in the experimental infrared spectra. The largest blue shift observed in the experiment was observed in the PhI-DMF system (+6 cm^{-1}), followed by the PhBr-DMF system (+4 cm^{-1}), and the smallest shift was observed in the PhCl-DMF system (+3 cm^{-1}). The observed pattern is consistent with the increasing polarizability of iodine, bromine and chlorine atoms and the σ-hole intensity.

These binary systems, when studied using DFT, showed that during the complex formation process, the C-X (X = Cl, Br, I) bond shortening (Δr) and, accordingly, the valence vibration frequencies undergo an unusual blue shift ($\Delta\nu$). The orbital

interactions and second-order stabilization energies ($E^{(2)}$) in the complexes were evaluated using NBO analysis. It was found that the stabilization energy due to the charge transfer nO(DMF)→σ*(C-X) increases sharply when going from the chlorine complex to the iodine complex ($\sum E^{(2)}$ from 0.91 kcal/mol in chlorine to 4.30 kcal/mol in iodine).



a) *b)* *c)*

Figure 1. Experimentally obtained infrared spectra of binary mixtures a) PhCl-DMF, b) PhBr-DMF and c) PhI-DMF in the corresponding ranges

While the blue shift of the C-X vibrational frequency was observed to increase in the order PhCl < PhBr < PhI in the experiment, the harmonic frequency calculations at the ωB97X-D/def2-TZVP level gave the trend PhCl ≈ PhBr > PhI. This discrepancy can be explained by the fact that the calculations were performed for an isolated 1:1 complex model, the solvent environment and multi-particle associations were not taken into account, and the limitations of the harmonic approximation.

REFERENCES:

[1] Legon, A. C. (2010). The galogen bond: an interim perspective. *Physical Chemistry Chemical Physics*, *12*(28), 7736-7747.

[2] Politzer, P., Murray, J. S., & Clark, T. (2010). Galogen bonding: an electrostatically-driven highly directional noncovalent interaction. *Physical Chemistry Chemical Physics*, *12*(28), 7748-7757.

[3] Whiffen, D. (1956). 273. Vibrational frequencies and thermodynamic properties of fluoro-, chloro-, bromo-, and iodo-benzene. *Journal of the Chemical Society (Resumed)*, 1350-1356.

NANOSUYUQLIKLARDA AKUSTIK TO‘LQINLAR SO‘NISHINING NANOZARRACHALAR KONSENTRATSIYASIGA BOG‘LIQLIGI

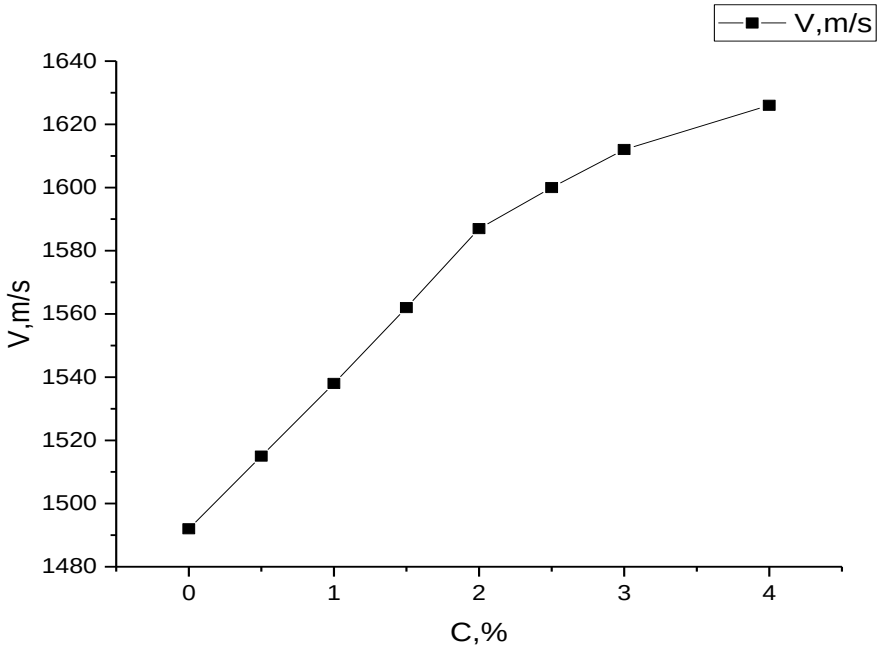
Axmedjanov Farxad Rashidovich, Soliyeva Nilufar Mashrabboy qizi
O’R FA IPLT instituti
nilufarsoliyeva90@gmail.com

Nanosuyuqliklardan ultratovush to‘lqinlari o‘tganda to‘lqin energiyasining so‘nishi va tarqalishi murakkab fiziko-gidrodinamik jarayonlarga asoslanadi. Nanosuyuqliklarda akustik to‘lqinlarning tarqalishi va energiyaning so‘nishi bir nechta raqobatdosh mexanizmlar majmuidan iborat bo‘lib, ularga Stoks-Kirxgofning klassik gidrodinamik so‘nishi, termal relaksatsiya, visko-inersion mexanizmlar hamda Reley sochilishi kiradi. Tadqiqot doirasida bazaviy suyuqlik sifatida suvga SiO_2nanozarrachalarini qo‘shib, ularning massaviy konsentratsiyasi 0% dan 4% gacha o‘zgartirilgan holda akustik o‘lchashlar bajarildi. Tajribada tarqalish masofasi L=10 mm qilib belgilanib, impulsning ikki tomonlama o‘tish yo‘li 2L = 20 mm ni tashkil etdi. Tovush to‘lqinining tarqalish tezligi $v = \frac{2L}{t}$ munosabati orqali hisoblandi. Olingan eksperimental va hisoblangan qiymatlar tahlili quyidagi jadvalda keltirilgan:

№	SiO_2 massaviy konsentratsiyasi (C,%)	O‘tish vaqti (t,10^{-5}s)	Tovush tezligi (v,m/s)
1	0 (Sof suv)	1.34	1492.5
3	1.0	1.30	1538.5
5	2.0	1.26	1587.3
7	3.0	1.24	1612.9
8	4.0	1.23	1626.0

Jadval tahlilidan ko‘rinib turibdiki, nanosuyuqlikdagi SiO_2 nanozarrachalarining massaviy konsentratsiyasi 0% dan 4% gacha oshib borishi bilan impulsning o‘tish vaqti 1.34 mks dan 1.23 mks gacha qisqargan. Natijada, nanosuyuqlikdagi tovush tezligi 1492.5 m/s dan 1626.0 m/s gacha barqaror ravishda oshgan. Bu holat qattiq fazaning

massaviy ulushi ortishi muhitning elastik xossalarini kuchaytirishi hamda to‘lqin tarqalish tezligini oshirishi bilan izohlanadi va uning grafigi quyidagicha bo’ladi.



Xulosa

Eksperimental olingan natijalar (massaviy konsentratsiyaning 0% dan 4% gacha ortishi bilan tovush tezligining 1492.5 m/s dan 1626.0 m/s gacha oshishi) nanosuyuqlikning effektiv elastik moduli qattiq fazaning qo‘shilishi hisobiga sezilarli darajada ortishini ko‘rsatadi. Bu holat tizimda klassik gidrodinamik (Stoks-Kirxgof) va effektiv muhit mexanizmlari ustuvor ekanligini tasdiqlaydi."

***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.

GRAFENDA BIR VA IKKI O‘LCHAMLI SUPERPANJARALARI ORQALI TO‘LQIN PAKETINING SOCHILISH

M. Shukurullayeva[1,], K. Urakova[2], and H. Raximov[1,]*
[1] O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Materialshunoslik instituti
[2] O‘zbekiston Milliy Universiteti, Talabalar shaharchasi
E-mail: mohirakhan777@gmail.com

Grafenning quyi energiyali zaryad tashuvchilari massasi nolga teng relativistik kvazizarralari sifatida tavsiflanadi. Ularning kiralligi va psevdospin xossalari elektrostatik to‘siqlardan o‘tishda Klein tunnellanishi kabi noodatiy hodisalarni yuzaga keltiradi [1–3]. Davriy elektrostatik potensiallar esa elektron to‘lqinlarini panjara geometriyasi orqali boshqarish imkonini beradi [4]. Ushbu ishda bir va ikki o‘lchovli grafen superpanjaralarida Gauss to‘lqin paketining dinamikasi o’rganildi.

Hisoblash modeli L=1024 nm va W=128 nm o‘lchamli bir qatlamli grafen tasmasidan iborat va to’siqli soha 128×128 nm etib olindi. Bir o‘lchovli holatda eni 16 nm bo‘lgan davriy potensial o’ralar/to‘siqlar va $+V/-V$ navbatlanuvchi to‘siq–o’ralar ketma-ketligi qaraldi. Ikki o‘lchovli holatda 16×16 nm kataklardan tashkil topgan davriy o’ralar, davriy to‘siqlar va shaxmat tartibidagi $+V/-V$ superpanjara o‘rganildi. Paketning energiyasi E=100 meV, kengligi 10 nm, potensial to’siq qiymatlari $|V|$=20–300 meV oralig’ida bo’lgan holat qaraldi.

To‘lqin funksiyasining vaqt evolyutsiyasi Dirak–Veyl modeli doirasida operatorlarni ajratish usuli bilan, Δt=0,1 fs vaqt qadamda hisoblandi. Paket grafenning chap qismidan musbat x o’qi yo‘nalishida harakatlana boshlaydi. Sochilish sohasidan kvazizarra o‘tish ehtimoligi aniqlandi. Bu yondashuv paketning bo‘linishi, ko‘p martalik qaytishi, faza yig‘ilishi va ko‘ndalang qayta taqsimlanishini bevosita kuzatishga imkon beradi.

Bir o‘lchovli superpanjaralarda davriy o’ralar eng yuqori shaffoflikni ko‘rsatdi: $|V|$=20 meV da $P\approx0{,}93$, $|V|$=260–300 meV da esa $P\approx0{,}85$ bo‘ldi. To‘siqlar ketma-ketligida P qiymati $V\approx140$ meV da ≈0,48 minimumga tushib, V=300 meV da ≈0,74 gacha tiklandi. Navbatlanuvchi to‘siq–o’ra strukturasi uchun minimum $|V|\approx100$–140 meV da $P\approx0{,}51$ bo‘lib, $|V|$=300 meV da ≈0,81 ga yetdi.

Ikki o‘lchovli strukturalarda ko‘ndalang sochilish kanallari tufayli paketning qayta taqsimlanishi kuchaydi. Davriy to’siqlarda $P\approx0,95$ dan $\approx0,67$ gacha kamaydi. Davriy to‘siqlar eng kuchli bostirishni berdi: $V\approx220$ meV da $P\approx0,35$ minimumga erishib, $V=300$ meV da $\approx0,52$ gacha tiklandi. $+V/-V$ shaxmat superpanjarasida minimum $|V|\approx180–220$ meV da $P\approx0,48$ bo‘lib, $|V|=300$ meV da $\approx0,58$ ga ko‘tarildi. Demak, ikki o‘lchovlilik o‘tish minimumini kattaroq potensiallar tomon siljitadi va interferensiyani kuchaytiradi.

Natijalar o‘tish ehtimoli potensial kattaligidan tashqari uning ishorasi, superpanjara o‘lchamliligi va to‘siq–o’ra tartibi bilan ham belgilanishini ko‘rsatdi. Davriy o’ralar ikkala geometriyada eng shaffof, ikki o‘lchovli to‘siqlar esa eng kuchli sochuvchi konfiguratsiya bo‘ldi. Minimumdan keyingi tiklanish kogerent faza yig‘ilishi va psevdospinga bog‘liq transportning muhimligini tasdiqlaydi. Shunday qilib, elektrostatik naqsh geometriyasi va qutbliligini tanlash orqali grafenda taqiqlangan zona ochmasdan elektron to‘lqinlarini boshqarish mumkin.

Adabiyotlar

1. Novoselov K.S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films // Science. – 2004. – Vol. 306. – P. 666–669.

2. Castro Neto A.H. et al. The electronic properties of graphene // Reviews of Modern Physics. – 2009. – Vol. 81. – P. 109–162.

3. Katsnelson M.I., Novoselov K.S., Geim A.K. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene // Nature Physics. – 2006. – Vol. 2. – P. 620–625.

4. Park C.-H. et al. Anisotropic behaviours of massless Dirac fermions in graphene under periodic potentials // Nature Physics. – 2008. – Vol. 4. – P. 213–217.

RESEARCH PROGRESS ON LASER-CONTROLLED COMBUSTION OF ADN-BASED SOLID PROPELLANTS

Lizhi Wu [a, b, c], Jingyuan Zhang [a, b, c], Lu Yao [a, b, c], Ruiqi Shen [a, b, c],

a *Department of Applied Chemistry, School of Chemistry and Chemical Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China*

b *Micro-Nano Energetic Devices Key Laboratory of MIIT, Nanjing 210094, China*

c *Institute of Space Propulsion, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China*

E-mail: wulizhi@njust.edu.cn

Abstract. The controllable combustion technology of solid propellants has become a current research hotspot. This field mainly focus on the ignition/ extinction behavior, combustion rate, and propulsion parameters of solid energetic materials under the influence of external physical fields. This report reviews recent advances in the controllable combustion of solid energetic materials under laser irradiation. It covers key aspects such as the design principles, and formulation development of photo-controllable propellants, ignition/extinction characteristics, combustion behavior, and propulsion parameters.

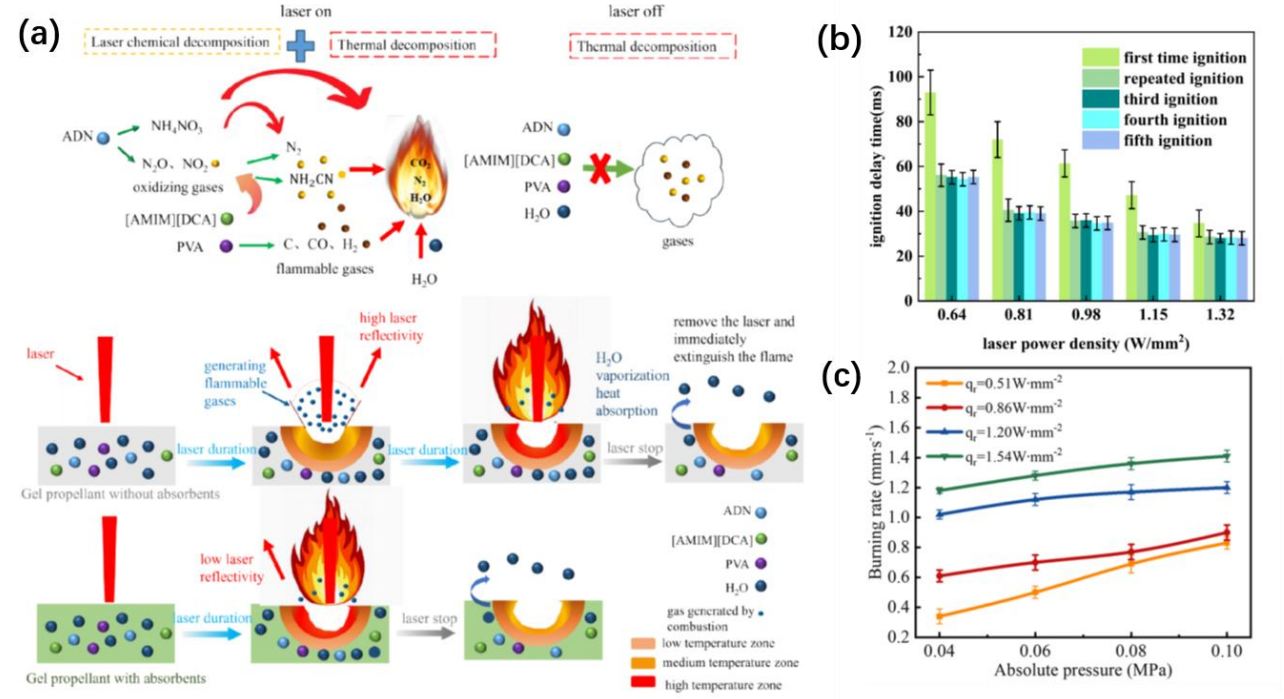


Fig.1 (a) Diagram of the controlled combustion mechanism of a laser-controlled gel propellant, (b) Comparison of multiple ignition delay times at different laser power densities, (c) Burning rate of the gel propellant as a function of laser power density and pressure

With a laser wavelength of 808 nm and a spot diameter of 6 mm, irradiation on the ADN-based propellant achieves a thrust output ranging from 4 mN to 80 mN, with a specific impulse of 40–80 s. Additionally, the existing challenges in the research are discussed, and suggestions for future research directions are proposed.

OKSIDLANGAN VOLFRAM YUZASIDA TRISIKLIK ANTIDEPRESSANTLARNING DISSOTSIATIV SIRTIY IONLASHUVI: β-BOG’ SELEKTIVLIGI VA DFT ASOSIDAGI SIRTIY FAOLLASHUV MODELI

I.M. Saydumarov[1], D.T. Usmanov[2]

[1]Toshkent davlat transport universiteti, O‘zbekiston Respublikasi
[2]O‘zR FA U.A.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, O‘zbekiston Respublikasi

Mazkur ishda oksidlangan volfram emitteri yuzasida kuchlanishni boshqarish (KB) va oqimni boshqarish (OB) usullari orqali imipramin va amitriptilin molekulalarining dissotsiativ sirtiy ionlashuvining tajribaviy va nazariy yo‘llar bilan tadqiq qilindi. Tajriba va nazariy hisoblashlarni umumlashtirib o‘rganish sirtiy ionlashuvining to‘liq kinetik tavsifini beradi.

Kvant-kimyoviy hisoblash bu molekuladagi elektronlar va atomlar xatti-harakatini kvant mexanikasi qonunlari asosida kompyuterda modellashtirish usulidir. Zichlik funksionali nazariyasi (DFT, Density Functional Theory) - bugungi kunda eng keng tarqalgan usul bo‘lib, molekulaning elektron zichligi orqali uning energiyasi, muvozanat geometriyasi, orbital energiyalari va bog‘larining kuchini yuqori aniqlikda hisoblab beradi.

Amitriptilinda halqa tizimida C=C qo’sh bog’ mavjud va uch halqali antidepressant (TCA) sinifiga mansub bo‘lib, imipiramindan farqli ravishda halqa tizimida azot yo’q va N atomi halqa ichida mavjud. Shu sababli amitriptilinda faqat bitta N atomi, imipraminda esa ikkita N atomi bor. Mazkur ishda amitriptilin va imipiramin molekulasining kvant-kimyoviy tahlili B3LYP/6-31G(d) darajasida ORCA 5.0.4 dasturida amalga oshirildi. Natijada tajribada bevosita o‘lchab bo‘lmaydigan muhim kattaliklar olinadi: HOMO/LUMO orbital energiyalari, bog‘ uzilish energiyasi (BDE), atomlardagi elektr zaryadlar (Mulliken) va ionlashish potensiali (IP).

1-jadvalda imipramin va amitriptilinning oksidlangan volfram sirtida dissotsiativ sirtiy ionlashuvining kinetik tavsiflari keltirilgan. Ikkala molekula ham o‘z R^+ ionini bir xil aktivatsiya energiyasi bilan desorbsiyalaydi ($E^+ = 1.65$ eV), bu bir xil desorbsiyalanuvchi ionga mos keladi. Dissotsiatsiya energiyasi E^d farq qiladi

(amitriptilin uchun 1.40 eV, imipramin uchun 1.25 eV), sirtiy ionlashish koeffitsiyenti esa imipramin uchun yuqoriroq (β = 0.86, amitriptilin uchun 0.70), bu uning pastroq ionlanish potensialiga mos keladi.

Imipramin va amitriptilinning oksidlangan volfram yuzasidagi dissotsiativ yuzaviy ionizatsiyasining kinetik tavsiflari **1-jadval**

Kattalik		Imipramin	Amitriptilin	Izoh
Diagnostik ion (m/z)		58	58	$(CH_3)_2N^+=CH_2$
T diapazoni (K)		730–788	720–788	emitter temperaturasi
E^+ (eV)		1.65	1.65	ion termodesorbsiyasi (VM)
lg D^+		12.5	12.6	pred-eksponensial
E_0* (eV)		1.75	1.70	neytral-radikal termodes. (VM)
lg D		13.1	13.1	pred-eksponensial
E_d (eV)		1.25	1.40	geterogen dissotsiatsiya (FM)
lg G		10.7	11.3	pred-eksponensial
β (SI koeffitsiyenti)		0.86	0.70	ion/umumiy oqim

2-jadvalda DFT ma’lumotlari keltirilgan. Orbitalining bog‘lovchi energiyasi yaqinlashuvi doirasida ikkala molekula ham IP < 6.5 eV emissiya qiymatini tavsiflaydi va ikkalasining HOMO sathlari oksidlangan volfram ish funksiyasidan yuqorida joylashgan, demak emitterga elektron ko‘chishi energetik jihatdan mumkin. Imipramin sezilarli pastroq IP ga ega (4.873 eV), chunki uning HOMO orbitali dibenzazepin π-tizimi va halqa azoti N_1 bo‘ylab delokalizatsiyalangan; amitriptilinning HOMOsi (−5.576 eV) dibenzosikloheptadiyen fragmentining π-orbitalidir. Amitriptilinning kengroq energetik tirqishi (5.280 va 4.971 eV) uning bir oz kamroq reaktivligini bildiradi.

Imipramin va amitriptilinning oksidlangan volfram yuzasidagi dissotsiativ sirtiy ionlashuvi birlashtirilgan KB/OB kinetikasi va B3LYP/6-31G(d) hisoblashlari bilan tavsiflandi. Ikkala molekula ham azotga nisbatan β-bog‘ni uzilishi m/z 58 ionini beradi; IP qiymatlari (4.873 va 5.576 eV) SI shartlari uchun yetarli bo‘ladi. Eng zaif β-

bog‘ azotga qo‘shni metilenda joylashgan; amitriptilin C=C konjugatsiyasi tufayli pastroq gaz fazasi BDE (3.288 va 3.748 eV) ga ega, imipraminning halqa azoti esa kuchliroq donordir (−0.527 eV). Tajribadan olingan E_0* qiymatlari asosida hisoblangan sirtiy faollashuv parametri ΔBDE (2.00 va 1.59 eV) shuni ko‘rsatadiki, o‘lchanadigan energetikani ichki bog‘ kuchi emas, balki sirt koordinatsiyasini boshqaradi. Birlashtirilgan eksperimental-nazariy yondashuv azotli asoslarning dissotsiativ sirtiy ionlashuvini bashorat qilish va keyingi tabiiy qadam sifatida dispersiya-tuzatmali, sirtiy-aniq hisoblashlarni belgilaydi.

Imipramin va amitriptilinning DFT (B3LYP/6-31G(d)) chegaraviy orbital deskriptorlari va global reaktivlik indekslari **2-jadval**

Deskriptor	Imipramin	Amitriptilin	Birlik
HOMO	−4.873 (MO#75)	−5.576 (MO#74)	eV
LUMO	+0.098 (MO#76)	−0.296 (MO#75)	eV
HOMO–LUMO tirqishi (ΔE)	4.971	5.280	eV
Ionlanish potensiali (IP)	4.873	5.576	eV
Elektron yaqinligi (EA)	−0.098	0.296	eV
Kimyoviy qattiqlik (η)	2.486	2.640	eV
Kimyoviy potensial (μ)	−2.387	−2.936	eV
Elektronmanfiylik (χ)	2.387	2.936	eV
Elektrofillik (ω)	1.146	1.633	eV
Dipol moment	1.193	1.019	μB*

Izoh: 1 μB = 9.274×10^{-24} A·m².

Ushbu ish dissotsiativ sirtiy ionlashuv usulida tajriba va nazariy hisob-kitoblarni (kompuyterda modellashtirish) tizimli birlashtirish sirtdagi jarayonlarni to‘liq kinetik tavsifini aniqlash imkonini berdi, ya’ni – sirtiy ionlashuvni nostatsionar usullari (KB va OB) molekulaning sirtdagi jarayonlarini to‘liq energetik manzarasini bersa, kvant-kimyoviy hisoblashlar esa bu manzaraning elektron asoslarini ochib berishga xizmat qiladi.

РАМАНОВСКИЕ И МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ ПРИЗНАКИ НЕОДНОРОДНОСТИ Ni/Si ДО ТЕРМИЧЕСКОГО СИЛИЦИДООБРАЗОВАНИЯ

Саидов Сафо Олимович[1], Худайкулов Ильёс Холмурадович[2], Хамроева Турсуной Собиржон кизи[3], Тогаев Арслонбек Шухрат угли[3]

[1] Бухарский государственный университет, Бухара, Узбекистан

[2] Институт ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А. Арифова, Центр коллективного пользования научным оборудованием, Ташкент, Узбекистан

[3] Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Российская Федерация

E-mail: safo.saidov.64@mail.ru ; blackflower452@gmail.com

Термически активированное превращение Ni–Si развивается из состояния границы Ni/Si, сформированного уже на стадии нанесения Ni. Атомистические исследования показывают, что до специальной термической активации граница Ni–Si может содержать перемешанную область [1]. Поэтому состояние до отжига важно как исходная конфигурация для последующего переноса компонентов, зарождения фаз и движения реакционной границы.

Исследованы два образца монокристаллического n-Si(111). Слой Ni формировали электронно-лучевым методом в Thermionics PVD SEB-06 при 5.4×10^{-6} Торр и 32 °C; ускоряющее напряжение — 10 кВ, ток пучка — 35 мА, время — 30 с. Последующий отжиг не проводили. Рамановские спектры регистрировали на Renishaw inVia при 532 нм; оценивали положение максимума Si-линии и её полную ширину на половине максимума (ПШПМ). СЭМ/ЭДС выполняли на Apreo ChemiSEM/TrueSight LX при 15 кВ.

Таблица 1. Параметры основной фононной линии Si

Образец	Точка	Максимум, $см^{-1}$	ПШПМ, $см^{-1}$
№1	1	519.72	6.81
№1	2	519.70	6.72
№1	3	519.77	6.92
№2	1	519.73	10.41

В спектрах обоих образцов доминирует линия оптического фонона кристаллического Si с максимумом 519.70–519.77 $см^{-1}$ (табл. 1). В трёх точках образца №1 ПШПМ составляет 6.72–6.92 $см^{-1}$, тогда как в единственной

исследованной точке образца №2 — 10.41 $см^{-1}$. С учётом различного числа измеренных точек этот результат трактуется как локальный спектральный контраст, а не как статистически установленное межобразцовое различие. Возможный вклад дефектно-деформационных, оптических и приповерхностных факторов не позволяет связать уширение с единственным микроскопическим механизмом.

Дополнительные спектральные особенности не образуют набора, достаточного для идентификации Ni_2Si, NiSi или $NiSi_2$. В данной работе рамановская спектроскопия характеризует прежде всего состояние Si-матрицы; фазовая атрибуция требует независимого фазочувствительного подтверждения, например рентгеновской дифракцией [2–4].

СЭМ выявляет различия исследованных краевых областей. У образца №1 край сравнительно ровный, с отдельными выступами; у образца №2 наблюдается более развитый волнистый рельеф с пластинчатыми и фрагментированными элементами (рис. 1). Эти локальные наблюдения не используются для количественной оценки общей шероховатости, сплошности или толщины покрытия.

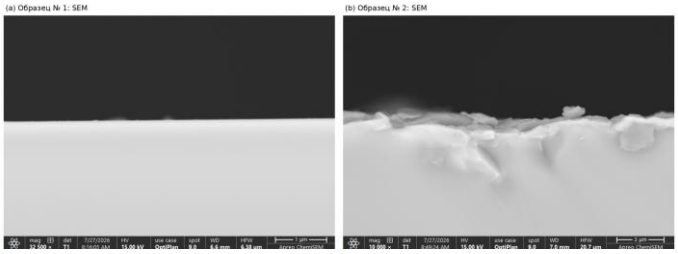


Рис. 1. СЭМ-изображения исследованных краевых областей: (a) образец №1; (b) образец №2.

При ЭДС-анализе Ni зарегистрирован в различных областях обоих образцов. В трёх локальных измерениях количественно оценённая доля Ni составляет 0.1–0.2 ат.%. При 15 кВ объём взаимодействия электронного пучка с веществом включает существенный вклад Si-подложки, поэтому эти значения не характеризуют стехиометрию отдельного слоя. ЭДС подтверждает локальную видимость Ni в анализируемом объёме, но не определяет толщину или стехиометрию покрытия.

Обсуждение. Рамановские, СЭМ- и ЭДС-наблюдения характеризуют Ni/Si до отжига как состояние с сохранённым кристаллическим откликом Si и локальным спектрально-морфологическим контрастом. Этот исходный контраст необходимо отделять от изменений, возникающих при последующей термообработке. Высокотемпературное взаимодействие Ni–Si может включать перераспределение компонентов, зарождение и рост силицидных фаз и перемещение реакционной границы, поэтому его нельзя сводить к простой диффузии [3–5]. Зафиксированное доотжиговое состояние является экспериментальной исходной точкой, но не доказательством конкретной силицидной фазы.

Заключение. После электронно-лучевого формирования Ni на n-Si(111) доминирующий фононный отклик кристаллического Si сохраняется, но локальные значения ПШПМ и морфология исследованных краевых областей различаются; Ni локально регистрируется ЭДС. Эти данные задают доотжиговый уровень для последующего сравнения, не подтверждая конкретную силицидную фазу.

Практическое значение и рекомендации. Доотжиговое состояние Ni/Si следует использовать как исходный контроль. В сравнительных сериях необходимо изменять один параметр термообработки при воспроизводимых остальных условиях; фазообразование устанавливать рентгеновской дифракцией, рамановскую спектроскопию применять для оценки состояния Si-матрицы, а СЭМ/ЭДС — морфологии и локальной видимости Ni.

Литература

1. Jara Donoso C. et al. Applied Surface Science. 2023;631:157563.
2. Bhaskaran M. et al. Micron. 2009;40(1):89–93.
3. El Kousseifi M. et al. Acta Materialia. 2020;198:100–110.
4. Hou A.-Y. et al. Applied Surface Science. 2021;538:148129.
5. Delwail C. et al. Acta Materialia. 2024;262:119430.

RAMAN AND FTIR CONSTRAINTS ON RETAINED HETEROGENEITY IN EuO-TREATED KEF-80 SILICON

Saidov Safo Olimovich[1], Khamroeva Tursunoy Sobirjon qizi[2], Togaev Arslonbek Shukhrat ugli[2]
[1] Bukhara State University, Bukhara, Uzbekistan
[2] National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, Russian Federation
E-mail: safo.saidov.64@mail.ru ; blackflower452@gmail.com

Introduction. High-temperature treatment of silicon with a chemically active rare-earth source may preserve the dominant crystalline Si response while generating a smaller reaction-affected population with different optical and bonding signatures. Raman and Fourier-transform infrared (FTIR) spectroscopy are complementary in this situation: Raman constrains a locally weighted lattice response, whereas transmission FTIR integrates bonding-sensitive absorption along the optical path [1–3]. We analyse EuO-treated KEF-80 silicon to determine whether these two spectroscopic projections support retained heterogeneity without implying wholesale transformation of the crystalline matrix.

Experimental basis. Phosphorus-doped n-type Czochralski KEF-80 Si (reference resistivity about 73 Ω·cm; nominal (100) orientation) was treated in sealed quartz ampoules using a finite EuO source spatially separated from the specimens. Heating was approximately 10–15 °C·min^{-1}, followed by a 5 h hold at selected temperatures within 1100–1300 °C and rapid removal from the hot zone [1]. Raman spectra were obtained at three selected surface positions on a Renishaw inVia platform. Complementary room-temperature FTIR transmission covered approximately 4000–450 cm^{-1}; a locally baseline-corrected residual was examined over 900–1300 cm^{-1}. Because the FTIR record is path-integrated and a matched source-free thermal control was unavailable, it is used as a bonding-sensitive constraint rather than a quantitative oxygen or layer-thickness measurement.

Results and discussion. All three Raman spectra are dominated by the first-order Si transverse-optical phonon near 521.0 cm^{-1}. The fitted full widths at half maximum are 6.15, 6.26 and 6.08 cm^{-1} for Spots 1–3, respectively [1]. No broad amorphous -Si-like contribution replaces the principal mode and no large site-to-site

displacement or linewidth difference is resolved. The dominant Raman-visible population therefore remains crystalline and comparatively similar at the sampled positions. Weaker bands near 299.56–303.36 cm^{-1} and 955.9–976.9 cm^{-1} are compatible with second-order Si scattering and do not identify a Eu-specific phase.

A stronger contrast occurs in the high-shift Raman background. Median values over 2000–3000 cm^{-1} are 349.4, 1670.5 and 92.6 a.u. for Spots 1–3, giving a maximum contrast of about eighteen. Thus a pronounced local optical variation coexists with a nearly unchanged principal Si phonon. This background cannot be converted into Eu concentration or phase abundance because luminescent centres, defect- or oxide-related states, local absorption, interference, surface relief, focusing and collection efficiency can all contribute [2]. The secure conclusion is spatial variability of a subordinate optical response.

FTIR adds a different constraint. In the 900–1300 cm^{-1} interval the processed residual reaches an approximate maximum $\Delta A \approx 0.010$ at 1151 cm^{-1}, with a peak-to-peak variation of about 0.013. No optically dominant broad SiO_2-like envelope is resolved. The interval is oxygen-sensitive but chemically non-specific: interstitial oxygen in crystalline Si has structure-dependent infrared-active modes [4], while thermally formed silicon oxides exhibit broad bands in approximately the same range whose position depends on oxidation conditions and Si–O–Si network organisation [5]. The 1151 cm^{-1} maximum therefore cannot identify one oxygen reservoir or a unique Eu–O–Si product.

This non-uniqueness is physically expected because oxygen could originate from the Czochralski matrix, the initial surface oxide or the finite EuO source. Controlled rare-earth oxide/silicon studies show that an oxygen-containing boundary can either suppress secondary reaction or, after oxide transformation, open access to silicon and facilitate rare-earth silicide formation [6,7]. These systems are not direct models of the present ampoule treatment; they demonstrate that boundary chemistry and thermal history govern the accessible pathway.

Conclusions. The combined Raman and FTIR record supports a bounded spectroscopic picture of EuO-treated KEF-80 silicon: a dominant crystalline-Si vibrational response coexists with a strongly position-dependent Raman background and a weak oxygen-sensitive FTIR residual. These observations are compatible with retained heterogeneous material whose spectroscopic weight is subordinate to that of the Si matrix. They do not establish a continuous modified layer, a unique Eu–Si–O topology, or the depth distribution of the contributing populations. Spatially registered Raman mapping, matched untreated and source-free thermal controls, front/back FTIR measurements and chemically selective depth analysis are the principal experiments needed to discriminate among the remaining interpretations.

References

[1] Saidov S. O. et al. Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2026. Vol. 37. Article 1344. DOI: 10.1007/s10854-026-17750-7.

[2] Nuytten T. et al. Applied Physics Letters. 2024. Vol. 125. Article 053506. DOI: 10.1063/5.0219438.

[3] Al-Amin K. et al. Nanoscale Advances. 2025. Vol. 7. P. 6677–6702. DOI: 10.1039/D5NA00522A.

[4] Gentile F. S. et al. The Journal of Chemical Physics. 2020. Vol. 152. Article 054502. DOI: 10.1063/1.5139564.

[5] Kayed K., Kurd D. B. Silicon. 2022. Vol. 14. P. 10081–10086. DOI: 10.1007/s12633-022-01732-5.

[6] Held R. et al. Physical Review Materials. 2021. Vol. 5. Article 124419. DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.5.124419.

[7] Selegard L. et al. Surface Science. 2021. Vol. 704. Article 121743. DOI: 10.1016/j.susc.2020.121743.

SUBSTRATE IMPACT ON NiPt-CATALYZED SWNT NUCLEATION

F.M. Safarov[1,2], U.B. Khalilov[1,2,3]

[1]Arifov Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies (Uzbekistan), [2]Denau institute of entrepreneurship and pedagogy (Uzbekistan), [3]University of Antwerp (Belgium)
**e-mail: fakhmsafarov@gmail.com*

The growth of single-walled carbon nanotubes (SWNTs) with specific chirality using bimetallic catalysts is a highly effective approach [1]. However, achieving precise control over this growth remains a significant scientific challenge. This limitation stems from an incomplete understanding of catalyst design and the initial nucleation step [2,3].

To address this problem, this study investigates the nucleation mechanism of SWNTs catalyzed by a Ni_xPt_y bimetallic nanocluster. By employing reactive molecular dynamics (MD) simulations, the catalytic nucleation process was analyzed in two different environments: in a vacuum and supported on a silicon (Si) substrate.

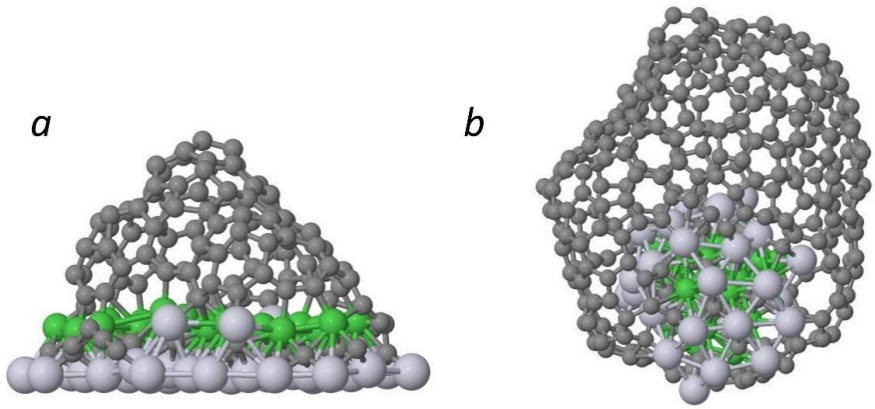


***Fig. 1**. (a) SWNT nucleation on a NiPt cluster supported on a Si substrate. (b) NiPt cluster encapsulation in a vacuum environment. Green, light grey, and grey spheres represent Ni, Pt, and C atoms, respectively.*

The results demonstrate a strong dependence of SWNT nucleation on the spatial arrangement of Ni and Pt atoms within the catalyst. In a vacuum, Pt atoms segregate to the surface while Ni atoms form the core, leading to the encapsulation of the catalyst by a carbon network. Conversely, when supported on a Si substrate, the strong interfacial attraction between Pt atoms and the substrate induces a structural inversion, forcing Ni atoms to the surface of the cluster. This specific surface enrichment of Ni creates highly favorable conditions for SWNT nucleation.

Overall, the spatial arrangement of the bimetallic catalyst components is the determining factor for successful SWNT nucleation. This arrangement is driven largely by substrate interactions. The Si substrate prevents catalyst encapsulation, providing a clear pathway for designing more efficient bimetallic catalysts for targeted CNT synthesis.

References

[1] Yang F. et al., *Chem. Rev.* **120**, 2693-2758 (2020).
[2] Qiu L. et al., *Phys. Rev. Let.* **123**, 256101 (2019).
[3] Khalilov U. et al., *Nat. Com.* **6**, 10306 (2015).

$CsPbI_2Br$ ASOSIDAGI NOORGANIK PEROVSKITLARDA METALL IONLARI YORDAMIDA DEFEKT PASSIVATSIYASI VA BARQARORLIKNI YAXSHILASH

Tajibayev Ilhom Ibrohimjonovich, Ro‘ziyev Farid Murtoza o‘g‘li, Boynazarov Ilhom Rustam o‘g‘li, Mengliyev Doniyor Erkin o’g’li
U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, Toshkent, O‘zbekiston
E-mail: roziyevf@iplt.uz

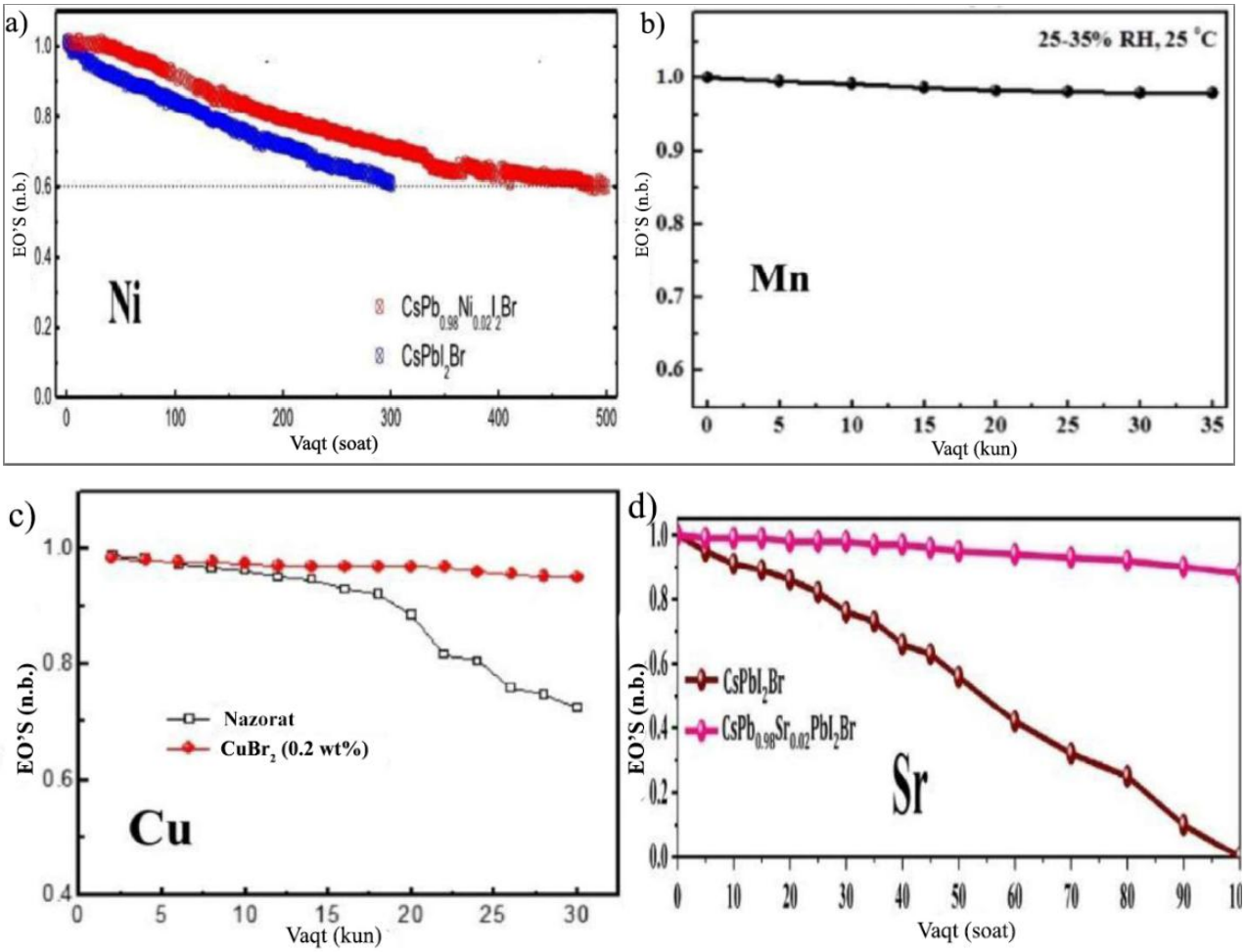
Annotatsiya. $CsPbI_2Br$ noorganik perovskiti optimal tarmoqli oralig‘i, shuningdek yuqori termik va fazaviy barqarorligi tufayli quyosh elementlari uchun istiqbolli material sifatida e’tirof etilmoqda. Biroq hozirgi kunda kristall panjaradagi defektlar va nurlanishsiz rekombinatsiya qurilma samaradorligini darajada pasaytiradi. Ushbu tezisda Pb^{2+} o‘rnini bosuvchi Ni^{2+}, Mn^{2+}, Cu^{2+} va Sr^{2+} ionlari yordamida defektlarni passivatsiyalash va fazani barqarorlashtirish tahlil qilindi. Natijalar bir xil valentlikka ega (izovalent) ionlar panjara va defektlar holatiga ta’sir ko’rsatishi, shuningdek ularni boshqarish imkoniyatini berishi mumkinligini ko‘rsatdi.

Kalit so‘zlar: $CsPbI_2Br$, metall ionlari, defekt passivatsiyasi, Pb^{2+} o‘rnini bosish, rekombinatsiya, fazaviy barqarorlik.

Kirish. $CsPbI_2Br$ asosidagi quyosh elementlari yuqori termik barqarorligi va tandem qurilmalar uchun mos tarmoqli oralig‘i tufayli muhim ahamiyat kasb etadi. Biroq ularning samaradorligi plyonka morfologiyasi, interfeys xususiyatlari va ichki nuqsonlar tufayli chegaralanib qolmoqda. Metall ionlari bilan qisman almashtirish yoki modifikatsiyalash natijasida nuqsonlar atrofidagi lokal kimyoviy va elektron muhit o‘zgaradi. Bu esa nuqsonlarning zaryad tashuvchilarni tutib qolish faolligini kamaytiradi, ularni passivatsiyalashga va kristall panjaraning fizik-kimyoviy xossalarini boshqarishga imkon beradi. Bunda ion radiusi, kimyoviy muvofiqlik va zaryad kompensatsiyasi asosiy omillar hisoblanib, ion konsentratsiyasining optimal qiymatini aniqlash muhim masalalardan biri hisoblanadi.

Material va metodika. Tadqiqot ishida $CsPbI_2Br$ va $CsPbIBr_2$ perovskit qatlamlari eritma asosida tayyorlandi. Pb^{2+} o‘rnini bosish uchun Ca^{2+}, Sr^{2+}, Mn^{2+}, Ni^{2+}, Cu^{2+} kabi izovalent hamda La^{3+} va boshqa lantanid ionlari kabi geterovalent kationlar ko‘rib

chiqildi. Tayyorlangan qatlamlar kristall tuzilishi, fotoelektrik xususiyatlari va barqarorligi bo‘yicha taqqoslandi. Ushbu tezisda ayniqsa Ni^{2+}, Mn^{2+}, Cu^{2+} va Sr^{2+} bilan bog‘liq barqarorlik natijalari tahlil qilindi.



1-rasm. Ni^{2+}, Mn^{2+}, Cu^{2+} va Sr^{2+} ionlari bilan modifikatsiyalangan seziy asosidagi perovskitlarning vaqt bo‘yicha barqarorlik sinovlari: (a) Ni, (b) Mn, (c) Cu, (d) Sr. $CuBr_2$ (0.2 wt%)

Natijalar va muhokama. 1-rasmda Ni^{2+}, Mn^{2+}, Cu^{2+} va Sr^{2+} ionlari bilan modifikatsiyalangan perovskitlarning vaqt bo‘yicha normallashtirilgan barqarorlik egri chiziqlari keltirilgan. Egri chiziqlar metall ionlari ta’sirida degradatsiya tezligining o‘zgarishini ifodalaydi. Dastlabki bosqichda Mn^{2+} va Cu^{2+} modifikatsiyalangan namunalar yuqoriroq barqarorlik ko‘rsatgan bo‘lsa, Sr^{2+} qo’shilgan namuna nazorat namunasiga nisbatan sezilarli darajada uzoq muddatli barqarorlikni namoyish etgan. Metall ionlari yordamida modifikatsiyalash perovskit degradatsiyasini sekinlashtirishi

mumkin. Biroq, turli ionlar uchun tajriba sharoitlari bir xil bo‘lmaganligi sababli, ularni bitta reyting bo‘yicha qat’iy taqqoslash o‘rinli emas. Shunga qaramay, ion turiga qarab fazaviy barqarorlikning sezilarli farq qilishi va optimal ionni tanlash zarurligi aniq ko‘rinadi. Metall ionlari $CsPbI_2Br$ xossalariga Pb^{2+} o‘rnini bosuvchi sifatida ta’sir etib, kristall panjarani deformatsiyalash va defektlar holatini boshqarish orqali namoyon bo‘ladi. Jumladan, Eu^{2+} qo’shilishi α-fazani barqarorlashtiradi va nurlanishsiz rekombinatsiyani kamaytiradi [1]. Eu^{2+} va In^{3+} birgalikda kiritilganda esa qurilma samaradorligi hamda termik barqarorlik ortishi qayd etilgan [2]. Gd^{3+} modifikatsiyasi tolerantlik faktorini oshirib, α-fazani barqarorlashtirishi va rekombinatsion yo‘qotishlarni kamaytirishi ko‘rsatilgan [3].

Xulosa. Metall ionlari bilan qisman almashinish $CsPbI_2Br$ perovskitlarida defektlar va fazaviy barqarorlikni boshqarishning samarali usullaridan biri sifatida tavsiya etiladi. Ni^{2+}, Mn^{2+}, Cu^{2+} va Sr^{2+} ionlari asosidagi tajribalar degradatsiya tezligi ion turiga bog‘liqligini tasdiqlaydi. Bundan tashqari, Eu^{2+} va Gd^{3+} ionlari ham panjara barqarorligini oshirib, rekombinatsiya yo‘qotishlarini kamaytirishi mumkin. Kelgusida ion konsentratsiyasini optimallashtirish, defektlarni spektroskopik tahlil qilish va uzoq muddatli termik-namlik sinovlarini o‘tkazish muhim hisoblanadi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. S. Akin, E. Akman, et al., Europium-Doped $CsPbI_2Br$ for Stable and Highly Efficient Inorganic Perovskite Solar Cells, Joule 3 (2019) 205-214. DOI: 10.1016/j.joule.2018.10.008.
2. S. S. Mali, J. V. Patil, J. A. Steele, et al., Implementing Dopant-Free Hole-Transporting Layers and Metal-Incorporated $CsPbI_2Br$ for Stable All-Inorganic Perovskite Solar Cells, ACS Energy Lett. 6 (2021) 778–788. DOI: 10.1021/acsenergylett.0c02385.

VISMUT ASOSLI KUPRAT O’TA O’TKAZGICHLARDA EFFEKTIV MASSA ANIZOTROPIYASIGA BOG’LIQLIGI

Z.R. Ramazonova[1], A.A. Ahadov[2], D.R. Djurayev[1]
[1]Buxoro davlat universiteti
[2]Buxoro davlat tibbiyot instituti

Vismut asosli $Bi_2Sr_2CuO_{6+\delta}$(Bi-2201), $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ (Bi-2212) va $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$ (Bi-2223) kupratlari kuchli qatlamlangan yuqori haroratli o’ta o’tkazgichlardir. Mis CuO_2 qatlamlari tekisligida zaryad tashuvchilarning harakatchanligi c-o’q yo’nalishidagiga nisbatan yuqori bo’lgani uchun $m_{ab} < m_c$ bo’ladi va effektiv massa anizotropiyasi eng katta qiymatga ega [1]. Bir o’qli anizotropik modelda: $\gamma = \sqrt{\frac{m_c}{m_{ab}}}$; $\frac{m_c}{m_{ab}} = \gamma^2$

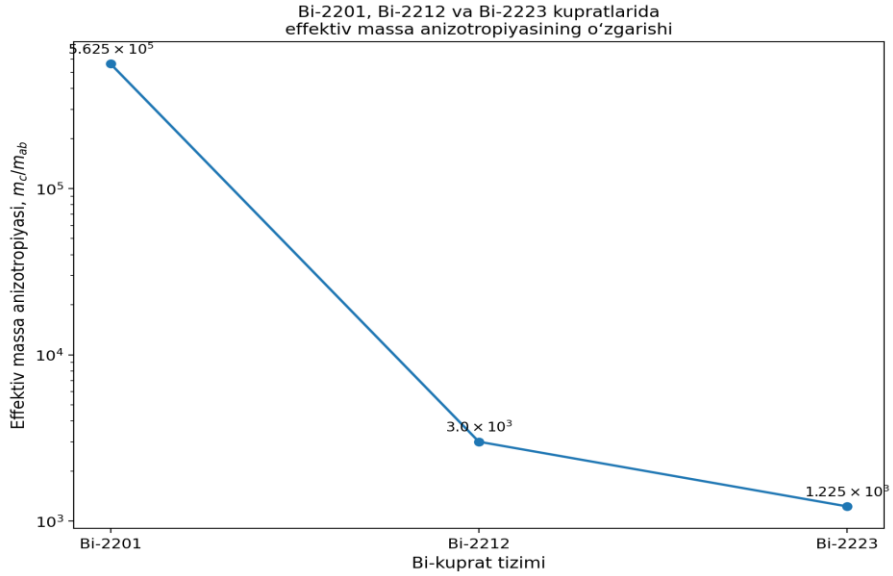
Anizotropik Ginzburg–Landau nazariyasida ushbu parametr kogerentlik uzunliklari, magnit maydonning London singish chuqurliklari hamda yuqori kritik magnit maydonlarning nisbatlari orqali ifodalanadi [1,6]:$\gamma = \frac{\xi_{ab}}{\xi_c} = \frac{\lambda_c}{\lambda_{ab}} = \frac{H_{c2}^{ab}}{H_{c2}^{c}}$

Bu yerda ξ_{ab} va ξ_c — mos ravishda ab-tekislik va c-o’q yo’nalishlaridagi kogerentlik uzunliklari, λ_{ab} va λ_c — magnit maydonning London singish chuqurliklari, H_{c2}^{ab} va H_{c2}^{c} esa tegishli yo’nalishlardagi yuqori kritik magnit maydonlardir. Kuchli qatlamlangan kupratlarda γ anizotropiya parametri temperatura, magnit maydon kuchlanganligi va uni aniqlash usuliga bog’liq bo‘lgan effektiv kattalik sifatida namoyon bo’lishi mumkin [3,4,8]. London modeli uchun:

$$\lambda_{ab}^2 = \frac{m_{ab}}{\mu_0 n_s e^2} \quad ; \quad m_{ab} = \mu_0 n_s e^2 \lambda_{ab}^2$$

Bu yerda n_s — o‘ta o‘tkazuvchan zaryad tashuvchilar konsentratsiyasi. Kupratlarda c-o’q yo’nalishidagi elektrodinamik xossalar legirlash darajasiga sezilarli bog’liq bo’lganligi sababli n_s, λ va effektiv massa qiymatlarini bir xil tarkib va bir xil namuna holati uchun taqqoslash muhim [9]. Bi-2201 uchun Sakamoto va hammualliflar Jozefson plazma rezonans usuli yordamida $\gamma \approx 750$ qiymatini baholagan [2]; bundan $m_c/m_{ab} \approx 5.625\times10^5$ kelib chiqadi. Bi-2212 kristallarida qatlamlararo Jozefson bog’lanishining mavjudligi tajribada bevosita kuzatilgan [7]. Kuchli magnit

maydonlarda o’tkazilgan o’lchovlarda γ ning 20 kOe dan kichik maydonlarda γ > 200, 210 kOe da esa γ < 60 bo‘lishi uning magnit maydonga sezgirligini ko’rsatadi [4]; Bi-2212 uchun yuqori kritik magnit maydonning katta qiymatlari elektr qarshiligini o’lchash usuli bilan ham qayd etilgan [8]. Bi-2223 uchun (Bi, Pb)-2223 namunalarning fluktuatsion elektr o’tkazuvchanligini tahlil qilishda γ ≈ 35 qiymati qo’llangan [5], ya’ni $m_c/m_{ab} \approx 1225$. Bi-2223 monokristallarida quyi kritik magnit maydonni o’lchash natijasida γ ≈ 50 qiymati olingan bo‘lib, uning anizotropiyasi Bi-2212 ga nisbatan kichikroq ekani ko‘rsatilgan [10].



1-rasm. Bi-2201, Bi-2212 va Bi-2223 kupratlarida effektiv massa anizotropiyasining o’zgarishi

Ushbu qiyosiy tahlilda Bi-2201, Bi-2212 va Bi-2223 uchun turli tajriba usullarida aniqlangan γ qiymatlari yagona $m_c/m_{ab} = \gamma^2$ mezoni asosida taqqoslandi va CuO_2 qatlamlari soni ortishi bilan effektiv massa anizotropiyasining umumiy kamayishi ko‘rsatildi. Bi-2212 misolida esa γ ni universal o‘zgarmas kattalik emas, balki magnit maydon va o’lchash sharoitiga bog’liq effektiv parametr sifatida talqin qilish zarurligi ko‘rinadi.

Adabiyotlar

1. Blatter G, Feigel’man M. V., Geshkenbein V. B. Larkin A. I., Vinokur V. M. Vortices in high-temperature superconductors. Reviews of Modern Physics, 1994, 66, 1125–1388.

2. Sakamoto S., Maeda A., Hanaguri T., et al. Josephson plasma resonance in a single-layered cuprate. Physical Review B, 1996, 53, R14749–R14752.

3. Farrell D. E., Bonham S., Foster J., et al. Giant superconducting anisotropy in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ Physical Review Letters, 1989, 63, 782–785.

4. Kawamata S., Inoue K., Okuda K., Sasaki T. Anisotropy parameter for $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ single crystal by magnetic torque measurements in high magnetic fields. Physica B: Condensed Matter, 1998, 246–247, 437–440.

5. Aftabi A., Mozaffari M. Fluctuation induced conductivity and pseudogap state studies of $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$ superconductor added with ZnO nanoparticles. Scientific Reports, 2021, 11, 4341

6. Blatter G., Geshkenbein V. B., Larkin A. I. From isotropic to anisotropic superconductors: A scaling approach. Physical Review Letters, 1992, 68, 875–878.

7. Kleiner R., Steinmeyer F., Kunkel G., Müller P. Intrinsic Josephson effects in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ single crystals. Physical Review Letters, 1992, 68, 2394–2397.

8. Alexandrov A. S., Zavaritsky V. N., Liang W. Y., Nevsky P. L. Resistive upper critical field of high-T_c single crystals of $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$. Physical Review Letters, 1996, 76, 983–986.

9. Basov D. N., Homes C. C., Singley E. J., Strongin M., Timusk T., Blumberg G., van der Marel D. Unconventional energetics of the pseudogap state and superconducting state in high-T_c cuprates. Physical Review B, 2001, 63, 134514.

10. Giannini E., Gladyshevskii R., Clayton N., Musolino N., Garnier V., Piriou A., Flükiger R. Growth, structure and physical properties of single crystals of pure and Pb-doped Bi-based high T_c superconductors. Current Applied Physics, 2008, 8, 115–119.

IBP QATTIQ QO‘SHIMCHASINING PM6:A4T-16 FAOL QATLAMI STRUKTURAVIY XUSUSIYATLARIGA TA’SIRI

D.M.O‘razqulova[1], N.O.Dilmurodova[1,2], S.Abdukarimova[1,2] V.O.Kuvondikov[1]

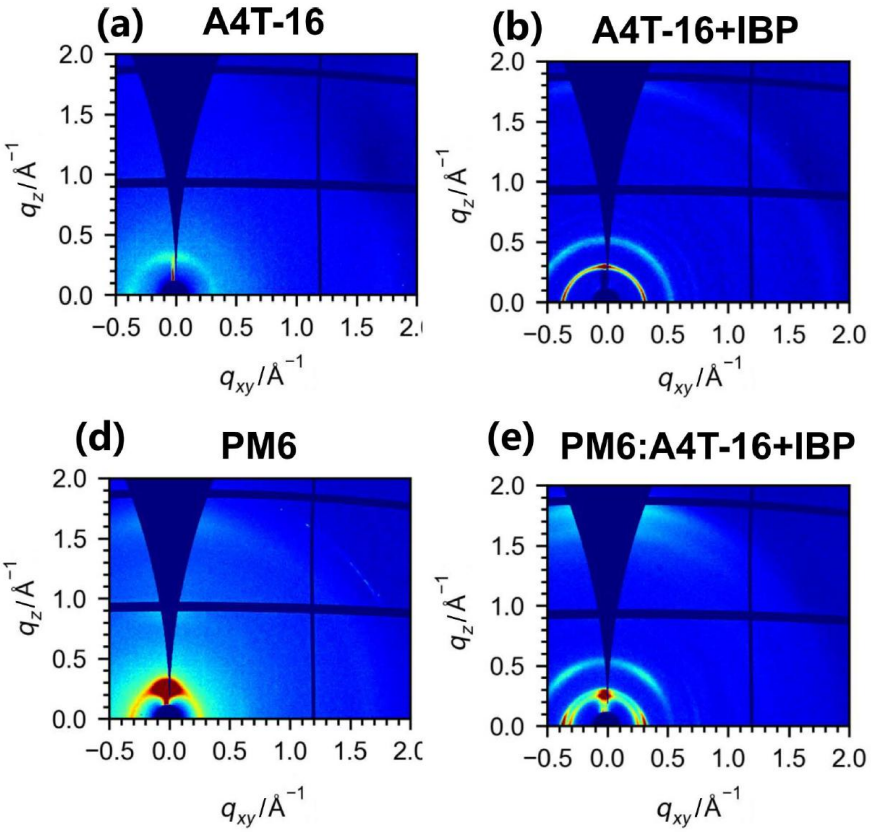
[1]U.A.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti
[2]Mirzo Ulug’bek nomidagi O’zbekiston Milliy Universiteti
e-mail: kuvondikov@iplt.uz

Kirish. Organik quyosh elementlari (OQE) yengil, egiluvchan va arzon eritmali texnologiyalar asosida tayyorlanishi bilan istiqbolli fotovoltaik yo‘nalish hisoblanadi. Fullerensiz akseptorlar sintezi va qurilma tayyorlash strategiyalarining takomillashuvi natijasida OQElarning energiya o‘zgartirish samaradorligi (PCE) 20% dan oshdi [1,2]. Tannarxni kamaytirish nuqtai nazaridan to‘liq kondensatsiyalanmagan halqali (non-fused-ring) akseptorlar, jumladan kvartertiofen yadroli A4T-16 kabi akseptorlar bugungi kunda tadqiqotchilar tomonidan keng o’rganilmoqda. Biroq bunday molekulalarda tekislik va konformatsion qat’iylikning yetishmasligi molekulyar upakovkalanishni yomonlashtiradi, buning natijasida esa morfologik boshqaruvsiz PM6:A4T-16 asosidagi OQElarida Fill faktori (FF) va PCE qiymatlariga salbiy ta’sir o’tkazadi [3]. Faol qatlamda π–π steking masofasi, kristallitlarning kogerentlik uzunligi zaryad tashuvchilar harakatchanligini belgilovchi asosiy mikrostrukturaviy parametrlardir. Shu bois ushbu ishda 4-iyodobifenil (IBP) qattiq qo‘shimchasining sof A4T-16 akseptor va PM6:A4T-16 faol qatlam plyonkalarining molekulyar upakovkalanishiga ta’siri keng burchakli rentgen difraksiyasi (GIWAXS) usuli bilan o‘rganildi.

Materiallar va metodika. PM6 donor va A4T-16 akseptor 1:1.2 og‘irlik nisbatida xlorbenzolda eritilib, umumiy konsentratsiyasi 22 mg/mL bo‘lgan eritma tayyorlandi. Eritmaga akseptor og‘irligiga teng miqdorda IBP kiritildi va aralashma 50 °C da 4 soat davomida aralashtirildi. Eritmalar tozalangan kremniy taglikka 2000 ayl/min tezlikda 60 s spin-koating usulida yotqizildi, plyonkalarga 80 °C da 5 daqiqa termik ishlov berildi; qalinlik ~110 nm ni tashkil etdi. GIWAXS tasvirlarida (010)

orientatsion tekistligi bo‘yicha steking masofasi d = 2π/q, kogerentlik uzunligi (CL) esa 2πK/FWHM (K = 0.9) ifodadan hisoblandi.

Natijalar va muhokama. Rasmda ko’rsatilgan yupqa plyonkalarning ikki o‘lchamli GIWAXS tasvirlarida ko’rinadiki, sof A4T-16 plyonkasida (a) faqat kuchsiz va yoyilgan difraksion halqalar kuzatiladi, ya’ni kristallanish darajasi past. IBP kiritilgandan so‘ng (b) halqalar sezilarli intensivlashib aniq difraksion chiziqlar paydo bo’lishi akseptor molekulalarining qayta kristallanib, uzoq masofali tartibga ega domenlar hosil qilganidan darak beradi [1]. Faol qatlam plyonkada (e) donor va akseptorga tegishli lamellyar (100) oriyentatsion chiziqlar yaqqol namoyon bo‘ldi.



1-rasm. Sof A4T-16 (a), IBP kiritilgan A4T-16 (b), sof PM6 (d) va IBP kiritilgan PM6:A4T-16 (e) plyonkalarining ikki o‘lchamli GIWAXS tasvirlari.

Ushbu GIWAXS tasvirlaridan hisoblangan kristallik o’lcham parametrlar 1-jadvalda keltirilgan. Sof A4T-16 da π–π steking masofasi 4.50 Å va kogerentlik uzunligi 34.35 Å ni tashkil etsa, IBP kiritilganda steking masofasi 4.36 Å gacha qisqaradi, kogerentlik uzunligi esa 47.21 Å gacha, ya’ni ~37% ga ortadi. Sochilish

vektori (q) 0.16 dan 0.12 $Å^{-1}$ gacha kamayishi kristallitlar o‘lchamining kattalashganini bildiradi.

1-jadval. Plyonkalarning GIWAXS (010) sochilish vektori bo‘yicha aniqlangan molekulyar upakovkalanish parametrlari.

Namuna	**Sochilish vektori (Å⁻1)**	**Steking masofasi (Å)**	**FWHM (Å⁻1)**	**CL (Å)**
PM6	1.29	4.87	0.18	30.73
A4T-16	1.40	4.50	0.16	34.35
A4T-16+IBP	1.44	4.36	0.12	47.21

Ushbu qiymatlardagi farq qattiq qo‘shimchalarning faol qatlamdan bug’lanish kinetikasi bilan bog‘liq bo’lib, IBP nisbatan past bug’lanish xususiyatiga ega bo‘lgani uchun sekin sublimatsiyalanadi hamda faol qatlamda nanog‘ovaklar hosil qilib, akseptorga qayta tartiblanish uchun yetarli imkoniyat yaratadi. Ushbu xususiyat hisobiga faol qatlamda o‘rtacha domen o‘lchami 5.70 dan 13.68 nm gacha ortib, zaryad tashuvchilar harakatchanligi muvozanatlashadi ($\mu_h/\mu_e \approx 1.14$). Natijada FF 0.580 dan 0.759 gacha, qisqa tutashuv toki 20.74 dan 21.81 mA/sm^2 gacha ortib, PCE 10.87% dan 14.98% gacha oshadi [1].

Xulosa. GIWAXS tahlili IBP qattiq qo‘shimchasi A4T-16 akseptorining molekulyar upakovkalanishini sezilarli yaxshilashini ko‘rsatdi: steking masofasi 4.50 dan 4.36 Å gacha qisqaradi, kogerentlik uzunligi esa 34.35 dan 47.21 Å gacha ortadi. Bu IBP ning past bug’lanish xususiyati tufayli sekin sublimatsiyalanib, akseptorning qayta kristallanishi uchun bo‘sh hajm va vaqt yaratishi bilan izohlanadi. Zichroq steking va kattaroq kristall domenlar zaryad tashishni yaxshilab, Fill faktorining oshishini ta’minlaydi. Shunday qilib, IBP kondensatsiyalanmagan halqali akseptorlar asosidagi OQElar morfologiyasini boshqarishda samarali va arzon vosita ekanligi ko’rsatildi.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. Zhang, R., Qi, L., Wu, M., et all. // Chin. J. Chem., (2026) 44: 268–276.
2. Ma, L., Zhang, S., Zhu, J., et all. // Nat. Commun., (2021) 12: 5093.
3. Hu, D., Tang, H., Chen, C., et all. // Adv. Mater., (2024) 36: 2406949.

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ФАЗОВОГО СОСТАВА ОКСИДА ФТОРА-ОЛОВА (FTO) СОДЕРЖАЩЕГО ЧАСТИЦЫ НАНОГРАФЕНА

П.Б. Парчинский [1], А.А. Насиров [1], Х.Ф. Режаматов [1], С.А. Хахомов[2], А.В. Семченко[2], Н. А. Кулагина[3]
Национальный Университет Узбекистана, Ташкент 100174, Узбекистан, pavelhys@mail.ru
Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины
Институт материаловедения АН РУз

Оксид олова солегированный фтором (FTO) широко применяется при разработке и изготовлении различных приборов и структур оптоэлектроники и фотовольтаики [1-3]. Среди его достоинств высокая прозрачность в видимой области спектра и достаточно высокая удельная проводимость, что позволяет использовать его в качестве фронтального собирающего электрода. Кроме того данный материал термически стабилен до 300 ^{0}C и обладает высокой устойчивостью к активным химическим средам, что позволяет использовать его как подложку для синтеза поглощающих слоев в перовскитных солнечных элементах. К настоящему времени установлено, что солегирование графеном и его производными может оказывать положительное влияние на электропроводность слоев FTO [4,5]. Это обуславливает значительный интерес к исследованию влияния углеродных наноструктур на оптические и структурные характеристики оксида фтора-олова. В настоящей работе приводятся результаты исследования влияния солегирования наночастицами графена на структурные параметры слоев FTO.

Пленки FTO с добавками наночастиц графена получали методом спрей-пиролиза подложке кремния p-типа проводимости с удельным сопротивлением 4 Ом×см [5]. Для формирования слоев FTO был приготовлен водно-спиртовой золь. В полученный золь вводили раствор, содержащий наноразмерный порошок графена. Концентрация раствора нанографена в исходном золе составляла от 6 до 12 молярных процентов. Образцы маркировались согласно содержанию раствора нанографена в исходном золе.

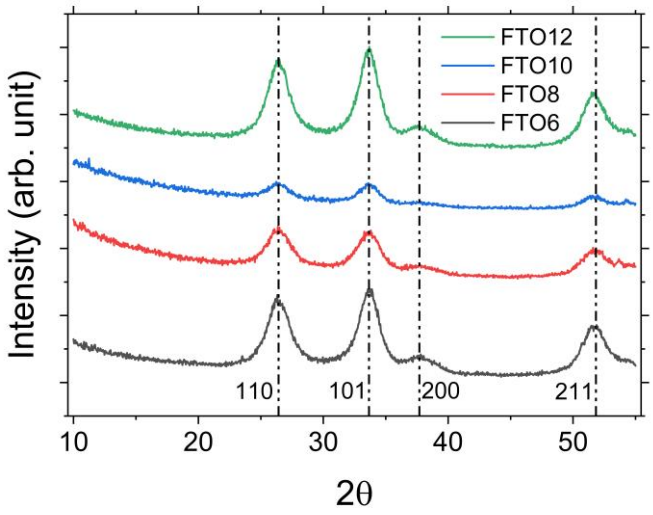


Рисунок 1. Данные рентгеноструктурного анализа образцов FTO содержащих графен.

На рисунке 1 представлены данные рентгеноструктурного анализа исследуемых слоев FTO с различным содержанием графена. Из представленных зависимостей видно, что в спектрах XRD образцов FTO-6 и FTO-12 доминируют рефлексы, связанные с плоскостью (110), тогда как в спектрах образцов FTO-8 и FTO-10 доминирующими являются рефлексы, связанные с плоскостью (101), что свидетельствует о том, что данные образцы характеризуются различными преимущественные направлениями кристаллизации.

Образец	**D, нм**	**σ, нм**
FTO-6	20.23	10.20
FTO-8	27.64	4.98
FTO-10	25.57	9.26
FTO-12	29.04	10.84

В таблице приведенной выше таблице представлены данные о среднем размере кристаллитов D, а также среднеквадратичном отклонении от среднего размера σ значений среднего раз, полученные для исследуемых слоев FTO. Вычисление размеров кристаллитов проводилось при помощи формулы Шредера

$$D = \frac{K\lambda}{\beta cos\theta}$$

Где K – постоянная Шредера, λ – длинна волны рентгеновского излучения, β – полуширина рефлекса, θ – брэгговский угол. Полученные значения D демонстрируют тенденцию к увеличению размеров кристаллитов при увеличении содержания нанографена в объёме слоя FTO. Исключение составляет образец FTO 10, однако данные полученные для этого образца характерезуются наибольшей погрешностью, вследствие наименьшей интенсивности рефлексов в рентгеновском спектре.

Таким образом, полученные нами данные свидетельствуют о том, что структурные характеристики слоев FTO, полученных методом спрей-пиролиза существенным образом зависят от содержания графена в объеме слоя.

Список литературы:

1.C.C. Pla Cid, E.R. Spada, M.L. Sartorelli. Effect of the cathodic polarization on structural and morphological proprieties of FTO and ITO thin films // Applied Surface Science 2013. v. 273, p. 603.

2. E. Ching-Prad, A. Watson, H. Miranda. Optical and electrical properties of fluorine doped tin oxide thin film // Journal of Materials Science: Materials in Electronics 2018 v. 29, p. 15299

3. R. Datt, H. Alsayyed, S. Dhall, et al. Top electrode materials for semi-transparent perovskite solar cells // Discov. Appl. Sci. 2025, v. 7, p. 1348.

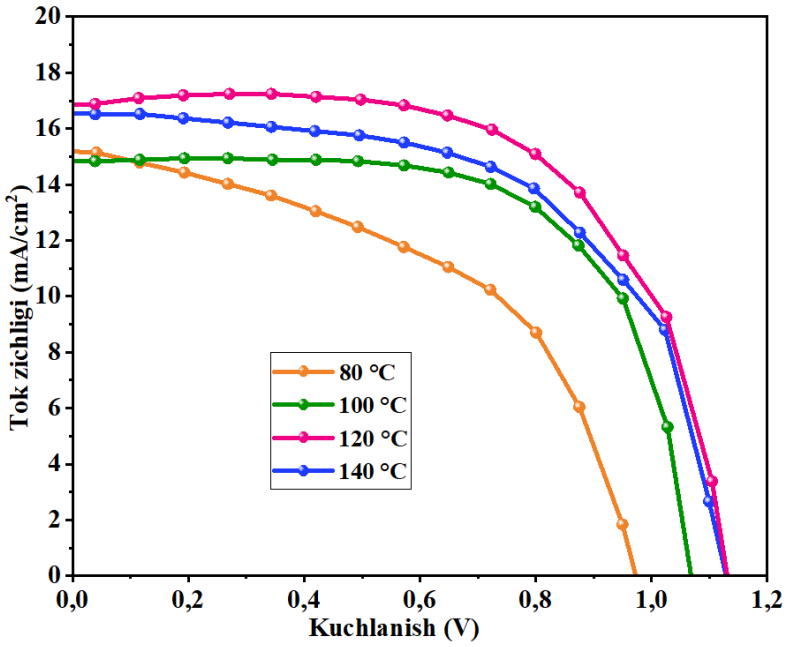
4. P. Das, B. Pal, J. Datta, M. Das, S. Sil, P.P. Ray Improved charge transport properties of graphene incorporated tin oxide based Schottky diode over pure one. J Phys Chem Solids 2021, 148, p. 109706

5. P. Parchinsky, A.A. Nasirov, S.U. Yuldashev, et al. Effect of Graphene Oxide on the Structural and Optical Properties of FTO Layers Obtained by Spray Pyrolysis. Photonics 2026, v. 13, p. 800.

$CsPbI_2Br$ ASOSIDAGI PEROVSKIT QUYOSH ELEMENTLARINING FOTOVOLTAIK PARAMETRLARIGA QIZDIRISH HARORATINING TA’SIRI

[1]Otaqulova Nilufar Farxod qizi, [2]Nurumbetova Lobar Rimbayevna
[1]U.A. Arifov nomidagi Ion plazma va Lazer texnologiyalari instituti,
[2]Toshkent davlat transport universiteti,
Email: nilufarotaqulova98@gmail.com

To‘liq noorganik $CsPbI_2Br$ perovskit quyosh element (PQE) lari yuqori termal va fazaviy barqarorligi sababli keng tadqiq qilinmoqda. Ushbu ishda $CsPbI_2Br$ perovskit faol qatlamlarini yotqizish jarayonida 0,5 mg/ml miqdorda polyimid (PI) sirt passivatsiyasi qo‘llanildi hamda faol qatlamlar 80, 100, 120 va 140 °C haroratlarda qizdirildi. Tayyorlash jarayoni havoda, xona haroratida amalga oshirilganligi uning sanoatga mosligini oshiradi. Eng optimal holat 120 °C haroratda qizdirilgan faol qatlamlarda kuzatildi.



1-rasm. Turli haroratlarda qizdirilgan $CsPbI_2Br$ PQElarning J-V egri chiziqlari

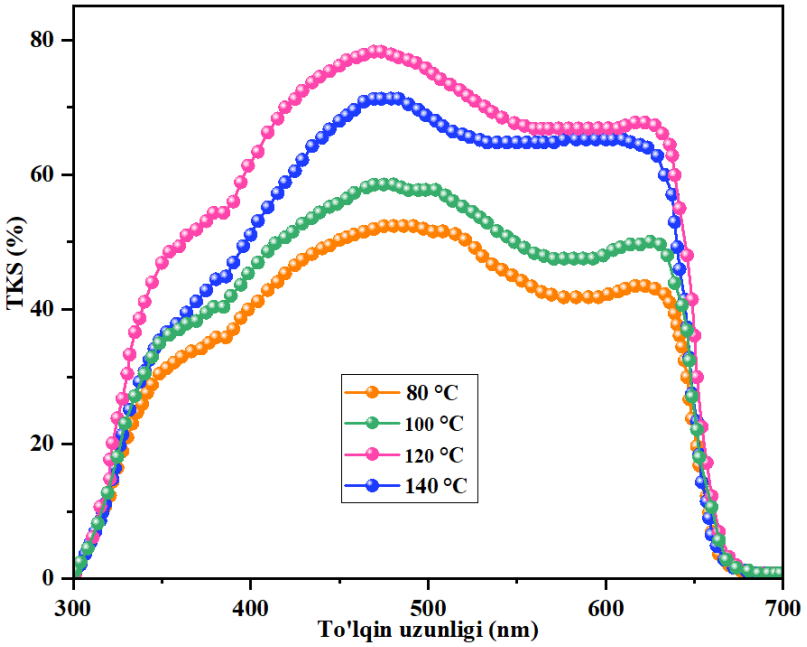
1-rasmda $CsPbI_2Br$ PQElarning J–V egri chiziqlari ko‘rsatilgan va asosiy fotovoltaik parametrlar (V_{OC}, J_{SC}, FF va EO’S) jadvalda keltirilgan. Birinchi holda, ya’ni 80 °C haroratda qizdirilgan faol qatlamlarda fotovoltaik parametrlar nisbatan past ko‘rsatkichlarga ega bo‘ldi: V_{OC} 1.08 V, J_{SC} 16.1 mA/cm^2, FF 60.2 %, EO’S esa 10.47

% ni tashkil etdi. Qizdirish harorati 100 °C ga oshirilganda esa J_{SC} 16,6 mA/cm^2 va EO’S ning 11,52 % ga oshganligini ko’rishimiz mumkin, FF ham 62.5 % ga ko’tarilgan. 0.5% konsentratsiyada esa eng yuqori samaradorlikka erishildi va V_{OC} 1.15 V, J_{SC} 17.2 mA·cm^{-2}, FF 66.5 % EO’S 13.15% ga ko’tarildi.

Jadval. Turli haroratlarda qizdirilgan $CsPbI_2Br$ PQElarning fotovoltaik parametrlari

				EO’S (%)
		1	2	1
			5	1
				1
				1

Haroratni 140 °C ga oshirganimizda esa ko‘rsatkichlar biroz pasaydi, V_{OC} 1.13 V, J_{SC} 16.8 mA·cm^{-2} va EO’S 12.14 % ga kamaydi. Bu haroratning optimaldan oshib ketishi faol qatlamda yangi nuqson markazlarini hosil qilib, rekombinatsiya jarayonlarini kuchaytirganini ko‘rsatadi.



2-rasm. Turli haroratlarda qizdirilgan $CsPbI_2Br$ PQElarning TKS spektrlari

2-rasmda turli haroratlarda qizdirib tayyorlangan $CsPbI_2Br$ PQElarning butun to‘lqin uzunliklari bo‘yicha tashqi kvant samaradorligi (TKS) spektrlari keltirilgan.

Barcha namunalarning TKS egri chiziqlari 300 dan 700 nm gacha bo'lgan keng to'lqin uzunligi diapazonini qamrab oladi, bu esa $CsPbI_2Br$ perovskit faol qatlamlarning keng spektrli yorug‘likni samarali yutishini ko‘rsatadi. Grafikdan ko’rish mumkinki, 80 °C da qizdirilgan faol qatlamlar eng past TKS qiymatlariga ega bo‘lib, bu past kristallik darajasi, yuqori nuqson zichligi va zaryad tashuvchilarning kuchli nurlanishsiz rekombinatsiyasi bilan izohlanadi. Natijada, hosil bo‘lgan elektron–kovak juftlarining sezilarli qismi tashqi zanjirga chiqmasdan yo‘qoladi. Umuman olganda, eng yaxshi natija PI passivatsiyasi qo’llangan va 120 °C haroratda qizdirilgan $CsPbI_2Br$ PQElarning TKS spektrlarida kuzatildi. Ushbu sharoitda maksimal fototok hosil bo‘lishi ta’minlandi va buning natijasida yuqori toki zichligiga (Jsc) hamda EO’S ning oshishiga erishildi.

Xulosa qilib aytganda, $CsPbI_2Br$ faol qatlamlarni optimal (120 °C) haroratda qizdirish hamda PI passivatsiyasini qo’llash, PQElarning fotovoltaik parametrlarini sezilarli darajada yaxshiladi. Natijada $CsPbI_2Br$ asosidagi PQElarning ochiq zanjir kuchlanishi 1.15 V, tok zichligi 17.2 mA/cm^2, to‘ldirish faktori 66.5 % va EO’S 13.15 % ga oshdi. Shunday qilib, $CsPbI_2Br$ faol qatlamlarida PI passivatsiyasini qo’llash hamda optimal haroratda qizdirish $CsPbI_2Br$ asosidagi PQElarning samaradorligi va barqarorligini oshirish uchun istiqbolli usul sifatida tavsiya etilishi mumkin.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Wang, D., et al., *Stability of perovskite solar cells.* Solar Energy Materials and Solar Cells, 2016. **147**: p. 255-275.
2. Zhang, Y., et al., *High efficiency (16.37%) of cesium bromide—passivated all-inorganic CsPbI2Br perovskite solar cells.* Solar RRL, 2019. **3**(11): p. 1900254.
3. Targhi, F.F., Y.S. Jalili, and F. Kanjouri, *MAPbI3 and FAPbI3 perovskites as solar cells: Case study on structural, electrical and optical properties.* Results in physics, 2018. **10**: p. 616-627.

POLARON MASS IN $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ CUPRATE: EFFECT OF THE 1/8 ANOMALY

Otajonov Sardorbek Mahmud ugli, Yavidov Bakhrom Yangibaevich, Saburova Gulnoza Gulumbaevna, Alibekova Shaxnoza Batirbaevna, Otajonov Asadbek Mahmud ugli
Nukus State Pedagogical Institute, Nukus, Uzbekistan
E-address: sardorbek.otajonov@ndpi.uzm

$La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (LSCO) is one of the most extensively studied hole-doped high-temperature superconductors. Its superconducting transition temperature T_c exhibits a characteristic dome-shaped dependence on the Sr concentration x. However, a local suppression of superconductivity occurs near $x = 1/8$, commonly known as the 1/8 anomaly. This feature has been associated with the development of competing charge and spin correlations in La-based cuprates [1,2]. In the present work, we investigate the influence of this anomaly on the polaron effective mass in LSCO within the bipolaron Bose–Einstein condensation (BEC) approach. In the bipolaron model, the superconducting transition temperature is determined by the carrier concentration and effective mass [3]:

$$T_{BEC} = \frac{3.31\hbar^2 n^{2/3}}{2k_B m_p} e^{-g^2}.$$

Assuming $T_c \cong T_{BEC}$, the three-dimensional polaron mass can be expressed as $m_p(x) = \frac{3.31\hbar^2 n_p^{2/3}(x)}{2k_B T_c(x)}$ where $n_p(x) = \frac{x}{2V_a(x)}$ is the bipolaron concentration and m_e is the free-electron mass. The in-plane polaron mass was calculated as $m_{p,ab}(x) = \frac{m_p(x)}{\gamma_m^{\frac{2}{3}}(x)}$, where the doping-dependent unit-cell volume $V_a(x)$ and mass anisotropy $\gamma_m(x)$ were taken from our previous LSCO calculations [4].

Without the 1/8 anomaly, T_c was described by the conventional empirical relation [5]: $T_c^{(0)}(x) = T_{c,max}[1 - 82.6(x - 0.16)^2]$.

To account for the anomalous suppression of superconductivity, a negative Gaussian contribution was introduced following the phenomenological description of the 1/8 anomaly in LSCO [6]:

$$T_c^{(1/8)}(x) = T_c^{(0)}(x) - \Delta T_c exp\left[-(\frac{x - x_a}{\Delta x})^2\right]$$

where $\Delta T_c = 5.5189\ K$ $x_a = 0.12297$ and $\Delta x = 0.01259$.

The calculations show that inclusion of the 1/8-region suppression of T_c produces a localized enhancement of both the three-dimensional and in-plane polaron masses. Near $x = 1/8$, however, a clear deviation appears.

At $x = 0.12$, the three-dimensional polaron mass increases from approximately $20.72m_e$ to $24.61m_e$, while the in-plane mass increases from approximately $1.87m_e$ to $2.23m_e$. At $x = 0.125$, the corresponding values are $20.56m_e$ and $24.40m_e$ for the three-dimensional mass and $1.95m_e$ and $2.31m_e$ for the in-plane mass.

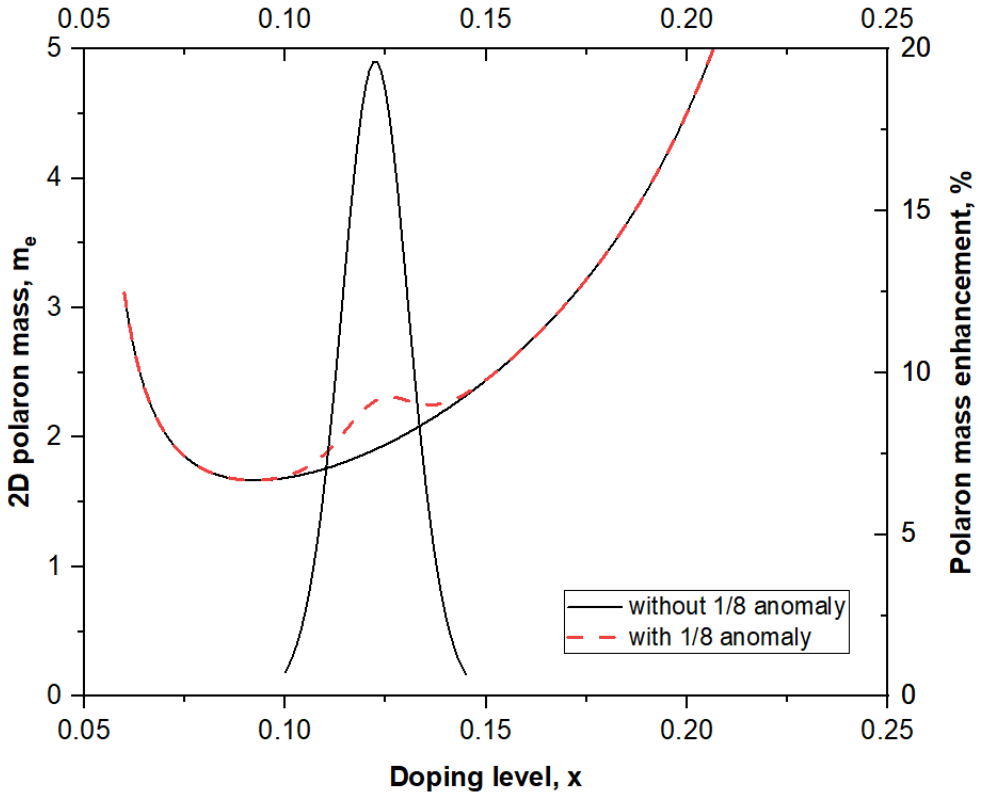


Fig. 1. Doping dependence of the polaron mass in LSCO calculated without and with the -region anomaly.

The relative enhancement was determined as: $\eta_m = \frac{m_p^{(\frac{1}{8})} - m_p^{(0)}}{m_p^{(0)}} \times 100\%$.

It reaches a maximum of approximately 19.5% near $x \simeq 0.123$ and rapidly decreases away from the anomalous region. The calculated mass enhancement

originates from the local reduction of T_c introduced into the BEC relation. Thus, incorporation of the 1/8 superconducting anomaly into the bipolaron BEC model predicts a localized enhancement of the polaron effective mass in LSCO. Experimental measurements of the effective carrier mass with sufficiently fine doping resolution around x=0.12-0.125 could provide a direct test of this prediction.

References

1. J. M. Tranquada et al., *Nature* **375**, 561 (1995).

2. J.-J. Wen et al., *Nature Communications* **10**, 3269 (2019).

3. A. S. Alexandrov, N. F. Mott, *Polarons and Bipolarons*. World Scientific, Singapore

4. (1995).

5. S. Otajonov, K. Tulepbergenov, B. Yavidov, *Physica B: Condensed Matter* **695**, 416589 (2024).

6. M. R. Presland et al., *Physica C* **176**, 95 (1991).

7. N. Cotón et al., *Superconductor Science and Technology* **26**, 075011 (2013).

DIRECT DETECTION OF NARCOTIC ANALGESICS IN BIOFLIDS USING THERMAL IONIZATION MASS SPECTROMETRY

Otaboyev Sh.Sh.[1], Usmanov D.T.[2]
[1]Urgench State University, Urgench, Uzbekistan
[2]Arifov Institute Ion-Plasma and Laser Technologies, Tashkent, Uzbekistan
Email: sherzodotaboyev2004@gmail.com

The highly sensitive detection of narcotics and illicit drugs is of great importance for public health. To date, many methods have been developed for this purpose, and mass spectrometric ionization methods are distinguished by their high sensitivity and reproducibility. However, these techniques are commonly coupled with chromatographic methods for the detection of illicit drugs in biofluids [1–2]. Therefore, the development of sensitive, direct, and rapid methods and methodologies is highly demanded to support the development of a healthy generation.

One promising method for the highly sensitive detection of trace amounts of illicit substances in biofluids is thermal (surface) ionization (TI). The TI method is simple, sensitive, and selective. The phenomenon of TI of organic compounds consists of the formation of positive polyatomic ions during the thermodesorption of particles from a solid surface and depends on the probability of isoenergetic electron exchange between the particles and the solid surface. Therefore, this method has high selectivity toward the ionization potential of substances. For example, if the ionization potentials of two compounds differ by 1 eV, their ionization efficiencies by TI can differ by up to 100,000 times. It has been demonstrated that molecules of nitrogen-containing bases, including a variety of physiologically active compounds, are more effectively ionized, with an ionization coefficient close to unity. Many narcotic substances are nitrogen-containing bases and can therefore be effectively ionized by the thermal ionization method [3].

In this research, the narcotic analgesic morphine, spiked into whole blood and drug-free urine, was investigated using the thermal ionization mass spectrometry (TI/MS) method. The TI/MS experiments were conducted using a magnetic-sector mass spectrometer, MI-1201B, upgraded for TI research. The molecular flows of the

studied compounds were directed toward the thermoemitter by means of a special quartz evaporator mounted in the ionization chamber. Drug-free urine and blood were collected from a healthy laboratory volunteer. A stock solution of pure morphine was prepared in pure ethanol at a concentration of 1 mg/mL. The stock morphine solution was then spiked into blank urine and further diluted with blank urine. Whole blood was diluted with ethanol to a concentration of 10%, and morphine was spiked into this solution. The special quartz evaporator was filled with 2–8 μL of the sample at the desired concentration, dried at room temperature in the open air, and then subjected to analysis.

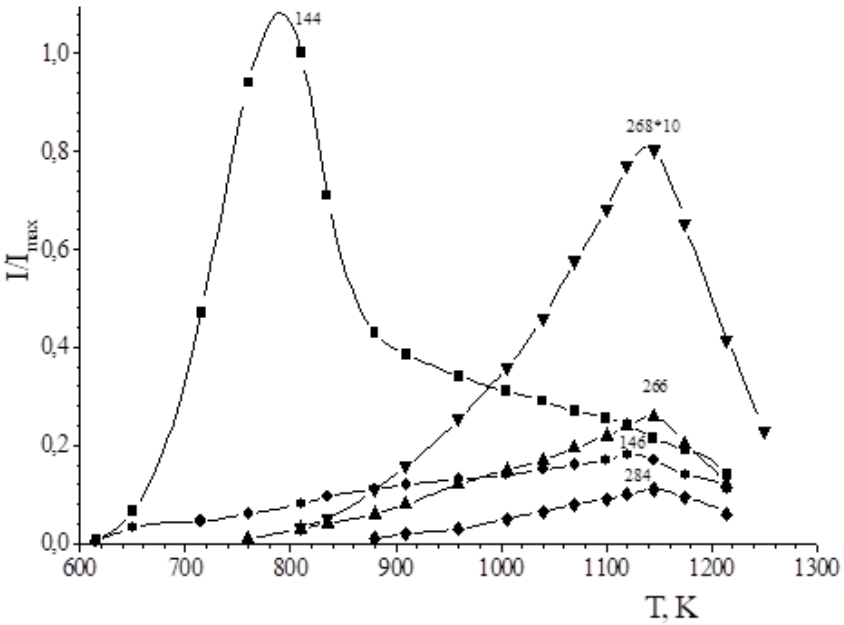


Figure 1. Dependence of ion currents on thermoemitter temperature.

Firstly, the mass spectrum and temperature dependence of the ion currents of the pure sample were obtained. The TI mass spectrum consists of deprotonated ions such as $[M-H]^+$, $[M-H-2nH]^+$, $[M-R]^+$, and $[M-R-2nH]^+$, corresponding to the products of chemical reactions in the adlayer, where M is the molecule, H is a hydrogen atom, and R is a radical. A doublet series at *m/z* 144 and 146 represents the base peaks in the mass spectrum of morphine. Figure 1 shows the temperature dependence of the ion currents. It can be seen from the graphs that the maximum intensity of the base peaks was reached at a relatively low thermoemitter temperature. The spiked samples were

then analyzed using the TI/MS method. Initially, blank biofluids, such as whole blood and urine, were analyzed. The temperatures of the thermoemitter and evaporator were set at 1000 K and 100°C, respectively. It was found that the TI mass spectrum of blank urine consists of several peaks, including background ions at *m/z* 58, 84, 86, and 133. Urea was not detected in the TI mass spectrum of blank urine, which can be explained by its molecular structure. Creatinine was detected with low intensity in the SI mass spectrum. Due to the high SI selectivity toward hydrocarbons, ketones, ethers, alcohols, and other solvents (10^{-8}), the mass spectrum of blank urine contains only a small number of lines. Whole blood is too viscous to be directly introduced into the evaporator cell; therefore, it was diluted with ethanol to a concentration of 10%. When the thermoemitter temperature was set at 1000 K, the mass spectrum of whole blood consisted of several series of ion lines at low *m/z* values, extending up to *m/z* 140. Several regularities were observed in these series, with mass differences of 14 Da and 12 Da. It was proposed that these series could be formed through the elimination of C–C and C–H bonds from hemoglobin. However, when the thermoemitter temperature was decreased to 800 K, the intensities of these lines sharply decreased by approximately one order of magnitude. As expected, in the spiked samples, the base peaks were observed at *m/z* 144 and 146. Calibration curves were obtained, and the limit of detection (LOD) of the method was determined.

It was found that such complex samples can be analyzed directly without any preliminary separation or extraction using this method, owing to its high selectivity and sensitivity.

References

[1]. X. Zhang, M. Chen, G. Cao, G. Hu. J Anal Meth Chem. 2013, 2, p. 151934

[2]. J-O. Svensson, M. Andersson, et.al. J Anal Toxicol. 2007, 31, 81-86.

[3]. Rasulev U.Kh. and Zandberg E.Ya. Prog. Surf. Sci, 1988, 28 (3/4), 181 – 412.

MACHINE-LEARNING-ASSISTED DFT SCREENING FOR THE DISCOVERY OF THERMODYNAMICALLY STABLE JANUS MXENES

J. OCHILOV[1], SH. KHASANOV[2], A. AZAMJONOV[1],
R. DILMURAT[3], U. KHALILOV[1,2,4]
[1]Arifov Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan
[2]Namangan State University, Namangan, Uzbekistan
[3]King Abdullah University of Science and Technology, Thuwal, Saudi Arabia
[4]Mosaic Research Group, University of Antwerp, Antwerp, Belgium
e-mail: juratochilov@gmail.com

Janus MXenes constitute a large and compositionally diverse class of two-dimensional materials whose asymmetric surface terminations can substantially modify their physicochemical properties relative to symmetric parent MXenes [1]. However, the identification of thermodynamically stable Janus MXenes remains computationally challenging because reliable stability assessment requires calculation of formation energies and energies above the convex hull for a large number of candidate structures. Exhaustive first-principles screening of such an extended chemical space is computationally expensive. Therefore, an efficient and reliable workflow that combines machine-learning-based pre-screening with density functional theory (DFT) validation is needed to accelerate the discovery of experimentally relevant stable Janus MXenes.

In this work, an integrated machine learning (ML)-DFT workflow was developed for the high-throughput screening of Janus MXenes. Structural and compositional data from the ICSD [2] and Materials Project [3] databases were processed using the Matminer library [4] to generate descriptors based on elemental properties, including atomic radius, electronegativity and valence-electron count. Eleven regression algorithms were trained and evaluated by cross-validation to predict the formation energy (E_f) and energy above the convex hull (E_{hull}) (Fig.1). Among these models, the Random Forest Regressor [5] exhibited the best predictive performance and was employed to screen a library of 220 Janus MXene structures generated through systematic substitution of transition metals, C/N cores, and O/halogen surface terminations, using a Zr_2 COT-derived Janus MXene structural prototype [6].

Candidates predicted to satisfy $E_f<0$ and $E_{hull}<0.2$ eV atom^{-1} [7] were selected for further analysis. A practically relevant subset was subjected to first-principles plane-wave DFT calculations using Quantum ESPRESSO.

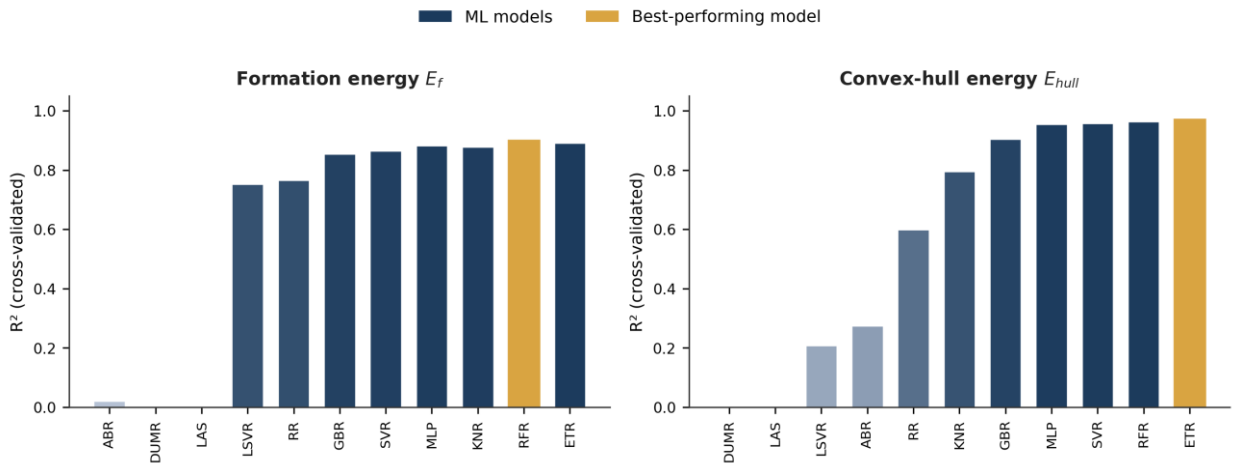


Figure 1. *Cross-validated R^2 of 11 machine-learning models for predicting the formation energy (E_f) and energy above the convex-hull (E_{hull}) of candidate Janus MXenes.*

Among the evaluated ML algorithms, the Random Forest Regressor achieved the highest cross-validated accuracy, with R^2=0.90 and *MAE*=0.17 eV atom^{-1} for E_f, and R^2=0.96 and *MAE*=0.04 eV atom^{-1} for E_{hull}. The ML screening identified 48 potentially stable Janus MXenes from the initial set of 220 structures. Ten candidates were prioritized for DFT validation by considering elemental abundance, material cost and the expected ambient stability of the surface terminations. In particular, candidates containing scarce elements such as Sc, Y, and Hf, as well as structures with less favorable I terminations, were deprioritized. The selected synthesis-relevant subset included Ti_2NOCl, Ta_2CClBr, and Mo_2CClBr. The DFT-calculated formation energies showed close agreement with the ML predictions, supporting the predictive reliability of the developed screening model and confirming the thermodynamic viability of the investigated candidate set (Fig.2).

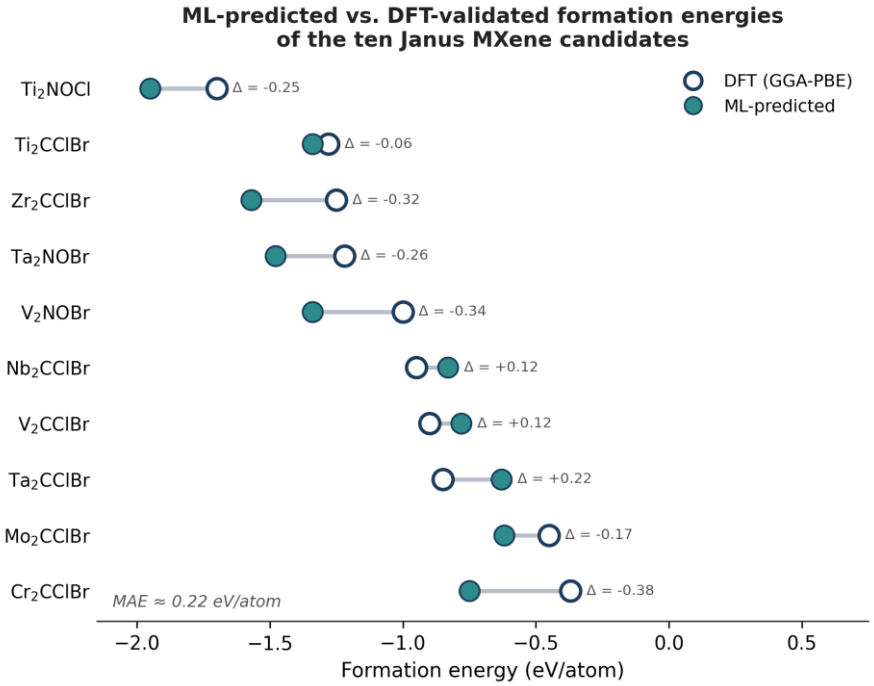


***Figure 2**. Comparison between ML-predicted and DFT-calculated formation energies for the ten Janus MXene candidates selected after ML screening. Filled symbols represent ML predictions, open symbols represent DFT results, and Δ denotes the ML−DFT deviation for each candidate.*

Overall, the proposed ML-DFT workflow provides a computationally efficient route for navigating the broad compositional space of Janus MXenes while retaining the reliability of first-principles validation. By reducing the number of structures requiring computationally intensive DFT calculations, the approach addresses the central challenge of efficiently identifying thermodynamically viable Janus MXenes. The validated set of ten candidates provides a focused and synthesis-relevant foundation for subsequent evaluation of electronic, catalytic, electrochemical and other application-specific properties.

REFERENCES

[1] D. Er, et al. ACS Applied Materials & Interfaces, 2014, 6 (14), 11173–11179.

[2] M. C. Sorkun, et al. Computational Materials, 2020, 6, 106.

[3] A. D. Sendek, et al. Energy & Environmental Science, 2017, 10, 306–320.

[4] L. Ward, et al. Computational Materials Science, 2018, 152, 60–69.

[5] L. Breiman. “Random Forests.” Machine Learning, 2001, 45, 5–32.

[6] Jisong Hu; et al. ACS Applied Nano Materials, 2024.

[7] E. Alibagheri, et al. Advanced Functional Materials, 2024, 34, 2402390.

OKSIDLANGAN VANADIY TERMOEMITTERIDA KORTIZON MOLEKULASINING SIRTIY IONLANISH XUSUSIYATLARI

O.I. Boliyev, D.T. Usmanov
O‘zR FA U.A.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti,
Toshkent, O‘zbekiston, e-mail: orifjonboliyev95@gmail.com

Organik molekulalarning qizdirilgan metall sirtlarida sirt ionlanishi ularning elektron tuzilishi, sirtning kimyoviy holati va termoemission xususiyatlari bilan chambarchas bog‘liq bo‘lgan murakkab fizik-kimyoviy jarayondir. Ayniqsa, metall sirtining oksidlanishi uning chiqish ish , adsorbsion xususiyatlari va molekula–sirt elektron almashinuvi sharoitlarini sezilarli darajada o‘zgartirishi mumkin. Shu sababli oksidlangan termoemitterlardan foydalanish organik birikmalarning ionlanishi va termik fragmentatsiyasini boshqarishning istiqbolli usullaridan biri hisoblanadi. Ushbu ishda kortizon molekulasining oksidlangan vanadiy termoemitteri sirtidagi sirt ionlanish xususiyatlari mass-spektrometriya usulda tadqiq qilindi.

Tadqiqotlar modifikatsiyalangan MI-1201B statik magnit mass-spektrometrida musbat ionlar rejimida amalga oshirildi[1,2]. Tajribalarda 99,8 % tozalikdagi, diametri 0,25 mm va uzunligi 16 mm bo‘lgan vanadiy simi termoemitter sifatida ishlatildi. Emitterning harorati VIMP-015M optik pirometri yordamida nazorat qilindi. Kortizonning molekulyar oqimi kvarts Knudsen yacheykasi yordamida hosil qilindi. Namuna xromatografik toza kortizondan tayyorlanib, analitik toza etanolda eritildi va Knudsen yacheykasiga kiritildi. Molekulyar oqim hosil qilish jarayonida yacheyka harorati nazorat qilindi.Vanadiy emitteri tajribalardan oldin yuqori vakuum sharoitida qisqa muddatli termik aktivatsiyadan o‘tkazildi. Bunda emitter harorati silliq ravishda taxminan 1600 K gacha oshirilib, ushlab turish bosqichisiz sekin pasaytirildi. Mazkur ishlov sirtga adsorbsiyalangan gazlar va uchuvchan aralashmalarni desorbsiyalash hamda emitterning boshlang‘ich termoemission holatini barqarorlashtirish uchun qo‘llanildi. Oksidlangan vanadiy sirtini hosil qilish uchun emitter atmosfera havosida qizdirildi.

Metall va oksidlangan vanadiy termoemitterlarida olingan SI mass-spektrlarning dastlabki qiyosiy tahlili emitter sirtining kimyoviy holati kortizonning ionlanish va fragmentatsiya jarayonlariga sezilarli ta’sir ko‘rsatishini ko‘rsatdi. Oksidlangan vanadiy sirtida kortizonga tegishli molekulyar va fragment ionlar keng massa diapazonida qayd etildi. Spektrda m/z 360 va 361 sohalaridagi molekulyar ionlarga mos signallar bilan bir qatorda m/z 248 ionining yuqori intensivligi kuzatildi. Shuningdek, yuqori, o‘rta va quyi massali fragment ionlarining mavjudligi kortizonning oksidlangan sirt bilan o‘zaro ta’siri jarayonida turli fragmentatsiya kanallari yuzaga kelishini ko‘rsatdi.

Olingan dastlabki natijalar vanadiy sirtining oksidlanishi kortizonning sirtiy ionlanish xususiyatlarini sezilarli darajada o‘zgartirishini ko‘rsatadi. Ayniqsa, oksidlangan vanadiy sirtida molekulyar ionlarning saqlanib qolishi bilan bir qatorda intensiv fragment ionlarining hosil bo‘lishi sirtning elektron-kimyoviy holati ion hosil bo‘lish va fragmentatsiya kanallarini shakllantirishda muhim rol o‘ynashini ko‘rsatadi. Mazkur ishning muhim jihati shundaki, vanadiyning oksidlangan sirtidan termoemitter sifatida foydalanib, kortizon molekulasining sirt ionlanishi ilk bor tadqiq qilinmoqda. Bu natijalar oksidlangan vanadiy sirtlarining organik molekulalar SI-MS tadqiqotlaridagi imkoniyatlarini baholash uchun yangi eksperimental asos yaratadi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Rasulev UK, Khasanov U, Islamov TK, et al. Surface ionization mass spectrometry. Analysis of post-mortems for fatal poisoning by chlorpromazine. *Z Zagadnien Nauk Sadowych* 2000; 43: 231-236.
2. Akhunov SD, Kasimov BS, Ashurov KB, Usmanov DT. Development of a surface ionization mass spectrometry method for the highly sensitive and highly selective analysis of morphine in biofluid. *Journal of Analytical Chemistry* 2021 Dec; 76.13: 1499-504.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ АНИЗОТРОПИИ СНОСА ЭНЕРГИИ В КРИСТАЛЛАХ GaAs и $PbMoO_4$

Ф.Р. Ахмеджанов, С.З. Мирзаев, Г.С. Нуждов
Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз
e-mail: nujdov_g@mail.ru

При распространении акустических волн в анизотропных средах направление потока энергии упругой волны, как правило, отклоняется от направления волнового вектора $\boldsymbol{q}$. Данное явление известно, как энергетический снос волны и приводит к паразитному сносу ультразвукового пучка с апертуры пьезопреобразователя и затуханию сигнала.

Целью настоящей работы является сравнительный трехмерный анализ пространственного распределения угла отклонения потока энергии для кристаллов, принадлежащих к разным кристаллографическим системам: кубическому арсениду галлия (GaAs, класс симметрии $\bar{4}3m$) и тетрагональному молибдату свинца ($PbMoO_4$, класс симметрии $4/m$).

Расчет фазовых скоростей V и векторов поляризации $\boldsymbol{\mu}$ упругих волн проводился на основе решения системы уравнений Грина–Кристоффеля [1]:

$$(\Gamma'_{ik} - \rho V^2 \delta_{ik})\eta_k = 0, \quad (1)$$

где ρ — плотность кристалла, δ_{ik} — тензор Кронекера, а компоненты вещественной части тензора Кристоффеля определяются через действительные упругие константы c'_{ijkl} и направляющие косинусы волнового вектора κ_j и κ_l как:

$$\Gamma'_{ik} = \kappa_j \kappa_l c'_{ijkl} \quad (2)$$

Компоненты вектора упругого потока энергии A_i рассчитывались с использованием тензора модулей упругости:

$$A_i = c'_{ijkl}\, \eta_j\, \eta_l\, \kappa_k \quad (3)$$

Угол углового отклонения потока энергии ξ (угол сноса) от направления волнового вектора определялся на основе рассчитанных пространственных проекций вектора энергии:

$$\xi = arccos \frac{A\, q}{|A||q|} \quad (4)$$

Для построения полных замкнутых 3D-поверхностей анизотропии рассчитывался радиус-вектор поверхности в сферической системе координат, модуль которого равен значению угла сноса: $R(\theta, \varphi) = \xi$ [2]. Расчет производился методом меридиональной развертки сферы с шагом сканирования 1º.

На основе разработанных алгоритмов были получены трехмерные индикатрисы пространственного распределения угла сноса энергии упругих волн для квазипродольной акустической моды. Расчеты выполнены с использованием экспериментальных модулей упругости кристаллов, взятых из справочной литературы [3].

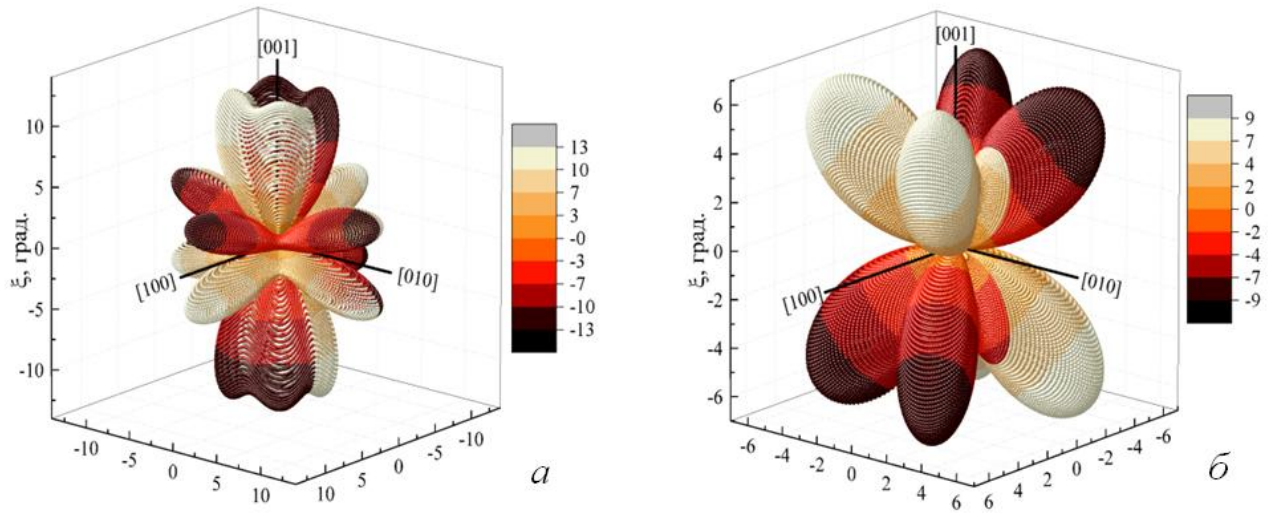


Рис. 1. Пространственное распределение угла отклонения потока энергии $\xi(\theta, \varphi)$ для квазипродольной моды в кристаллах GaAs (а) и $PbMoO_4$(б).

Арсенид галлия (GaAs): Обладает кубической симметрией, упругие свойства которой описываются тремя независимыми компонентами: C_{11}, C_{12} и C_{44}. В результате трехмерная индикатриса упругого сноса демонстрирует высокую степень макросимметрии. Максимальные значения углов сноса локализованы строго в межосевых плоскостях типа {110}, достигая экстремумов в направлениях, близких к <111>, где величина угла сноса ξ составляет 13.2º**.** Направления кристаллографических осей <100>, <110> и <111> являются осями

«чистых мод», вдоль которых поток энергии строго коллинеарен волновому вектору ($\xi = 0$).

Молибдат свинца ($PbMoO_4$): Относится к тетрагональной сингонии (планарный класс). Снижение симметрии кристаллической решетки ведет к появлению дополнительных упругих модулей, среди которых ключевое значение имеет компонента C_{16} = 13.6 ГПа [3]. Присутствие ненулевого модуля C_{16} кардинально меняет топологию трехмерной поверхности отклонения энергии. Максимальное значение угла сноса для квазипродольной моды в этом кристалле ограничивается величиной 9º.

Сравнительный анализ показал, что понижение кристаллографической симметрии среды приводит к качественной трансформации пространственной картины упругого сноса волн. Тетрагональная асимметрия, обусловленная компонентой C_{16}, вызывает угловой разворот акустических осей. Полученные трехмерные карты распределения углов сноса имеют непосредственное прикладное значение для точного выбора рабочих срезов упругих элементов с целью минимизации энергетических потерь в устройствах акустооптики и лазерной техники.

Список использованной литературы:

1) Royer D., Dieulesaint E. // Elastic Waves in Solids II. Springer, 2000.

2) Akhmedzhanov F. R., Tugalov F. B. // Physics of Wave Phenomena. 2026. V. 34. № 1. P. 70.

3) Акустические кристаллы: Справочник / под ред. М. П. Шаскольской. М.: Наука, 1982.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ТЕОРИИ ГРАФОВ И ОБЩЕЙ ТОПОЛОГИИ В АНАЛИЗЕ ПРОЦЕССОВ СИНТЕЗА И ФАЗОВОЙ СТАБИЛЬНОСТИ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ И ДРУГИХ СЛОЖНЫХ МАТЕРИАЛОВ.

Нуждов Г.С.[1], Оксенгендлер Б.Л.[2], Салихов А.[3], Тураева Н.Н.[2,4], Максимов С.Е.[1], Сулейманов С.Х.[2]

[1]Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз

[2]Институт Материаловедения АН РУз.

[3]University of Nottingham, Nottingham, UK

[4]Webster University, USA, Saint Louis.

oksengendlerbl@yandex.ru

Концепция сложности (Complexity), сформировавшая основу анализа самоорганизации, в начале XXI века нашла применение в радиационной физике твердого тела. Радиация переводит материал в открытое неравновесное состояние, а его отклик определяется топологическими, фрактальными и нелокальными характеристиками структуры: размерностью, хиральностью и индексами связности.

Этот подход применим к высокоэнтропийным материалам (ВЭМ) [1], синтез которых является многофакторной оптимизацией атомного упорядочения пяти и более элементов. Конфигурационная энтропия смешения ΔS_{mix} конкурирует с энтальпией ΔH_{mix}, поэтому классических термодинамических критериев недостаточно для прогнозирования однофазности или распада системы.

Для преодоления комбинаторной сложности описания фазовой стабильности предложен аппарат, объединяющий теорию графов и вычислительную топологию [2].

Фазообразование при термическом или радиационном синтезе ВЭМ представляется динамическим взвешенным графом $G(t) = (V, E)$. Вершины V соответствуют локальным атомным позициям и характеризуются вектором признаков, определяющим тип атома. Рёбра E описывают межатомные корреляции, а их вес $\omega(v_i, v_j)$ зависит от расстояния, энергии эффективного взаимодействия и локальной эффективной температуры T_{loc}:

$$\omega(v_i, v_j, t) = \exp\left(-\frac{\varepsilon_{ij}(r)}{k_B T_{loc}(t)}\right),$$

где $\varepsilon_{ij}(r)$ — потенциал межатомного взаимодействия, k_B — постоянная Больцмана.

При радиационно-термической активации и диффузии топология G(t) эволюционирует. Спектр матрицы Лапласа графа позволяет оценивать химический ближний порядок. Устойчивые сильносвязанные подграфы могут свидетельствовать о зарождении интерметаллических фаз, нарушающих энтропийную стабилизацию.

Для оценки завершенности синтеза и фазовой однородности строится фильтрация симплициальных комплексов K(G) по радиусу координационных сфер r. Топологическая целостность характеризуется числами Бетти β_k.

1) $\beta_0 \rightarrow 1$. Переход от множества компонент ($\beta_0 \gg 1$) к $\beta_0 = 1$ фиксирует формирование единого перколяционного кластера однофазного твердого раствора.

2) β_1 и β_2. β_1 характеризует дислокационные петли и искажения решетки от атомно-размерного несоответствия. β_2 описывает замкнутые нанопустоты и поры, возникающие вследствие эффекта Киркендалла при взаимной диффузии.

Устойчивость фазы к распаду оценивается через эйлерову характеристику $\chi(K)$ как конфигурационный топологический инвариант. Минимизация флуктуаций $\chi(K)$ по ансамблю конфигураций при фиксированной температуре предлагается как критерий завершения фазообразования стабильного твердого раствора.

При анализе иерархических систем важен принцип целостности Л. фон Берталанфи. В традиционном подходе «красок» хроматическое число графа связано с конфигурацией минимума свободной энергии и термодинамической стабильностью. Однако этот аппарат ориентирован на закрытые системы в равновесии, где отсутствуют потоки вещества и информации. Для открытых систем, обменивающихся с внешней средой массой, теплом и энтропией, в том

числе при радиационном воздействии, статическое хроматическое число недостаточно показательно.

В открытых системах устойчивое состояние представляет собой стационарное неравновесие (равновесие по потокам). В термодинамике И. Пригожина оно связывается с минимумом скорости производства энтропии:

$$\frac{d(dS)}{dt} \to 0$$

Хроматическое число необходимо адаптировать к динамическим потоковым моделям. Вместо статического инварианта раскраски целесообразно использовать спектр оператора Лапласа графа, описывающий диффузию и перенос, динамическое хроматическое число $\chi(G,t)$ и дифференциальную графовую энтропию. Это связывает топологическую структуру «красок» со скоростью диссипации энергии и устойчивостью системы в неравновесных потоках.

Заключение

Графовые дескрипторы и персистентные гомологии позволяют перевести представления о «хаотичности» и «энтропийной стабилизации» многокомпонентных систем в измеримые топологические инварианты. Подход дает возможность прогнозировать критические точки фазового расслоения при моделировании кинетики синтеза и сокращать эмпирический поиск оптимальных режимов обработки ВЭМ. Кроме того такой подход позволяет связать хроматическое число с размерностью системы (двумерность – с 4-мя “красками”, трехмерность – с 5-ю “красками”).

Литературные источники

1) George E. P., Raabe D., Ritchie R. O. *High-entropy alloys* // Nature Reviews Materials. – 2019. – Vol. 4. – No. 8. – P. 515-534.

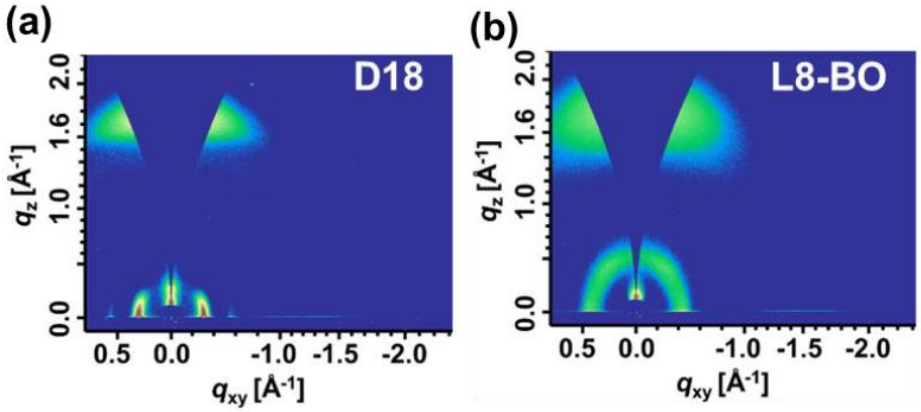
2) Edelsbrunner H., Harer J. *Computational Topology: An Introduction.* – American Mathematical Society, 2010.

POLIMER FAOL QATLAMLARNING MORFOLOGIK XOSSALARINI GIWAX USULIDA TADQIQ QILISH

[1]Nurumbbetova Lobar, [2]Reyimbayeva Sanobar
[1]Toshkent davlat transport universiteti
[2]Mirzo Ulug’bek nomidagi O’zbekiston Milliy universiteti

GIWAXS o‘lchashlari polimer qatlamlar uchun juda muhim bo‘lib, materialning ichki tuzilmasi va tartibini atom yoki molekulyar darajada o‘rganish imkonini beradi. Polimerlar amorf yoki qisman kristall tuzilishga ega bo‘lishi mumkin. GIWAXS texnikasi materiallarning fazalarini, kristallik darajasini, o‘lchamini va orientatsiyasini aniqlashga yordam beradi. Bu polimerlarning funksional xususiyatlarini (masalan, elektr o‘tkazuvchanlik yoki elastiklik) tushunishda yordam beradi. Shu sababli, GIWAXS polimerlarning fizikaviy va kimyoviy xususiyatlarini tushunishda va ularni yangi texnologiyalar, jumladan, quyosh panellari va elektron qurilmalar uchun optimallashtirishda muhim ahamiyatga ega[1].

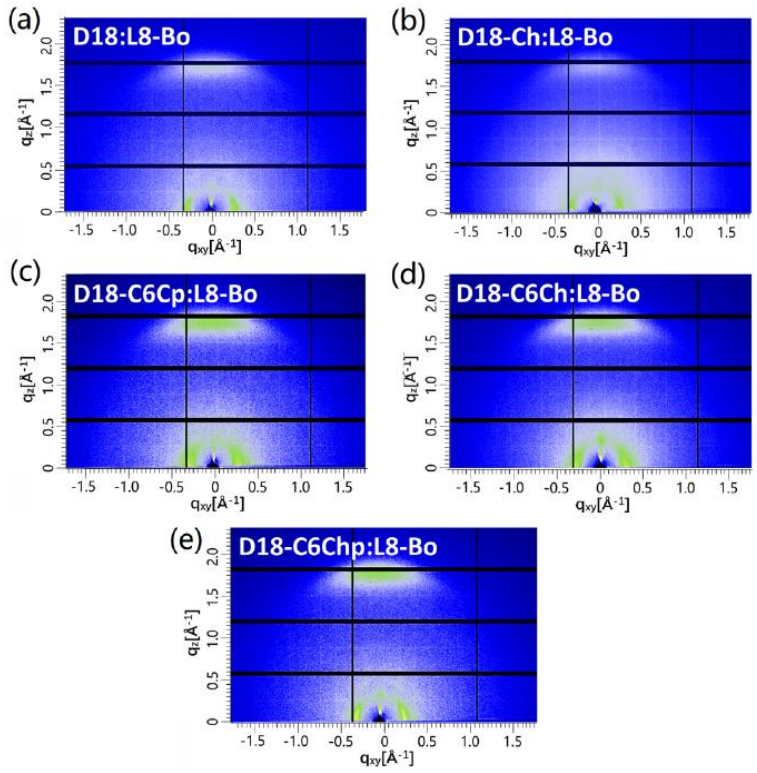
1-rasmda D18 va L8-Bo polimer qatlamlarning GIWAX tasvirlari berilgan bo‘lib, bu GIWAXS tasvirlarda ikki xil polimer D18 va L8-Bo polimer qatlamlarning struturaviy holati ko‘rsatilgan. Har ikki tasvirdagi yuqori qismda q_z yo‘nalishida (vertikal) tarqalgan signal kristall fazani holatini ko‘rsatadi.



1-rasm. D18 va L8-Bo qatlamlarning GIWAX tasvirlari

D18 va L8-Bo materiallarida yuqori q_z yo‘nalishda hosil bo‘lgan keskin dog‘lar kristallik mavjudligini bildiradi. Bu esa molekulalarning muayyan yo‘nalishda tartiblanganligini ko‘rsatadi. L8-Bo akseptor polimerida esa markaziy qismdagi doira

shaklidagi diffraktsiya halqalari materialning ko‘proq izotropik (har tomonga bir xil) tartiblanganligini anglatadi, D18 donor polimerida esa bu halqalar kamroq ifodalangan[2].



2-rasm. Bir xil sharoitda olingan D18 va D18 asosidagi polimer donorlar va L8-Bo akseptor aralashmasi asosida tayyorlagan faol qatlmlarning GIWAX tasvirlari

Tasvirdagi dog‘larning qanchalik keskin va yaqin tartiblanganligiga qarab molekulalarning qavatlar ichida qanday yo‘nalganligini bilib olish mumkin. L8-Bo polimer qatlam tasvirida q_{xy} (gorizontal) yo‘nalishda ko‘proq tartiblanganlik ko‘rinadi, bu esa molekulalar yuzaga nisbatan yanada tartibli joylashganligini ko‘rsatadi. Lekin D18 donor polimerida esa dog‘larning qanchalik keskin va yaqin tartiblanganligiga qarasak molekulalar yuzaga nisbatan yanada tartibli joylashishi kamroq ekanini ko‘rsatmoda. Shu sababli, past kristallik daraja va amorf fazaning yuqori bo‘lishi PQElarning optimal bo‘lishiga ta‘sir ko‘rsatishi va elektr o‘tkazuvchanlik yoki optik samaradorlik talab qilinadigan qurilmalarda ma‘lum bir cheklovlarga ega bo‘lishi mumkin. Bu ikkita donor va akseptor qatlamlarning agregatsiya holatlarini baholashdan keyin D18:L8-Bo, D18-C6Cp:L8-Bo, D18-C6Ch:L8-Bo va D18-

C6Chp:L8-Bo faol qatlamlarning kristallanish sifati GIWAXS o‘lchovi bilan o‘rganildi. 2a-e-rasmlarda ko‘rsatilganidek, barcha optimallashtirilgan faol qatlamlar q_z yo‘nalishidagi π-π diffraksiya piki va q_{xy} yo‘nalishida sezilarli qatlamli diffraksiya cho‘qqisi bilan o‘xshash stacking yuz yo‘nalishini ko‘rsatdi. Olingan GIWAX tasvirlaridan D18:L8-Bo faol qatlami tasvirining o‘rtasida egilgan chiziq va markaziy qismida diffuziya zichlashganini ko‘rsatadi. Bu faol qatlam strukturasining yaxshi tartiblaganligini yoki kristallanishning yaxshi shakllanganligini ko‘rsatadi. Ushbu tasvirdagi manzarada vertikal va gorizontal yo‘nalishlarda ba‘zi o‘zgarishlar kuzatilgan.

D18-Ch:L8-Bo faol qatlam orqali olingan tasvir biroz sustroq va kengroq diffuziya manzarasini ko‘rsatmoqda. Bu yerda tartibsizroq struktura mavjud bo‘lib, ehtimol, kristallanishning pastligi yoki amorf fazaning ulushi yuqoriligi bilan bog‘liq. D18-C6Cp:L8-Bo faol qatlam tasviri D18:L8-Bo faol qatlami tasviriga o‘xshash, lekin bu yerda ham biroz yumshoqroq va diffraksiya chizig‘i qisman kuchsizroq shakllangan. Bu faol qatlam namunasida ham ba‘zi kristallanish mavjud bo‘lib, ammo struktura D18:L8-Bo faol qatlam namunasiga qaraganda kamroq tartiblangan strukturaga ega. D18-C6Ch:L8-Bo faol qatlam tasvirida diffuziya manzarasining markaziy qismida aniqroq va vertikal chiziqlar bor. Bu kristallanishning yuqori ekanligini va strukturaaviy tartiblanishning yaxshiligini ko‘rsatadi. D18-C6Chp:L8-Bo faol qatlam tasvirida diffuziya manzarasi yanada kengroq, bu esa strukturaning nisbatan tartibsiz ekanligidan dalolat beradi va kristallanish darajasi pastroq ekanligi bilan izohlanadi.

Foydalanilgan adabiyotlar

[1] D. Yang, F.C. Löhrer, V. Körstgens, A. Schreiber, B. Cao, S. Bernstorff, P. Müller-Buschbaum, Advanced Science 7 (2020) 2001117.

[2] A. Mahmood, J.L. Wang, Solar RRL 4 (2020) 2000337.

КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ КЛАСТЕРОВ ЭТАНОЛА, ИЗОЛИРОВАННЫХ В АРГОНОВОЙ МАТРИЦЕ

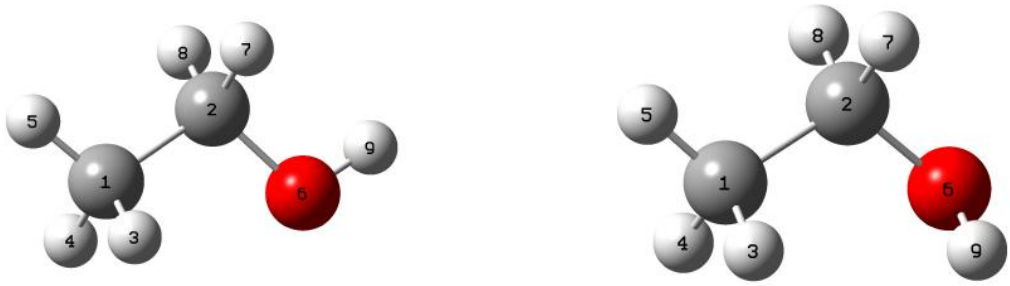
А.А. Некбоев[1], Б.Т. Куйлиев[1], И.Ю. Дорошенко[2]
[1]Каршинский государственный университет, Кучабог 17, 180119, г. Карши, Узбекистан
[2]Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, ул. Владимирская, 64/13, 01601, Киев, Украина
e-mail: bahromq@rambler.ru

Молекула этанола (молекулярная формула C_2H_5OH) может существовать в различных конформациях, обусловленных вращением атомов вокруг одиночных связей. В случае транс-конформера двугранный угол CCOH равен 180°, что означает, что группа –OH расположена напротив этильной группы. В гош-конформере группа –OH смещена относительно этильной группы, и двугранный угол CCOH составлят 60°.

Конформационный состав этанола, изолированного в низкотемпературной аргоновой матрице, с использованием методов ИК спектроскопии и квантово-химических расчётов. При постепенном повышении температуры матрицы от 10 до 40 K изолированные молекулы этанола образуют водородно-связанные кластеры, состоящие из нескольких молекул [1].

Расчёт структурных и спектральных характеристик конформеров этанола был выполнен с использованием программного пакета Gaussian 09 [2]. Применялся метод функционала плотности (DFT) в приближении B3LYP с базисным набором cc-pVTZ. Оптимизация геометрии была проведена для различных конформаций мономеров (g, t), димеров (tt, tg, gt, gg), тримеров (ttt, ttg, tgg, ggg) и тетрамеров (tttt, gggg, tgtg, ttgg). После оптимизации геометрии кластеров были рассчитаны полная энергия кластера и энергия диссоциации на одну водородную связь.

На рис. 1 показаны оптимизированные геометрические структуры транс- (а) и гош- (б) конформеров этанола.



а) транс (t) б) гош (g)

Рис. 1. Оптимизированная структура конформеров этанола

Рассчитанная частота валентного колебания связи O–H для транс-конформера составляет 3670 см$^{-1}$, тогда как для гош-конформера — 3682 см$^{-1}$. Это указывает на то, что частота валентного колебания O–H выше у гош-конформера по сравнению с транс-конформером.

Зарегистрированные ИК-спектры этанола, изолированного в аргоновой матрице при температурах 20 - 40 K, в спектральной области валентных колебаний свободной O–H группы (3630–3680 см$^{-1}$) представлены на рис. 2.

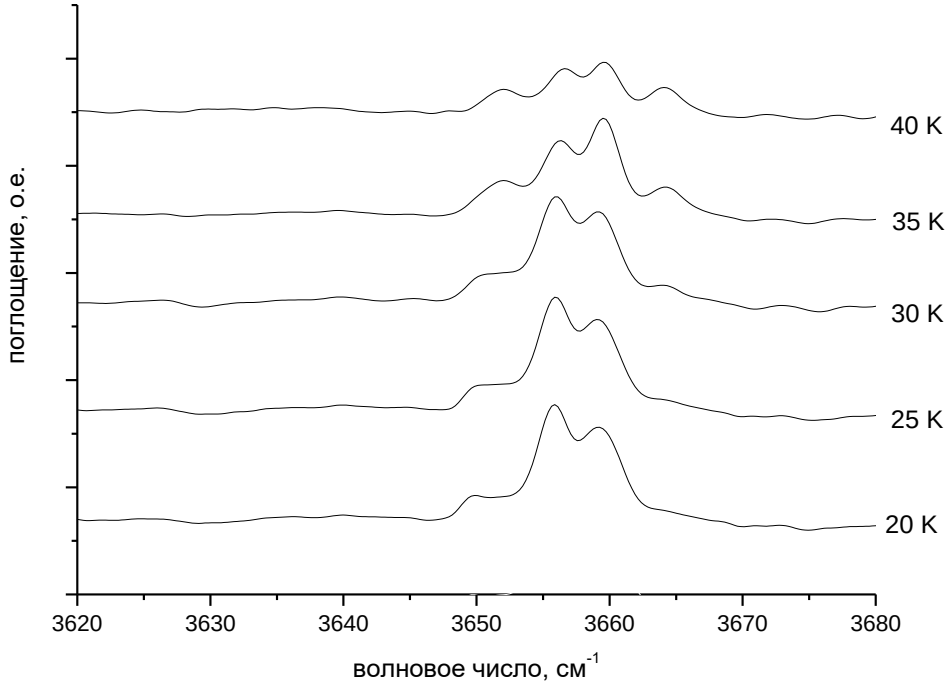


Рис. 2. Спектры ИК поглощение этанола в аргоновой матрице при температурах 20 – 40 K в спектральном интервале валентных колебаний свободной O–H группы

Как видно, при 20 K интенсивность полосы транс-конформера выше, что означает, что транс-конформеры присутствуют в образце в большем количестве. При нагревании матрицы наблюдается перераспределение интенсивности между полосами, и уже при 35 K полоса гош-конформера становится более интенсивной. Это может указывать на конформационный переход из транс- в гош-форму. Однако, поскольку энергия гош-конформера выше и транс-конформер является более энергетически выгодной структурой, такое перераспределение может быть связано с тем, что транс-конформеры при повышении температуры матрицы более активно участвуют в образовании кластеров, что приводит к уменьшению их относительного количества. При 40 K интенсивность обеих полос начинает уменьшаться, поскольку при этой температуре мономеры этанола объединяются в кластеры, состоящие из двух и более молекул [3].

Полученные результаты углубляют представления о конформационном поведении и динамике кластерообразования этанола в криогенном окружении, способствуя более глубокому пониманию молекулярных взаимодействий в низкотемпературных матрицах.

ЛИТЕРАТУРА

1. V. Pogorelov, I. Doroshenko, P. Uvdal, V. Balevicius, and V. Sablinskas. Temperature-controlled kinetics of the growth and relaxation of alcohol clusters in an argon matrix, Molecular Physics, **108** (17), 2165-2170 (2010).
2. F. Van der Broek, H.K. Nienhuys, and H.J. Bakker, Vibrational dynamics of the CO stretch vibration in alcohols, J. Chem. Phys. **114**(7), 3182-3186 (2001).
3. G. A. Pitsevich, I. Yu. Doroshenko, V. E. Pogorelov, V. Shablinskas, and V. Balevicius. Structure and vibrational spectra of gauche- and trans-conformers of ethanol: Nonempirical anharmonic calculations and FTIR spectra in argon matrices, Low Temperature Physics, 39(4), 389–400 (2013).

STUDY OF THE KINETIC CHARACTERISTICS OF HALOPERIDOL MOLECULES ON AN OXIDIZED TUNGSTEN SURFACE USING THE VOLTAGE MODULATION METHOD

M.M. Nazarov, Sh.Dj. Akhunov, Sh.M. Akhmedov, D.T. Usmanov
Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies named after U.A. Arifov, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan,
e-mail: maxmanazarnazarov1996@gmail.com

Methods of mass spectrometric analysis are of significant importance in the fields of forensic medicine and forensic toxicology, particularly for compounds containing tertiary amines [1]. Haloperidol contains a tertiary amine in the piperidine ring and is 4-[4-(4-chlorophenyl)-4-hydroxy-1-piperidinyl]-1-(4-fluorophenyl)-1-butanone. It is one of the antipsychotic drugs widely used in the treatment of schizophrenia and other psychiatric disorders, as well as one of the psychoactive and neuroleptic drugs most frequently encountered in clinical and forensic toxicology practice [2,3]. All antipsychotic drugs can cause adverse effects and, in cases of overdose, may result in severe poisoning. Therefore, determining the physicochemical parameters of this organic compound and conducting an in-depth analysis of it are of significant importance.

The advantage of the surface ionization method over other methods is that, under vacuum conditions, the composition of ions desorbed from the thermoemitter surface during the desorption of organic molecules is known in advance. Depending on the thermoemitter temperature, the variation in ion current exhibits a characteristic pattern specific to each type of ion, which is effective for analysis and increases the reliability of the results. At the same time, only a small amount of the substance under study is sufficient for the research and no additional extraction procedure is required, which increases the efficiency of the SI method for analytical investigations.

The compound under study has been well investigated under stationary conditions using the surface ionization method, and its mass spectrum and ionization channels have been determined [4]. The study of the kinetic parameters of the compound under non-stationary conditions made it possible to investigate the nature

of this compound in greater depth. The kinetic parameters of haloperidol were determined by voltage modulation using the surface ionization mass spectrometry method.

The experiments were carried out using an MI-1201 static mass spectrometer equipped with a magnetic analyzer. The studies were conducted under high-vacuum conditions of 1–3 × 10^{-6} Pa, using an oxidized tungsten thermoemitter as the ion source. The thermoemitter was in the form of a ribbon with dimensions of 1 mm in width, 16 mm in length, and 0.02 mm in thickness. In the voltage modulation experiments, a non-stationary process was induced by applying, via a pulse generator, a potential higher than the thermoemitter potential to the ion-extracting lenses.

As a result of the study, it was experimentally established that the fragment ions with *m/z* 334 and *m/z* 338 are readily ionizable ions. Initially, plots of the dependence of ion current intensity on the thermoemitter temperature were constructed under stationary conditions. Analysis of these plots confirmed that the ions under study are readily ionizable. In the subsequent stages, a non-stationary process was induced, and ion current relaxation was observed for both ions. Temperature-dependence plots were constructed, and the rate constants K^+, K^0 and the lifetimes of the ions were determined from the $[\ln\Delta I(t) - ln\Delta I_{max}] = f(t)$ dependence plot. By analyzing the initial and maximum ion current intensities, the ionization coefficient β was determined from the $\beta = \frac{i_{max}-i_0}{i_{max}}$ dependence. The activation energies E^+ and E^0 were determined from the $\lg[\beta(T)K_i(T)] = f(\frac{5040}{T})$ and $\lg[(1-\beta(T))K_i(T)] = f(\frac{5040}{T})$ dependence plots, respectively, and the ionization potentials of the ions were estimated using the $\beta = \frac{1}{1+\frac{Q_0}{Q_+}\exp[\frac{V-\varphi}{kT}]}$ dependence equation.

References

[1]. Ishii, A., Kaneko, R., Hirata, Y., & Hamajima, M. (2008). Application of New Mass Spectrometric Techniques to Legal Medicine. *Journal-mass spectrometry society of japan*, *56*(3), 131. https://doi.org/10.5702/massspec.56.131

[2]. Favretto, D., Stocchero, G., Nalesso, A., Vogliardi, S., Boscolo-Berto, R., Montisci, M., & Ferrara, S. D. (2013). Monitoring haloperidol exposure in body fluids and hair of children by liquid chromatography–high-resolution mass spectrometry. *Therapeutic drug monitoring*, *35*(4), 493-501. *DOI:* 10.1097/FTD.0b013e3182892d11

[3]. Khelfi, A., Azzouz, M., Abtroun, R., Reggabi, M., & Alamir, B. (2018). Determination of Chlorpromazine, Haloperidol, Levomepromazine, Olanzapine, Risperidone, and Sulpiride in Human Plasma by Liquid Chromatography/Tandem Mass Spectrometry (LC-MS/MS). *International journal of analytical chemistry*, *2018*(1), 5807218. https://doi.org/10.1155/2018/5807218Digital Object Identifier (DOI)

[4]. Khasanov, U., Iskhakova, S. S., Radjabov, A. S., Akhmedov, S. M., Toirov, S. T., Kholmatov, A. S., ... & Usmanov, D. T. (2025). Mass Spectrometric Study of Heterogeneous Reactions of Transformations of Molecules of Butyrophenone Derivatives During Adsorption on a Hot Surface of Tungsten Oxide. *Journal of Mass Spectrometry*, *60*(12), e5193. https://doi.org/10.1002/jms.5193Digital Object Identifier (DOI)

P3HT VA P3HTT POLIMER ARALASHMALARINING OPTIK, MIKROSTRUKTURAVIY VA MORFOLOGIK XUSUSIYATLARIGA TARKIBIY NISBATLARNING TA’SIRI

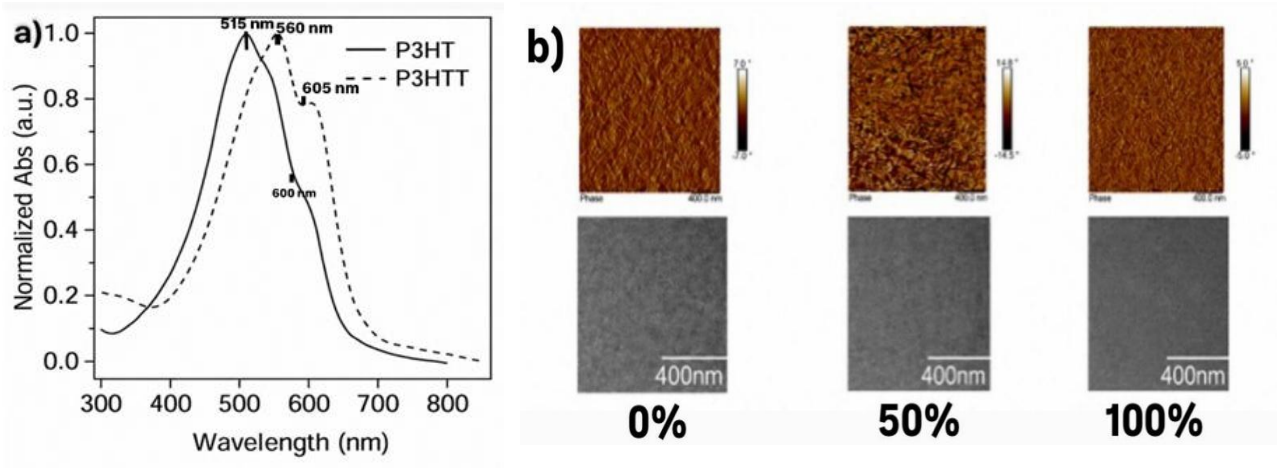
N.O. Dilmurodova[1], S.A. Abdukarimova[1], V.O. Kuvondikov[1,2]
[11]Mirzo Ulug’bek nomidagi O’zbekiston Milliy Universtiteti
[2]U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti
e-mail: dilmurodovanazirabonu@gmail.com

So‘nggi yillarda qayta tiklanuvchi energiya manbalarini rivojlantirish va egiluvchan optoelektronika qurilmalarini yaratishda konjugatsiyalangan yarimo‘tkazgichli polimerlar asosidagi fotoelektrik elementlar hamda fotodetektorlar alohida o‘rin egallab kelmoqda [1]. Ushbu yo‘nalishda P3HT (poli3-geksiltiofen) polimeri o‘zining yuqori teshik (kovak) o‘tkazuvchanligi, kimyoviy barqarorligi va eritma asosida qayta ishlash texnologiyalariga mosligi tufayli “kovak tashuvchi material” sifatida eng keng tadqiq qilingan obyektlardan biri hisoblanadi. Biroq, P3HT zanjirlarining o‘zaro kuchli π-π ta’sirlashuvi tufayli eritma va yupqa plyonka holatida boshqarib bo‘lmaydigan darajada yirik supramolekulyar agregatlarni hosil qilishi asosiy muammolardan biridir [2]. Shunga qaramay, so‘nggi ilmiy izlanishlarda polimer zanjirlariga molekulyar darajada kimyoviy modifikatsiya kiritish va ikki komponentli polimer aralashmalarini yaratish eng samarali strategiya sifatida e’tirof etilmoqda. Xususan, P3HT zanjiridagi alkil guruhiga oltingugurt atomini biriktirish orqali olingan P3HTT (poli3-geksiltiotiofen) analogi polimer zanjirining moslashuvchanligini va optik yutilish spektrini o‘zgartirish imkonini beradi. P3HTT ning amorf va kuchliroq interkonjugatsiyalangan tabiati P3HT matriksidagi kristallsizlanish hamda agregatsiya o‘lchamlarini tartibga solishda muhim rol o‘ynaydi. Tadqiqotda P3HT va uning alkiltio-o‘rinbosarli analogi P3HTT aralashmasi orqali polimer zanjirlarining eritmadan qattiq plyonkagacha bo‘lgan supramolekulyar agregatsiyasini boshqarish usuli taklif etildi.

Ushbu ishda P3HT va P3HTT gomopolimerlari hamda ularning aralashmalari asosidagi faol qatlam yupqa plyonkalarining optik va morfologik parametrlari tadqiq qilindi. Faol qatlamlarni olish uchun dastlab P3HT va P3HTT polimerlari har xil

massaviy nisbatlarda (1:0, 1:1 va 0:1) olinib, xlorbenzol (CB) erituvchisida eritildi. Eritmalar tozalangan tagliklar sirtiga “spin-coating” usulida qoplandi, yupqa plyonkalar olindi. Olingan faol qatlam plyonka namunalarining optik yutilish, sirt morfologiyasi va fazalar ajralishi Atom-kuch mikroskopiyasi (AFM) va O‘tkazuvchi elektron mikroskopiyasi (TEM) orqali tahlil qilindi. Olingan natijalar 1-rasmda ko’rsatilgan. Yupqa plyonkalarning optik xossalari Shimadzu UV-1280 spektrofotometri yordamida o‘rganildi (1a-rasm). Politiofenlar spektrida molekulalararo interkonjugatsiya va molekula ichidagi tranzitlarni aks ettiruvchi 0-1 va 0-0 vibronik o‘tish piklari kuzatildi. Sof P3HTning optik yutilishining maksimum piklari 515 nm va 600 nm to‘lqin uzunliklarida hosil bo’ldi. Sof P3HTT uchun esa bu maksimum piklari 560 nm va 605 nm ga siljib, sezilarli qizil siljish va 0-0 vibronik o‘tish piki intensivligi ortdi. Bu holat P3HTT yon zanjiridagi oltingugurt atomining (-S-C_6H_{13}) yuqori elektron donorlik xususiyati evaziga π-π konyugatsiyalangan zanjirda elektronlar delokalisatsiyasining ortishi hamda zanjirlararo ta’sirlashuvning kuchayishi bilan izohlanadi. Aralashma plyonkalarning sirt topografiyasi va ichki hajmiy faza mikrostrukturasi AFM va TEM usullarida tadqiq qilindi (1b-rasm). AFM tasvirlari tahlili shuni ko‘rsatdiki, P3HTT ning kiritilishi va uning ulushi oshib borishi bilan plyonka sirtining o‘rtacha kvadratik g‘adir-budurligi kamayib, sirt silliqligi ortadi. Sirt silliqligining ortishi faol qatlam va metall elektrod (Ag) o‘rtasidagi kontakt qarshiligini kamaytirishga hamda zaryad yig‘ish samaradorligini oshirishga xizmat qiladi. TEM tasvirlarida P3HT (0%) tola-simon strukturaga ega bo‘lsa, P3HTT miqdori oshib borishi bilan (50% va 100%) faza ajralishi jarayoni susaygani va hajm bo‘ylab bir jinsli (gomogen) amorf-kristall morfologiya shakllangani kuzatildi. P3HTT ning yuqori konsentratsiyasida hosil bo‘ladigan yirik agregatlar plyonkaning o‘sish jarayonida kristallanishni ma’lum darajada tormozlaydi.

P3HT va P3HTT politiofen plyonkalarining optik-morfologik tahlili shuni ko‘rsatdiki, P3HTT komponentining kiritilishi plyonkalardagi agregatsiya va sirt mikrotuzilishini samarali boshqarish imkonini beradi.



1-rasm. Faol qatlam yupqa plyonkalarining (a) optik yutilish spektrlari hamda (b) AFM va TEM morfologik tahlil natijalari.

P3HTT ning optik spektrdagi siljishi hamda sirt g‘adir-budurligini kamaytirishi zaryad tashish jarayonlarini optimallashtiradi. Tajriba natijalariga ko‘ra, 50% P3HTT bo‘lgan aralashma (P3HT:P3HTT = 1:1) va sof P3HTT (100%) plyonkalari sirt g‘adir-budurligini kamaytirish va hajmiy gomogenlikni ta’minlash orqali morfologiyani yaxshilaydi, bu esa arzon hamda yuqori samarali gibrid fotodetektorlar yaratishda yangi imkoniyatlar ochadi.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. Liu C. C., Shao L., Chen S. H., Hu Z. W., Cai H. J., Huang F. Recent progress in π-conjugated polymers for organic photovoltaics: Solar cells and photodetectors // Progress in Polymer Science. – 2023. – Vol. 143. – P. 101711. DOI: 10.1016/j.progpolymsci.2023.101711.
2. Clark J., Silva J.-C., Friend R. H., Spano F. C. Role of intermolecular coupling in the photophysics of disordered organic semiconductors: Aggregate emission in regioregular poly(3-hexylthiophene) // Physical Review Letters. – 2007. – Vol. 98. – P. 206406. DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.206406.

ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ ДОБАВКИ НА СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ СИСТЕМЫ Ti_6Al_4 V–Re ПРИ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ ЛЕГИРОВАНИИ

Р.Х. Ашуров, Э.Э. Мухторов, И.Х. Худойкулов, Т.К. Турдалиев
Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз

Механическое легирование представляет собой неравновесный процесс формирования пересыщенных твёрдых растворов в конденсированных средах. При обработке пластичных металлических систем высокая энергия удара, необходимая для растворения легирующего элемента, одновременно вызывает холодную сварку частиц, что снижает выход продукта. Возникает компромисс между энергонапряжённостью процесса и выходом материала.

В настоящей работе на примере системы Ti6Al4V–Re исследовалось влияние технологической добавки (парафина) на структурные изменения в α-Ti при высокоэнергетической механической обработке. Основное внимание уделено количественным параметрам: размеру областей когерентного рассеяния (ОКР) и изменению параметров кристаллической решётки.

Смесь порошков Ti64 и Re (4:1 по массе) обрабатывалась в планетарной мельнице Retsch PM400 в среде аргона. Исследованы три режима: 200 об/мин (4 ч), 250 об/мин (8 ч) и 350 об/мин с добавкой 2 мас. % парафина (4 ч). Структурное состояние определяли методом рентгенофазового анализа. Размер ОКР α-Ti рассчитывали по уравнению Шеррера для рефлекса (101).

Режим	ПАВ	Выход, %	D (101), нм
200 об/мин, 4 ч	—	80	11.8
250 об/мин, 8 ч	—	80	6.8
350 об/мин, 4 ч	парафин 2%	90	5.1

Увеличение времени обработки при щадящем режиме приводит к уменьшению ОКР с 11.8 до 6.8 нм. Введение парафина при максимальной

энергонапряжённости позволяет достичь наименьшего размера ОКР (5.1 нм) при максимальном выходе (90 %).

На дифрактограммах фиксируется дополнительный рефлекс в области 2θ ≈ 42.8–43.0°, не относящийся к α-Ti, Re или TiO_2. Его интенсивность возрастает с энергонапряжённостью и коррелирует с уменьшением ОКР. Рефлекс связывается с прогрессирующим внедрением Re в решётку α-Ti.

Полученные данные указывают, что технологическая добавка влияет не только на механику процесса (снижение холодной сварки), но и на кинетику структурных изменений. Совместное уменьшение ОКР и изменение параметров решётки свидетельствует о том, что легирование развивается через увеличение площади межзёренных границ.

Переход к высокоэнергетическому режиму с ПАВ снимает ограничение по времени обработки и позволяет достичь более глубокой структурной перестройки матрицы, чем при эквивалентном времени щадящего помола.

Показано, что введение 2 мас. % парафина при механическом легировании Ti6Al4V–Re переводит процесс в область совместного улучшения выхода (90 %) и структурной проработки (ОКР 5.1 нм). Результаты демонстрируют возможность управления формированием твёрдого раствора в конденсированной среде за счёт технологических добавок, регулирующих баланс между деформацией и холодной сваркой.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ЛИТЕРАТУР

1. Suryanarayana, C. Mechanical alloying and milling / C. Suryanarayana // Progress in Materials Science. — 2001. — Vol. 46, № 1–2. — P. 1–184.

2. Lu, L. Influence of process control agent on mechanical alloying behavior / L. Lu, Y.F. Zhang // Journal of Alloys and Compounds. — 1999. — Vol. 290, № 1–2. — P. 270–278.

3. Thijs, L. A study of the microstructural evolution during selective laser melting of Ti–6Al–4V / L. Thijs // Acta Materialia. — 2010. — Vol. 58, № 9. — P. 3303–3312.

$CsPbI_2Br$ PEROVSKIT PLYONKALARINING OPTIK BARQARORLIGIGA $GdCl_3$ QO’SHILISHINING TA’SIRI

[1]Tajibaev I.I., [2]Zaxidova M.A., [2]Mengliboyev D.E., [1]Boynazarov I.R.
[1]U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti
[2]Mirzo Ulug’bek nomidagi O’zbekiston Milliy Universiteti
E-mail: doniyormengliboyev@gmail.com

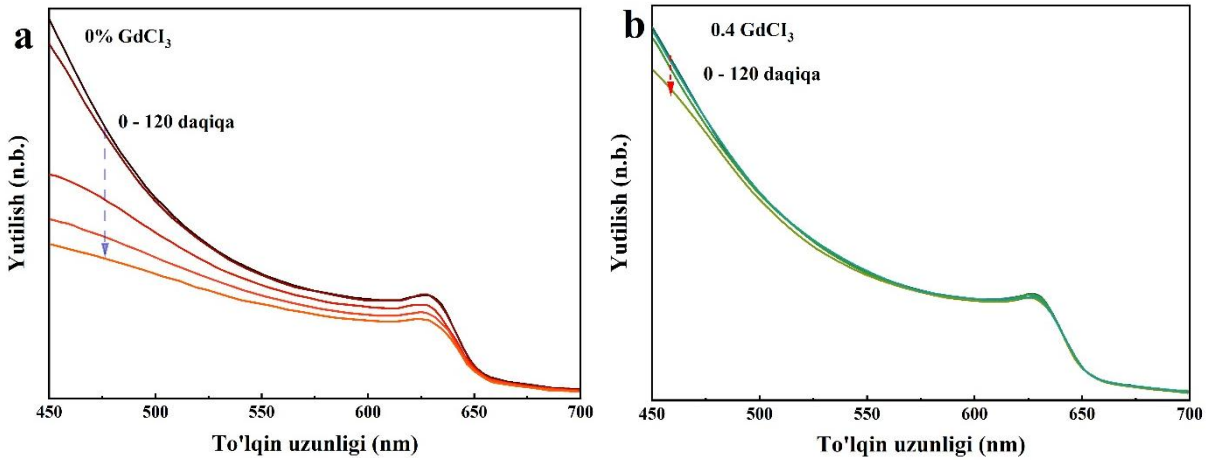
Annotatsiya. Ushbu ishda $GdCl_3$ qo‘shilgan va qo‘shilmagan $CsPbI_2Br$ noorganik perovskit plyonkalarining namlik ta’sirida optik yutilish xususiyatlarining o‘zgarishi UV-Vis spektroskopiya usuli yordamida o‘rganildi. 0% va 0,4% $GdCl_3$ qo’shilgan plyonkalarning yutilish spektrlari 60% nisbiy namlikda 120 daqiqa davomida kuzatildi. $GdCl_3$ qo‘shilishi perovskitning optik yutilish spektri degradatsiyasini sekinlashtirib, plyonkaning namlikka chidamliligini oshiradi. Nazorat plyonkasi 120 daqiqada yutilish intensivligini sezilarli yo‘qotsa, $GdCl_3$ qo’shilgan plyonka boshlang‘ich spektral xususiyatlarini saqlab qoladi. Bu Gd^{3+} ionlarining Pb^{2+} o‘rnini geterovalent almashtirishi natijasida tolerantlik faktorining yaxshilanishi va kristall panjaraning barqarorlashuvi bilan optik jihatdan izohlanadi.

Kalit so‘zlar: $CsPbI_2Br$, noorganik perovskit, gadoliniy, UV-Vis spektroskopiya, optik yutilish, fazaviy barqarorlik.

Kirish. $CsPbI_2Br$ perovskiti 1,91 eV optimal tarmoqli oralig‘i bilan tandem quyosh elementlari uchun istiqbolli material hisoblanadi. Biroq yuqori namlikda fotoaktiv α-fazadan perovskit bo‘lmagan δ-fazaga optik xususiyatlarning keskin o‘zgarishi bilan kechadigan o‘tish sodir bo‘ladi [1]. Pb^{2+} o‘rniga kichikroq Gd^{3+} ionini (r=94 pm) kiritish tolerantlik faktorini oshirib, α-fazani barqarorlashtiradi [2-3]. Ushbu tadqiqot maqsadi $GdCl_3$ qo’shilgan $CsPbI_2Br$ plyonkalarining namlik ta’siridagi optik yutilish spektrlari evolyutsiyasini UV-Vis spektroskopiya orqali tahlil qilishdan iborat.

Material va metodika. $CsPbI_2Br$ prekursori 1,0 M DMF:DMSO (4:1) da tayyorlandi. 0,4% molyar $GdCl_3$ qo‘shilgan va qo‘shilmagan namunalar spin-coating usulida FTO/TiO_2 tagliklar ustiga yotqizildi (1000 rpm 15 s, 4000 rpm 45 s), hamda 160°C da 10 daqiqa mobaynida termik ishlov berildi. Yutilish spektrlari Shimadzu UV-

1280 da 450–700 nm oralig‘ida, 60% nisbiy namlik va 25°C da 0, 30, 60, 90, 120 daqiqalarda o‘lchandi.



1-rasm. $CsPbI_2Br$ perovskit plyonkalarining 60% nisbiy namlikda 120 daqiqa davomida vaqt bo‘yicha UV-Vis yutilish spektrlari: (a) 0% $GdCl_3$ (nazorat), (b) 0,4% $GdCl_3$ qo’shilgan.

Natijalar va muhokama. $GdCl_3$ qo‘shilmagan plyonkada 120 daqiqa davomida yutilish spektri intensivligi keskin pasayadi. 450 nm da 98% dan 95% gacha, 500 nm da 85% dan 82% gacha, 550 nm da 75% dan 72% gacha, 600 nm da 65% dan 63% gacha, 650 nm da 55% dan 52% gacha kamayadi. Qisqa to‘lqinlarda (450–550 nm) pasayish 5–7% ni tashkil etib, uzun to‘lqin uzunliklarga (650–700 nm, 3–4%) nisbatan kattaroqdir. Plyonka rangi jigarrangdan sarg‘ishga o‘zgaradi, bu α-fazali perovskitning δ-fazaga optik o‘tishi va PbI_2, I_2 kabi yutilish spektrini o‘zgartiruvchi ikkilamchi fazalar hosil bo‘lishi bilan bog‘liq. Spektr shaklining o‘zgarishi materialning elektron tuzilishi o'zgarganligini, ya'ni taqiqlangan soha kengligi va optik o'tishlarning buzilganligini ko‘rsatadi [3].

$GdCl_3$ qo’shilgan plyonkada yutilish spektri ancha barqaror: 450 nm da 98% dan 95% ga (3% pasayish), 500 nm da 60% dan 55% ga (5% pasayish), 550 nm da 45% dan 40% ga, 600 nm da 35% dan 30% ga, 650 nm da 20% dan 15% ga, 700 nm da 5% dan 2% ga tushadi. Pasayish tezligi nazoratnikiga nisbatan sekinroq bo‘lib, plyonka 120 daqiqa davomida qoramtir-jigarrang rangini va spektr shaklini saqlab qoladi. Bu Gd^{3+} ionlarining Pb^{2+} o‘rnini egallashi natijasida tolerantlik faktorining 0,81 dan 0,88 ga

oshishi hisobiga α-fazaning barqarorlashuvi bilan izohlanadi. Barqarorlashgan struktura namlik ta’sirida optik o'tishlarni (Pb 6p → I 5p) buzilishdan saqlaydi, shuningdek, yuzaning gidrofobligi oshishi (namlanish burchagi 40° dan 63° ga ortishi) tufayli suv molekulalarining perovskit yuzasiga adsorbsiyasi va ichki diffuziyasi kamayadi. Natijada optik yutilish spektri uzoqroq vaqt davomida o'zgarishsiz qoladi.

Xulosa. $GdCl_3$ qo’shilishi $CsPbI_2Br$ perovskitining namlik ta’siridagi optik yutilish spektri barqarorligini sezilarli oshiradi, bu α-fazani stabilizatsiya qilib, degradatsiyani sekinlashtiradi. UV-Vis spektroskopiya perovskit plyonkalarining fazaviy barqarorligini tezkor va informatsion baholashning samarali optik usuli ekanligini tasdiqlaydi.

Foydalanilgan adabiyotlar ro’yxati

1. Mali S.S., Patil J.V., Hong C.K. Efficient and Stable All-Inorganic Niobium-Incorporated $CsPbI_2Br$-Based Perovskite Solar Cells. ACS Applied Materials and Interfaces, 2020, 12(24), 27176-27183
2. Liu Y., Li J. Phase transition mechanism of $CsPbI_2Br$ perovskite films induced by moisture. Journal of Alloys and Compounds, 2024
3. Zhu Y., et al. In Situ Microscopic Observation of Humidity-Induced Degradation in All-Inorganic Perovskite Films. ACS Applied Energy Materials, 2026

HYDROPHILICITY OF FUNCTIONALIZED C_{84} FULLERENE

Sh. Matnazarova[1], M. Isakjanova[1], U. Khalilov[1], M. Yusupov[1,2]
[1] Arifov Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, AS Uz
[2] Institute of Fundamental and Applied Research, NRU TIIAME
E-mail: shakhrizoda.matnazarova@outlook.com

Due to their unique physicochemical properties, fullerenes are widely recognized as promising nanomaterials for biomedical applications [1]. However, their poor water solubility and intrinsic hydrophobicity remain major limitations for practical use [2]. Therefore, developing effective approaches to enhance the hydrophilicity of fullerenes has become an important research direction.

In this study, the possibility of improving the hydrophilicity of fullerenes through functionalization of the carbon cage was investigated using reactive molecular dynamics (MD) simulations based on the density functional tight binding (DFTB) method [3]. Model systems of C_{84} fullerene functionalized with carboxyl (-COOH) groups were constructed (Fig. 1), and their hydrophilic properties were evaluated by calculating the dipole moment and the Gibbs free energy of solvation.

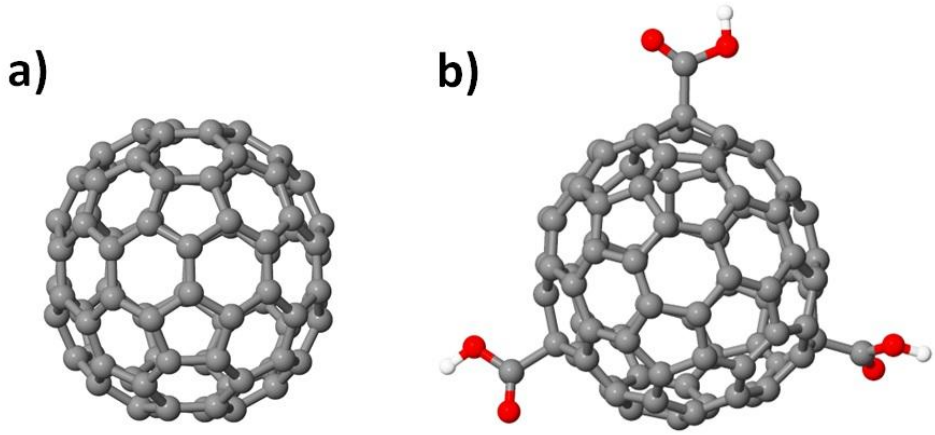


Figure 1. Pristine C_{84} fullerene (a) and its functionalized form with three carboxyl (-COOH) radicals (b). Carbon, oxygen and hydrogen atoms are shown in gray, red and white, respectively.

The simulation results showed that pristine C_{84} fullerene exhibits dipole moment and Gibbs free energy of solvation values close to zero, confirming its hydrophobic nature. Instead, functionalization with COOH groups alters the electronic charge distribution of fullerene, leading to an increase in the dipole moment and stronger

interactions with water molecules. Moreover, the simulations revealed that increasing the number of COOH groups results in a further enhancement of these parameters, indicating improved hydrophilicity of the fullerene. These findings highlight the potential of functionalized fullerenes for future biomedical and pharmaceutical applications.

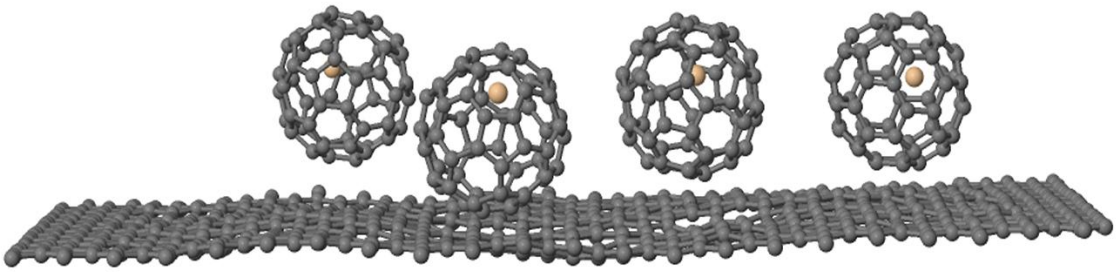
References

1. N. Slepičková Kasálková et al., *Nanomaterials* 11(9) (2021) 2368.
2. C. M. Sayes et al., *Nano Letters* 7(8) (2007) 2399.
3. M. Elstner et al., *Physical Review B* 58 (1998) 7260.

$Si@C_{60}$ ENDOFULLERENLARINING GRAFEN SIRTIDAGI ADSORBSION KONFIGURATSIYALARI VA ENERGETIK BARQARORLIGINI MOLEKULYAR DINAMIKA USULIDA MODELLASHTIRISH

Muazzamxon Mamadaliyeva[1], Ishmumin Yadgarov[1], Dilfuza Husanova[1], Umedjon Khalilov[1,2]
O'zR FA U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, O‘zbekistan
[2]MOSAIC ilmiy-tadqiqot guruhi, Antverpen universiteti, Antverpen, Belgiya
E-mail: muazzamxon.zubayr@gmail.com

Grafen–fulleren asosidagi nanogibrid tizimlar o‘ziga xos elektron, mexanik va adsorbsion xususiyatlari tufayli funksional nanomateriallar sifatida katta ilmiy qiziqish uyg‘otmoqda [1, 2]. Xususan, endohedral fullerenlarning grafen sirtidagi adsorbsiyasi molekulalararo va molekula-sirt o‘zaro ta’sirlarining tabiati, adsorbsion konfiguratsiyalarning barqarorligi hamda nanogibrid tizimning strukturaviy evolyutsiyasini aniqlashda muhim ahamiyat kasb etadi. Biroq, bir nechta $Si@C_{60}$ endofulleren molekulalarining grafen sirtiga adsorbsiyalanish jarayonidagi fazoviy tashkil topishi va tizimning energetik barqarorligi yetarli darajada o‘rganilmagan.



1-rasm. $Si@C_{60}$ endofullerenlarining grafen sirtidagi adsorbsion konfiguratsiyasi (C atomlari kulrang, Si atomlari to‘q sariq rangda).

Mazkur tadqiqotda to‘rtta $Si@C_{60}$ endofulleren molekulasining grafen sirtiga adsorbsiyasi LAMMPS dasturiy paketi yordamida molekulyar dinamika (MD) usulida modellashtirildi. Atomlararo o‘zaro ta’sirlarni tavsiflash uchun ReaxFF reaktiv kuch maydonidan [3] foydalanildi. Dastlabki konfiguratsiya energiya bo‘yicha minimallashtirildi, so‘ngra tizim NVT (izotermik-izoxorik) ansambli, 300 K harorat va 1 femtosekundli vaqt qadami sharoitida muvozanatga keltirildi. Shundan so‘ng, $Si@C_{60}$ molekulalarining grafen sirtiga yaqinlashishi, ularning nisbiy fazoviy joylashuvi hamda tizim potensial energiyasining vaqt bo‘yicha evolyutsiyasi batafsil tahlil qilindi.

Hisoblashlar davomida endofullerenlarning grafen sirtida adsorbsiyalanishi natijasida hosil bo‘lgan konfiguratsiyalarning strukturaviy va energetik barqarorligi baholandi. Tizim potensial energiyasining o‘zgarishi, Si@C_{60} molekulalari va grafen sirti orasidagi masofalarning vaqtga bog‘liqligi hamda adsorbsion o‘zaro ta’sir energiyalari miqdoriy jihatdan tahlil qilindi. Natijalarga ko‘ra, turli Si@C_{60} molekulalari uchun o‘zaro ta’sir energiyasi -4.14 dan -6.21 eV gacha bo‘lgan oraliqda o‘zgaradi hamda hosil bo‘lgan molekula-sirt atomlari orasidagi bog‘lar soni esa mos ravishda 4, 4, 6 va 5 tani tashkil etadi.

1-jadval *Grafen–Si@C_{60} tizimlarida adsorbsion o‘zaro ta’sir energiyasi (Eint), hosil bo‘lgan bog‘lar soni va bitta bog‘ga to‘g‘ri keluvchi o‘rtacha energiya.*

Grafen sirtga tushayotgan (Si@C60) endofullerenlar	**E_{int} (eV)**	**Bog‘lar soni**	**E_{int} / $N_{bog‘}$ (eV)**
1- Si@C60	−4.14	4	−1.035
2- Si@C60	−4.14	4	−1.035
3- Si@C60	−6.21	6	−1.035
4- Si@C60	−5.17	5	−1.034

Bitta bog‘ga to‘g‘ri keladigan o‘rtacha o‘zaro ta’sir energiyasining barcha molekulalar uchun deyarli bir xil (-1.034÷-1.035 eV) bo‘lishi, Si@C_{60}–grafen interfeysida hosil bo‘lgan bog‘lanishlarning energetik jihatdan o‘xshash va yuqori darajada barqaror tabiatga ega ekanini ko‘rsatadi. Ushbu natijalar Si@C_{60}–grafen nanogibrid tizimlarining molekulyar darajadagi xususiyatlarini chuqurroq tushunishga hamda ularning nanoelektronika va boshqa funksional nanomateriallar sohalaridagi istiqbolli qo‘llanilishini ilmiy asoslashga xizmat qiladi.

Foydalanilgan adabiyotlar

[1] Kroto H. W., et al. *Nature* 318 (1985) 162.

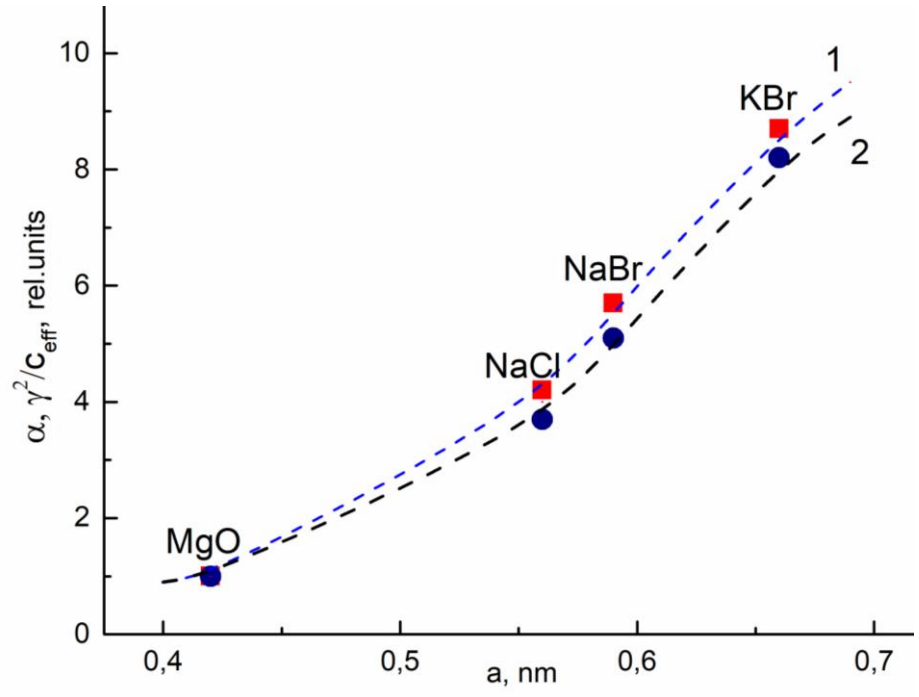
[2] Koh W., et al. *ChemPhysChem* 16 (2015) 789.

[3] Park H., et al. *Chemistry of Materials* 35 (2023) 2835.

MgO, NaCl, NaBr va KBr KRISTALLARIDA YUQORI CHASTOTALI AKUSTIK TO‘LQINLARNING SO‘NISH ANIZOTROPIYASI

F.R. Akhmedzhanov, N.M. Maharov, V. N. Avdievich
O‘zbekiston Fanlar Akademiyasi Ion-plazma va Lazer Texnologiyalari Instituti

Ushbu ishda kristallardagi akustik to‘lqinlarning anizotropiyasini haqiqiy va mavhum effektiv elastiklik konstantalari yordamida tasvirlashning yangi yondashuvi taklif qilingan [1]. Ushbu ishda bunday yondashuv Kubik simmetriyali kristallarda atomlararo ta’sir kuchlarining nochiziqliligini tavsiflovchi effektiv Grunayzen konstantasi bilan akustik to‘lqinlarning so‘nishi anizotropiyasi o‘rtasidagi bog‘liqlikni aniqlash uchun takomillashtirilgan. Kristall namunalari parallelepiped shaklida bo‘lib, [100], [110] va [111] o‘qlari bo‘ylab yo‘naltirilgan. Akustik to‘lqinlar X- va Y-kesimli kvarts o‘tkazgichlar yordamida hosil qilingan. Tadqiqotlar xona haroratida ultratovush usulida [2] amalga oshirilgan. Akustik to‘lqinlarning tezligi va so‘nishini aniqlash aniqligi mos ravishda 0,1% va 10% ni tashkil etadi.



1-rasm. [100] yo‘nalish bo‘ylab kristallardagi akustik bo‘ylama to‘lqinlar uchun so‘nish koeffitsienti (1) va γ^2/c_{eff} (2) kattaliklarining panjara parametri bilan bog‘liqligi.

Akustik so‘nish koifitsentlari bo‘yicha eksperimental natijalardan foydalanib, turli yo‘nalishlardagi bo‘ylama va ko‘ndalang to‘lqinlar uchun effektiv Grunayzen konstantalari qiymatlari quyidagi ifoda yordamida aniqlandi:

$$\gamma_{eff} = \left(\frac{c''_{eff} \cdot V_D^2}{2 \cdot \lambda \cdot T \cdot \omega} \right)^{1/2} \quad (1)$$

Yuqoridagi garfikda MgO, NCl, NaBr va KBr kristallari uchun Akustik to‘lqinlar so‘nish koifitsenti hamda Grunayzen parametri γ^2/c_{eff} ning haqiqiy elastik doimiylariga nisbati bo‘yicha panjara parametrlari bilab bo‘g‘liqligi ko‘rsatilgan. Malumki Grunayzen parametri kristal panjara parametrining hajmi o‘zgarganda tebranish chastotasining deformatsiyaga bog‘liqligini tavsiflaydi va shu nuqtai nazardan panjara parametri bilan bo‘g‘liq hisoblanadi. Natijalarga ko‘ra akustik to‘lqinlarning so‘nish koifitsentiga nafaqat Grunayzen parametrining balki haqiqiy elastiklik doimiysi c_{eff} ham tasir ko‘rsatishi ma’lum bo‘ladi.

Adabiyotlar

1. F. R. Akhmedzhanov; N. M. Makharov ; A. M. Lomonosov ; V. V. Temnov.“Anisotropic attenuation of GHz-frequency acoustic phonons and the Grüneisen tensor in MgO crystal” Appl. Phys. Lett. 2024. 124 p 152204 https://doi.org/10.1063/5.0189944.

2. R. Truell, Ch. Elbaum, B. Chik. Qattiq jism fizikasida ultratovush usullari. Academic Press, Nyu-York va London. (1969).

3. F.R. Akhmedzhanov, J.O. Kurbanov, A.F. Boltabaev. Attenuation of Acoustic Waves in Single-domain and Polydomain $LiTaO_3$ Crystals. Sensors & Transducers. V. 246. No 7, pp. 43-47 (2020).

4. Ахмеджанов Ф.Р, Авдиевич В.Н, Махаров Н.М. “Анизотропия акустических свойств и параметра Грюнайзена в кубических кристаллах” Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии 2025. 17(6): p 649-654. https://doi.org/10.17725/rensit.2025.17.649.

ХОЛОДНАЯ ПОВЕРХНОСТНАЯ ИОНИЗАЦИЯ МОЛЕКУЛ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

М.О. Нормуродова, А.Ш. Раджабов, Д.Т. Усманов
Институт ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А. Арифова АН РУз, г. Ташкент, Узбекистан, m.normurodova0217@gmail.com

Для решения задач идентификации и количественного анализа органических соединений разработан широкий спектр аналитических методов, основанных на сочетании различных способов пробоподготовки, разделения, детектирования и идентификации компонентов исследуемых смесей. Оптимальные возможности и эффективность конкретного метода при этом существенно зависят от природы анализируемых соединений, состава исследуемого объекта и поставленной аналитической задачи [1].

Особый интерес представляют методы, основанные на селективном образовании ионов непосредственно при взаимодействии анализируемых молекул с поверхностью твёрдого тела. Поверхностная ионизация (ПвИ) не является одинаково эффективной для всех классов органических соединений, однако для ряда веществ, в частности азотсодержащих органических молекул, она может обеспечивать высокую эффективность ионизации и выраженную селективность **[2]**.

При адсорбции органических молекул на поверхности ПвИ-эмиттера протекает совокупность взаимосвязанных физико-химических процессов, определяющих селективность каналов гетерогенных химических реакций, количественное распределение образующихся продуктов, а также селективность и эффективность ионизации как исходных молекул, так и продуктов их поверхностных превращений. Традиционно управление данными процессами осуществляется путём выбора материала ПИ-эмиттера с определённой каталитической активностью и работой выхода, а также регулирования его температуры **[2]**.

Принципиально иной подход связан с использованием внешнего электрического поля в качестве дополнительного управляющего параметра.

Сильное электрическое поле потенциально способно воздействовать как на селективность конкурирующих каналов поверхностных химических превращений, так и на селективность и эффективность ионизации образующихся продуктов. Вместе с тем большинство исследований поверхностной ионизации органических соединений выполнено в условиях, при которых влияние электрического поля на физико-химические процессы на поверхности эмиттера не являлось определяющим. Поэтому закономерности воздействия сильного электрического поля на процессы поверхностных превращений молекул и ионообразования остаются недостаточно изученными. Целью настоящей работы являлось исследование влияния напряжённости электрического поля на селективность каналов гетерогенных химических реакций молекул, адсорбированных на поверхности ПИ-эмиттера, и эффективность ионизации образующихся продуктов. В качестве модельного соединения использован триэтиламин (ТЭА).

Экспериментальные исследования выполнены на модернизированном магнитном масс-спектрометре МИ-1201Б, оснащённом высоковольтным полевым ПИ источником ионов с цилиндрической коаксиальной ионно-оптической системой, обеспечивающей изоэнергетическую транспортировку ионов в масс-анализатор. В качестве ПИ-эмиттера использовалась окисленная вольфрамовая проволока диаметром 50 мкм.

На рис. 1 представлены температурные зависимости токов ионов, образующихся при поверхностных превращениях молекул ТЭА, измеренные при низкой ($E = 1{,}33\times10^4$ В/см) и высокой напряжённости ($E = 3{,}34\times10^6$ В/см) электрического поля. При $1{,}33\times10^4$ В/см основным ионным продуктом является $[M-H]^+$, тогда как $[M-CH_3]^+$ регистрируется только при высоких температурах. Повышение напряжённости поля до $3{,}34\times10^6$ В/см приводит к появлению ионов $[M+H]^+$, M^+ и $[M-3H]^+$ наряду с $[M-H]^+$ и $[M-CH_3]^+$, а также к изменению их относительных интенсивностей.

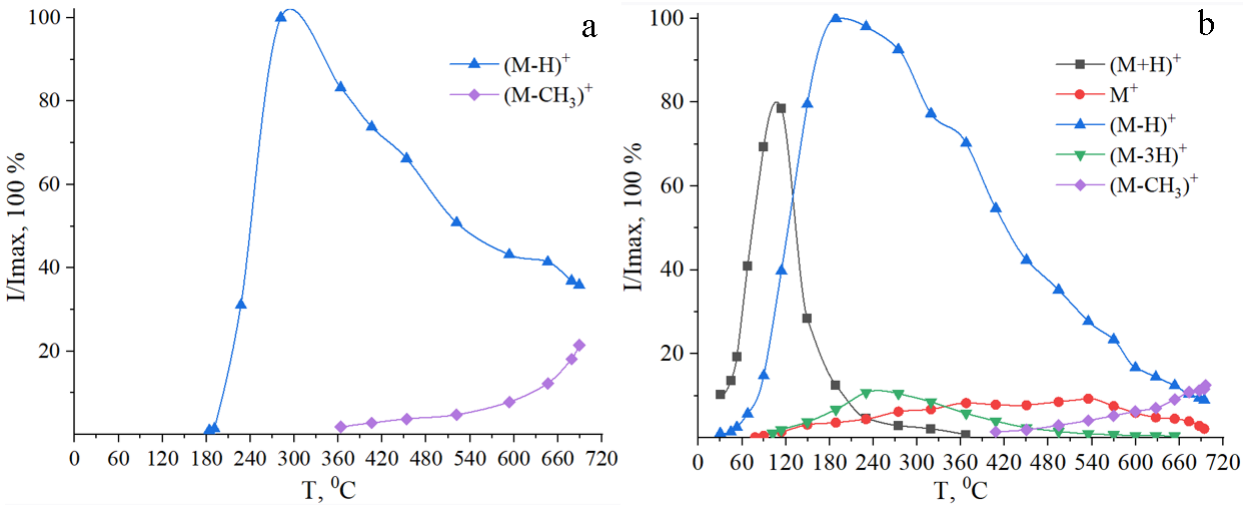


Рис. 1. Температурные зависимости тока ионов молекул ТЭА и из продуктов химических реакций.

Дальнейшее увеличение E сопровождается перераспределением относительных интенсивностей молекулярных и фрагментных ионов и снижением пороговых температур их образования. Наиболее выраженный эффект наблюдается для $[M-H]^+$ и $[M+H]^+$, пороговые температуры которых при высоких значениях E смещаются в область, близкую к комнатной температуре.

Полученные результаты свидетельствуют, что сильное электрическое поле влияет не только на эффективность ионизации, но и на селективность поверхностных химических превращений молекул и образующихся при этом продуктов. Возможность эффективного образования ионов при значительно более низких температурах эмиттера указывает на переход от преимущественно термической поверхностной ионизации к новому режиму, который может быть определён как **«холодная поверхностная ионизация»**.

Литература

1. Trufelli H., et al. Molecules, 2020.

2. Rasulev U.Kh., Zandberg E.Ya., et al. *Progress in Surface Science*. 1988. Vol. 28, No. 3–4. P. 181–412. DOI: 10.1016/0079-6816(88)90003-2.

РАЗРАБОТКА ИЗЛУЧАЮЩИХ КОМПОНЕНТОВ ДЛЯ ОПТИЧЕСКИХ СЕНСОРОВ НА ОСНОВЕ КОМПОЗИТОВ СОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦЫ

Камилов Ш.Х.[1], Рахимова Я.[1], Саидкулов Д.[1], Абдурахманов У.[1],
[1] Национальный университет Узбекистана
sherkamilov19@gmail.com
Юрков Г.Ю.[2]
[2] N.N. Semenov Federal Research Center of Chemical Physics Russian Academy of Sciences

Объяснить интерес к нанообъектам можно тем, что уменьшение материалов до наноразмеров приводит к проявлению в них так называемых кванто-размерных эффектов, когда размеры исследуемых объектов сравнимы с длиной де-бройлевской волны электронов, фононов и экситонов. Одной из главных причин изменения физических и химических свойств малых частиц по мере уменьшения их размеров является рост относительной доли «поверхностных» атомов, находящихся в иных условиях (координационное число, симметрия локального окружения и т.д.), нежели атомы внутри объемной фазы. С энергетической точки зрения уменьшение размеров частицы приводит к возрастанию роли поверхностной энергии. Иначе говоря, «внутренние» атомы будут формировать непрерывную энергетическую зону, тогда как энергетические уровни внешних «поверхностных» атомов будут дискретны и четко выражены. Именно в этом состоит одно из основных положений теории размерного квантования, предложенной Ал. Эфросом и А. Эфросом в 1982 году, согласно которой центр наночастиц имеет зону с непрерывной электронной плотностью, а края состоят из дискретных уровней. Наиболее сильно этот эффект проявляется для полупроводниковых наночастиц с большим радиусом экситона.

Поэтому разработка композиционных полимерных материалов, содержащих полупроводниковые наночастицы сульфида кадмия CdS на основе местного полиэтилена, исследование электрических и оптических свойств и

обосновать возможности использования их в как перспективные материалы оптоэлектроники нового поколения является весьма актуальным.

Целью настоящей работы являлась усовершенствование существующей [1] методики получения композиционных полимерных материалов на основе полиэтилена высокого давления (ПЭВД), содержащих наночастицы CdS и исследования их оптических свойств.

За основу получения композиционных полимерных материалов была взята методика «класпол», разработанная проф. С.П. Губиным [2] и проф. И.Д. Кособудским [3]. Для синтеза наночастиц CdS использовались водные растворы. Разложение $CdCl_2 + H_2S$ осуществлялась в раствор-расплаве полиэтилен – масло. Для этого в четырехгорлую колбу снабженную мешалкой, капельной воронкой, термометром и холодильником помещали 10 г полиэтилена и 100 мл масла. Затем осуществляли нагрев реакционной смеси до температуры синтеза (300^o С) в атмосфере азота при интенсивном перемешивании. После чего, поддерживая постоянную температуру, с помощью капельной воронки в образовавшийся раствор-расплава полиэтилен-масло по каплям вводили водный раствор $CdCl_2 + H_2S$, скорость подачи раствора составила 15 мл/ч. Скорость подачи азота регулировали таким образом, чтобы обеспечить быстрое удаление из реактора газообразных продуктов. После добавления всего раствора реакционную массу выдерживали в течении одного часа при температуре синтеза, поддерживая интенсивное перемешивание. Затем нагрев прекращали и реакционную смесь охлаждали до комнатной температуры в атмосфере азота.

После отмывки образца от масла бензолом в аппарате Сокслетта образцы высушивали и хранили до начала исследования на воздухе.

Определение размера наночастиц CdS в образцах осуществляли методом просвечивающей электронной микроскопии на микроскопе JEOL JEM 1011 при ускоряющем напряжении 80 кВ. Для проведения исследования образцы подвергали ультразвуковому диспергированию в этаноле, а затем полученную дисперсию наносили на медную сетку, покрытую слоями формавара и углерода.

На темно-сером фоне (полиэтилен) выделяются темные образования – наночастицы, форма которых близки к сферической. Согласно расчету полученных изображений был определен средний размер частиц CdS, который был равен 2,2± 0,2 нм.

В работе [4] показано, что при уменьшении полупроводниковых наночастиц, начиная с определенного размера проявляется квантовый эффект, т.е. наблюдается уменьшение ширины энергетических зон, что приводит к росту энергии оптических переходов и сдвиг оптического спектра в коротковолновой области.

Для разработанных нами материалов, содержащих наночастицы сульфида кадмия, исследованы их оптические свойства. На спектре люминесценции наблюдалось смещение полос в коротковолновую область.

Обосновано возможность использования полученных материалов для разработки излучающих компонентов при производстве оптических сенсоров и лазеров с перестраиваемой длиной волны.

ЛИТЕРАТУРА

1. Umar Abdurakhmanov, SHAMIL sharipov, Yayra Rakhimova. Munira Karabayeva, and Maksudbek Baydjanov. J. Am Ceram. Soc 2006, V89, №96. pp. 2946-2948.
2. Юрков Г.Ю., Губин С.Н., Панкратов Д.А., и др. Неорган. материалы. 2002.Т.38., №2. С.186.
3. N/A/ Taratanov, G. Yu. Yurkov, A.S. Fionov, F.T. Boymuratov, U. Abdurakhmanov, I.D. Kosobudsky, Journal of Chemistry and Chemical Enginocring, 2010, Vol 52, №7. pp. 72-75.
4. Р.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер, Физика квантовых низкоразмерных структур. М: Логос, 2000.

EARLY CARBON CLUSTERING ON Ni(100) AND Ni(110) SURFACES UNDER PECVD-RELEVANT CONDITIONS: A REACTIVE MOLECULAR DYNAMICS STUDY

[1]Tursunpulat Juraboev, Umedjon Khalilov[1,2]
[1]*Arifov Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan*
[2]*MOSAIC research group, University of Antwerp, Antwerp, Belgium*
e: mail: tursunpulatjuraboev24@gmail.com

Carbon adsorption, dissociation, diffusion, and clustering on nickel surfaces play an important role in the early stages of graphene nucleation during plasma-enhanced chemical vapor deposition (PECVD) [1,2]. Once carbon-containing species reach the catalyst surface, their subsequent behavior is influenced by the local surface structure. However, it is still unclear how the crystallographic orientation of nickel affects carbon redistribution between the surface and bulk and, in turn, the onset of C-C bond formation.

To address this question, reactive molecular dynamics simulations were performed for Ni(100) and Ni(110) surfaces under deposition conditions representative of PECVD. The simulations were carried out at 700 K using LAMMPS [3] with the ReaxFF potential [4]. Carbon was supplied sequentially in the form of C_2 dimers. The resulting adsorption, dissociation, surface migration, bulk diffusion, redistribution, and cluster formation were analyzed as functions of carbon loading.

As shown in Fig. 1, carbon initially penetrated into the near-surface and bulk regions on both Ni(100) and Ni(110). With increasing carbon loading, the bulk carbon fraction increased until the coverage reached approximately 3.5 ML. Beyond this point, both surfaces entered a saturation regime, in which further carbon incorporation into the bulk was suppressed and carbon increasingly accumulated at the surface. This shift in the surface-bulk carbon distribution is clearly reflected in Fig. 1. The resulting surface enrichment increased the likelihood of encounters between carbon atoms and small aggregates. Consequently, the first C-C bonds were observed at a C/Ni ratio of 20% on Ni(100), whereas the corresponding value for Ni(110) was 43%. Further

deposition led to the growth of dimers and trimers into tetramers and pentamers, together with the formation of pentagonal, hexagonal, and heptagonal ring motifs.

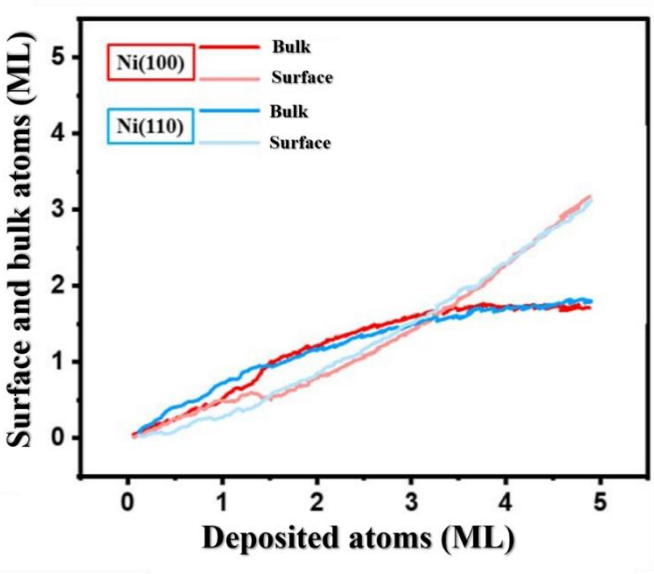


Fig. 1. *Evolution of carbon partitioning between the surface and bulk regions as a function of carbon coverage on Ni(100) and Ni(110) surfaces.*

Overall, Fig. 1 shows that carbon saturation was accompanied by a shift from bulk diffusion to surface accumulation. This surface enrichment preceded the formation of C-C bonds and facilitated early carbon-cluster growth. The lower C/Ni ratio required for C-C bond formation on Ni(100) indicates that this surface reached the clustering regime earlier than Ni(110). Thus, under the present simulation conditions, nickel crystallographic orientation controlled the onset of early carbon clustering, with Ni(100) exhibiting a lower apparent threshold for cluster formation.

References

[1] Li N. et al. *Sci. Rep.* **11**, 6007 (2021).

[2] Chen S. et al. *Phys. E* **144**, 115465 (2022).

[3] Plimpton S. *J. Comput. Phys.* **117**, 1–19 (1995).

[4] Zou C. et al. *Acta Mater.* **83**, 102–112 (2015).

MOLECULAR DYNAMICS INVESTIGATION OF THERMALLY ACTIVATED Ni EXOATOM MIGRATION ON C_{60} FULLERENE

Kh.I. Jabborov[1], B.E.Umirzakov[1], I.D.Yadgarov[2]
[1]Tashkent State Technical University named after I.A. Karimov.
[2]Institute of Ion-plasma and laser technologies of Uzbekistan Academy of Sciences.
xayitmurodjabborov5@gmail.com

Transition-metal functionalization of fullerene structures has attracted considerable attention because it provides an effective route for tuning their electronic, magnetic, and chemical characteristics, with potential relevance to catalysis, molecular electronics, and advanced nanomaterial design [1]. Ni-modified C_{60} systems are of particular interest, as the presence of an exohedral Ni atom can significantly affect the properties of the carbon framework and its reactivity [2]. According to previously published DFT studies, transition metal atoms can occupy various adsorption positions on the C_{60} surface, with C–C bridging sites often proving energetically favorable [3]. Therefore, studying the mobility of the metal exohedral atom on the fullerene surface is important for understanding the stability and dynamic evolution of such nanocomplexes [4]. Increasing temperature can significantly alter the nature of the surface motion of the Ni atom. As thermal energy increases, the probability of overcoming local potential barriers and the transition of an exoatom between adjacent stable or metastable positions increases.

Molecular dynamics simulations were performed in LAMMPS using a hybrid interaction scheme. The C_{60} framework was described by the AIREBO potential with a cutoff of 3.0 Å, while Ni–C interactions were represented by the Morse potential with D_e = 0.433 eV, R_e=2.316 Å, α=3.244 $Å^{-1}$, and a cutoff of 4.0 Å. This description allows continuous weakening and reformation of Ni–C interactions during thermally activated surface migration. The optimized C_{60} cage exhibited a characteristic C–C bond length of approximately 1.42 Å and retained its structural integrity over the investigated temperature range.

The C_{60} fullerene was first energy-minimized to obtain its equilibrium structure. A Ni atom was then placed above the fullerene surface, and the Ni–C_{60} system was

further optimized in LAMMPS using the conjugate-gradient method. Within the adopted interaction model, Ni preferentially occupied sites near C–C bonds rather than the centers of pentagonal or hexagonal rings. The most energetically favorable Ni–C_{60} configuration obtained after optimization is presented in Fig. 1.

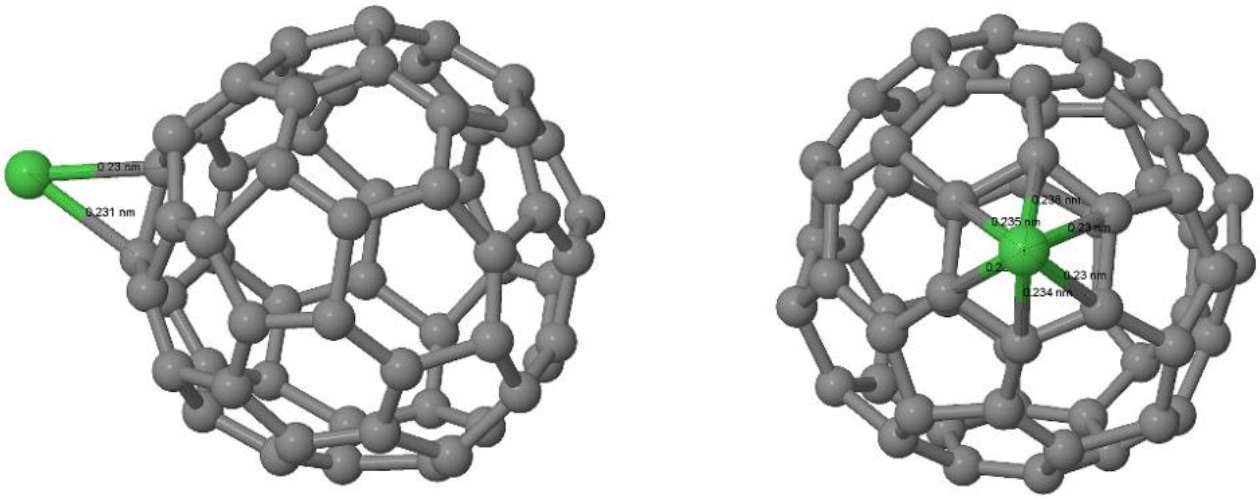


Fig. 1. Optimized localization sites of the Ni exoatom on the C_{60} surface.

Molecular dynamics simulations were performed in the NVT ensemble over the temperature range of 1000–1700 K with a 100 K interval. Each simulation was carried out for 1000 ps using a time step of 0.001 ps. Ni migration was monitored through the time evolution of the Ni–C_{60} interaction energy and changes in the atomic configurations. At elevated temperatures, pronounced energy fluctuations accompanied transitions of the Ni exoatom between stable and metastable adsorption sites. Figure 2 shows the minimum energy migration path of Ni between adjacent adsorption states 6–5 → 6–6, calculated using the CI-NEB method. The energy barrier of the direct transition is 1.12 eV, while for the reverse process it increases to 1.56 eV. The 6–6 configuration is energetically more favorable by ≈0.44 eV, which indicates the non-equivalence of the adsorption minima on the C_{60} surface. The obtained values are consistent with the characteristic range of migration barriers of transition metal atoms on sp^2-carbon structures [42,43]. In MD simulations, noticeable thermally

activated migration of Ni is observed at temperatures above ≈1100 K, while the C_{60} carbon framework retains structural stability up to 1700 K.

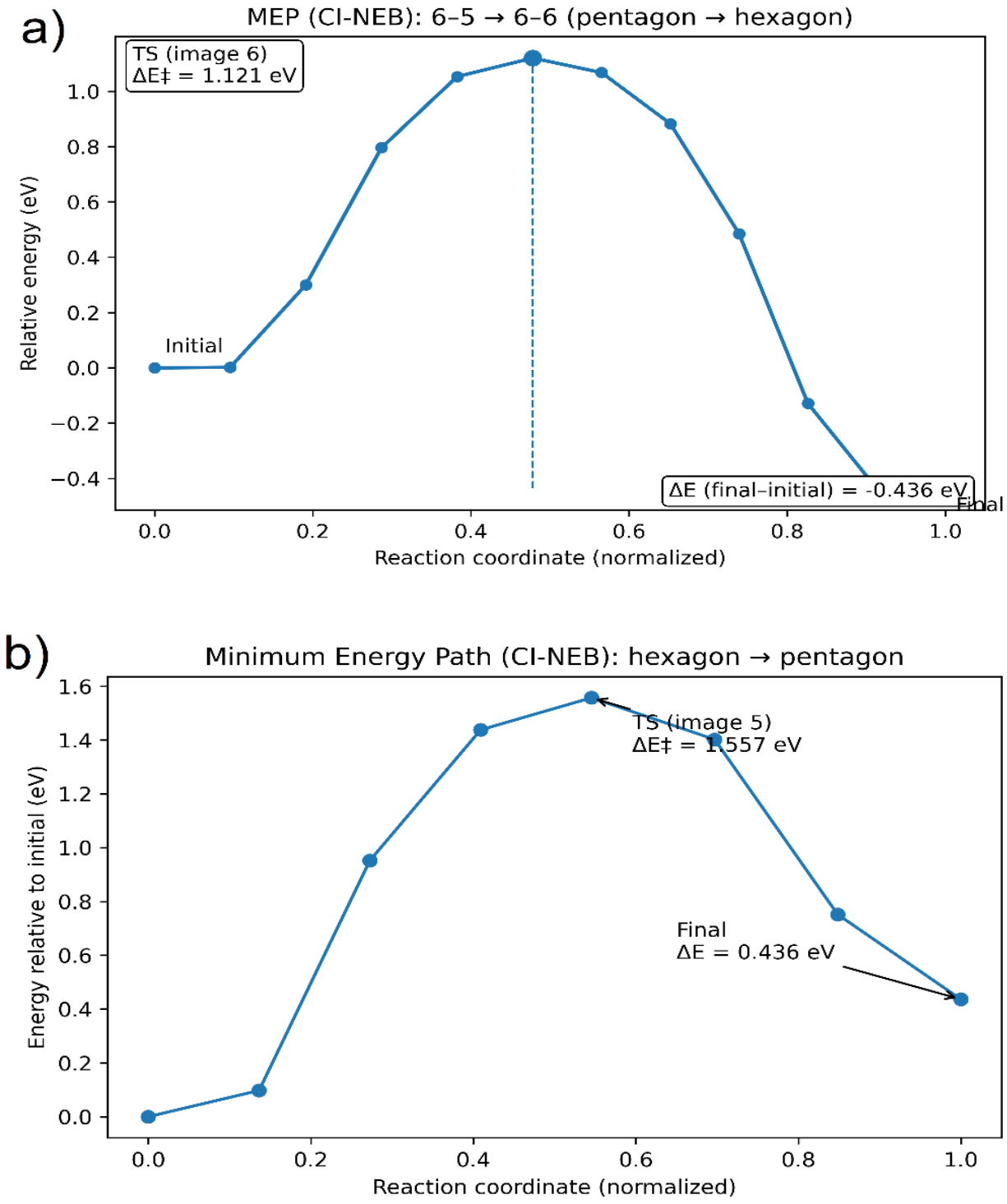


Fig. 2. Minimum energy migration paths of Ni to C_{60} calculated by the CI-NEB method: (a) the 6–5 → 6–6 transition with a barrier of 1.12 eV; (b) the reverse

transition 6–6 → 6–5 with a barrier of 1.56 eV. The energy difference between the states is ≈0.44 eV.

Molecular dynamics simulations showed that increasing temperature activates the migration of the Ni exoatom between different adsorption sites on the C_{60} surface. The results provide insight into the thermal stability and surface dynamics of metal-fullerene complexes. Such systems are of interest for the development of nanocatalysts, functional carbon nanomaterials, and molecular electronics, where the mobility of metal atoms can significantly affect the performance of the material.

References

1. Neyts, E. C., Bogaerts. Formation of endohedral Ni@ C60 and exohedral Ni-C60 metallofullerene complexes by simulated ion implantation. *Carbon* 47, 3177–3184 (2009).

2. Verkhovtsev, A. V., Schramm, S., & Solov’yov, A. V. *Molecular dynamics study of the stability of a carbon nanotube atop a catalytic nickel nanoparticle. J. Phys. Chem. C* 118, 16521–16529 (2014).

3. Sehrish Sarfaraz et al., Metallofullerenes as Robust Single-Atom Catalysts for Adsorption and Dissociation of Hydrogen Molecules: A Density Functional Study, ACS Omega 8 (39) (2023) 36493–36505.

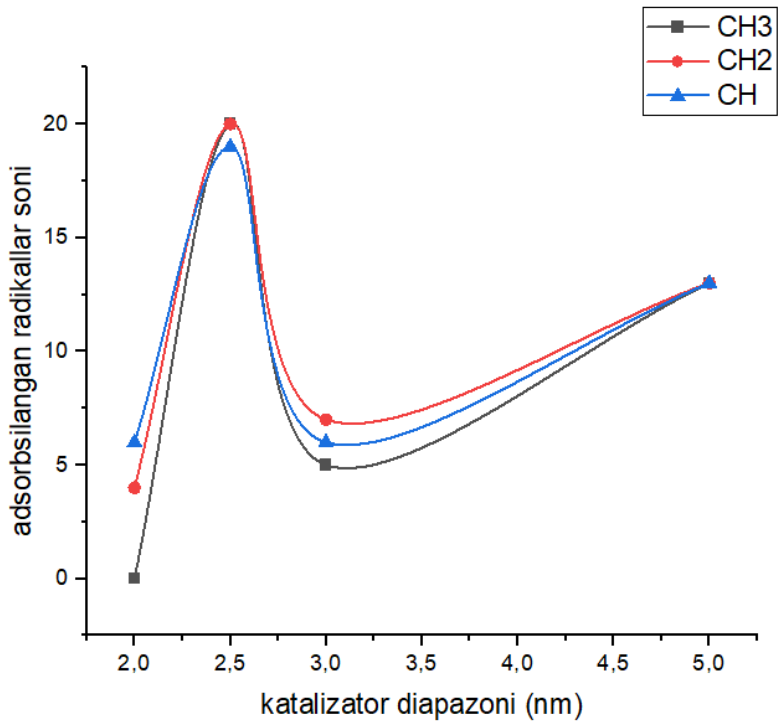
4. Apriati, Y. N., Nugraheni, A. D., & Sholihun, S. *Interaction of small molecules with fullerene C_{60}: DFT study of adsorption energy. Materials Science Forum* 1066, 135–143 (2022).

METAN PLAZMASIDAN VODOROD AJRATIB OLISHDA Ni-Pt NANOZARRACHALARINING ADSORBSION VA DISSOTSIATSION SAMARADORLIGI

[1]Chorshanbiyeva N, [2]Iskandarova Z, [3]Xalilov U.B

[1]Termiz Davlat Universiteti
[2]Denov Tadbirkorlik va Pedagogika Instituti
[3]O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Arifov nomidagi Ion-plazma va Lazer texnologiyalari instituti

An’anaviy usullarga nisbatan past haroratda ishlovchi plazma-kataliz texnologiyasi yordamida uglevodorodlardan ekologik toza vodorod olish samaradorligini oshirish va Ni-Pt bimetall nanokatalizatorlarining ta’sir mexanizmlarini to‘laqonli o‘rganish talab etiladi. Ushbu muammoni hal etish maqsadida ReaxFF reaktiv Molekulyar Dinamika usuli va LAMMPS dasturiy paketi vositasida turli o‘lchamdagi (2-5 nm) bimetallik Ni-Pt nanoqotishmalari yuzasida metan radikallarining (CH_3, CH_2, CH) adsorbsiyasi jarayoni modellashtirildi.



1-rasm. Ni-Pt nanozarrachalari o‘lchamining (2.0-5.0 nm) adsorbsiyalangan metan radikallari (CH_3, CH_2, CH) soniga bog‘liqligi.

Tadqiqotda Ni_xPt_{1-x} metall nanoklasterlari (2.0, 2.5, 3.0, 5.0 nm) minimizatsiya qilinib, ularning Gibbs erkin energiyalari hisoblandi. Natijalar shuni ko‘rsatdiki, klaster o‘lchami ortishi bilan Gibbs energiyasi pasayadi va termodinamik barqarorlik ortadi. 5 nm o‘lchamli va 50% Ni tarkibli klaster eng past Gibbs energiyasiga ega bo‘lsa-da, sirt faolligi va radikallarni adsorbsiyalash qobiliyati bo‘yicha 2.5 nm o‘lchamli $Ni_{0.5}Pt_{0.5}$ nanozarrachasi eng yuqori samaradorlikni namoyon etdi.(1-rasm)

Dastlabki modellashtirish natijalari shuni ko’rsatadiki, 2,5 va 5 nm diametrli bimetal katalizator yuzasida plazma prekursorlarining adsorbsiyasi yuqoriligi ushbu turdagi katalizatorlarning faol markazlar soni ko’pligidan dalolat beradi. Undan tashqari, natijalar shuni ko’rsatadiki, 2,5 nm diametrli Ni-Pt katalizatori metan plazmasi uchun eng samarali adsorbent ekanligini ko’rsatdi.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. Levchenko, I., et al. Plasma-Catalysis of Nonoxidative Methane Coupling: A Dynamic Investigation of Plasma and Surface Microkinetics over Ni(111). The Journal of Physical Chemistry C, 2022, 126(26), 11145–11156. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c03503

2. Zeng, J., et al. Plasma Catalysis for Hydrogen Production: A Bright Future for Decarbonization. ACS Catalysis, 2024, 14(3), 1627–1645. https://doi.org/10.1021/acscatal.3c05434

3. Levchenko, I., et al. "Mechanisms of Plasma-Catalytic Methane Conversion." *Journal of Catalysis*, 2022.

4. Kim, S., & Lee, H. "Applications of Plasma Catalysis in Fuel Cells and Waste Treatment." *Energy & Environmental Science*, 2023.

5. Shmidt, V. S. (2007). *Kinetika i kataliz* [Kinetics and Catalysis].

6. U.P.M. Ashik et al., Production of greenhouse gas free hydrogen by thermocatalytic decomposition of methane – A review, Renewable and Sustainable Energy Reviews, Volume 44, April 2015, Pages 221-256

7. Q. Wang et al., Electrochemical Methane Conversion, Small Structures, Volume 2, Issue 9

8. Zou Chenyu et al. Molecular Dynamics Simulations of the Effects of Vacancies on Nickel Self-Diffusion, Oxigen Diffusion and Oxidation Initiation in Nickel, Using the ReaxFF Reactive Forde Field, Acta Mater. 2015, 83, 102.

GRAFENDA TO‘LQIN PAKETI DINAMIKASIGA ASIMMETRIK ELEKTROSTATIK SOCHUVCHI MARKAZLARNING TA’SIRI

M. Jabborova[1], N. Iskandarov[1], X. Butanov[1], K. Bobojonov[2], X. Raximov[1]
[1]O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Materialshunoslik instituti, Toshkent sh. e-mail: mahfuzasohibovna@gmail.com
[2] Abu Rayhon Beruniy nomidagi Urganch davlat universiteti, Urganch sh.

Grafen ikki o ‘lchovli material bo‘lib, unda zaryad tashuvchilar massasiz Dirak fermionlari sifatida tavsiflanadi. Chiziqli energetic spektr va psevdospinning saqlanishi tufayli grafendagi electron transporti an’anaviy yarim o‘tkazgichlardagidan tubdan farq qiladi. Ushbu xususiyatlarning eng muhim namoyonlaridan biri Klein tunnellanishi bo‘lib, bunda elektronlar potensial to‘siqlardan juda yuqori ehtimollik bilan o‘ta oladi [1–3].

Zaryad tashuvchilar transportini boshqarishning istiqbolli usullaridan biri sun’iy elektrostatik potensial strukturalarni hosil qilish hisoblanadi. Potensial sohalarning geometriyasi, o‘lchamlari va o‘zaro joylashuvi to‘lqin paketlarining interferensiyasi, ko‘p martalik sochilishi hamda lokalizatsiyasiga sezilarli ta’sir ko‘rsatadi. Shu sababli grafenda assimetrik elektrostatik sochuvchi massivlar mavjud bo‘lganda electron to‘lqin paketining tarqalish dinamikasini o‘rganish alohida ilmiy qiziqish uyg‘otadi.

Tadqiqot monoqavat grafen uchun Dirak–Veyl uzluksiz modeli doirasida bajarildi. Gauss to‘lqin paketining vaqt bo‘yicha evolyutsiyasi operatorlarni ajratish usuli yordamida hisoblandi [4–6]. Hisoblashlarda o‘lchami 1024×128 nm bo‘lgan grafen varag‘i qaraldi. Unda ikkita vertical qatorda joylashgan aylana shaklidagi elektrostatik sochuvchilar joylashtirildi. Potensiallarning uch xil konfiguratsiyasi tahlil qilindi. Birinchi konfiguratsiyada ikkala qatorda ham birxil qutblilikka ega potensial to‘siqlar va potensial o‘ralar joylashgan. Ikkinchi konfiguratsiyada potensiallarning qutbliligi almashtirilgan. Uchinchi konfiguratsiyada esa potensial to‘siqlar va o‘ralar assimetrik tarzda joylashtirilib, qo‘shni qatorlarda ularning ishoralari navbatma-navbat almashadi.

Qo‘shni sochuvchi markazlari orasidagi masofa 32 nm qilib olindi. Sochuvchi markazlar radiusi 5–15 nm, potensial kattaligi esa 20–300 meV oralig‘ida o‘zgartirildi. Barcha hisoblashlarda to‘lqin paketinin genergiyasi 100 meV, vaqt qadami esa 0,1 fs qilib tanlandi. Asosiy fizik kattalik sifatida sochilish sohasi orqali o‘tish ehtimoli tahlil qilindi.

Olingan natijalar electron to‘lqin paketining transporti potensial strukturalarning geometriyasi hamda qutbliligiga kuchli darajada bog‘liqligini ko‘rsatdi. Sochuvchilar radiusi kichik bo‘lganda (R=5nm) barcha konfiguratsiyalarda o‘tish ehtimoli yuqori bo‘lib qoladi. Eng katta shaffoflik birinchi konfiguratsiyada kuzatildi, bunda o‘tish ehtimolining to‘yingan qiymati deyarli barcha potensial qiymatlarida birga yaqin bo‘lib qoladi. Ikkinchi, ayniqsa uchinchi konfiguratsiyada esa o‘tish ehtimoli kamayib, bu qaytuvchi sochilishning kuchayishi va to‘lqin paketining qisman lokalizatsiyalanishi bilan izohlanadi. $|V|$ = 300 meV da uchinchi konfiguratsiya uchun o‘tish ehtimoli taxminan 0,65 gacha kamayadi.

Sochuvchi markazlar radiusining 15 nm gacha ortishi transport xarakterini sezilarli darajada o‘zgartiradi. Barcha konfiguratsiyalarda o‘tish ehtimoli kamayishi bilan bir qatorda 150–400 fs oralig‘ida yaqqol vaqt tebranishlari kuzatiladi. Ushbu tebranishlar qo‘shni potensial sohalar orasidagi ko‘p martalik ichki qaytishlar natijasida yuzaga keladigan interferensiya hodisalari bilan bog‘liq bo‘lib, Fabri–Pero rezonatoridagi jarayonlarga o‘xshash xususiyat namoyon qiladi. Eng kuchli interferensiya effektlari uchinchi assimetrik konfiguratsiyada kuzatildi, bunda to‘lqin paketi sochilish sohasi ichida uzoqroq vaqt saqlanib qoladi.

Sochuvchilar radiusiga bog‘liq holda o‘tish ehtimolining to‘yingan qiymatini tahlil qilish shuni ko‘rsatdiki, birinchi konfiguratsiyada o‘tish ehtimoli radius ortishi bilan deyarli monoton kamayadi. Ikkinchi konfiguratsiyada R≈13–15 nm atrofida keng minimumlar hosil bo‘ladi. Uchinchi konfiguratsiya esa eng murakkab nomonoton bog‘lanishni namoyish etib, chuqur antirezonans minimumlari bilan tavsiflanadi. Ushbu minimumlarning joylashuvi ham sochuvchi radiusi, ham potensial kattaligiga bog‘liq bo‘ladi. Olingan natijalar grafenning o‘zini modifikatsiya qilmagan holda,

faqat sun’iy elektrostatik strukturalarning geometric parametrlarini o‘zgartirish orqali electron transportini samarali boshqarish mumkinligini ko‘rsatadi.

Sonli modellashtirish natijalari grafenda electron to‘lqin paketining tarqalish dinamikasi elektrostatik sochuvchi strukturalarning fazoviy tashkil etilishiga kuchli bog‘liq ekanligini tasdiqladi. Sochuvchilar kichik radiuslarda deyarli ballistic transportni ta’minlaydi, radiusning ortishi esa ko‘p martalik sochilishning kuchayishiga, to‘lqin paketining potensial sohaichida uzoqroq ushlanib qolishiga hamda kuchli interferensiya effektlarining yuzaga kelishiga olib keladi.

Shuningdek, potensial sochuvchilarning assimetrik konfiguratsiyasi murakkab interferensiya manzarasi hosil qilishi sababli elektronlarnin go‘tishini eng samarali darajada bostirishi aniqlandi. Mazkur natijalar grafen asosidagi elektron-optik elementlar, to‘lqin paketlari filtrlari hamda transport xossalari elektrostatik strukturalarning geometriyasi yordamida boshqariladigan nano electron qurilmalarni loyihalashda qo‘llanilishi mumkin.

Adabiyotlar

1. Novoselov K. S., Geim A. K. et al. Science.306 (2004)666.
2. Castro Neto A. H. et al. Rev. Mod. Phys. 81 (2009)109.
3. Chaves A. et al. The split-operator technique for the study of spinorial wave-packet dynamics // Communications in Computational Physics.17 (2015)850.
4. Rakhimov Kh, Chaves A., Farias G. Wave packet propagation through randomly distributed scattering centers in graphene. in Low-Dimensional Functional Materials (Springer, 2013).
5. Rakhimov Kh, Chaves A., Lambin Ph. Scattering of electrons by randomly distributed nitrogen substitutional impurities in graphene. Appl. Sci., 6(2016) 256
6. Rakhimov Kh., et al. Wave-packet rectification in graphene with alternating circular electrostatic potential barriers. J. App. Phys. 137 (2025) 144302.

ИССЛЕДОВАНИЯ ПСИХОТРОПНОГО ПРЕПАРАТА СИБУТРАМИНА МЕТОДОМ ТЕРМОИОННОЙ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

С. Исхакова, Т. Эрназаров, Ш. Ахмедов, З. Ульмасова

Институт Ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан

Процессы, происходящие на поверхности твердого тела, играют важную роль в природе. Отличия в свойствах атомов и молекул на поверхности от их свойств в изолированном состоянии или в объеме твердого тела приводят к специфичности этих процессов. Их изучение имеет фундаментальное значение для дальнейшего развития физики твердого тела и лежит в основе таких разделов науки и техники, как микро- и наноэлектроника, гетерогенный катализ, эмиссионная электроника, вакуумные технологии и др. Поэтому проблема изучения взаимодействия частиц с твердыми телами является общей для физики конденсированных сред, физической электроники и физхимии поверхности.

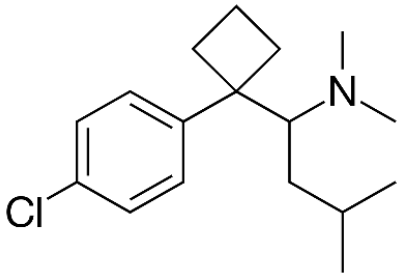
В физической электронике в последнее десятилетие идет переход от достаточно продвинутых исследований взаимодействия атомных частиц к исследованию взаимодействия комплексов атомных частиц с поверхностью. Достаточно продвинутой в этой области знаний является диссоциативная термоионная эмиссии (ТИ) органических и биоорганических молекул. Обнаружение этого нового способа ионизации молекул и выявление основных закономерностей явления открыли новое направление исследований - от разработки методов определения свойств и характеристик их взаимодействия с поверхностью до новых направлений в масс-спектрометрии для обнаружения и анализа физиологически активных органических соединений.

К настоящему времени около 5% населения земного шара так или иначе являются потребителями наркотиков, поэтому появление на наркорынке в начале нынешнего столетия Новых Психоактивных Веществ (НПВ) - «дизайнерских наркотиков» ухудшили и без того сложную наркоситуацию во всем мире.

В настоящем для обнаружения и анализа злоупотребляемых наркотиков и психотропных препаратов в биологических образцах используют различные физико-химические методы. Термоионная эмиссия (ТИ) является одним из наиболее информативных среди множества методов по определению характеристик взаимодействия многоатомных частиц с твердым телом.

Масс-спектрометрические исследования в вакуумных условиях представляют большой научный интерес для изучения влияния адсорбции и гетерогенных реакций, таких как дегидрогенизация, диссоциация и ассоциация, происходящих на нагретой поверхности эмиттера, на состав масс-спектра.

Методом термоионной масс-спектрометрии был исследован психостимулятор амфетаминового ряда Сибутрамин являющейся третичным амином, который применяется для подавления аппетита человека.



Сибутрамин $C_{17}H_{26}ClN$

M=280 г/моль

Эксперименты по ТИ/МС проводились с помощью модифицированного статического магнитного масс-спектрометра МИ-1210В, Диапазон массовых чисел МИ-1201В при $V_{уск}$=5 кВ составляет 1÷600. Рабочий вакуум $(1÷2)\cdot10^{-5}$ Па. Из ТИ масс-спектра видно, что он относится к мягкому типу ионизации и показывает, что структура молекулы в значительной степени сохраняется. В спектре зарегистрированы основные фрагментные ионы m/z 166, 114, 98, 72, 58 и квазимолекулярный ион при *m/z* 278. Ион *m/z* 114 является основным ионом с высокой интенсивностью и представляет собой стабильный фрагмент, образующийся при распаде трет-бутиламинной части сибутрамина. Пик *m/z* 278 соответствует молекулярному иону типа $[M–H]^+$, что подтверждает сохранность

молекулярной структуры при использовании метода ТИ. На рисунке 1 приведен ТИ масс-спектр Сибутрамина.

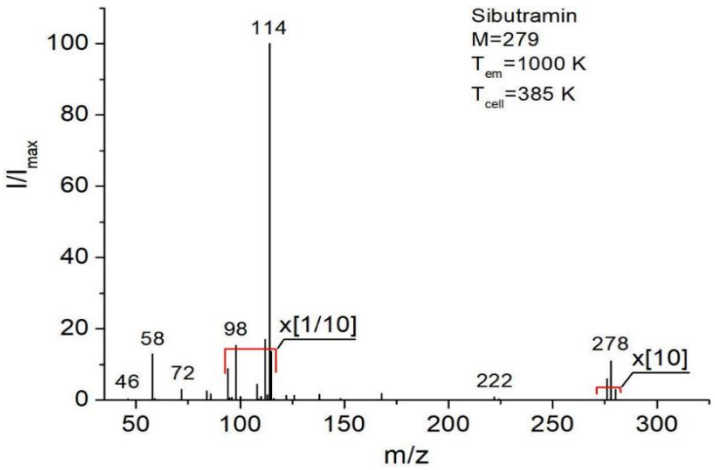


Рисунок 1- ТИ масс-спектр Сибутрамина

Таким образом, в данном методе фрагментация происходит преимущественно по механизму разрыва β-связи. Масс-спектр ТИ состоит из десорбированных в ионном состоянии продуктов гетерогенных реакций дегидрогенизации, диссоциациии, ассоциации и эти гетерогенные реакции протекают по аминным и ароильным каналам в зависимости от центра адсорбции молекул на гетероатомах азота или кислорода карбонильной группы.

Литература

[1]. European Drug Report 2022: Trends and Developments,Publications Office of the European Union, Luxembourg. https://www. emcdda. europa. eu/ publi catio ns/ edr/ trends- devel opmen ts/2022_ en

[2]. U. Khasanov, S.S. Iskhakova, D.T. Usmanov, Examination of the effect of air atmosphere on heterogeneous reactions under surface ionization of psychotropic drug molecules, European Journal of Mass Spectrometry, 26(6), 409–418, (2020). DOI: 10.1177/1469066720976016

[3]. Nie, H.; Li, X.; Hua, Z.; Pan, W.; Bai, Y.; Fu, X. Rapid Screening and Determination of 11 New Psychoactive Substances by Direct Analysis in Real Time Mass Spectrometry and Liquid Chromatography/ Quadrupole Time-of-Flight Mass Spectrometry. Rapid Commun. Mass Spectrom. 2016, 30 Suppl 1, 141.

РАССЕЯНИЕ ИОНОВ МОНОКРИСТАЛЛОМ, ПРИ АДСОРБЦИИ O_2

[1]Исаханов З.А., [2]Джурахалов А.А., [1,3]Умирзаков Б.Е., [3]Хужаниязова А.У., [3]Ташмухамедова Д.А.

1. ИИПиЛТ АН РУз, 100125, Ташкент, E-mail: za.isakhanov@gmail.com

2. Organi, a company specializing in business applications and IT services, Wilrijk, Belgium. dzhurakhalov@gmail.com

3. ТГТУ, 100095, Ташкент, ул.Университетская 2, Узбекистан

Низко- и средне энергетическое рассеяния ионов позволяет зафиксировать моменты перехода от хемосорбции к фазовому окислению, что важно для изучения каталитических свойств поверхности твердого тела. В последнее время для этих целей, широко используется методы ЭОС, РФЭС и ионно-рассеивательная спектроскопия (ИРС). Привлекательной особенностью метода ИРС является его высокая поверхностная чувствительность. Вращением мишени по азимуту можно определить угловые распределения положения адатомов на поверхности в определённом кристаллографическом направлении.

В настоящей работе исследовано малоугловое рассеяние ионов Ne^+ с начальной энергией E_0 = 5 кэВ и углами скольжения в интервале $\psi = 10 \div 15°$ поверхностью монокристалла Ni(100) ⟨100⟩ с субмонослойным покрытием атомами кислорода. Траектории ионов Ne^+, испытывающих скользящее рассеяние на регулярных цепочках адатомов O и атомах подложки Ni, моделировались на компьютере в приближении парных столкновений с использованием потенциала взаимодействия, полученного сопряжением ортогональной аппроксимации потенциала Фирсова с потенциалом Борна–Майера. На рис.1 приведены расположение атомов никеля и кислорода на самом верхнем слое Ni(100).

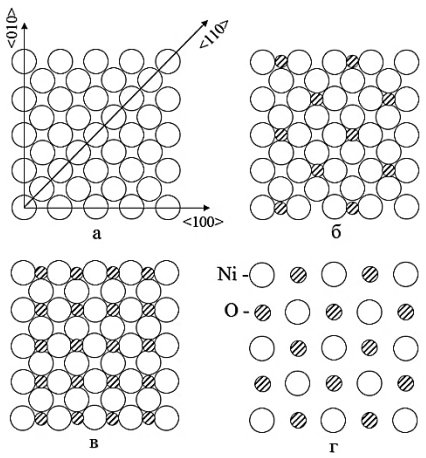


Рис.1. Расположение атомов никеля в первом слое монокристалла Ni(100) (а) и атомов кислорода в адсорбционных структурах, соответствующих начальным стадиям адсорбции: б — p(2×2), в — c(2×2), и г — NiO(100)-(1×1).

В процессе окисления первоначально чистой поверхности Ni(100) (а) первая фаза хемосорбции p(2×2)-O (б), соответствующая степени покрытия 0,25

и одному атому O на четыре атома Ni, сменяется второй фазой c(2×2)-O при степени покрытия 0,5 и одном атоме O на два атома Ni.

Локальная координационная структура атома O на поверхности Ni(100) в фазах хемосорбции p(2×2) и c(2×2) одна и та же и соответствует расположению кислорода на ~0.9 Å над верхним слоем атомов Ni в местах с координационным числом 4 [1]. Адсорбционные структуры p(2×2)-O и c(2×2)-O на поверхности Ni(100) упорядочены, соизмеримы с подложкой и не приводят к её перестройке [1]. При дальнейшем увеличении экспозиции в кислороде и достижении степени покрытия ~ 0,62 начинают образовываться островки NiO (100)-(1×1) со структурой типа NaCl (рис.1г). На начальной стадии этот процесс интерпретируется как фазовый переход первого рода и, в отличие от хемосорбции, сопровождается перемещением атомов подложки [2]. Постоянная решётки в полностью упорядоченном оксиде NiO(001)-(1×1) составляет 8/7 от объёмного никеля [3]. Из рис.1 видно, что поверхность Ni(100) со структурами p(2×2) (б) и c(2×2) (в) в направлении ⟨100⟩ представляет собой последовательное смещение друг-друга, расположенных на разных уровнях цепочек атомов O и атомов подложки Ni. Расстояние между соседними атомами O в структуре p(2×2) вдвое больше, а в структуре c(2×2) — такое же, как и между атомами Ni в направлении ⟨100⟩.

Энергия рассеянных ионов определялись выражением:

$$E = (1+\mu)^{-2} \cdot \left(\cos\theta \pm \sqrt{f(\mu)^2 - sin^2\theta}\right)^2, \qquad f = \left[1 - \frac{1+\mu}{\mu} \cdot \frac{\xi(E_0,P)^{1/2}}{E_0}\right]$$

$\xi(E_0,P)$ a - величина неупругой потери энергии в однократном столкновении. В рассматриваемом случае $\mu \approx 0{,}79$ ($\mu = (m_2/m_1) < 1$), $\theta_{пред} \approx 52{,}5°$, и $P_{пред} \approx 0{,}05$ Å.

Таким образом, разным адсорбционным структурам кислорода на поверхности Ni(100) соответствуют существенно отличные овалы зависимости E(θ).

Литература:

1. K. Doll, Surf. Sci. 544, 53, P.103, (2003).
2. B.V. Andryushechkin, K.N. Eltsov, V.M. Shevlyuga, Surf. Sci. 584, P. 122. (2005).
3. N.S.Komarov,T.V.Pavlova, B.V.Andryushechkin, J. Phys. Chem. C.123, 45. P.27659, (2019).

ВЛИЯНИЯ ЭФФЕКТА КАНАЛИРОВАНИЯ НА ВЫХОД ОЖЕ-ЭЛЕКТРОНОВ ИЗ МОНОКРИСТАЛЛА ZnTe

[1]З.А. Исаханов*, [1,2]Б.Э. Умирзаков, [2]Ж.Б. Хужаниёзов, [2]Гаибназаров Б.Б., [1]Р.Т. Курбанов
[1]*Институт Ионно-плазменных и лазерных технологий Академии Наук Республики Узбекистан* *e-mail: za.isakhanov@gmail.com
[2]*Ташкентский государственный технический университет, Университетская 2, e-mail: be.umirzakov@gmail.com*

В последние годы эффект каналирование при выходе электронов и ионов из монокристаллических образцов экспериментально и теоретически интенсивно изучается [1, 2]. Взаимодействие оже-электронов с атомными цепочками в кристаллической решетке зависит от их энергии и типа кристалла. К экспериментальному изучению эффекта каналирования при выходе вторичных электронов, в том числе оже электронов из монокристаллических образцов элементарных полупроводников и металлов посвящены большое число работ [3], а в случае бинарных монокристаллических полупроводников проводились недостаточно. В данной работе исследовано влияние эффекта каналирования на выход оже-электронов из монокристалла ZnTe(100).

Исследования проводились на сверхвысоковакуумном (10^{-8} Па) малоугловом оже-спектрометре, собранного на базе установки УСУ-2 [4]. Спектрометр давал возможность изучить зависимости интенсивностей оже-эмиссии электронов, вылетающих под одинаковыми и различающимися полярными углами вылета θ, от угла падения пучка первичных электронов и ионов [5]. Малоугловой оже-спектрометр давала возможность с помощью эффекта каналирования пучка электронов оценить относительную концентрацию примесных атомов, находящихся в различных каналах монокристаллов [6]. Перед исследованиями монокристаллы ZnTe(100) очищались прогревом при температуре T≈900 К в течение 4 часа. Оже-спектры записывались при энергии первичных электронов E_p=2800 эВ.

На рис.1 представлены зависимости относительных интенсивностей оже-пиков, соответствующих энергиям 71 эВ и 485 эВ от угла падения первичного

пучка электронов (при постоянном угле вылета θ = 45° вторичных электронов) на грань (100) ZnTe. Видно, что на кривых $I_i/I_{max}(\varphi)$ (I_i – интенсивность отдельного пика, I_{max} – интенсивность всех пиков вместе в оже-спектре) обнаруживается анизотропия выхода оже-сигналов от угла падения пучка первичных электронов, т.е. при совпадении направления пучка первичных электронов с низко- индексными осями кристалла интенсивности оже-электронов резко возрастают. Следует, однако, отметить, что обнаруженную нами анизотропию интенсивностей эмиссии оже-электронов для указанных на рис.1 переходов от угла падения пучка первичных электронов, можно объяснять, как механизмом дифракции электронов, так и эффектом каналирования первичных электронов в кристалле. Известно, что захват частиц в канале происходит при угле падения частиц меньше критического угла каналирования и осуществляется посредством связанных между собой столкновений под скользящими углами с атомами рядов и плоскостей, образующих стенки каналов решетки. Зависимость анизотропии эмиссии оже-сигналов от угла падения

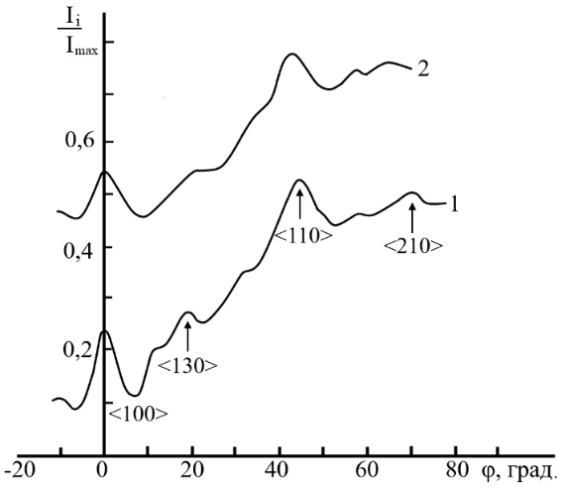


Рис. 1. Зависимости относительных интенсивностей оже-пиков, монокристаллических ZnTe(100) соответствующих энергиям: **1** - 71 эВ и **2** - 485 эВ от угла падения пучка первичных электронов. Кривая 2 сдвинута вверх относительно кривой 1.

пучка первичных электронов на грань, можно оценить на основе налетающих электронов в кристалл извне вдоль направления оси канала, но ближе к его стенкам, на начальном участке движения начинает деканалировать, т.е. при движении по каналу постепенно приближается к осям атомных цепочек и соответственно вероятность процессов, характеризуемых малыми значениями прицельного параметра взаимодействия, будет возрастать, а значит электроны отклоняются на большие углы рассеяния и приводит к резкому возрастанию роли

обратно рассеиваемых электронов в выбивании вторичных, в том числе и оже-электронов [7].

Таким образом, при совпадении направления пучка первичных электронов с низкоиндексными осями кристалла (мишени) интенсивности оже- электронов резко возрастают. Однако анизотропия интенсивностей оже-электронов, наблюдаемая в зависимости от угла падения пучка первичных электронов, как видно из рис.1, обнаруживается на фоне возрастающей кривой $I_{оже}(\varphi)$. Последнее, обусловлено тем, что увеличение угла падения пучка, приводит к уменьшению глубины выхода оже- электронов по отношению поверхности кристалла и соответственно растет эмиссия оже-электронов.

Литература:

1. *Kriaa H., Guitton A., Maloufi N.* // Materials 2021, V.14, 1696. DOI: 10.3390/ma14071696.
2. *Winkelmann A., Jablon B.M., Tong V.S., Trager-Cowan C., Mingard K.P.* // Journal of Microscopy, 2020, Vol. 277, pp. 79–92. DOI: 10.1111/jmi.12870
3. *Андрющенко Т.А., Лященко С.А., Лукьяненко А.В., Варнаков С.Н., Овчинников С.Г.* // Письма в ЖТФ. 2023. Т. 49, вып. 14. С. 22–27.
4. *Isakhanov Z.A., Umirzakov B.E., Nabiev D.Kh., Imanova G.T., Bekpulatov I.R., Khudaykulov F.Ya., Iskhakova S.S., Abdiyev Kh.E.*, // Micro and Nano Systems Letters. 2024. 12-25. https://doi.org/10.1186/s40486-024-00215-z
5. *Isakhanov Z.A. //* Journal of Surface Investigation. X_ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2013. Vol.8, №11., p.897.
6. *Isakhanov Z.A., Kodirov T., Halmatov A.S., Ruzibaeva M.K., Muhtarov Z.E., Umirzakov B.E.* // J. of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2017. V.11, No. 1, pp. 152–154. DOI:10.1134/S1027451017010128.
7. *Isakhanov Z.A., Kosimov I.O., Umirzakov B.E., Erkulov R.M.* // Technical Physics, 2020, 65(1), pp.114-117.

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ИОНИЗАЦИИ БАКТЕРИЙ TRICHODERMA SP МЕТОДОМ ПИРОТЕРМИЧЕСКОЙ ИОНИЗАЦИОННОЙ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Ибадуллаева М.И.[1], *Усманов Д.Т.*[2]
[1]*Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан*
[2]*Институт ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А.Арифова, АН РУз, Ташкент, Узбекистан*
Email: ibodullayevamadinabonu069@gmail.com

Исследования, посвящённые установлению класса бактерий физическими методами, были начаты в 80-х годах путём применения масс-спектрометрического анализа продуктов пиролиза. К концу XX и в начале XXI столетия эти исследования приобрели особый характер в связи с возникшей над миром угрозой биотерроризма. В настоящее время при анализе продуктов пиролиза бактерий используют различные методы ионизации, такие как электронная ионизация, ионизация лазерным излучением, ионизация продуктами деления ядер калифорния, химическая ионизация и т. д., в совокупности с различными методами разделения смесей и ионов: от газовой хроматографии (ГХ), хромато-масс-спектрометрии с электронным ударом (ГХ/МС), жидкостной хроматографии с масс-спектрометрией (ЖХ/МС) до тандемных и времяпролётных масс-спектрометров и спектрометрии ионной подвижности (СИП) [1-2]. Тем не менее, развитие и разработка селективных и высокочувствительных методов и приборов для анализа продуктов пиролиза бактерий является актуальной задачей.

Метод термическая-ионизационная масс-спектрометрия (ТИ/МС) имеет ряд преимуществ при анализе азотистых оснований [3]. Так как продукты пиролиза бактерий состоят в основном из азотистых оснований, то использование термической (поверхностной) ионизации (ТИ) с ее высокой эффективностью и селективностью к азотистым основаниям, позволит выявить закономерности ТИ продуктов пиролиза и схем термолиза бактерий.

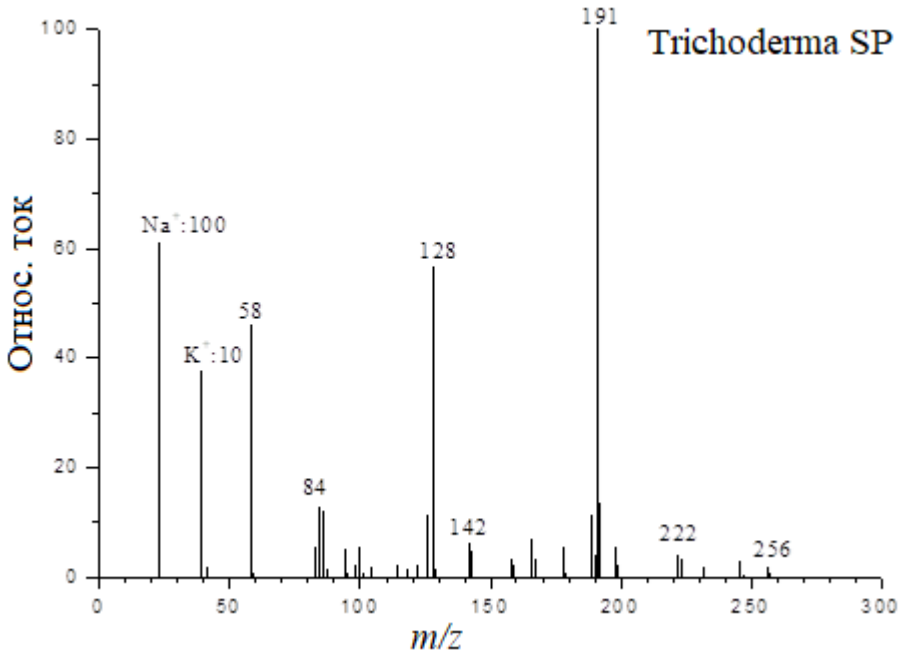
Практический интерес исследования методом пиролитической ТИ/МС (ПТИ/МС) продуктов пиролиза бактерий связан с развитием научных основ ПТИ методов масс-спектрометрического анализа бактерий, позволяющие по выявленным закономерностям ТИ продуктов пиролиза и схем термолиза установить их класс и природу.

В настоящей работе методом ПТИ/МС исследована культура мицелиальных грибов (Trichoderma SP), выращенная в Институте микробиологии АН РУз и представлявшая собой жидкость. При ПТИ/МС пиролизер заправлялся этой жидкостью с помощью щприца “Agilent” в количестве 5-8 микролитр и вакуумировался после испарения жидкой составляющей. Эксперименты по ПТИ/МС проводились с помощью модифицированного для ПТИ исследований статического магнитного масс-спектрометра МИ-1210В. В качестве источника ионов использована окисленная вольфрамовая лента размером 1.0x12x0.05 мм^3. Температура эмиттера изменялась в диапазоне от 600 К до 1250 К. Пиролитический узел представляет собой кварцевую трубу длиной 12 мм с внутренним диаметром 1,5 мм с платиновым нагревателем. Нагрев пиролизатов от комнатной до 400^{0}С (при 0-180 мА) осуществлялся источником постоянного тока.

Пиро-ТИ (ПТИ) масс-спектр мицелиального гриба Trichoderma sp. приведён на рис. 1. Как видно, ПТИ масс-спектр Trichoderma sp. является малолинейчатым по сравнению с ТИ масс-спектрами индивидуальных органических соединений. Интенсивность токов главных линий ионов достигает 10^{-9} А, т. е. продукты пиролиза гриба эффективно ионизуются путём ТИ. Масс-спектр ПТИ состоит из чётных и нечётных линий ионов, которые, согласно азотному правилу, подтверждают наличие нечётного и чётного числа гетероатомов азота в этих ионах. В масс-спектрах Trichoderma главной линии является нечетный ион серии с m/z=191. Следует отметить, что при малых температурах пиролиза в масс-спектре главными являются ионы с большими

массами, а при больших температурах пиролиза – ионы малых масс. Такая закономерность наблюдается и при ионизации электронами [4].

Рис.1. Масс спектр ППИ Trichoderma SP.



ПТИ/МС-исследования продуктов пиролиза микроорганизмов - мицелиальных грибов (Trichoderma sp.) - показали, что молекулы пиролизатов ионизуются с высокой эффективностью, а ПТИ масс-спектры являются многолинейчатыми по сравнению с масс-спектрами индивидуальных органических соединений. Образующиеся ионы являются устойчивыми положительно заряженными ионами, не имеющих неспаренных электронов и их можно представить в виде ионов с 4-х валентным положительно заряженным атомом азота с sp^2-гибридными орбиталями.

Литература:

[1]. Snyder A. P., Eiceman G.A, Windig W.J., Anal. Appl. Pyrolysis, 1988, 13, 243.

[2]. Beverly M.B., Voorhees K.J., Hadfield T.L., Cody R.B. Analytical Chemistry, 2000, 72, 2428.

[3]. Rasulev U.Kh. and Zandberg E.Ya. Prog. Surf. Sci, 1988, 28 (3/4), 181 – 412.

[4]. Tripathi A., et.al. Rapid Com. Mass Spectrom., 2001, 15, 1672-1680

SEMICONDUCTOR OPTICAL AMPLIFIERS FOR RELIABLE FREE-SPACE OPTICAL COMMUNICATION SYSTEMS: PHYSICAL PRINCIPLES AND PERFORMANCE CHALLENGES

Gupta Ganesh[1], Yusupov Ahmed[2]

[1] Thompson International School, Tashkent, Uzbekistan
Email: ganesh.gupta2608@gmail.com
[2] Tashkent University of Information Technologies, Tashkent, Uzbekistan
Email: prof.ayusupov@gmail.com

Abstract. Free-space optical (FSO) communication has emerged as a transformative technology for high-capacity, low-latency data transmission in satellite constellations and terrestrial networks. However, atmospheric turbulence-induced scintillation, beam wander, and signal fading fundamentally limit link reliability and achievable distances. Semiconductor optical amplifiers (SOAs) offer a compact, low-cost, and integrable amplification solution that addresses these challenges, yet their practical deployment requires careful navigation of inherent performance trade-offs. This work presents a focused scientific analysis of SOA physics and system integration for FSO applications, examining both the potential and limitations of this technology.

The physical foundation of SOA operation rests on carrier population inversion and stimulated emission within a direct bandgap semiconductor active region. Gain bandwidth and saturation characteristics are governed by the density of states and waveguide design, with quantum-confined structures offering enhanced gain and temperature stability. When deployed in FSO systems, SOAs serve dual roles: as transmitter booster amplifiers to increase link margin, and as receiver pre-amplifiers to improve detection sensitivity under weak signal conditions. Recent system-level evaluations have demonstrated that SOA-based pre-amplification can reduce scintillation-induced fade probability by over 80% in moderate-to-strong turbulence regimes, and high-power 1550 nm SOAs have achieved open-eye operation in watt-class satellite link scenarios.

Despite these advances, fundamental performance challenges persist. Amplified spontaneous emission (ASE) noise degrades optical signal-to-noise ratio, particularly

in multi-stage amplification architectures. Gain saturation nonlinearities distort signal waveforms a critical limitation for intensity-modulated formats such as OOK while cross-gain modulation introduces channel crosstalk in wavelength-division multiplexed systems. Experimental characterization reveals that while DPSK modulation exhibits only ~2 dB power penalty through a high-power SOA, OOK formats suffer penalties of 7-8 dB due to extinction ratio degradation from gain compression. These findings underscore the imperative for modulation-format-aware system design and adaptive gain control strategies.

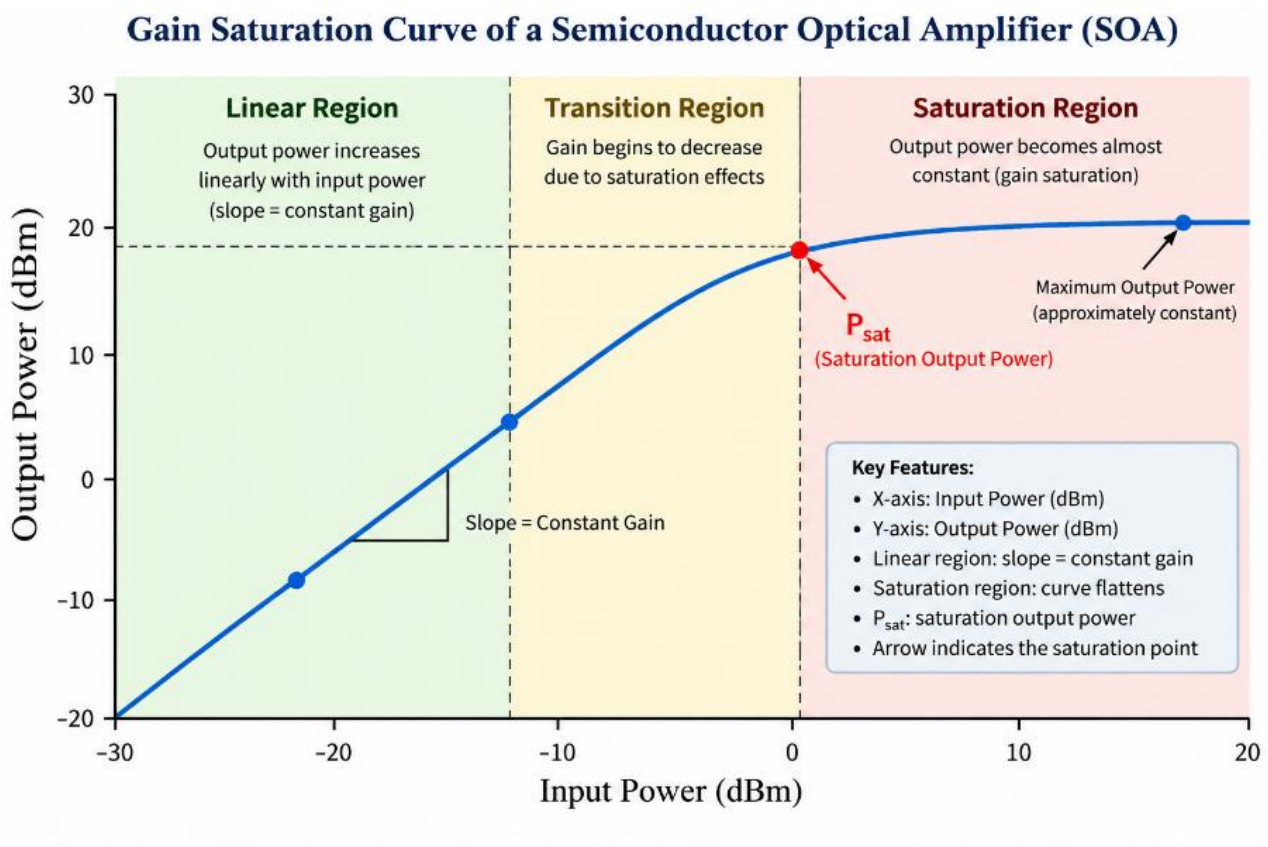


Figure 1. Typical SOA gain saturation curve showing linear amplification region (left) and saturation region (right). The saturation output power (P_{sat}) determines the upper limit of reliable amplification. Gain compression in the saturation region causes waveform distortion in intensity- modulated formats such as OOK.

This work concludes that SOAs represent a viable amplification technology for FSO systems where size, weight, power, and cost constraints preclude the use of conventional erbium-doped fiber amplifiers. However, their successful integration

demands a shift from static link budget design toward adaptive optimization frameworks that account for dynamic turbulence conditions and format-dependent nonlinear impairments. We recommend future research directions including:(1) computational modeling of turbulence-SOA interaction using Monte Carlo methods to predict outage probability under realistic channel statistics; (2) development of machine learning-based adaptive gain control algorithms that jointly optimize optical and electrical amplification stages ; and (3) investigation of optically-pumped SOA architectures that decouple carrier injection from optical confinement, potentially enabling lower noise figures and higher saturation powers than conventional electrically-pumped devices. These directions align with the growing emphasis on intelligent, reconfigurable optical communication systems and offer a pathway toward reliable, high-capacity FSO links.

References

[1] A. Maho et al., "Development and system evaluation of high-power semiconductor optical amplifiers for satellite-based free-space communications," in Proc. SPIE, vol. 13699, 2025.

[2] C. K. Duda, C. Lindstrom, F. Fonta, B. Stuhl, A. Cross, and J. Smith, "Evaluation of a semiconductor optical amplifier for free space optical communication applications," in Proc. SPIE, vol. 13355, 2025.

[3] H. Tang, C. Yang, L. Qin, L. Liang, Y. Lei, P. Jia, Y. Chen, Y. Wang, Y. Song, C. Qiu, C. Zheng, X. Li, D. Li, and L. Wang, Sensors, vol. 23, no. 17, p. 7326, 2023,

[4] RPMC Lasers, "1550 nm SOAs boost link margin for free-space optical communication," Technical Note, 2025.

[5] M. Abtahi, P. Lemieux, W. Mathlouthi, and L. A. Rusch, J. Lightw. Technol., vol. 24, no. 12, pp. 4966–4973, Dec. 2006.

[6] M. Labrecque, J. Campbell, A. Chu, K. McClune, S. Estrella, E. Burke, T. T. Liu, H. E. Garrett, M. Larkins, S. Kinney, G. Morrison, L. A. Johansson, M. Mashanovitch, and P. O. Leisher, "Robust high-power single-mode semiconductor optical amplifiers at 1550 nm for free space optical communications," in Proc. SPIE, vol. 13029, 2024,

NUMERICAL STUDY OF THE EFFECT OF GOLD NANOPARTICLE SIZE ON THE PHOTOELECTRIC PERFORMANCE OF SILICON SOLAR CELLS BY USING SENTAURUS TCAD

M. Komilov [1*], R. Aliyev [2], N. Mirzaalimov [3], Sh. Tadjibayeva[4], A.Mirzaalimov

[1]*Senior Lecturer of department “Condensed Matter Physics”, Andijan State University, Andijan, Uzbekistan,* komilovmdotcom@gmail.com.

[2]*Professor of department “Condensed Matter Physics”, Andijan State University, Andijan, Uzbekistan,* alievuz@yahoo.com .

[3] *Associate Professor of department “Condensed Matter Physics”, Andijan State University, Andijan, Uzbekistan,* mirzaalimov90@mail.ru.

[4]*Lecturer of department “Condensed Matter Physics”, Andijan State University, Andijan, Uzbekistan,* shtadjiboyeva@gmail.com.

[5] *Associate Professor of Tashkent International University Andijan Campus, Andijan, Uzbekistan,* avazbekmirzaalimov@mail.ru.

Section: V. Advanced solar cells and photovoltaic technologies, Advanced characterization of photovoltaic materials and devices

---

Abstract

Improving light absorption and charge generation in silicon-based solar cells is essential for enhancing their photovoltaic performance. This study investigates the influence of a gold (Au) nanoparticle embedded in the emitter layer of a silicon-based solar cell on its optical and photoelectric characteristics using numerical simulations in the Sentaurus TCAD environment. An n^+–p–p^+ silicon solar-cell structure was developed, with the Au nanoparticle positioned at the center of the emitter layer. To identify the optimum nanoparticle size, its radius was systematically varied from 1 to 25 nm, and the resulting changes in short-circuit current density, optical generation, absorbed-photon density, and conversion efficiency were evaluated. The simulations revealed a strong dependence of the photovoltaic response on nanoparticle radius. The maximum short-circuit current density of 5.095 mA/cm² was obtained for a nanoparticle radius of 5 nm, while the minimum value of 3.667 mA/cm² occurred at 19 nm. The conversion efficiency exhibited a similar trend, reaching 2.96% at 5 nm and decreasing to 2.00% at 19 nm. Furthermore, the introduction of the Au nanoparticle increased the absorbed-photon density by approximately 2.7 times compared with the

nanoparticle-free structure. The observed enhancement is attributed to the optical interaction of the metal nanoparticle with incident radiation and the resulting increase in optical generation within the emitter region. These findings demonstrate that the size and placement of Au nanoparticles are critical parameters for optimizing the optical and photoelectric response of silicon solar cells and highlight the potential of plasmonic nanoparticle incorporation for improving photovoltaic device performance.

Keywords: Sentaurus TCAD; numerical modeling; silicon solar cell; gold nanoparticle; plasmonic effect; optical generation; absorbed-photon density; photovoltaic efficiency.

References:

1. *A. Mirzaalimov, J. Gulomov, R. Aliev, N. Mirzaalimov, and S. Aliev, “A study of silicon p-n structures with mono-and multifacial photosensitive surfaces,” Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, vol. 22, no. 1, pp. 25–32, 2022,*
2. *J. Gulomov, R. Aliev, N. Mirzaalimov, B. Rashidov, and J. Alieva, “Study of Mono- and Polycrystalline Silicon Solar Cells with Various Shapes for Photovoltaic Devices in 3D Format: Experiment and Simulation,” Journal of Nano- and Electronic Physics, vol. 14, no. 5, pp. 05012-1-05012–8, 2022,*
3. *M. Olaimat, L. Yousefi, O. Ramahi, M. M. Olaimat, and O. M. Ramahi, “Using Plasmonics and Nanoparticles to Enhance the Efficiency of Solar Cells: Review of Latest Technologies,” 2021.*
4. *P. Sati, A. Kumari, and S. Kumar, SOLAR ENERGY ADVANCEMENTS AND THEIR ENVIRONMENTAL IMPACTS, vol. 2. 2022.*
5. *R. Aliev, A. Mirzaalimov, and S. Aliev, “Development and some photovoltaic parameters of a silicon solar generator with vertical p-n junctions,” Applied Solar Energy (English translation of Geliotekhnika), vol. 49, no. 2, pp. 59–61, Apr. 2013.*
6. *P. Reineck, D. Brick, P. Mulvaney, and U. Bach, “Supporting Information for: Plasmonic Hot Electron Solar Cells: The Effect of Nanoparticle Size on Quantum Efficiency”.*

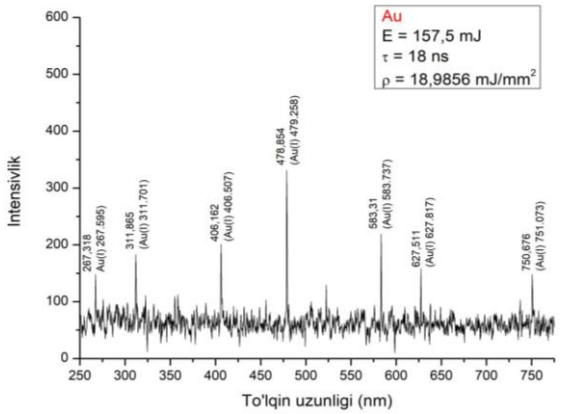
LIBS TEXNOLOGIYASI YORDAMIDA OLTIN VA KUMUSH PLAZMASINING EMISSIYA SPEKTRLARINI TAHLIL QILISH

Niyozkulov J.K., Eshonqulov G‘.B., Vahobova Z., Turotov F.K., Abduraimova K.
O‘zbekiston Milliy Universiteti, Fizika fakulteti Fotonika kafedrasi
E-mail: f.turotov@nuu.uz

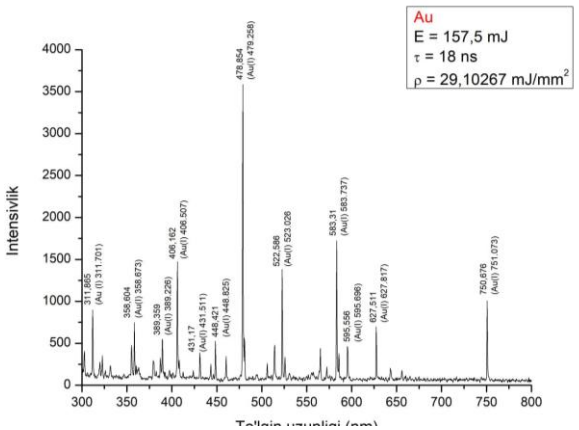
Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS) — modda yuzasiga yuqori quvvatli lazer nurlanishini fokuslash orqali uning yuzasidan mikroskopik plazma hosil qilish va ushbu plazmaning optik nurlanish spektrini tahlil qilishga asoslangan zamonaviy emission analitik usuldir [1]. Ushbu usul lazer nurlanishi ta’sirida hosil bo‘lgan plazma emissiyasi spektrini tahlil qilishga asoslanadi [2]. Mazkur ishda oltin (Au) va kumush (Ag) namunalarining elementar emissiya spektrlari tajribaviy ravishda tadqiq etildi. Tadqiqotning asosiy maqsadi Au va Ag elementlariga xos xarakteristik spektral chiziqlarni aniqlash, ularning intensivligini lazer energiya zichligiga bog‘liqligini o‘rganish hamda spektral chiziqlarni ishonchli identifikatsiya qilishdan iborat [3-4]. Shu bilan birga, olingan natijalar NIST atom spektrlari bazasi (ASD) ma’lumotlari bilan taqqoslanib, aniqlik darajasi baholandi [5].

Nanosekundli lazer impulslarining energiya zichligi o‘zgarishi ta’sirida atomar va ionar o‘tishlar dinamikasi hamda plazma hosil bo‘lish jarayoni o‘rganilib, spektral tahlil uchun 1064 nm to‘lqin uzunligi va 15-18 ns impuls davomiyligiga ega Nd:YAG lazeri qo‘llanildi. Lazer nuri namunaga fokuslanib, energiya zichligi oshirib borilishi natijasida plazma hosil qilindi. Spektral ma’lumotlarni qayd etishda yuqori aniqlikdagi spektrometr va optik tolali tizimdan foydalanildi.

LIPS texnologiyasi yordamida oltin va kumush namunalarining emissiya spektrlari turli energiya zichliklarida tadqiq qilindi. Olingan natijalar har ikkala element uchun ham xarakterli emissiya chiziqlarining hosil bo‘lishini va lazer impulsining energiyasi ortishi bilan spektral signallarning sezilarli darajada kuchayishini ko‘rsatdi.

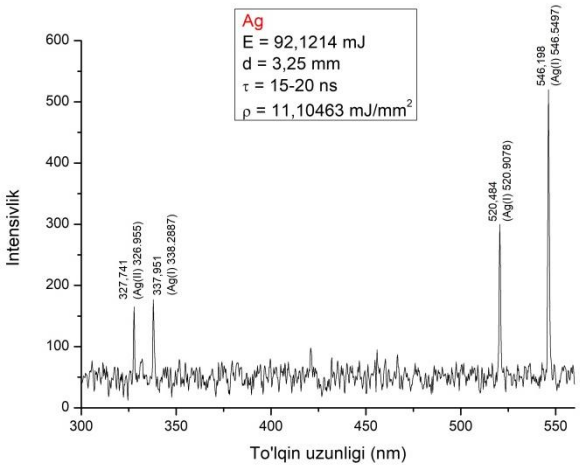


1-rasm

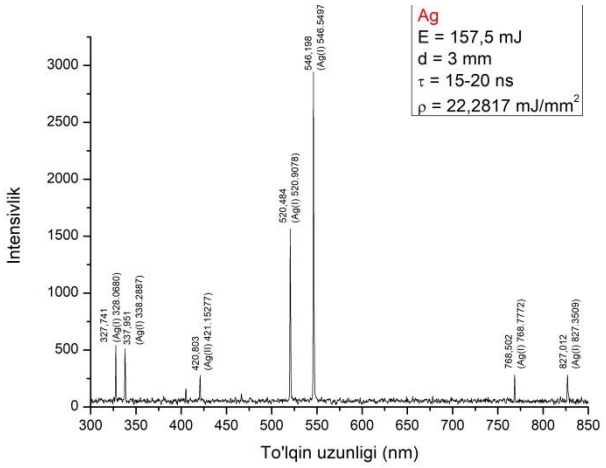


2-rasm

Au spektral xarakteristikalari: Oltin namunasi uchun 478.85 nm va 750.676 nm to‘lqin uzunliklaridagi atomar emissiya chiziqlari identifikatsiya qilindi (1-2 rasmlar). Eksperimental va nazariy to‘lqin uzunliklari orasidagi tafovut minimal ekanligi aniqlandi, bu esa tizimning yuqori kalibrlash aniqligini tasdiqlaydi.



3-rasm



4-rasm

Kumush namunalarida esa 327–338 nm hamda 520–546 nm oralig‘idagi emissiya chiziqlari asosiy spektral xususiyat sifatida qayd etildi. Energiya zichligi oshirilganda ushbu chiziqlarning intensivligi bir necha barobar ortib, spektrda qo‘shimcha emissiya chiziqlari paydo bo‘ldi. Xususan, 520 nm va 546 nm atrofidagi chiziqlar eng yuqori intensivlikka ega bo‘lib, kumush plazmasining asosiy emissiya markazlari sifatida namoyon bo‘ldi (3-4 rasmlar).

Lazer energiya zichligining oshishi plazma temperaturasining ortishiga va natijada atomlarning ionizatsiya darajasi oshishiga olib keldi. Tadqiqot natijasida LIBS usuli yordamida Au va Ag elementlarini identifikatsiya qilish uchun optimal energetik parametrlar aniqlandi. NIST bazasi bilan o‘tkazilgan qiyosiy tahlil esa olingan spektrlarning xalqaro standartlarga mosligini tasdiqladi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. X. Wan et al. Analysis of heavy metals in organisms based on an optimized quantitative LIBS. Optik – Int. J. Light Electron. Opt.(2015)
2. V. N. Rai, Awadhesh K. Rai, Fang-Yu Yueh, J. P. Singh. Laser-induced breakdown spectroscopy for real time and online elemental analysis. Bulletin of Laser and Spectroscopy Society of India (12) 1 (2003)
3. Mohamad Sabsabi and Paolo Cielo. Quantitative Analysis of Aluminum Alloys by Laser-Induced Breakdown Spectroscopy and Plasma Characterization. Applied Spectroscopy. Volume 49, Issue 4 (1995)
4. M. A. Wakil and Zeyad T. Alwahabi. Gated and non-gated silver detection using microwave-assisted laser induced breakdown spectroscopy. J. Anal. At. Spectrom., 2021, 36, 185-193

Internet saytlari

5. https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database

REACTIVE MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF AMORPHOUS NETWORK FORMATION FROM ZN_4O CLUSTERS AND 2,6-NAPHTHALENEDICARBOXYLATE LIGANDS IN ETHANOL

A. Ergasheva, I. Juraev, U. Khalilov
Arifov Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, AS Uz
E-mail: azizaabdujabborqizi@gmail.com

Isoreticular metal-organic frameworks (IRMOFs) are porous crystalline materials with tunable structures and selective adsorption properties, making them promising for gas storage, separation, catalysis and sensing applications [1–4]. However, the molecular mechanisms governing IRMOF assembly and phase formation remain poorly understood.

In this work, reactive molecular dynamics simulations were performed to investigate the interactions between Zn_4O clusters and 2,6-naphthalenedicarboxylate (2,6-NDC) ligands in an ethanol medium. The simulations were used to analyze the initial coordination processes, the evolution of metal-ligand connectivity and the role of ethanol molecules in directing the structural organization of the emerging framework.

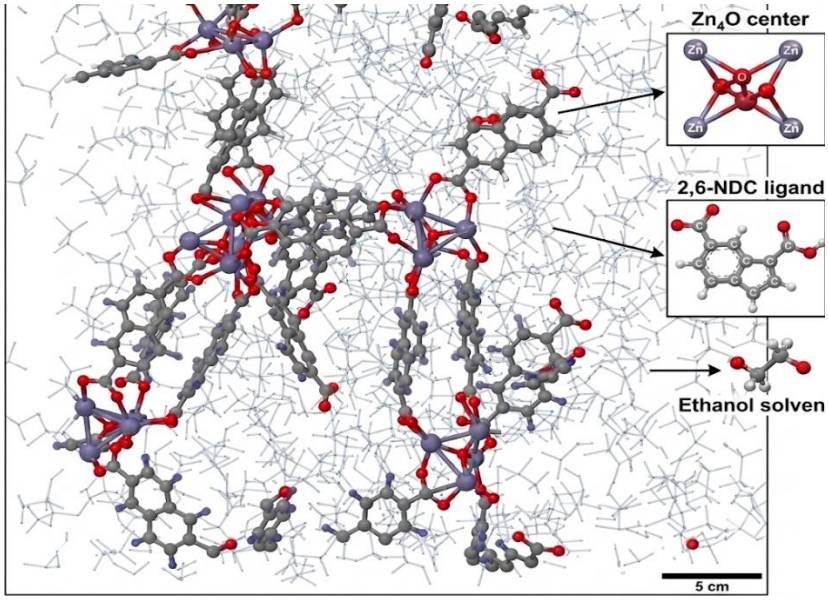


Fig 1. *Process of Zn_4O and 2,6-NDC amorphous structure formation in ethanol medium.*

The simulation results show that the interaction of Zn_4O clusters with 2,6-NDC ligands leads to the formation of a three-dimensional amorphous coordination network rather than an ordered IRMOF-type crystalline structure. The resulting network is characterized by asymmetric metal-ligand coordination and the absence of long-range structural order. In addition, ethanol molecules interact with accessible Zn sites and promote local coordination distortions, thereby hindering the formation of a regular and rigid crystalline framework.

These findings demonstrate that, under the simulated thermodynamic conditions, the Zn_4O/2,6-NDC system preferentially evolves toward a stable amorphous phase. The study provides atomistic insight into the early-stage assembly of IRMOF-8 precursors and highlights the important role of solvent-mediated coordination effects in controlling the transition between amorphous and crystalline metal-organic framework structures.

References

[1] S. Yu, X. Meng et al., International Journal of Hydrogen Energy 47, 39586 (2022).

[2] X. Zhang et al., Separation and Purification Technology 318, 123908 (2023).

[3] A. Nuri et al., Catal Lett 149, 1941 (2019).

[4] N. La Ngoc Tran et al., Sensors and Actuators A: Physical 347, 113932 (2022).

SPIN-POLARIZED PBE+U STUDY OF THE DOPED HOLE IN $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ AT x = 0.25

Eraliev A.A.[1], Otajonov A.M.[1], Yavidov B.Ya.[1], Khajibaev D.G.[2]
[1] Nukus State Pedagogical Institute named after Ajiniyaz, Nukus
[2] Institute of Fundamental and Applied Research, NRU TIIAME, Tashkent
asqar.eraliev@ndpi.uz

In the conventional description [1] the hole introduced by Sr substitution in $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ enters the planar Cu-3d x^2-y^2 / O-$2p_\sigma$ antibonding band. Perry, Tahir-Kheli and Goddard (PTG) [2] proposed instead, from B3LYP calculations with explicit Sr, a localized Cu-3d $3z^2-r^2$ / apical O-$2p_z$ hole on the CuO_6 octahedron adjacent to each dopant, reporting z^2 hole populations of 0.341, 0.367 and 0.375 at x = 0.125, 0.25 and 0.5, together with an anti-Jahn–Teller contraction of the apical Cu–O bond. Two difficulties attach to the claim. Polarization-dependent X-ray absorption gives a Cu z^2 admixture of only 1.5–2 % [3], and B3LYP predicts an insulator even at overdoping, where experiment finds a metal [4], so orbital populations taken from that solution are suspect. We test the proposal at x = 0.25 within spin-polarized PBE+U.

Computational details. Quantum ESPRESSO 6.7MaX [8] was used with PBE and a Hubbard correction in the Dudarev scheme [5], U = 8 eV on both Cu sublattices, and GBRV ultrasoft pseudopotentials [6] with cutoffs of 80 and 640 Ry. The cell is the 56-atom orthorhombic Cmce supercell of eight formula units (a = 10.7126, b = 5.5434, c = 13.1039 Å) with two La replaced by Sr, giving x = 0.25 and checkerboard antiferromagnetic order, sampled on a shifted 3×6×4 mesh with 0.01 Ry smearing. All internal coordinates were relaxed to forces below 10^{-3} Ry/bohr with an electronic threshold of 10^{-8} Ry. An independent self-consistent run from atomic orbitals reproduced the relaxed total energy of −5844.66114 Ry. Löwdin populations were obtained after a non-self-consistent calculation on a 4×8×6 mesh with 450 bands (spilling parameter 0.0020).

Results. After relaxation the eight Cu sites separate into two groups of four, with moments of 0.570 and 0.423 μ_B; the larger coincides with the value of the undoped

compound. Both Sr occupy the same rock-salt block, so each CuO_2 plane has a substituted layer on one side only.

The Hubbard occupation matrices place the hole in the in-plane orbital without ambiguity. For both Cu types the hole eigenvalue in the minority-spin channel (0.461 and 0.505) carries 98.4–98.6 % weight on the crystal-frame d_{xy} orbital — that is, $x^2–y^2$ in the Cu–O bond frame of the 45°-rotated cell — and zero weight on $3z^2–r^2$. The z^2 hole populations are 0.053 and 0.025; Löwdin analysis of the same density gives 0.070 and 0.041. Both are an order of magnitude below the 0.367 reported in [2] for this doping, and agree with our earlier x = 0.125 value of 0.06. The total d occupation is 9.233 and 9.235, so neither site approaches Cu^{3+}; the two groups differ only in the majority-spin $x^2–y^2$ channel, whose occupation falls from 0.987 to 0.923.

The doped charge resides on the planar oxygen. Löwdin charges separate the 32 oxygen atoms into two groups of sixteen: 6.357 electrons on the planar sites against 6.435 on the apical, with a spread below 0.01 within each group. The spin polarization is more decisive, since it requires no undoped reference: the planar oxygen carries $+0.060\ \mu_B$ in its 2p shell, 0.058 of it from the two in-plane components, whereas the apical oxygen carries $-0.006\ \mu_B$ and is isotropic to within 0.01 electron. The system is metallic, and the Cu–O antibonding manifold 1.9 eV above E_F is planar in character, with a planar-to-apical weight ratio of 32.

The relaxed geometry separates the structural and orbital responses completely. The anti-Jahn–Teller contraction predicted by PTG is present and large: the apical Cu–O bond between the dopant and the copper lying directly beneath it along c contracts from 2.468 Å in the undoped compound to 2.245 Å, a shortening of 0.22 Å, close to the 0.26 Å reported in [2]. That copper, however, retains the full undoped moment of $0.570\ \mu_B$ and the larger of the two z^2 hole populations, 0.070. The four copper atoms that actually carry the doping — moment $0.423\ \mu_B$, reduced $x^2–y^2$ occupation — have apical distances of 2.472 and 2.495 Å, indistinguishable from the undoped value. The contraction and the doped hole therefore reside on different copper atoms. Since the apical distortion has served as the principal structural evidence for the z^2-hole picture

[2, 7], this removes that evidence: the contraction is an electrostatic response to the neighboring Sr^{2+} and not a signature of z^2 occupancy.

Conclusions. At x = 0.25 the doped hole is of $x^2–y^2$ and planar-oxygen $2p_\sigma$ character. The Cu-3d z^2 population is depleted by at most 0.07 electrons, the apical oxygen carries no spin polarization, and the anti-Jahn–Teller contraction occurs on a copper atom that is not hole-doped. Occupation matrices are projector dependent, but two independent projections of the same density agree, the polarization analysis carries no reference-state ambiguity, and the result is consistent with our x = 0.125 calculation and with the measurement of [3].

REFERENCES

1. Zhang F.C., Rice T.M. // Phys. Rev. B. – 1988. – Vol. 37. – P. 3759–3761.

2. Perry J.K., Tahir-Kheli J., Goddard W.A. III // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 65. – P. 144501.

3. Chen C.T., Tjeng L.H., Kwo J. et al. // Phys. Rev. Lett. – 1992. – Vol. 68. – P. 2543–2546.

4. Furness J.W., Zhang Y., Lane C. et al. // Commun. Phys. – 2018. – Vol. 1. – P. 11.

5. Dudarev S.L., Botton G.A., Savrasov S.Y. et al. // Phys. Rev. B. – 1998. – Vol. 57. – P. 1505–1509.

6. Garrity K.F., Bennett J.W., Rabe K.M., Vanderbilt D. // Comput. Mater. Sci. – 2014. – Vol. 81. – P. 446–452.

7. Božin E.S., Billinge S.J.L. // Phys. Rev. B. – 2005. – Vol. 72. – P. 174427.

8. Giannozzi P. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. – 2009. – Vol. 21. – P. 395502.

РОЛЬ КВАНТОВОЙ ЁМКОСТИ ГРАФЕНА И ПАРАМЕТРА $\eta = C_Q/C_{geo}$ В ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЙ ИНЖЕНЕРИИ MR-DWELL НАНОСТРУКТУР: СПЕКТРОСКОПИЯ $d2I/dV2$ КАК ПРЕДЛАГАЕМЫЙ МЕТОД ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ОЦЕНКИ

Досымова Бигуль Умиткаримовна[1], Долгополов Михаил Вячеславович[2]
[1] Ташкентский филиал НИЯУ МИФИ, Ташкент, Узбекистан
[2] Самарский государственный технический университет, Самара, Россия
E-mail: bbddggaa@gmail.com

Многослойные InAs/InGaAs/GaAs MR-DWELL (dots-in-a-well) гетероструктуры формируют квазисвязанные и локализованные состояния, определяющие резонансный туннельный транспорт. При радиационном воздействии накопление индуцированного заряда изменяет локальный электростатический потенциал, что приводит к смещению резонансных уровней и изменению их эффективного уширения. Поэтому повышение радиационной устойчивости может достигаться не только изменением активной структуры, но и управлением интерфейсом, через который внешнее зарядовое возмущение передаётся квантовой транспортной системе.

Предлагается использовать графен как активный элемент такого интерфейса. В отличие от идеализированного металлического электрода с практически бесконечной плотностью состояний, графен обладает конечной квантовой ёмкостью C_Q. Общая концепция quantum capacitance была введена Лурьи [1], а квантовая ёмкость графена была непосредственно измерена Xia и соавт. [2]. Это создаёт физическую основу для управления электростатическим экранированием без изменения основной геометрии MR-DWELL.

Для интерфейса графен—h-BN—MR-DWELL геометрическая ёмкость диэлектрического слоя задаётся как:

$$C_{geo} = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r A}{t_d}$$

а ключевым безразмерным параметром является: $\eta = \frac{C_Q}{C_{geo}}$

Здесь C_Q характеризует электронную сжимаемость графена, C_{geo} определяется геометрией и диэлектрической проницаемостью h-BN, а η задаёт относительный вклад этих двух составляющих в интерфейсную электростатику. В последовательной ёмкостной модели изменение η приводит к перераспределению потенциала между графеновым интерфейсом и активной частью гетероструктуры. Для радиационного сенсора цепочка преобразования может быть записана как:

$$D \rightarrow Q_{tr} \rightarrow \Delta\varphi(z) \rightarrow \Delta E_{res}, \Delta\Gamma \rightarrow I(V, D)$$

Введение графена добавляет управляемое звено:

$$C_Q \rightarrow \eta \rightarrow \Delta\varphi(z)$$

Таким образом, параметр η связывает электронные свойства графена с изменением энергетического положения и эффективной ширины резонансных состояний. В ранее разработанной модели graphene-assisted MR-DWELL показано, что изменение η позволяет управлять компромиссом между подавлением радиационно-индуцированного смещения резонансов и сохранением резонансного транспортного отклика [4]. Параметр η при этом является характеристикой конкретной интерфейсной конфигурации, а не универсальной материал-константой.

Для экспериментальной проверки этой связи предлагается регистрировать вольт-амперные характеристики и их вторую производную: $\frac{d^2I}{dV^2}$

Резонансные состояния определяют локальную кривизну I(V)-характеристики, поэтому положение и форма экстремумов d^2I/dV^2 могут использоваться как чувствительный диагностический признак изменения резонансного транспорта. Для набора образцов с различными значениями η можно сопоставить измеренные смещения особенностей d^2I/dV^2 с расчётными изменениями ΔE_{res} и ΔГ.

Принципиально важно, что d^2I/dV^2 не является прямым измерением C_Q или η. Это экспериментальный readout, чувствительный к изменению резонансного

отклика. Количественная оценка η требует сопоставления экспериментальных спектров с электростатической и транспортной моделью, а также контроля температуры, контактных сопротивлений, паразитной ёмкости и других факторов, влияющих на I(V)-характеристику.

Предлагаемая физическая цепочка имеет вид:

$$C_Q \rightarrow \eta \rightarrow \Delta E_{res}, \Delta\Gamma \rightarrow I(V) \rightarrow \frac{d^2I}{dV^2}$$

Схема объединяет электронные свойства графена, интерфейсную электростатику и резонансный транспорт MR-DWELL. Современные InAs/InGaAs DWELL-структуры и graphene-containing X-ray detector architectures подтверждают актуальность соответствующих технологических направлений [3, 5], но не являются прямой валидацией предлагаемой схемы.

Заключение. Предложена концепция электростатической инженерии MR-DWELL на основе конечной квантовой ёмкости графена. Параметр $\eta = C_Q/C_{geo}$ задаёт степень интерфейсной электростатической связи, а спектроскопия d^2I/dV^2 предлагается для экспериментальной проверки связанных с η изменений ΔE_{res} и $\Delta\Gamma$. Цепочка $C_Q \rightarrow \eta \rightarrow \Delta E_{res}, \Delta\Gamma \rightarrow I(V) \rightarrow d^2I/dV^2$ формирует основу последующей экспериментальной реализации радиационно-стойких MR-DWELL сенсоров.

ЛИТЕРАТУРА

1. Luryi S. Appl. Phys. Lett. 1988. Vol. 52. P. 501–503.

2. Xia J., Chen F., Li J., Tao N. Nat. Nanotechnol. 2009. Vol. 4. P. 505–509.

3. Mouloua D., Martin M., Ilahi B. et al. Sci. Rep. 2025. Vol. 15. P. 37470.

4. Dosymova B.U., Dolgopolov M.V. A Design Framework // arXiv:2608.06616. 2026. https://arxiv.org/abs/2608.06616

5. Liu C., Luo Y., Chen R., Wu W., Zhou H. Adv. Compos. Hybrid Mater. 2026. Vol. 9. P. 34.

METALL VA OKSIDLANGAN VOLFRAM TERMOEMITTERLARIDA DEKSAMETAZON MOLEKULASINING SIRTIY IONLANISH JARAYONLARI

O.I. Boliyev, Sh.M. Akhmedov, Sh.Dj. Akhunov, A.Sh. Radjabov, D.T. Usmanov
O‘zR FA U.A.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti,
Toshkent, O‘zbekiston,
e-mail: orifjonboliyev95@gmail.com

Yuqori haroratli termoemitter sirtlarida organik molekulalarning adsorbsiyasi, desorbsiyasi, ionlanishi va termik parchalanishi o‘zaro uzviy bog‘liq bo‘lib, murakkab fizik-kimyoviy jarayonlar zanjirini hosil qiladi. Ion hosil bo‘lish samaradorligi molekulaning xususiyatlari bilan bir qatorda emitter sirtining elektron holati, chiqish ishi, kimyoviy tarkibi va haroratiga ham bog‘liq. Metall sirtni oksidlash orqali ushbu xususiyatlarni o‘zgartirish sirtiy ionlanish samaradorligini boshqarish imkonini beradi.

Volfram yuqori erish harorati, vakuum sharoitida ishlash barqarorligi va termoelektron xususiyatlari sababli termoemitter sifatida keng qo‘llaniladigan materiallardan biridir. Volfram sirtida oksid qatlamining hosil bo‘lishi sirtning elektron holatini, xususan, chiqish ishini va molekulalarning sirt bilan o‘zaro ta’sir xususiyatlarini o‘zgartiradi[1-2]. Natijada metall va oksidlangan volfram sirtlarida molekulalarning adsorbsiyasi, elektron almashinuvi, ionlanishi va termik desorbsiyasi turlicha kechishi mumkin. Shu nuqtayi nazardan, kortikosteroidlar guruhiga mansub deksametazonning metall va oksidlangan volfram sirtlaridagi sirtiy ionlanishini o‘rganish ushbu molekulalarning termoemitter sirtlari bilan o‘zaro ta’sirini aniqlash uchun muhimdir..Mazkur ishning maqsadi metall va oksidlangan volfram termoemitterlari sirtida deksametazonning sirtiy ionlanish xususiyatlarini aniqlash, hosil bo‘ladigan molekulyar va fragment ionlarning tarkibini o‘rganish hamda ularning intensivligini emitter haroratiga bog‘liqligini tadqiq etishdan iborat.

Tajribalar sirtiy ionlanish tadqiqotlari uchun moslashtirilgan MI–1201B statik magnit mass-spektrometrida amalga oshirildi[3]. Termoemitter sifatida 0,05×1,0×16,0 mm^3 o‘lchamdagi volfram lenta ishlatildi. Tajribalar ikki xil sirt holatida — boshlang‘ich tekstura qilingan toza metall volfram va oksidlangan volfram sirtlarida

bajarildi. Bunda emitter harorati metall volfram uchun $1450 - 2150$ K oralig‘ida, oksidlangan volfram uchun esa $600 - 1250$ K oralig‘ida o‘zgartirildi. Oksidlangan emitter sirtini olish orqali volframning elektron va kimyoviy xususiyatlarini o‘zgartirish ko‘zda tutildi. deksametazonning etil spirtidagi eritmasi Knudsen yacheykasiga joylashtirilib, qizdirilgan emitter sirtiga termik bug‘ oqimi ko‘rinishida yetkazildi. Mass-spektrlar musbat ionlarni qayd qilish rejimida olindi. Emitter toki bosqichma-bosqich o‘zgartirilib, unga mos harorat qiymatlarida ion signallarining intensivligi qayd qilindi. Sirtiy ionlanish jarayonini tahlil qilishda deksametazon molekulalarining emitter sirtiga kelishi, adsorbsiyalanishi, termik qo‘zg‘alishi, sirt bilan elektron almashinuvi, ion holida desorbsiyalanishi va ehtimoliy fragmentatsiyasi ketma-ket va raqobatlashuvchi jarayonlar sifatida qaraladi. Emitter haroratining o‘zgarishi ushbu jarayonlarning har biriga turlicha ta’sir ko‘rsatishi mumkin. Nisbatan past haroratlarda molekulalarning sirtga adsorbsiyasi va ularning sirt bilan o‘zaro ta’siri muhim rol o‘ynasa, harorat ortishi bilan termik desorbsiya va ion hosil bo‘lish jarayonlari faollashadi. Yuqori haroratlarda esa molekulaning parchalanishi, emitter sirtining fizik-kimyoviy holatining o‘zgarishi va molekulalarning sirt yaqinidagi yashash vaqtining qisqarishi ayrim ionlarning intensivligi pasayishiga olib kelishi mumkin. Demak, ion toklarining haroratga bog‘liqligi oddiy monoton funksiya bo‘lmasdan, bir nechta bir vaqtning o‘zida sodir bo‘luvchi fizik-kimyoviy jarayonlarning natijasi bo‘lishi mumkin.

Metall va oksidlangan volfram termoemitterlarida olingan mass-spektrlarning qiyosiy tahlili deksametazonning ionlanish va fragmentatsiya xususiyatlari emitter sirtining kimyoviy-elektron holatiga sezilarli darajada bog‘liqligini ko‘rsatadi. Tajribaviy spektrlarda qayd etilgan molekulyar va fragment ionlarning *m/z* qiymatlari, nisbiy intensivliklari hamda ularning emitter haroratiga bog‘liqligi ion hosil bo‘lish jarayonining asosiy diagnostik mezonlari sifatida qaraldi. Ion signallarining harorat bo‘yicha turlicha o‘zgarishi molekula–sirt o‘zaro ta’siri, termik desorbsiya, ionlanish va fragmentatsiya jarayonlari o‘rtasidagi raqobatni aks ettiradi.Ayniqsa, oksidlangan volfram sirtida ion intensivligining harorat bilan o‘zgarishini talqin qilishda emitter

sirtining o‘zi ham qizdirish jarayonida fizik-kimyoviy jihatdan qayta tashkil topishi mumkinligini hisobga olish muhimdir. Shu sababli kuzatilgan ion signallari molekulaning xossalarigina emas, balki sirtning oksidlanish darajasi, elektron holati va adsorbsion markazlari bilan belgilanadigan kompleks natija sifatida baholanadi. Mazkur yondashuv deksametazon uchun SI–MS diagnostik belgilarini aniqlash bilan birga, kortikosteroid molekulalarining termoemitter sirtlarida ionlanish mexanizmlarini tushuntirishga imkon beradi.

Shunday qilib, metall va oksidlangan volfram termoemitterlarida deksametazon molekulasining sirtiy ionlanishini qiyosiy tadqiq etish emitter sirtining kimyoviy va elektron holati ion hosil bo‘lish jarayoniga ta’sirini aniqlash, molekulyar va fragment ionlarning shakllanish xususiyatlarini tavsiflash hamda ion toklarining haroratga bog‘liqligini baholash imkonini beradi. Tadqiqot natijasida aniqlanadigan xarakterli *m/z* signallar va ularning harorat bo‘yicha intensivliklari deksametazonning SI–MS sharoitidagi diagnostik belgilarini shakllantirish hamda kortikosteroid molekulalarining termoemitter sirtlaridagi ionlanish mexanizmlarini chuqurroq tushuntirish uchun asos bo‘lishi mumkin.

Foydalanilgan adabiyotlar

3. Kingdon KN, Irving Langmuir. Thermionic phenomena due to alkali vapors. *Phys. Rev* 1923; 21: 380-382.
4. Vida G, Josepovits VK, Gyor M, et al. Characterization of tungsten surfaces by simultaneous work function and secondary electron emission measurements. *Microsc Microanal* 2003; 9.4: 337–342.
5. Usmanov DT, Akhunov S, Khasanov U, Rotshteyn VM, Kasimov B. Direct detection of morphine in human urine by surface-ionization mass spectrometry. European Journal of Mass Spectrometry. 2020 Apr;26(2):153-7.

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕАДДИТИВНЫХ ЭФФЕКТОВ ПРИ РАСПЫЛЕНИИ НАНОПЛЕНОК ФУЛЛЕРЕНА C_{60} БОМБАРДИРОВКОЙ ПОЛОЖИТЕЛЬНЫМИ ИОНАМИ ЦЕЗИЯ В ДИАПАЗОНЕ ЭНЕРГИЙ E_0=1–5 КЭВ

Ахунов Ш.Дж., Махманов У.К., Усманов Д.Т.

Институт электроники им. У.А. Арифова Академии наук Республики Узбекистан, г. Ташкент E-mail: a.shovkatjon@mail.ru

В работе экспериментально и теоретически исследованы физические механизмы вторичной ионной эмиссии тонких нанопленок фуллерита C_{60} (толщиной 32 нм) при прямой бомбардировке моноатомными положительными ионами цезия ($^{133}Cs^+$) в диапазоне кинетических энергий от 1 до 5 кэВ. Эксперимент проведен на модифицированном секторном магнитном масс-спектрометре МИ-1201Т в условиях сверхвысокого безмасляного вакуума (10^{-6}–10^{-7} Па), после высокотемпературного прогрева аналитической камеры [1]. Образцы представляли собой однородные нанопленки фуллерена C_{60} толщиной 32 нм, нанесенные методом центрифугирования из раствора в толуоле на диэлектрические стеклянные подложки. Установлены закономерности эмиссии вторичных ионов в статическом (0.1 нА) и динамическом (1.0 нА) режимах облучения.

Обнаружен нелинейный рост коэффициента эмиссии интактных молекулярных ионов C_{60}^+ (m/z=720) при увеличении энергии пучка, обусловленный перекрытием каскадов столкновений и формированием приповерхностных термических пиков (*thermal spikes*). Экспериментально зафиксированы эффекты динамического цезирования поверхности, приводящие к резкому снижению локальной работы выхода и аномальной интенсификации процессов вторичной ионизации без термического разрушения углеродных каркасов. Изучение процессов ионно-лучевого воздействия на кластерные углеродные системы, такие как нанопленки фуллерита C_{60}, представляет фундаментальный интерес для физической электроники и эмиссионной микроскопии. Прямая бомбардировка органических и молекулярных мишеней

положительными моноатомными ионами цезия ($^{133}Cs^+$) традиционно рассматривается как эффективный инструмент прецизионного анализа поверхности.

Защита от электростатической зарядки диэлектрической подложки обеспечивалась заземленной мелкоячеистой металлической маской. Первичный пучок ионов цезия $^{133}Cs^+$ формировался в термоионизационном источнике и направлялся на мишень под углом 45°. Ток пучка варьировался от статического недеструктивного режима (I_1 = 0.1 нА, флюенс $<10^{13}$ ион/см^2) до динамического (I_2 = 1.0 нА), вызывающего радиационную аморфизацию.

В статическом аналитическом режиме облучения при энергиях пучка E = 1–3 кэВ в масс-спектрах регистрируется исключительно чистая линия интактного родительского иона C_{60}^+ (m/z = 720) и его изотопных сателлитов (m/z = 721, 722). При переходе к энергии 4–5 кэВ упругие потери энергии первичного иона цезия (133 а.е.м.) в легкой углеродной матрице резко возрастают. Это провоцирует внутримолекулярную фрагментацию по механизму последовательного отщепления стабильных нейтральных димеров углерода по схеме $C_{60}^+ \rightarrow C_{58}^+ + C_2 \rightarrow C_{56}^+ + C_2$, физическая природа которого в бесполевом пространстве прибора строго описывается положениями теории мономолекулярного распада возбужденных кластеров.

В динамическом режиме (при токе 1 нА) происходить сглаживание и деструкцию рельефа нанопленки толщиной 32 нм. Экстремально высокая плотность энергии приводит к разрушению молекулярных сфер и их последующей поперечной сшивке в стабильную сетку аморфного углерода. Данный визуальный факт безупречно коррелирует с масс-спектрометрическими данными, фиксирующими в этой точке падение родительского пика и взрывной рост термодинамически стабильных легких цепочек C_3^+ (m/z=36) и атомарного C^+ (m/z=12). Ключевой физической особенностью прямой бомбардировки ионами Cs^+ является нелинейный рост интенсивности интактного молекулярного пика C_{60}^+.

Передача импульса от тяжелого снаряда Cs^+ углеродным сферам локализуется в приповерхностном слое. Это формирует область мгновенного разогрева трека (*thermal spike*) и приводит к кооперативному «поршневому» выталкиванию неповрежденных макромолекул фуллерена без разрыва внутренних ковалентных связей. Экстремально высокая плотность энергии приводит к разрушению молекулярных сфер и их последующей поперечной сшивке в стабильную сетку аморфного углерода.

Таким образом, прецизионное варьирование энергии пучка первичных ионов Cs^+ в диапазоне 1–5 кэВ на масс-спектрометре МИ-1201Т позволяет реализовать неразрушающий контроль наноструктур и открывает новые механизмы управления вторично-ионной эмиссией за счет эффектов динамического цезирования и коллективных термических пиков, продолжая фундаментальные традиции физической электроники [4–8].

Литература

1. *Радченко В. И.* Вакуумная техника и технология. — 2019. — Т. 29. — С. 88.
2. *Siekhaus W. J., Wucher A. et al.* Phys. Rev. B. — 2012. — Vol. 85. — P. 125401.
3. *Garrison B. J.* Acc. Chem. Res. — 2016. — Vol. 49. — P. 2561.
4. *Dzhemilev N. Kh., Verkhoturov S. V., Veremyakin I. V.* Nucl. Instrum. Meth. B. — 1990. — Vol. 51. — P. 131.
5. *Джемилев Н. Х., Веревкин И. В.* Известия АН СССР. Сер. физ. — 1990. — Т. 54. — С. 1350.
6. *Dzhemilev N. Kh., Rasulev U. Kh. et al.* Int. J. Mass Spectrom. — 1991. — Vol. 107. — P. 209.
7. *Akhunov Sh., Morozov S. N., Rasulev U. Kh.* Nucl. Instrum. Meth. B. — 2003. — Vol. 203. — P. 110–118.
8. *Dzhemilev N. Kh., Betz G. et al.* Nucl. Instrum. Meth. B. — 2001. — Vol. 180. — P. 120.

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕАДДИТИВНЫХ ЭФФЕКТОВ ПРИ БОМБАРДИРОВКЕ ПЛЕНОК ФУЛЛЕРЕНА (C_{60}) ПОЛИАТОМНЫМИ ИОНАМИ Au_m^+ (m=1-7)

Ахунов Ш.Дж., Усманов Д.Т., Ахмедов Ш.М., Назаров М.М., Болиев О.
Институт ионно-плазменных и лазерных технологий, АН РУз, Ташкент, Узбекистан
e-mail: a.shovkatjon@mail.ru

В работе экспериментально и теоретически исследован процесс эмиссии вторичных ионов при бомбардировке тонких фуллереновых пленок C_{60} пучками моноатомных и полиатомных ионов золота $^{197}Au^+$, где m=1-7, с использованием статического секторного магнитного масс-спектрометра МИ-1201Т [1]. Первичные пучки формировались по оригинальной двухкаскадной схеме путем распыления мишени $^{197}Au^+$ ионами цезия Cs^+ под углом 45°, что позволило сепарировать кластерные пучки вплоть до Au_7^+. Измерения проведены в широком энергетическом диапазоне (1–7 кэВ) при углах падения пучка 45° на образец. Детально изучено влияние тока первичного пучка на характер спектров:

-продемонстрирован переход от структурно-информативного статического режима (при токе 0.1 нА) к деструктивному динамическому режиму с аморфизацией поверхностного слоя (при токе 1 нА). В динамическом режиме обнаружен и физически обоснован куполообразный характер интенсивности нечетных мелкомассовых кластеров углерода с максимумом при энергии 3 кэВ.

-исследованы эффекты неаддитивного кластерного усиления при облучении легкой фуллеритовой матрицы полиатомными пучками золота, продемонстрировавшие нелинейный рост коэффициента эмиссии неповрежденных молекул с увеличением размера первичного кластера. Установлено, что поддержание тока пучка Au^+ на уровне 0.1нА обеспечивает реализацию статического недеструктивного режима ВИМС. Варьирование энергии от 1 до 7 кэВ позволяет осуществлять контролируемый переход от деликатной десорбции неповрежденных кластеров C_{60}^+ к их последовательной фрагментации. Напротив, повышение тока до 1 нА переводит систему в динамический режим, вызывая аморфизацию мишени с глубокой деструкцией углеродных каркасов, что наглядно подтверждается инверсией пиков в области спектра малых масс.

1. Akhunov Sh., Morozov S.N., Rasulev U.Kh. // Nucl. Instrum. And Methods. B. 2003. V. 203. P. 146.

TRIGEKSIFENIDIL (SIKLODOL) MOLEKULASINING SIRTIY IONLASHUV QONUNIYATLARI

Sh.M. Axmedov, S.S. Isxakova, Sh.Dj. Axunov, O.I. Boliyev, M.M. Nazarov, Sh.T. Toirov, D.T. Usmanov

O‘zR FA U.A.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, Toshkent, O‘zbekiston, e-mail: sherzod_in@mail.ru

Siklodol – antixolinergik (M-xolinoblokator) guruhiga mansub dori vositasi bo‘lib, uning ta'sir etuvchi moddasi trigeksifenidil (trihexyphenidyl) hisoblanadi. Kimyoviy jihatdan u 1-siklogeksil-1-fenil-3-piperidinopropan-1-ol bo‘lib, formulasi $C_{20}H_{31}NO$, molekulyar massasi esa M = 301 g/mol ni tashkil qiladi. Molekula tarkibida uchlamchi spirt guruhi, piperidin halqasi, siklogeksil va fenil radikallari mavjud – aynan shu tuzilish uning gaz fazadagi termik va ionlashuv xususiyatlarini belgilaydi.

Bunday murakkab organik birikmalarning gaz fazasidagi holatini, termik barqarorligini va fragmentatsiya kanallarini o‘rganishda sirtiy ionlashuv mass-spektrometriyasi (SI/MS) samarali analitik usul sifatida qo‘llaniladi.

Sirtiy ionlashuv hodisasi molekulaning qizdirilgan metall sirt bilan o‘zaro ta’sirlashuvi natijasida elektron berish yoki olish orqali ion hosil qilishiga asoslangan. Jarayon Saxa-Langmyur tenglamasi bilan tavsiflanadi va ionlashuv darajasi emitter sirtining chiqish ishiga, molekulaning ionlanish potensialiga, emitter harorati kabi bir qancha parametrlarga bog‘liq [1].

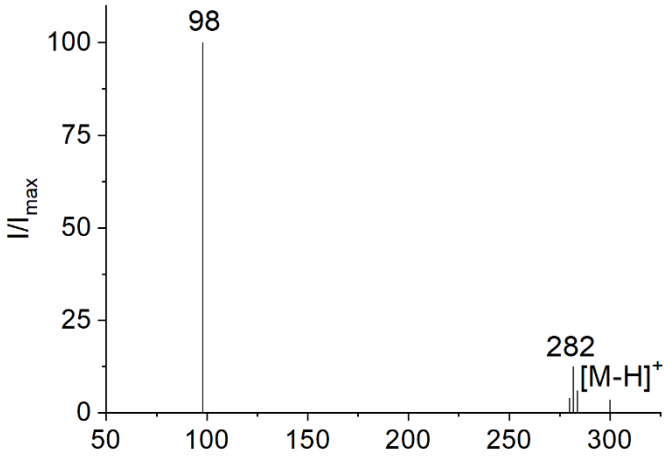
Ushbu usulning muhim afzalligi va ustunligi shundaki, u “yumshoq” ionlashuv sifatida past energiyali sharoitda molekulyar ionni saqlab qolish imkonini beradi, biroq bir vaqtning o‘zida yuqori haroratlarda termik parchalangan fragmentlarini ham kuzatish mumkin bo‘ladi.

1-rasmda keltirilgan spektr siklodolning SI/MS ri emitter harorati T_{em} = 1000 K, namuna bug‘latgich harorati $T_{bug‘}$ = 428 K sharoitlarda olingan.

Mass spektrda intensivligi eng yuqori (I/I_{max} = 100%) pik m/z 98 da kuzatiladi. Bu qiymat molekuladagi piperidin fragmentining xarakterli ioniga mos keladi –C–C bog‘ining piperidin azoti yoniga yaqin joyda uzilishi natijasida hosil bo‘ladigan siklik immoniy kationi ($C_6H_{12}N^+$, m/z ≈ 98). Bu turdagi parchalanish piperidin halqasi tutgan

ko‘plab farmakologik faol birikmalar (jumladan trigeksifenidil) uchun umumiy va yaxshi ma’lum fragmentatsiya yo‘nalishi hisoblanadi.

Triheksifenidil (siklodol) ning SI mass spektri, M=301 g/mol.



Ancha past intensivlikdagi (~15%) pik m/z 282 atrofida kuzatiladi. Bu, ehtimol, molekuladagi uchlamchi gidroksil guruhining suv yoki gidroksil radikali shaklida ajralib chiqishi (M−OH yoki M−H_2O) natijasida hosil bo‘lgan fragmentga mos keladi. Uchlamchi benzil turdagi spirtlar uchun bunday degidratatsiya reaksiyasi odatiy hisoblanadi, chunki natijada hosil bo‘lgan karbokation fenil halqasi bilan konjugatsiyalanib turg‘unlashadi.

Molekulyar massa hududida, ya’ni m/z 300 atrofida, juda kichik intensivlikdagi $[M–H]^+$ ioni kuzatiladi. Uning intensivligining pastligi molekulaning sirtiy ionlashuv sharoitida termik jihatdan beqarorligini va molekulyar ion hosil bo‘lishidan ko‘ra parchalanish jarayonining ustunlik qilishini ko‘rsatadi. Bu holat – murakkab, funksional guruhlarga boy organik molekulalar uchun sirtiy ionlashuv spektrlarida keng tarqalgandir.

Bunday fragmentatsiya yo‘li trigeksifenidilning boshqa ionlashuv usullarida (masalan, elektron zarb bilan ionlashtirishda) ham kuzatiladigan tipik yo‘nalishga mos keladi, bu esa sirtiy ionlashuv natijalarining ishonchliligini tasdiqlaydi.

Usmanov D. T. et al. Direct detection of morphine in human urine by surface-ionization mass spectrometry //European Journal of Mass Spectrometry. – 2020. – T. 26. – №. 2. – C. 153-157.

ВЛИЯНИЕ ГРАНИЦЫ АСИММЕТРИЧНОГО ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА НА ДИНАМИКУ ЭЛЕКТРОННОГО ВОЛНОВОГО ПАКЕТА В МОНОСЛОЙНОМ ГРАФЕНЕ

М. Авазов[1,], Н. Искандаров[1], К. Бобожонов[2], Х. Рахимов[1]*

[1] Институт материаловедения Академии наук Республики Узбекистан

[2] Ургенчский государственный университет им. Абу Райхана Беруни, Ургенч

** e-mail: avazovmirzabek954@gmail.com*

Графен представляет собой двумерный материал с линейным энергетическим спектром в окрестности точек Дирака. Низкоэнергетические носители заряда ведут себя как безмассовые релятивистские квазичастицы, что обусловливает высокую подвижность и необычные квантово-транспортные явления, включая туннелирование Клейна [1]. Для направленного управления носителями перспективно формирование электростатических потенциалов с заданной геометрией. Цель работы – исследовать влияние треугольного асимметричного электростатического потенциала на динамику электронного волнового пакета в монослойном графене при распространении слева направо и справа налево. Анализировалась зависимость вероятности прохождения от энергии волнового пакета, величины и знака потенциала, а также направления движения.

Модельная система представляет собой монослой графена длиной L = 1024 нм и шириной W = 128 нм. В центральной части расчётной области расположен электростатический потенциал треугольной формы, занимающий область размером 64 × 128 нм. Потенциал рассматривался как положительный барьер $+V$ или отрицательная потенциальная яма $-V$.

Динамика квазичастиц описывалась континуальной моделью Дирака, а временная эволюция рассчитывалась методом расщепления оператора [2, 3]. Начальное состояние задавалось гауссовским волновым пакетом шириной σ = 15 нм. Рассматривались энергии E = 100 и 200 мэВ при $|V|$ = 25–500 мэВ; шаг по времени составлял Δt = 0,2 фс. Вероятность прохождения определялась как интегральная вероятность нахождения квазичастицы за потенциальной областью после взаимодействия с ней.

После взаимодействия с асимметричной потенциальной областью вероятность прохождения быстро возрастает и достигает квазистационарного значения. При малых $|V|$ сохраняется высокая прозрачность, связанная со слабым рассеянием и

особенностями хирального туннелирования.

С увеличением $|V|$ вероятность прохождения в целом уменьшается, однако зависимость остаётся немонотонной: при промежуточных значениях потенциала возникают локальные максимумы и минимумы. Это связано с интерференцией прошедших и отражённых компонент, фазовыми сдвигами на границах потенциала и частично резонансным прохождением. Для E = 100 и 200 мэВ получены различающиеся зависимости прохождения от величины потенциала. В отдельных диапазонах $|V|$ увеличение энергии повышает прозрачность структуры, однако характер изменения определяется соотношением между энергией квазичастицы и величиной потенциала.

Главным результатом является различие между прямым и обратным прохождением. При изменении направления волновой пакет взаимодействует с различными сторонами треугольной потенциальной области, что изменяет условия отражения, интерференции и перераспределения плотности вероятности. Направленная асимметрия сохраняется как для положительного барьера, так и для отрицательной потенциальной ямы.

Треугольный асимметричный электростатический потенциал существенно влияет на динамику электронного волнового пакета в монослойном графене. Вероятность прохождения определяется величиной и знаком потенциала, энергией пакета и направлением его распространения.

Геометрическая асимметрия приводит к устойчивому различию между прямым и обратным прохождением. Немонотонные зависимости обусловлены интерференцией, внутренним отражением и частично резонансным взаимодействием волнового пакета с границами потенциала. Результаты могут быть использованы при разработке графеновых электронно-оптических элементов, направленных транспортных каналов и геометрических диодных структур.

Литература

1. Katsnelson M. I., Novoselov K. S., Geim A. K. Nature Physics, **2**, 620 (2006).
2. Rakhimov Kh., Chaves A., and Lambin Ph. App. Sci. **6** (9), 256 (2016).
3. Anđelković M., *et al*. Physica E **147**, 115607 (2023).

НАНОМАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДА В КАЧЕСТВЕ АНОДА ДЛЯ НАТРИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Асатов А.А.
Институт ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А. Арифова АН Республики Узбекистан, Ташкент, Узбекистан, aaasatov@gmail.com

Натрий-ионные аккумуляторы (НИА) рассматриваются как перспективная альтернатива литий-ионным (ЛИА) благодаря высокой доступности и низкой стоимости натрия [1], тогда как масштабирование ЛИА ограничено дефицитом лития [2]. Ключевой научной задачей остаётся создание эффективных анодных материалов. Цель работы — анализ наноматериалов на основе углерода в качестве анода НИА и факторов, определяющих их электрохимические характеристики.

Ион натрия крупнее иона лития (102 пм против 76 пм), что снижает скорость диффузии и повышает энергию активации при интеркаляции. Графит — стандартный анод ЛИА — непригоден для НИА, так как Na^+ нестабильно встраивается в структуры типа LiC_6 [3]. Объёмные изменения анодов НИА при циклировании достигают 200–300% (сплавы на основе Sn) против ~10% у графита в ЛИА, что снижает циклическую стабильность (табл. 1) и требует анодных материалов с более открытой наноструктурой.

Параметр	Li-ion (графит)	Na-ion (наноуглерод)
Размер иона	76 пм	102 пм
Объёмное расширение	~10%	до 200–300%
Удельная ёмкость анода	300–370 мА·ч/г	300–350 мА·ч/г

Таблица 1 – Сравнение анодных материалов ЛИА и НИА [3]

Наноматериалы на основе углерода как анод НИА

Среди альтернативных анодов НИА рассматривались сплавы фосфора и олова, оксиды, сульфиды и кремний — материалы с высокой ёмкостью, но подверженные значительным объёмным изменениям и быстрой деградации при

циклировании. Наибольший практический интерес представляют наноструктурированные углеродные материалы: твёрдый углерод (ТУ), наноуглеродные волокна, графеновые структуры и углеродные наноматериалы, допированные гетероатомами (N, S, Co), — благодаря низкой стоимости, высокой электропроводности, коррозионной стойкости и экологичности производства [4]. ТУ демонстрирует наиболее сбалансированные характеристики (300–350 мА·ч/г при доступной цене), однако начальная кулоновская эффективность (~80%) и циклическая стабильность остаются умеренными.

Механизмы хранения натрия в углеродных наноматериалах

Механизм хранения Na^+ в неупорядоченной наноструктуре ТУ остаётся предметом дискуссии: предложены модели «вставка–адсорбция», «адсорбция–интеркаляция», «трёхступенчатая» и «адсорбция–заполнение», различающиеся вкладом интеркаляции, адсорбции на дефектах и заполнения закрытых нанопор [5]. Общей чертой моделей является определяющая роль наноразмерной пористости, межслоевого расстояния (d_{002}) и доли псевдографитовых доменов в ёмкости и обратимости процесса.

Электрохимические характеристики наноструктурированных углеродных анодов

Морфология наноматериала и метод синтеза существенно влияют на характеристики. ТУ, полученный пиролизом опилок при 1400 °C, показывает начальную обратимую ёмкость 309,2 мА·ч/г при кулоновской эффективности 83,4% и потере ёмкости 4,2% после 100 циклов [6]. Модифицирование поверхности ТУ центрами CoN_4 обеспечивает ёмкость 220,6 мА·ч/г при 25 °C и сохранение 270 мА·ч/г при −40 °C за счёт ускоренной десольватации и диффузии Na^+ [7].

Заключение

Проведённый анализ показывает, что наноматериалы на основе углерода — прежде всего твёрдый углерод и его наноструктурированные модификации — являются наиболее реалистичной основой анодов для НИА, обеспечивая приемлемое сочетание удельной ёмкости, стоимости и экологичности производства. Ключевые научные задачи — повышение начальной кулоновской эффективности (~80%), циклической стабильности и скорости переноса Na^+, определяемые морфологией и пористостью наноструктуры. Рекомендуется:

– регулировать межслоевое расстояние d_{002} и пористость углеродных наноматериалов на стадии синтеза;

– формировать стабильный слой твёрдого электролита (SEI) с высоким содержанием NaF;

– использовать недорогие возобновляемые прекурсоры (биомасса, уголь) и допирование гетероатомами (N, S, Co) для наноструктурирования углерода и ускорения переноса Na^+.

Развитие методов направленного наноструктурирования углерода и инженерии межфазных границ — наиболее перспективный путь к созданию анодов нового поколения для промышленных натрий-ионных аккумуляторов.

Список литературы

1. Yabuuchi N., Kubota K., Dahbi M., Komaba S. Chemical Reviews. – 2014. – Vol. 114, № 23. – P. 11636–11682.
2. Skundin A., Kulova T., Yaroslavtsev A. // Russian Journal of Electrochemistry. – 2018. – Vol. 54, № 2. – P. 113–152.
3. Hwang J., Myung S., Sun Y. // Chemical Society Reviews. – 2017. – Vol. 46, № 12. – P. 3529–3614.
4. Zhang X., Yang Y., Liu J., et al. ChemSusChem. – 2023. – Vol. 16, № 8. – e202201987.
5. Chen X., Liu C., Fang Y., Cao Y., et al. // Carbon Energy. – 2022. – Vol. 4. – P. 1133–1150.
6. Wang J., Li F., Duan Y., et al. // Ionics. – 2023. – Vol. 29. – P. 2311–2318.
7. Song M., Hu Z., Yuan C., et al. Advanced Energy Materials. – 2024. – Vol. 14. – 2304537.

ОСОБЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ ФОТОЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ Si (111) В ОБЛАСТИ БЛИЖНЕГО УЛЬТРАФИОЛЕТА

Н.А. Нурматов, Р.А. Алимов, Б.Т. Туракулова, М. Абдужабборова
Национальный университет Узбекистана имени Мирзо Улугбека
AlimovRavshan313@gmail.com.

В данной работе представлены результаты системного анализа спектральных зависимостей квантового выхода фотоэмиссии (КВФ) монокристаллического кремния Si (111) n-типа в энергетическом диапазоне $h\nu$ = 4,0–5,2 эВ. Экспериментальные исследования, проведенные в условиях сверхвысокого вакуума, позволили впервые зафиксировать формирование параболических зависимостей КВФ, обусловленных сложной кинетикой образования кислородосодержащих термических доноров и возникновением «quasi-metallic» (квазиметаллического) поверхностного слоя. Научная новизна исследования заключается в установлении взаимосвязи между термически активируемой ионизацией доноров, смещением уровня Ферми и энергетической трансформацией поверхности, приводящей к металлоподобному характеру эмиссии. Полученные данные позволяют глубже интерпретировать процессы на атомно-чистой поверхности кремния, имеющие критическое значение для современной полупроводниковой электроники.

Состояние поверхности полупроводниковых материалов является определяющим фактором в функционировании современных микро- и наноэлектронных устройств. Динамический контроль эмиссионных свойств при термических воздействиях необходим для проектирования стабильных эмиттеров и высокоэффективных фотоэлектрических преобразователей [1]. В процессе технологического отжига в приповерхностных слоях полупроводников протекают сложные фазовые превращения, сегрегация примесей и структурная перестройка, что радикально меняет электронную конфигурацию границы раздела.

Актуальностью настоящего исследования является недостаточное изученность механизмов формирования фотоэлектронных спектров кремния в диапазоне энергий $h\nu$ = 4,0–5,5 эВ. Существующие модели часто не учитывают влияние термических дефектов и локальных состояний, возникающих в условиях

сверхвысокого вакуума. Целью работы является комплексное выяснение механизмов формирования электронной структуры поверхностного слоя Si (111) и их прямого влияния на КВФ. Для исключения влияния внешних адсорбатов и обеспечения достоверности результатов эксперимент проводился в сверхвысоковакуумных условиях, позволяющих наблюдать внутреннюю динамику перестройки дефектной структуры кристалла.

Методика эксперимента. Экспериментальные исследования осуществлялись на базе многофункциональной сверхвысоковакуумной установки при остаточном давлении ~10^{-10} Торр. Контроль элементного состава и химической чистоты поверхности проводился методом оже-электронной спектроскопии (ОЭС) [2,3].

Объектом исследования служил монокристалл Si (111) n-типа (диаметр 8 мм, толщина 1 мм). Образец подвергался длительному отжигу при температурах T = 1400–1450 ^{0}K в течение более 50 часов. Данный цикл обеспечивал полную десорбцию оксидных пленок и углеродных загрязнений, накопленных в процессе механической и химической обработки. После каждого этапа прогрева регистрировались оже-спектры; отсутствие посторонних пиков и стабильность основных переходов кремния (в частности, пика при 92 эВ) подтверждали достижение атомной чистоты. Снятие спектральных зависимостей КВФ проводилось в диапазоне $h\nu$=4,0–5,2 эВ с использованием калиброванных источников УФ-излучения и монохроматора МРД-12У.

Результаты и обсуждение. Анализ экспериментальных зависимостей Y(hν) показал, что высокотемпературный отжиг трансформирует полупроводниковый характер эмиссии в металлоподобный. В спектральной области до $h\nu$ = 5,15 эВ рост КВФ подчиняется параболическому закону, что позволило применить формализм теории Фаулера. Путем построения изотермических прямых в координатах $Y^{1/2}$ = f($h\nu$) и их экстраполяции до пересечения с осью энергий была определена фотоэлектронная работа выхода, равная $h\nu$ = 3,98 ± 0,02 эВ

Важной особенностью спектров является отклонение от аппроксимации Фаулера, наиболее выраженное в критической точке $h\nu$=4,66 эВ, где фотоэмиссионный ток достигает выраженного максимума. Согласно нашей

интерпретации, данный пик обусловлен высокотемпературной перестройкой дефектной структуры и высокой чувствительностью УФ-фотоэмиссии к локальной топологии поверхности. В рамках трехступенчатого механизма Спайсера этот эффект можно рассматривать как резонансное усиление эмиссии, связанное с изменением вероятности прохождения электронов к поверхности (вторая ступень). При этом существенную роль играет неупругое электрон-электронное рассеяние на избыточных донорных центрах и рассеяние на фононах, которые модифицируют длину свободного пробега фотоэлектронов. Таким образом, термическая обработка не только очищает поверхность, но и создает специфический профиль дефектов, формирующий тонкую структуру КВФ.

Проведенное исследование раскрывает фундаментальные механизмы трансформации электронной структуры Si (111) под воздействием термических факторов в сверхвысоком вакууме [4].

Результаты работы имеют стратегическое значение для проектирования перспективных электронных эмиттеров и приборов на основе кремниевых наноструктур.

Список литературы

1. Демидов А. А., Рыбалка С. Б. Современные и перспективные полупроводниковые материалы для микроэлектроники следующего десятилетия (2020-2030 гг.) // Прикладная математика & Физика. — 2021. — Т. 53, № 1. — С. 53–72.

2. Бурибаев И., Нурматов Н. А. Фотоэлектронная эмиссия монокристаллов ниобия и сплава ниобий-молибден в области ВУФ // Изв. АН СССР, сер. физич. — 1991. — Т. 55, № 12. — С. 2450–2453.

3. Buribayev I., Nurmatov N. A. UV photoelectron spectra of Nb and Mo single-crystal surface // J. of Electron Spectrosc. Relat. Phenom. — 1994. — Vol. 68. — P. 547–554.

4. Kazumi Wada. Unifi ed model for formation kinetics of oxygen thermal donors in silicon // Phys. Rev. B. — 1983. — Vol. 30, No. 10. — P. 5884–5895.

СТИМУЛИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ РАДИАЦИОННО-ОБЛУЧЕННЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КРЕМНИЕВЫХ СТРУКТУР

Р. У. Алиев[1], Ю. В. Царенко[2], Н. А. Мирзаалимов[1], Г. А. Алиева[1]
[1] Андижанский госуниверситет, Узбекистан
[2] Витебский институт технической акустики, Беларусь
alievuz@yahoo.com

В работе представлены экспериментальные результаты исследования процессов восстановления физических параметров, облученных гамма радиацией (Co^{60}) структур с n^+-p-переходом на основе монокристаллического и поликристаллического кремния (МК и ПК), предназначенного для использования в качестве основания для фотоэлектрических преобразователей энергии. В качестве метода исследования использован “Sinton Instrument Suns-V_{oc}”, позволяющий измерять в автоматическом режиме Вольт-Амперные и Вольт-Ваттные характеристики, зависимости времени жизни неосновных носителей заряда (НЗ) при вариации освещенности в диапазоне (0,01-6,0)×100 Вт/см^2 [1]. Инновационный процесс ультразвуковой обработки (УЗО) радиационно-облученных структур осуществлялось при помощи ультразвуковых ванн с частотой 50-100 КГц в условиях с и без сопутствующих термоообработок. Сопоставление измеренных характеристик и изменение времени жизни неосновных НЗ в МК и ПК структурах позволяли представит физическую картину дефектообразования при радиационном облучении и механизмы их аннигляции при УЗО с и без последующих термических обработок (ТО) в вакууме.

Представляет большой интерес физические процессы аннигляции дефектов в объёмах зерен и их реструкции на границах зерен (ГЗ) при УЗО [2]. Анализ результатов исследования позволяли определить, что структуры из ПК деградирует под воздействием гамма-излучения быстрее и сложнее, чем МК. Основная причина заключается в наличие ГЗ и относительно повышенная концентрация исходных дефектов. Особенности деградации

поликристаллического кремния заключаются в следующих: -Границы зерен изначально содержат оборванные связи и примеси. Гамма-излучение ускоряет генерацию дефектов именно в этих областях, превращая их в мощные «стоки» для рекомбинации носителей; -Вакансии, созданные радиацией, легче перемещаются к границам зерен и образуют там стабильные комплексы дефектов, что резко снижает подвижность носителей заряда; -Радиационные дефекты увеличивают высоту потенциальных барьеров на границах зерен, что значительно повышает последовательное сопротивление структуры; -В ПК обычно выше концентрация кислорода и углерода, при облучении они активно формируют дефектные комплексы примесь-кислород, или вакансия кислород, создающие глубокие уровни в запрещенной зоне.

Существенное уменьшение эффективности ПК происходит при меньших дозах радиации из-за исходно меньшего времени жизни неосновных НЗ. Сильнее ухудшается фотоотклик в длинноволновой ИК-области из-за разрушения объемных свойств материала. Ультразвуковые волны создают переменные механические напряжения в решетке. Это стимулирует диффузию подвижных дефектов (например, атомов водорода или междоузельных атомов) к UP и дислокациям, где они пассивируют оборванные связи. Метод эффективен именно для ПК, ультразвук активирует «геттерирование» примесей ГЗ, снижая плотность глубоких ловушек в объеме зерна.

Литература

1. Рашидов Б. Д. Кремнийли p-n-структураларнинг фотоэлектрик хусусиятларига локал механик зўриқишнинг таъсири. // Автореферат дисс. На соискание уч. степени PhD по физ.-мат. наук. ФерПИ, Фергана. 2023. -56 с.

2. Ekaterina V. Skorb ⇑, Helmuth Möhwald Ultrasonic approach for surface nanostructuring. // Ultrasonics Sonochemistry 29 (2016) 589–603. http://dx.doi.org/10.1016/j.ultsonch.2015.09.003

EXACT LAYER-ODD CHECKERBOARD CONSTRAINT AT $\nu = 3/2$ IN A BILAYER EXTENDED HUBBARD MODEL

Abdullo Ahadov[1,2], Davron Dzhuraev[1]
*[1] Bukhara State University, Bukhara 200117, Uzbekistan *e-mail: ahadov.abdullo@bsmi.uz*
[2] Bukhara State Medical Institute, Bukhara 200126, Uzbekistan

For the bilayer nickelate $La_3Ni_2O_7$, we isolate the competition between kinetic coherence and nonlocal Coulomb exclusion in a one-effective-orbital extended Hubbard model. Here t is intralayer hopping, $t_\perp$ interlayer hopping, U onsite repulsion, and $V_\parallel$ and $V_\perp$ the in-plane and rung Coulomb repulsions. The filling is $\nu = \frac{N_e}{N_s}$, with N_e electrons on N_s lattice sites: $\nu = \frac{N_e}{N_s} = \frac{3}{2} \Rightarrow N_1 = \frac{N_s}{2}$, $Q = (\pi, \pi, \pi)$. At $\nu = 3/2$, exclusion of empty sites fixes N_1, the number of singly occupied vertices, to half the lattice. Zero nonlocal bond penalty then forces these vertices onto one complete bipartite sublattice. Positive $V_\perp$ locks the two checkerboards in antiphase and selects $Q = (\pi, \pi, \pi)$, where the final π denotes odd layer parity.

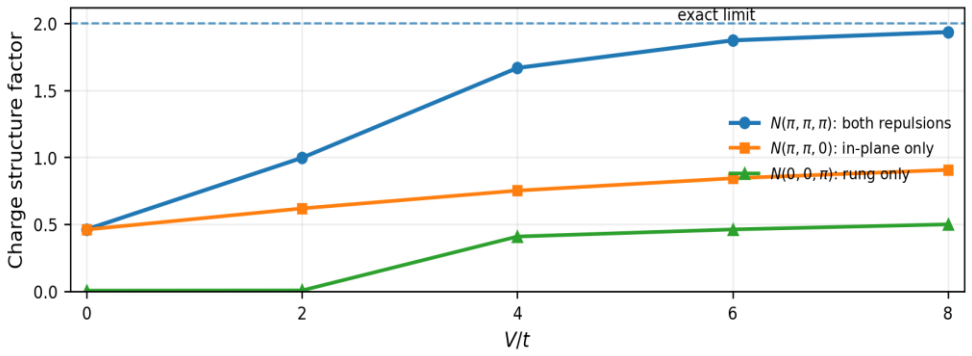


Fig. 1. ED charge response at ν = 3/2. Along $V_\parallel = V_\perp$ = V, N(π,π,π) rises 0.462→1.936 for V/t = 0→8, reaching 96.8% of the exact value 2. At V/t = 8, the $V_\parallel$ -only and $V_\perp$-only limits give N(π,π,0) = 0.907 and N(0,0,π) = 0.500, respectively, resolving separate in-plane and rung-odd charge sectors.

For an eight-site exact-diagonalization benchmark at $\frac{U}{t} = 8$, $\frac{t_\perp}{t} = 0.5$ and $V_\parallel = V_\perp = V$, the connected charge structure factor $N(Q)$ grows from 0.462 to 1.936 as V/t increases from 0 to 8, approaching the exact value 2 (see Fig.1). Meanwhile, the bond-defect expectations $P_\parallel$ and $P_\perp$ and the empty-site density $n_0 = D - 1/2$ collapse. Hence the strong-coupling state approaches the exact parity-locked kernel rather than merely developing generic charge fluctuations [1,2].

References

[1] H. Sun et al., Nature 621 (2023) 493-498. [2] J. Zhan et al., npj Quantum Mater. (2026).

PRESSURE-DRIVEN DECOUPLING OF INTERLAYER HYBRIDIZATION AND THE SUPERCONDUCTING SCALE IN $La_3Ni_2O_7$

Abdullo Ahadov[1,2],; Davron Dzhuraev[2]*
[1]Bukhara State Medical Institute, Bukhara 200126, Uzbekistan
[2]Bukhara State University, Bukhara 200117, Uzbekistan
**e-mail: ahadov.abdullo@bsmi.uz*

For bilayer $La_3Ni_2O_7$, P is hydrostatic pressure (GPa), and t_z is the interlayer hopping integral (eV), measuring hybridization between the two NiO_2 layers through the inner-apical Ni–O bridge. The T-linear normal-state resistance obeys $R(T) = R_0 + A'T$; R_0 is residual resistance and A' is the slope dR/dT (Ω K^{-1}), used as a low-energy scattering coordinate. T_c is the midpoint superconducting transition temperature. The dimensionless quantities λ_s and λ_c are the structural/interlayer and correlation-associated pairing contributions; λ_{eff} is the total effective coupling. At reference pressure P_0 = 20.5 GPa, λ_{s0} and λ_{c0} are their reference values: $\lambda_s(P) = \lambda_{s0}\frac{t_z(P)}{t_z(P_0)}$, $\lambda_c(P) = \lambda_{c0}\left(\frac{A'(P)}{A'(P_0)}\right)^{1/2}$ and $\lambda_{eff}(P) = \lambda_s(P) + \lambda_c(P)$. From 20.5 to 29.2 GPa in the same crystal, t_z rises from 0.6552 to 0.6744 eV, whereas A' falls from 1.29×10^{-3} to 6.38×10^{-4} Ω K^{-1} and T_c decreases from 61.9 to 55.3 K [1–3]. Hence the increase of λ_s compensates only about half of the decrease of λ_c, leaving λ_{eff} and the superconducting scale lower.

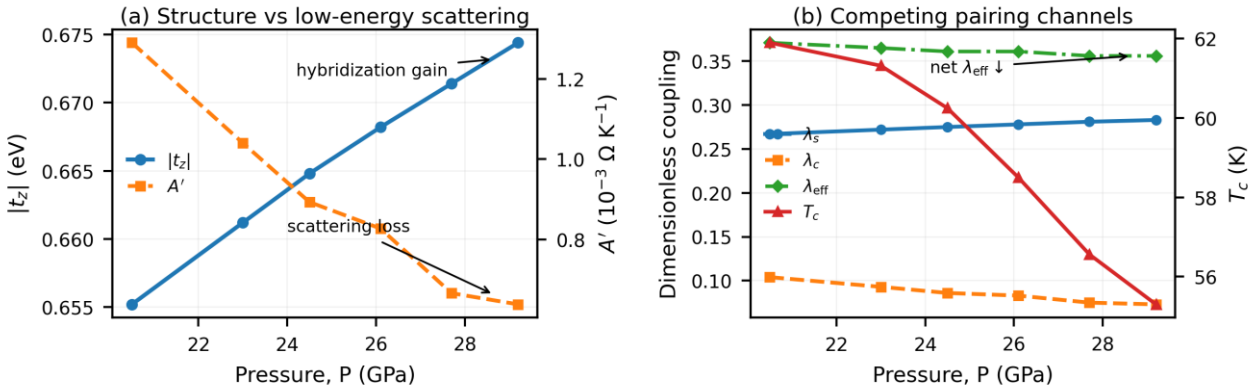


Fig. 1. (a) Pressure drives opposite changes of t_z and A'. **(b)** λ_s rises but λ_c falls more strongly, so λ_{eff} and T_c decrease.

Thus, superconductivity in pressurized $La_3Ni_2O_7$ reflects competition between stronger bilayer hybridization and a weakening correlation-associated low-energy channel.

References:

[1] H. Sun et al., Nature 621 (2023) 493–498.
[2] Y. Zhang et al., Nat. Commun. 15 (2024) 2470.
[3] Y. Zhang et al., Nat. Phys. 20 (2024) 1269–1273.

КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЭВОЛЮЦИИ СОЛЬВАТНЫХ СТРУКТУР В КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОЛИТНЫХ СИСТЕМАХ

Ашуров Р., Адилов М.

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А. Арифова АН РУз

e-mail: r.ashurov@iplt.uz

Локальное окружение катиона в жидкой фазе — сольватная оболочка — определяет энергетику переноса заряда через границу раздела и является ключевым параметром конденсированных ионных систем. По соотношению сил взаимодействия «катион—растворитель» и «катион—анион» различают сольватно-разделённые ионные пары (SSIP), контактные ионные пары (CIP) и агрегаты (AGG). Строение оболочки исследуется, как правило, при комнатной температуре, тогда как вопрос о её температурной устойчивости практически не ставился. Работа посвящена спектроскопическому и расчётному исследованию температурной эволюции сольватных структур.

Исследована система из 2,0 моль/л бис(фторсульфонил)имида калия в смеси пропиленкарбоната (ПК) и 1,1,2,2-тетрафторэтил-2,2,2-трифторэтилового эфира (ГФЭ) в объёмном соотношении 1:1. Системы сравнения — растворы той же соли в чистом ПК с концентрациями 2,0 и 4,0 моль/л.

Применены рамановская и ИК-спектроскопия, ЯМР на ядрах ^{17}O и дифференциальная сканирующая калориметрия. Молекулярно-динамическое моделирование с силовым полем OPLS-AA выполнено при трёх температурах — −20, +25 и +45 °C — с анализом радиальных функций распределения и координационных чисел. Квантово-химические расчёты выполнены методом функционала плотности (B3LYP/6-31G(d,p)); электростатический потенциал (ESP) рассчитан на поверхности Ван-дер-Ваальса.

Разложение колебательного спектра аниона. Область валентных колебаний группы S–N–S допускает разложение на компоненты, отвечающие различным типам координации (таблица).

Таблица — Отнесение компонент колебательного спектра

Волновое число, см$^{-1}$	**Отнесение**
≈712	Пропиленкарбонат, координированный с катионом (SSIP)

Волновое число, см$^{-1}$	Отнесение
≈720	Свободные анионы
≈729	Контактные ионные пары (CIP)
≈737	Агрегаты AGG-I (анион с двумя катионами)
≈749	Агрегаты AGG-II (анион более чем с двумя катионами)

Ослабление координации катион-растворитель. Полоса валентных колебаний C=O чистого ПК расположена при ≈1780,3 см$^{-1}$. Введение соли вызывает красный сдвиг, свидетельствующий о прочной координации катиона с карбонильной группой; последующее введение ГФЭ уменьшает сдвиг (полоса возвращается к ≈1779,6 см$^{-1}$), что указывает на ослабление взаимодействия катиона с растворителем.

Прямое доказательство диполь-дипольного взаимодействия. Добавление ГФЭ к ПК вызывает синий сдвиг рамановской полосы, монотонно усиливающийся с ростом содержания ГФЭ. Сдвиг связан с возрастанием дипольного момента связей C=O вследствие увеличения плотности электронного облака и служит прямым спектроскопическим свидетельством межмолекулярных диполь-дипольных взаимодействий между молекулами двух растворителей, противодействующих притяжению катиона к карбонильному кислороду.

Несольватирующий характер сорастворителя. Сигнал группы S=O в спектре ЯМР ^{17}O смещается в сильное поле после введения ГФЭ, что отражает сокращение расстояния «анион—катион». В ИК-спектре отсутствует возмущение полосы C–O–C сорастворителя, что означает пренебрежимо малое его взаимодействие с катионом.

Расчёт ESP даёт количественный дескриптор: для ПК экстремальные значения −1,731 и 1,393 эВ (модули сопоставимы), для ГФЭ — -0,831 и 1,663 эВ, то есть модуль минимума меньше модуля максимума, что характерно для несольватирующего компонента. Молекулярная динамика подтверждает вывод: координационное число пары «катион—фтор аниона» составляет 3,52 против 0,43 для пары «катион—фтор сорастворителя» при 25 °C.

Температурная эволюция. Во всём интервале сольватная структура остаётся доминируемой контактными парами и агрегатами. Доля сольватно-разделённых ионных пар составляет 18,7 % при +25 °C и 11,4 % при −20 °C; структуры при +25 и +45 °C практически идентичны.

Результат противоречит интуитивным представлениям: обычно понижение температуры рассматривается лишь как фактор, затрудняющий разрушение сольватной оболочки вследствие термически активируемого характера процесса. Здесь обнаружен противоположно направленный структурный эффект - охлаждение смещает равновесие в сторону контактных пар и агрегатов, уменьшая долю наиболее прочно сольватированных состояний и частично компенсируя кинетическое замедление. Температура стеклования по данным ДСК составляет около −34,3 °C, что подтверждает сохранение жидкоподобного состояния во всём интервале.

Выводы

1. Разложение области валентных колебаний S–N–S на пять компонент позволяет количественно охарактеризовать долевое распределение типов координации катиона.
2. Синий сдвиг рамановской полосы растворителя при введении фторированного сорастворителя, обусловленный возрастанием дипольного момента связей C=O, служит прямым доказательством межмолекулярных диполь-дипольных взаимодействий, ослабляющих связь катиона с растворителем.
3. Совокупностью данных ЯМР ^{17}O, ИК-спектроскопии, расчёта ESP и молекулярной динамики (координационное число 0,43 против 3,52) установлен несольватирующий характер сорастворителя.
4. Обнаружен эффект структурной компенсации: при понижении температуры от +25 до −20 °C доля сольватно-разделённых ионных пар уменьшается с 18,7 до 11,4 %, что частично компенсирует термическое замедление разрушения оболочки. Отсюда следует, что температурную устойчивость сольватной структуры необходимо рассматривать как самостоятельный проектный параметр конденсированных ионных систем.

Литература

1. Ge T., Yu D., Xiong Y. et al. Materials Today Energy. — 2026. — Vol. 55. — 102166.
2. Luo J., Yu D., Qin Y. et al. Energy. — 2026. — Vol. 361. — 142157.
3. Wu Y., Hu Q., Liang H. et al. Advanced Energy Materials. — 2023. — Vol. 13. — 2300259.

SINTEZ HARORATINING ZnO YUPQA PLYONKALARI TUZILISHI VA MORFOLOGIYASIGA TA’SIRI: XRD VA SEM TAHLILI

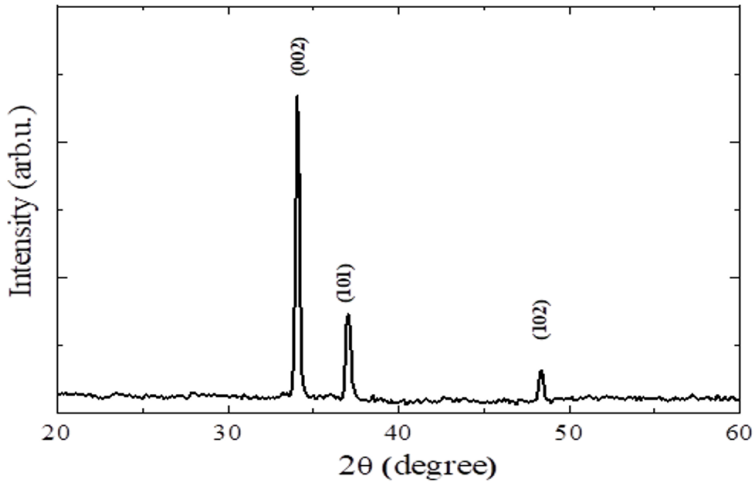
M.A. Zaxidova, S.E. Abdurashidova
Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy universiteti, Fizika fakulteti
E-mail: mzakhidova@yahoo.com; sabdurashidova89@gmail.com

Rux oksidi (ZnO) keng taqiqlangan zonali (Eg ≈ 3,37 eV) yarimo‘tkazgich bo‘lib, geksagonal vyurtsit tuzilishi, yuqori eksiton bog‘lanish energiyasi (≈60 meV), optik shaffofligi va kimyoviy barqarorligi bilan ajralib turadi [1]. Shu sababli ZnO yupqa plyonkalari optoelektronika, ultrabinafsha fotodetektorlar, gaz sensorlari, fotokatalitik tizimlar va quyosh energetikasida istiqbolli material hisoblanadi. Ularning funksional xossalari kristallanish darajasi, kristallitlarning orientatsiyasi va o‘lchami hamda sirt morfologiyasiga bog‘liq. Ishning maqsadi sintez haroratining ZnO yupqa plyonkalarining strukturaviy va morfologik xossalariga ta’sirini qiyosiy baholashdan iborat.

ZnO yupqa plyonkalari ultrasonik sprey piroliz (USP) usulida p-Si(111) taglik ustiga 320 °C va 430 °C haroratlarda o‘stirildi. Prekursor sifatida rux atsetat dihidrat [$Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$] ning suvli eritmasidan foydalanildi [2]. Kristall tuzilish XRD (X-ray diffraction — rentgen nurlari difraksiyasi) usulida Shimadzu XRD-6100 diffraktometrida $\lambda = 0{,}154$ nmli nurlanishida, sirt morfologiyasi esa SEM (Scanning Electron Microscopy — skanerlovchi elektron mikroskopiya) usulida 10 kV tezlashtiruvchi kuchlanishda ETD detektori yordamida tadqiq qilindi [2]. XRD kristall faza va kristallografik orientatsiyani, SEM esa sirt donalarining shakli, o‘lchami va taqsimlanishini baholash imkonini berdi.

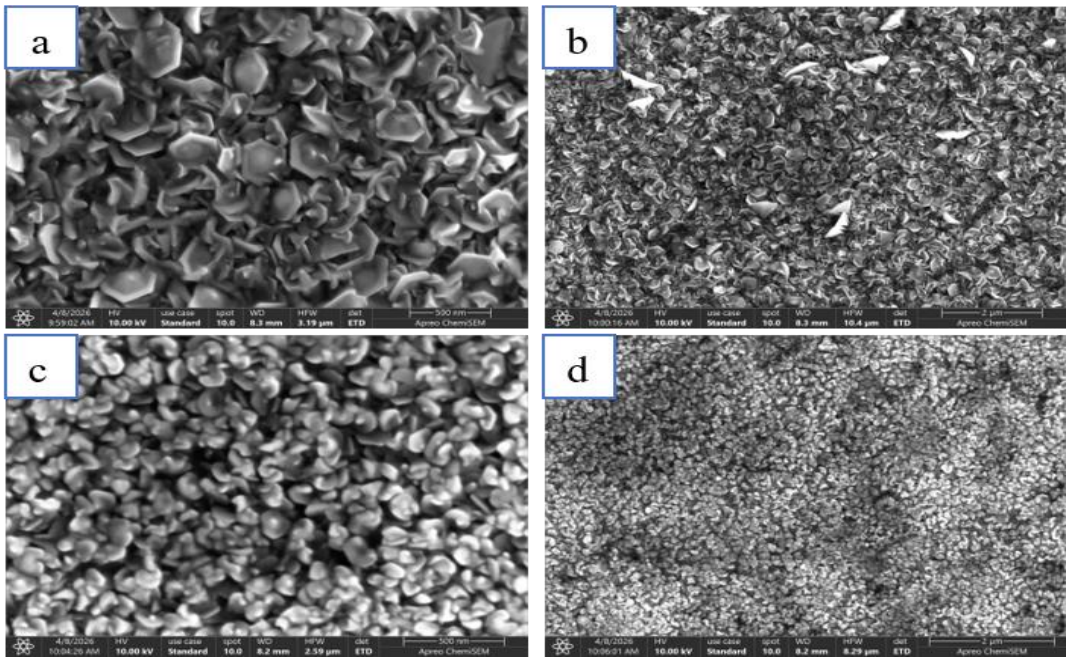
430 °C da o‘stirilgan ZnO plyonkasining XRD diffraktogrammasida geksagonal vyurtsit tuzilishiga xos (002), (101) va (102) reflekslar kuzatildi [1] (1-rasm). (002) maksimumining ustunligi kristallitlarning c-o‘qi bo‘ylab afzal orientatsiyalangan holda o‘sishini ko‘rsatadi. Difraksion maksimumlarning aniq shakllanishi namunaning yaxshi kristallanganidan dalolat beradi. Scherrer formulasi $D = k\lambda/(\beta\cos\theta)$ bo‘yicha kristallitlarning o‘rtacha o‘lchami taxminan 25÷30 nm deb baholandi [3]. Begona

fazalarga tegishli sezilarli qo‘shimcha maksimumlarning kuzatilmagani ZnO fazasining ustunligini ko‘rsatadi.



1-rasm. 430 °C da o‘stirilgan ZnO yupqa plyonkasining XRD diffraktogrammasi

SEM tasvirlari sintez harorati sirt morfologiyasiga sezilarli ta’sir ko‘rsatishini namoyon etdi (2-rasm). 320 °C da o‘stirilgan namunalarda taxminan 200÷500 nm o‘lchamli yirik plastinkasimon tuzilmalar va nisbatan g‘adir-budur sirt kuzatildi. 430 °C da esa sirt nisbatan mayda, yumaloqlashgan, zich va bir tekisroq taqsimlangan donalardan tashkil topdi [3].



2-rasm. ZnO yupqa plyonkalarining SEM tasvirlari: a) 320 °C, 500 nm; b) 320 °C, 2 μm; c) 430 °C, 500 nm; d) 430 °C, 2 μm

Harorat oshishi prekursorning termik parchalanishi, sirt diffuziyasi va kristallanish markazlarining hosil bo‘lish sharoitlarini o‘zgartirishi mumkin. Natijada plyonka yuzasining qoplanishi bir jinsliroq tus oladi. XRD va SEM natijalarini birgalikda tahlil qilishda kristallit o‘lchami bilan SEM tasviridagi sirt donasi o‘lchami bir xil fizik kattalik emasligini hisobga olish zarur. XRD dagi Scherrer o‘lchami rentgen nurlarini kogerent sochuvchi kristall sohani tavsiflaydi, SEM esa real sirt donalari va agregatlarini ko‘rsatadi. Shu sababli XRD bo‘yicha 25÷30 nm kristallit o‘lchamining SEM da kuzatilgan yuzlab nanometrli tuzilmalardan kichik bo‘lishi tabiiy chunki bitta sirt donasi bir nechta kristallitlardan tashkil topishi mumkin. Natijalar sintez harorati ZnO plyonkalarining kristall orientatsiyasi va sirt morfologiyasini boshqaruvchi muhim texnologik parametr ekanligini ko‘rsatadi.

Xulosa qilib aytganda, USP usulida 320 °C va 430 °C da o‘stirilgan ZnO yupqa plyonkalari XRD va SEM usullari bilan qiyosiy tadqiq qilindi. 430 °C da ZnO ning geksagonal vyurtsit tuzilishi va (002) yo‘nalish bo‘yicha afzal o‘sishi aniqlandi, kristallitlarning o‘rtacha o‘lchami 25÷30 nm ni tashkil etdi. SEM tahlili harorat oshishi bilan yirik plastinkasimon tuzilmalardan nisbatan mayda va zich donali morfologiyaga o‘tishni ko‘rsatdi. Olingan natijalar sintez haroratini boshqarish orqali ZnO yupqa plyonkalarining strukturaviy-morfologik xossalarini maqsadli o‘zgartirish mumkinligini ko‘rsatadi, bu esa gaz sensorlari, fotokatalitik va optoelektron qurilmalar uchun amaliy ahamiyatga ega.

Adabiyotlar

1. Özgür Ü., Alivov Ya.I., Liu C. et al. A comprehensive review of ZnO materials and devices // Journal of Applied Physics. – 2005. – Vol. 98. – P. 041301.

2. Zakhidov E.A., Zakhidova M.A., Kokhkharov A., Nematov Sh.K., Nusretov R.A. Modification of ZnO film surface by C60 molecules: Raman and photoluminescent spectroscopy // Uzbek Physical Journal. – 2017. – Vol. 19, No. 4. – P. 220–228.

3. Abdurashidova S.E., Zaxidova M.A. ZnO yupqa plyonkalarining strukturaviy va morfologik tadqiqoti // Magistrlik dissertatsiyasi. – Toshkent: O‘zMU, 2025.

ПРОНИКНОВЕНИЕ АТОМОВ УГЛЕРОДА МЕЖДУ ГРАФЕНОВОЙ ПЛЕНКОЙ И ПОВЕРХНОСТЬЮ ПАЛЛАДИЯ

Абдуллаев Р.М., Содикова Ш.М., Камилов Ш.Х., Юнусов А.Х.
Национальный Университет Узбекистана
E-mail: raxmatillaabdullayev0@gmail.com

Данная работа посвящена изучению явления проникновения атомов углерода между графеновой пленкой, которая получена на поверхности палладия путем диффузии её из объёма перенасыщенного атомами углерода.

Надо отметить то, что в работе [1] развиты методы поверхностной ионизации атомов и молекул солей щелочных металлов, с помощью которых изучен комплекс процессов на поверхности и в объёме пленочных систем металл-углерод, играющих существенную роль при использовании этих систем в эмиссионной электронике, физической химии, электрохимии, гетерогенном катализе. Он базировался на том, что молекулы не диссоциируют на валентно насыщенной поверхности слоя графита, но диссоциируют у отдельных атомов, содержащих свободные валентности. Атомы цезия имеют наименьший потенциал ионизации среди металлов, поэтому использование в качестве модельных молекул CsCl позволяет получить высокую эффективность ионообразования (100%) и поэтому обеспечивает высокую чувствительность метода.

В данной работе в качестве эмиттера и адсорбента служила прямоугольная лента из палладия (40x0,5x0,1 мм^3). Углеродное покрытие на поверхности палладия создавали путем адсорбции на поверхности паров бензола. Температуру палладия определяли с помощью платина-платинородиевой термопары. Процесс происходящий при науглероживании палладия выдерживаемого в нагретом состоянии (при науглероживании T~1300K) в парах бензола при ($p \sim (1 \div 5 \cdot 10^{-5}$ тор) можно представить следующим образом. Молекулы бензола после адсорбции на поверхности палладия вероятно с адсорбированной молекулы бензола сначала отщепляется атомы водорода, а

затем происходит разрушение более сильно связанного углеродного скелета. Освобождающиеся атомы углерода одновременно могут участвовать в двух процессах: растворении и строительстве углеродной пленки в адслое.

Опыты показывают, что пока $C_2 \ll C_{2m}$, (C_2 – концентрация углерода в ближайшем к поверхности плоскости междузлей, C_{2m} –то же при определенной растворимости), работает лишь один сток - растворение, а поверхность палладия даже значительных по плотности потока бензола остается практически свободной от углерода. Это свидетельствует о том, что углерод при таких температурах науглероживания достаточно быстро диффундирует в объем образца. Когда C_2 сравнивается с C_{2m} растворение заканчивается и начинается накопление углерода на поверхности. Максимальная толщина углерода, имеющего графитовую структуру получаемого таким образом на поверхности палладия составляет один монослой. Это объясняется тем, что на валентно насыщенной поверхности графитового слоя молекулы бензола не диссоцируют и быстро с неё десорбируются.

В палладии содержатся неизменное количество углерода, при изменении температуры происходит перераспределение углерода между поверхностью и объёмом палладия. При $T < T_к$, когда $C_2 \ll C_{2m}$ (где C_{2m} –предельная растворимость углерода при $T_к$), практически весь углероды находится в растворённом состоянии ($\gamma=1$ т.е. все молекулы $CsCl$ поступающие на поверхность диссоцируются полностью).

При $T<T_к$, когда $C_2 > C_{2m}$ (раствор перенасыщен) избыточный углерод из объёма палладия перемещается на поверхность, к границам зёрен и дефектам решётки ($\gamma \sim 10^{-3} \div 10^{-5}$). Видно, что монослой графита на поверхности палладия, как и на поверхности иридия, родия и рения [1,2] приводит к сильному отравлению металлического катализатора в реакции диссоциации.

При дальнейшем понижении температуры абразца (после достижения монослоя) это должно бы привести к росту γ, т.е. если дальнейший рост

углеродной пленки формировался бы сверху первого слоя, то это можно было бы обнаружить методом ПИ молекул CsCl , но данный метод отрицает этот вариант роста углеродной пленки. Подтверждением этому служит результаты работы [3], где используя высокую чувствительность молекул CsCl к атомам и кластерам, находящихся на графитовом слое изучены начальные стадии роста углеродной пленки на иридии. Показано, что при температуре T_1 (точнее узкая температурная область ~50 К в районе T_1) выше которой на поверхности иридия растет лишь монослой где температура адсорбции 1400 К, поток атомов углерода $\nu \approx 7 \cdot 10^{13} cm^{-2} c^{-1}$), а при $T < T_1$, на поверхности иридия растет многослойное углеродное покрытие при T_1 адсорбции 1200 К. Многослойная углеродная пленка состоит из нижней сплошной части и верхней не сплошной части толщиной в несколько атомных слоев.

На основе полученных данных, нами было выдвинуто следующее предположение, что второй слой пленки начинает формироваться снизу первого слоя, т.е. происходит проникновение атомов углерода между графеновой пленкой и поверхностью палладия.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тонтегоде А.Я. Поверхностная ионизация атомов и молекул и её новые применения. Дисс. на соискание уч. степ. док. физ.-мат. наук ФТИ им А.И. Иоффе, Л.,1974.

2. Gall N.R., Рутков Е.В., Тонтегоде А.Я. Интеркаляция атомов никеля под двумерной графеновой плёнкой на (111) Ir . Carbon. 2000, v.38, №5, P 663-667.

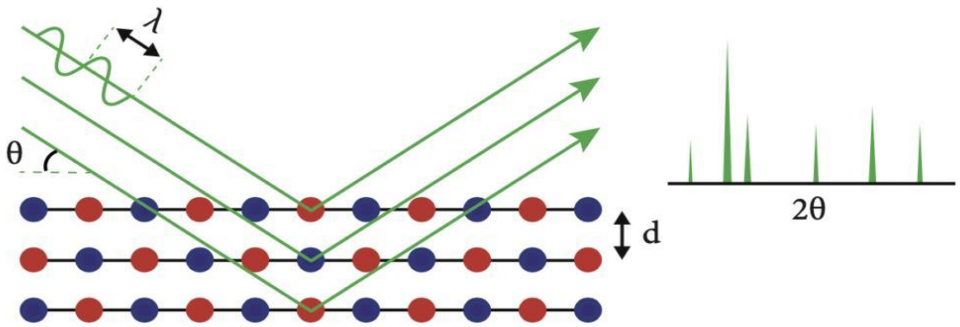
3. Абдуллаев Р.М., Зохидова М.А., Гиясова З.Р. Начальные стадии роста углеродной пленки на поверхности рения при диффузии примесного углерода из объема. УФЖ. 2021, 23, № 1, 52-56.

Ga_2Gd KRISTALLINING KRISTALL TUZILISHINI RENTGEN-DIFRAKSION USULDA TADQIQ ETISH

Ibodova Maftunabonu Ilyoz qizi, Fayziyev Shaxobiddin Shavkatovich
Buxoro davlat universiteti
e-mail: m.ibodova2000@gmail.com, s.s.fayziev@buxdu.uz

Intermetall birikmalar o‘ziga xos kristall tuzilishi va fizik xususiyatlari bilan zamonaviy materialshunoslikda muhim o‘rin egallaydi. Ularning strukturaviy xususiyatlarini aniqlash materialning keyingi fizik xossalarini tadqiq etish uchun muhim ilmiy asos hisoblanadi. Gadoliniy va galliy asosidagi birikmalar ham shu nuqtai nazardan qiziqish uyg‘otadi. Ga_2Gd tarkibidagi elementlarning kristall panjarada tartibli joylashishi natijasida ma’lum kristallografik struktura shakllanadi. Bunday strukturani eksperimental aniqlashning asosiy usullaridan biri rentgen-difraksion tahlildir. XRD usulida kristall namunaga tushirilgan rentgen nurlari kristall panjaradagi atom tekisliklaridan difraksiyalanadi. Natijada hosil bo‘lgan difraktogrammadagi maksimumlarning joylashuvi va intensivligi namunaning kristall tuzilishi haqida ma’lumot beradi.

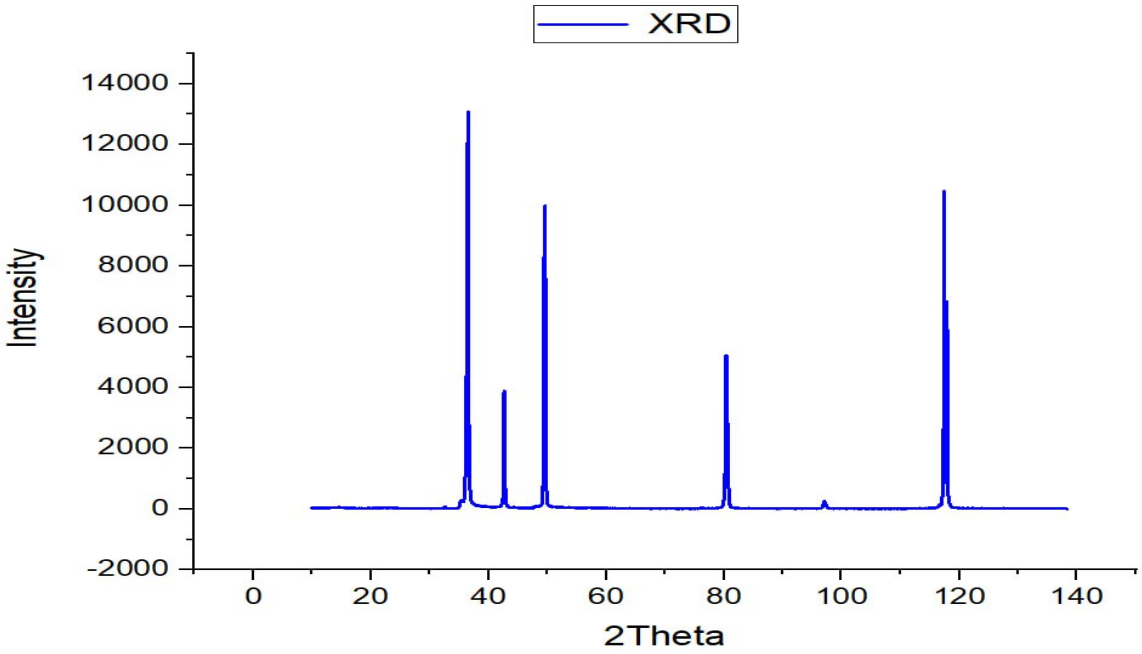
Gadoliniy va galliy asosidagi ferromagnit qotishmalar (xususan Ga_2Gd kristallari) o‘zining noyob magnit va struktur xususiyatlari tufayli zamonaviy mikroelektronika va spintronika yo‘nalishlarida istiqbolli materiallardan hisoblanadi. Ushbu ishda Ga_2Gd ferromagnit kristalling kristallanish holatini baholash hamda uning strukturaviy xarakteristikalarini aniqlash maqsadida rentgen-difraksion tahlil (XRD) tadqiqotlari o‘tkazildi.



1-rasm. Rentgen difraktometrining Bragg-Brentano (θ-2θ) o‘lchov sxemasi.

Eksperimental o‘lchovlar standart Bragg–Brentano Ga_2Gd geometriyasiga ega rentgen difraktometrida aks ettirish rejimida amalga oshirildi. Olingan difraktogramma asosida namunaning fazaviy tarkibi va kristallik darajasi tizimli tahlil qilindi (1-rasm).

Difraktogramma 2θ ning taxminan 0-140° oralig‘idagi qiymatlarini qamrab oladi. Spektrda fon signaliga nisbatan bir nechta keskin va yuqori intensivlikdagi difraksiya maksimumlari yaqqol ajralib turadi (2-rasm).



2-rasm. Ga_2Gd kristallining rentgen-difraksion difraktogrammasi.

Natijalar va muhokama. Olingan XRD difraktogrammasida Ga_2Gd namunasiga tegishli asosiy difraksiya maksimumlari taxminan 36°, 43°, 50°, 80° va 117° atrofida kuzatildi. Eng intensiv difraksiya maksimumi $2\theta \approx 36°$ sohada joylashgan. Mazkur maksimum difraktogrammadagi eng yaqqol reflekslardan biri bo‘lib, uning intensivligi grafik bo‘yicha taxminan 13000 shartli birlikka yetadi. $2\theta \approx 43°$ sohada nisbatan pastroq intensivlikdagi refleks kuzatiladi. Uning intensivligi taxminan 4000 shartli birlikni tashkil qiladi.

Keyingi kuchli maksimum $2\theta \approx 50°$ sohada kuzatilib, uning intensivligi taxminan 10000 shartli birlikka teng. Bu refleks ham Ga_2Gd difraktogrammasining asosiy strukturaviy maksimumlaridan biri hisoblanadi. Yuqori burchaklar sohasida

$2\theta \approx 80°$ atrofida yana bir aniq difraksiya maksimumi kuzatiladi. Bundan tashqari, $2\theta \approx 117°$ sohada yuqori intensivlikdagi refleks mavjudligi qayd etildi. Difraktogrammaning umumiy ko‘rinishida difraksiya maksimumlari keskin va tor shaklda namoyon bo‘lgan. Bu holat namunaning kristallanganligini ko‘rsatuvchi muhim belgi hisoblanadi. Kristall moddalarda atomlarning fazoviy tartibli joylashuvi natijasida ma’lum burchaklarda intensiv difraksiya maksimumlari hosil bo‘ladi.

Shuningdek, asosiy maksimumlar orasida intensivlikning juda past bo‘lishi va kuchli reflekslarning aniq ajralib turishi namunaning difraksion jihatdan yaxshi ifodalangan kristall strukturaga ega ekanligini ko‘rsatadi.

Xulosa. Ga_2Gd kristallining XRD difraktogrammasi tahlil qilindi. Difraktogrammada taxminan 36°, 43°, 50°, 80° va 117° sohalarda asosiy difraksiya maksimumlari kuzatildi. Eng yuqori intensivlikdagi refleks taxminan 36° sohada, boshqa kuchli reflekslar esa 50°, 80° va 117° atrofida qayd etildi. Difraksiya maksimumlarining keskin va aniq ifodalanganligi Ga_2Gd namunasining yaxshi kristallangan tuzilishga ega ekanligini ko‘rsatadi. Olingan XRD natijalari Ga_2Gd kristallining strukturaviy holatini baholash uchun yetarli dastlabki eksperimental ma’lumotlarni beradi. Biroq faqat taqdim etilgan difraktogramma asosida kristall panjara parametrlari, kristallit o‘lchami yoki fazalarning miqdoriy tarkibini aniqlashga doir xulosa chiqarilmaydi.

Foydalangan adabiyotlar ro‘yxati:

1. Ibodova M.I., Fayziyev Sh.Sh. Ga_2Gd materiallarining umumiy xususiyatlari // Buxoro davlat universiteti ilmiy axboroti. - 2026. - №5(134). - B. 138-142.

2. Fayziyev Sh.Sh., Ibodova M.I., Nasirova N.G., Sharipova M.Z. Ga-Gd qotishmasining fizik tahlili // Buxoro davlat universiteti ilmiy axboroti. - 2026. - №4(133). - B. 126-133.

META-KSILOL–XLOROFORM TIZIMIDAGI CH·π MOLEKULALARARO TA’SIRLARNING NAZARIY VA MEP TAHLILI

A.Absanov, M.Shoimov

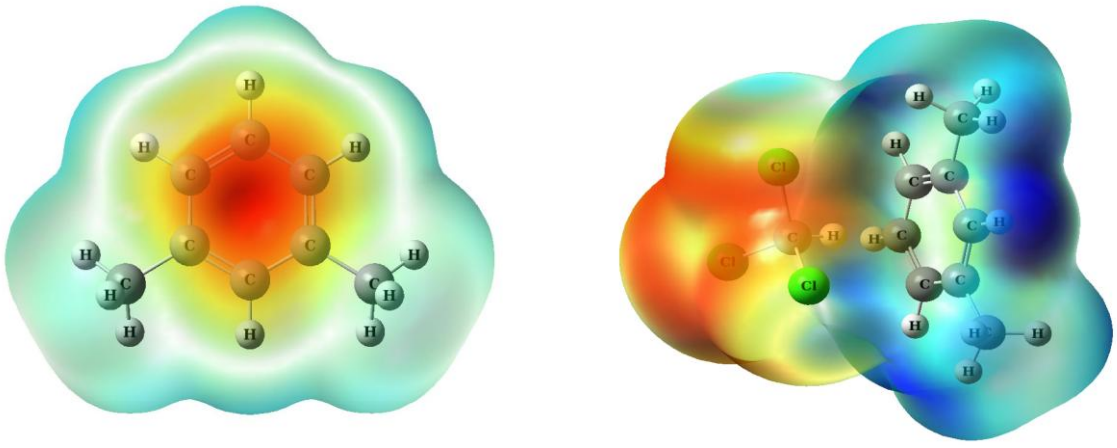
Sharof Rashidov Samarkand State University (15 University Blvd., 140104, Samarkand, Uzbekistan;
E-mail: shoimovmurodjon@gmail.com

Molekulalararo o‘zaro ta’sirlar, xususan, vodorod bog‘lanish va CH···π turidagi ta’sirlar molekulyar komplekslarning hosil bo‘lishi hamda ularning elektron va tebranish xususiyatlarini belgilashda muhim ahamiyatga ega [1]. Aromatik uglevodorlarning protonodonor molekulalar bilan o‘zaro ta’sirida aromatik halqaning π-elektron tizimi muhim rol o‘ynaydi. Bunday ta’sirlar molekulalarning elektron zichligi va energetik xususiyatlarida sezilarli o‘zgarishlarni yuzaga keltirishi mumkin [2]. Meta-ksilol ($(CH_3)_2C_6H_4$) benzol halqasiga ikkita metil guruhi birikkan aromatik uglevodor bo‘lib, uning elektron tuzilishi aromatik π-tizim bilan bog‘liq xususiyatlarni namoyon etadi. Xloroform esa C–H bog‘idagi vodorod atomi orqali aromatik molekulalarning π-elektron tizimi bilan kuchsiz CH···π o‘zaro ta’sir hosil qilishi mumkin. Meta-ksilolning turli muhitlardagi xususiyatlari avval o‘rganilgan bo‘lsa-da, meta-ksilol–xloroform tizimidagi CH···π ta’sirlarning elektron tabiati yetarli darajada tadqiq etilmagan [3]. Barcha hisoblashlar zichlik funksional nazariyasi (DFT) usuli yordamida Gaussian 09W dasturida amalga oshirilgan. Meta-ksilol va xloforom molekulyar strukturasini hisoblash tadqiqoti DFT/6-311++G(d.p) usuli hamda B3LYP (Becke-3-Li-Yang-Parr) gibrid funksional yordamida amalga oshirilgan [4].

Molekular elektrostatik potential sirt yuzasi tahlili kimyoviy jarayonlar, masalan, intramolekulyar zaryad o‘tkazish, vodorod bog'lanishi va boshqa o‘zaro ta'sirlarni tushunishda muhim ahamiyatga ega. MEP xaritalash bu molekulaning uning yuzasidagi turli nuqtalarda elektrostatik potentsialini baholash va xaritalash texnikasi hisoblanadi [5]. Rang xususiyatlari elektronlarning lokalizatsiyasiga qarab, elektrofilik (salbiy) va nukleofilik (pozitiv) joylarni ajratib ko‘rsatadi. Ijobiy mintaqalar (nukleofilik) ko‘k rang bilan ifodalanadi, bu erda elektronlar kamroq; salbiy mintaqalar (elektrofilik) qizil rang bilan tasvirlanadi, bu erda elektronlar ko‘p; va neytral joylar

yashil rang bilan ko‘rsatiladi. Shuningdek, 1-rasmda Turli ranglar bilan MEP tasvirlangan. Molekulyar elektrostatik potensial yoki molekulyar potensial yuza xaritasi meta-ksilol monomer, meta-ksilol + xloroform komplekslaridagi zaryad taqsimotini visual ravishda ifodalangan. Zaryadga bog‘liq parametrlar bo‘lgan electrophilic, nucleophilic reaksiyalar hamda bog‘lanishlarni o‘rganishda muhim rol o‘ynaydi shu bilan birga Elektrostatik potentsialni topishdan yana bir maqsad molekulaning reaktiv qismlarini aniqlashdir. Elektrostatik potentsial quyidagi tartibda oshadi: qizil < to‘q sariq < sariq < yashil < ko‘k. -2.735 e^{-2} eV dan 2.735 e^{-2} eV gacha bo‘lgan MEP xaritasi meta-ksilolning monomerida halqa markazi salbiy potentsialga ega ekanligini ko‘rsatadi. Qizil rang molekulaning eng katta salbiy zaryadini belgilaydigan elektrofil mintaqani aks ettiradi. Halqa bo‘ylab joylashgan C-H gurihi atrofidagi sariq rang biroz elektronga boy mintaqa va yashil rang nol potentsialni ifodalaydi. CH_3 atrofidagi ko‘k rang nukleofil musbat zaryad qismi ekanligini ko‘rsatadi. Meta-ksilo + 1 xloroform kompleksi uchun MEP xaritasi -1.867 e^{-2} eV va 1.867 e^{-2} eV oralig'ida kuzatilganda, meta-ksilolning halqa markazi atrofidagi qizil rang sarg'ish rangga o‘zgarib, bu mintaqadagi potentsialning pasayishini ko‘rsatdi.

e



a monomer

c) meta-ksilol+ 1 xloroform

rasm. *Meta ksilol + xloroform komplekslari uchun MEP diagrammasi.*

Bunda xloroformning vodorod atomi meta-ksilolning halqa markaziga yo‘nalganini va shu orqali kompleks hosil bo‘lishini ko‘rishimiz mumkin. Komplekslari asosan zaif bog'lanishlarni hosil qilishini anglatadi.

Ushbu ishda meta-ksilol va xloroform aralashmalaridagi molekulalararo ta’sirlar Raman spektroskopiyasi va MEP xaritalari yordamida tahlil qilindi. Tadqiqot natijalari shuni ko‘rsatdiki, meta-ksilolning aromatik halqasi bilan xloroform molekulasining C–H guruhi orasida CH···π tipidagi zaif o‘zaro ta’sirlar yuzaga keladi. Bu ta’sirlar Raman spektrlaridagi ayrim tebranish chiziqlarining siljishi orqali aniqlandi. MEP tahlili natijalari ham molekulalardagi elektron zichlikning taqsimlanishi ushbu komplekslarning hosil bo‘lishiga qulay sharoit yaratishini ko‘rsatdi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

[1] Sinnokrot, M. O., & Sherrill, C. D. (2006). High-accuracy quantum mechanical studies of π− π interactions in benzene dimers. The Journal of Physical Chemistry A, 110(37), 10656-10668. https://doi.org/10.1021/jp0610416

[2] Nishio, M., Umezawa, Y., Fantini, J., Weiss, M. S., & Chakrabarti, P. (2014). CH–π hydrogen bonds in biological macromolecules. Physical Chemistry Chemical Physics, 16(25), 12648-12683. https://doi.org/10.1039/C4CP00099D

[3] Jensen, F. (2017). *Introduction to Computational Chemistry* (3rd ed.). John Wiley & Sons. https://doi.org/10.1002/9781118825993

[4] Becke, A. D. (1993). Density‐functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. The Journal of chemical physics, 98(7), 5648-5652. https://doi.org/10.1063/1.464913

[5] J. S. Murray, K. Sen, Molecular electrostatic potentials, Concepts and Applications, Elsevier, Amsterdam, 1996.

POLIMER QUYOSH ELEMENTLARINING TASHQI KVANT SAMARADORLIGINI TADQIQ ETISH

[1]Saparbayev A.A., [2]Ibragimova K.H.
[1]U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti
[2]Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy universiteti
Email: ibragimovakaromat53@gmail.com

Tashqi kvant samaradorligi (TKS) — qurilmaga tushgan ma’lum to‘lqin uzunligidagi fotonlarning tashqi elektr zanjirida yig‘ilgan elektronlarga aylanish nisbati hisoblanadi va quyidagicha aniqlanadi:

$$TKS(\lambda) = \frac{N_e(\lambda)}{N_{ph}(\lambda)} \cdot 100\%.$$

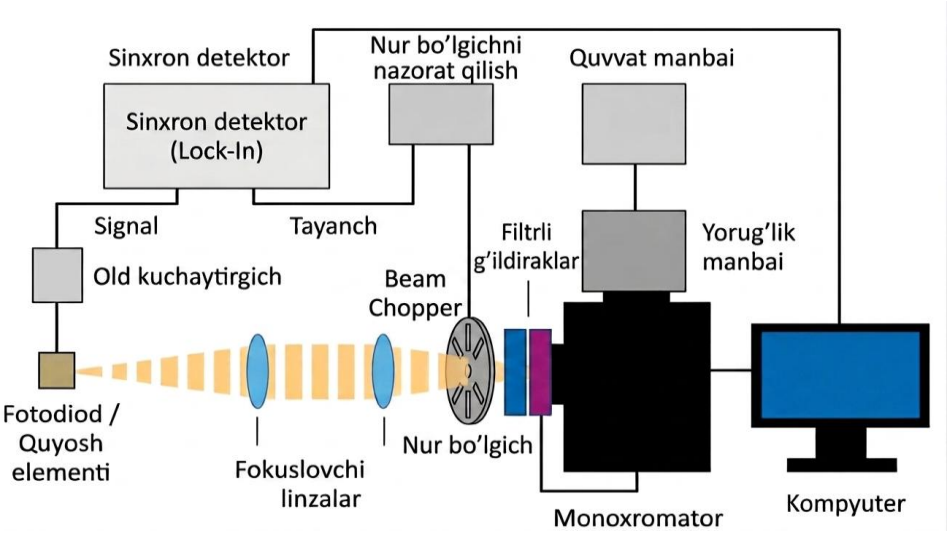
Bu yerda: N_e -tashqi elektr zanjirida qayd etilgan elektronlar soni, N_{ph} -esa faol qatlam sirtiga tushayotgan fotonlar sonidir.

Demak, TKS qiymatining ortishi polimer quyosh elementi (PQE) ga tushayotgan fotonlarning samarali ravishda fotogeneratsiyalangan zaryad tashuvchilarga aylanishi va ularning tashqi elektr zanjiriga yig‘ilish samaradorligi yuqori ekanligini ko‘rsatadi[1]. PQElarda TKS spektrining kengligi va intensivligi faol qatlamning optik yutilishi hamda fotogeneratsiyalangan zaryad tashuvchilarning samarali yig‘ilishi bilan chambarchas bog‘liq.

1-rasmda yuqori sezgirlikdagi TKS spektral o‘lchash qurilmasining eksperimental sxemasi keltirilgan. Mazkur qurilmaning ishlash prinsipi yorug‘lik manbaidan hosil bo‘lgan nurlanishni ma’lum to‘lqin uzunliklariga ajratish va tekshirilayotgan organik quyosh elementida hosil bo‘ladigan fototokni yuqori sezgirlik bilan qayd etishga asoslangan.

Yorug‘lik manbaidan hosil bo‘lgan nurlanish dastlab filtrli g‘ildiraklardan o‘tkazilib, monoxromator yordamida kerakli to‘lqin uzunligidagi monoxromatik nurlanishga ajratiladi. So‘ngra optik ajratgich va fokuslovchi linzalar yordamida nurlanish PQEga yo‘naltiriladi. Optik ajratgichdan ajratilgan signalning bir qismi sinxron aniqlash uchun tayanch signal sifatida qo‘llanadi. Faol qatlamda

fotogeneratsiyalangan zaryad tashuvchilar harakati natijasida hosil bo‘lgan kuchsiz fototok old kuchaytirgich orqali kuchaytiriladi detektor yordamida qayd etiladi. O‘lchash davomida to‘lqin uzunligi bosqichma-bosqich o‘zgartirilib, mos fototok qiymatlari aniqlanadi[2]. Ushbu ma’lumotlar asosida organik quyosh elementining TKS spektri shakllantirilib, faol qatlamning turli to‘lqin uzunliklarida fotonlarni zaryad tashuvchilarga aylantirish va ularni yig‘ish samaradorligi baholanadi.

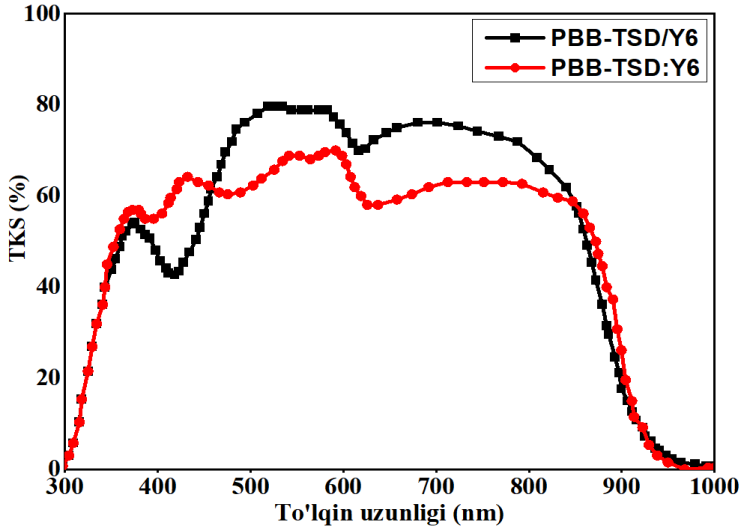


1-rasm. TKS spektrini o‘lchash qurilmasining sxematik tasviri.

Mazkur TKS o‘lchash qurilmasi yordamida PBB-TSD asosidagi PQElarining spektral fotoelektrik xususiyatlari o‘rganildi. Faol qatlamlar qatlamma-qatlam va hajmiy geterostrukturali usullarda tayyorlanib, TKS spektrlarining to‘lqin uzunligiga bog‘liqligi o‘lchandi.

2-rasmda PBB-TSD:Y6 va PBB-TSD/Y6 faol qatlam asosida tayyorlangan PQElarining TKS spektrlari grafigi keltirilgan. Grafikdan ko’rish mumkinki, TKS spektri 300 dan 1000 nm gacha bo’lgan keng to’lqin uzunligi diapazonini qamrab olgan, shu bilan birga yaqin infraqizil sohada 900 nm dan keyin TKS qiymatining keskin pasayishi Y6 akseptorining optik yutilish chegarasi bilan bog‘liq. TKS ning eng yuqori qiymati 78 % bo’lib bu PBB-TSD/Y6 faol qatlam ega PQElarga tegishlidir. PBB-TSD:Y6 faol qatlam ega PQElarning TKS qiymati PBB-TSD/Y6 PQElarning TKS qiymatiga qaraganda past natija ko’rsatdi va bu holatni PBB-TSD:Y6 faol qatlamlarining strukturaviy va morfologik kamchiliklari ya’ni past kristallanish

darajasi, donor va akseptor fazalarining mukammal ajralmaganligi bilan izohlash mumkin[3].



2-rasm. PBB-TSD/Y6 qatlamma-qatlam va PBB-TSD: Y6 hajmiy geterostruktura asosidagi PQElarining TKS spektrlari.

Xulosa qilib aytganda, PBB-TSD/Y6 faol qatlamga asoslangan PQElarning kengroq spektral sohada yuqori TKS qiymatlarini namoyon qilishi fotogeneratsiyalangan zaryad tashuvchilarning samaraliroq hosil bo‘lishi va yig‘ilishini ko‘rsatdi. Ayniqsa, qatlamma-qatlam strukturali faol qatlamga ega PQElarda TKS qiymatlarining yuqoriligi donor–akseptor interfeysida zaryadlarning samarali ajralishi va tashilishi bilan bog‘liq bo‘lib, faol qatlam morfologiyasi PQElarning fotovoltaik xususiyatlariga muhim ta’sir ko‘rsatishini tasdiqladi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Zhang, S., et al., Over 14% efficiency in polymer solar cells enabled by a chlorinated polymer donor. Advanced Materials, 2018. **30**(20): p. 1800868.
2. Yuan, J., et al., Correction: Enabling low voltage losses and high photocurrent in fullerene-free organic photovoltaics (vol 10, 570, 2019). Nature Communications, 2019. **10**.
3. Wei, X., et al., Recent progress and applications of nanoIR-AFM in morphological characterization of organic solar cells. Advanced Functional Materials, 2024. **34**(49): p. 2408960.

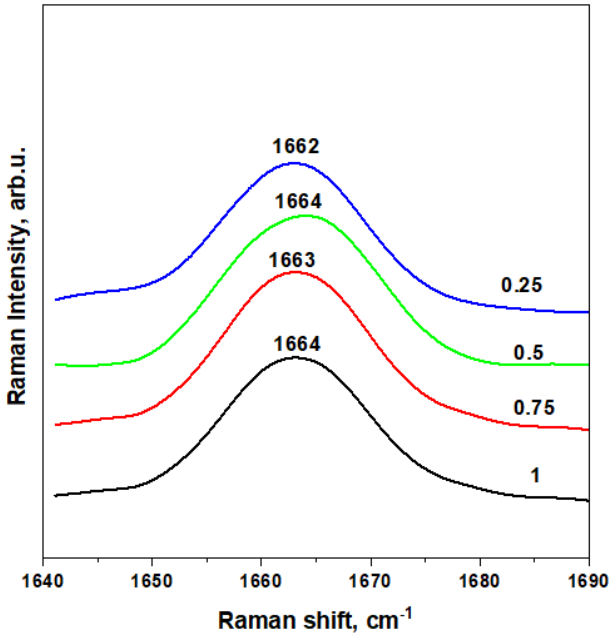
INVESTIGATION OF BENZOPHENONE-ACETONE REACTION THROUGH RAMAN SPECTRA OF C=O VIBRATION MODES

Jumabayev Abduvaxid, Norkulov Asliddin, Ernazarov Zoxid
Department of Optics and Spectroscopy, Samarkand state university
norqulovasliddin1987@gmail.com

Recent studies conducted worldwide highlight the significance of theoretically investigating the intermolecular interactions of ketones and the nature of their physical and chemical effects due to hydrogen bonding and Van der Waals forces in various solutions. Studying the manifestation of intermolecular interactions in vibrational spectra provides sufficient information on identifying relatively weak hydrogen bonds in ketones and their different solutions, as well as the mechanisms of molecular cluster formation derived from ketone molecules.

The benzophenone molecule exhibits various vibrational modes, including six planar ring deformations and thirty C-H bond stretching and bending vibrations, along with an additional twelve modes associated with C=O movements [1-2]. The Raman spectrum of benzophenone at atmospheric pressure is highly complex [3], and functional groups sensitive to changes in spectral parameters were selected to assess non-covalent interactions of benzophenone with various solvents. Among these groups, the C=O, C-H stretching, and C-H bending vibrational modes were studied.

In part a) of Figure 1, the Raman spectra of the C=O stretching vibrations of the benzophenone-acetone solution are presented. The maximum of the C=O stretching vibration band for a 1M concentration of the benzophenone-acetone solution is observed at 1664 cm^{-1}. When the concentration of the solution is reduced to 0.75M, this band shifts to 1663 cm^{-1}. Similarly, when the concentration is further decreased to 0.25M, the C=O stretching vibration peak is measured at 1662 cm^{-1}, indicating a 2 cm^{-1} red shift compared to the 1M solution. This shift is caused by a reduction in the stretching frequency and force constant of the >C=O bond in hydrogen-bonding acceptor molecules [4]. However, such minor shifts may arise from the formation of weak hydrogen bonds between benzophenone and acetone molecules.



1. Figure. Raman scattering spectra of the C=O stretching vibrational band of the benzophenone-acetone solution.

The aim of the presented work was to microscopically evaluate the interactions between the solute and the solvent, and to analyze the changes observed in vibrational spectroscopy. Therefore, in this study, Raman spectroscopy was employed to assess the covalent interactions of benzophenone and its interactions with acetone, focusing on the intermolecular interactions sensitive C=O vibrational bands. In the solutions of benzophenone, red shifts were also observed in the C=O stretching vibrational bands. Such shifts were predicted to be due to the weak hydrogen bonding formed through the C=O interactions between benzophenone and the solvents.

Reference

1. Sąsiadek, W., et al. (2005). Journal of Raman Spectroscopy: An International Journal for Original Work in all Aspects of Raman Spectroscopy, Including Higher Order Processes, and also Brillouin and Rayleigh Scattering, 36(9), 912-923

2. Volovšek, V., Baranović, G., & Colombo, L. (1993). Spectrochimica Acta Part A: Molecular Spectroscopy, 49(13-14), 2071-2080.

3. W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten, J. Mol. Graph. 14, 1 (1996) 33–38,

4. Wang, H., Wang, L., Shen, S., Zhang, W., Li, M., Du, L., Phillips, D. L. (2012). The Journal of Chemical Physics, 136(12).

ВЛИЯНИЯ УГЛА НАКЛОНА ТРАССЫ НА ПРОЦЕСС ФИЛАМЕНТАЦИИ УЛЬТРАКОРОТКИХ ЛАЗЕРНЫХ ТМПУЛЬСОВ

Муратбаева[1] Т.К. , Касимов[2] А.К.
[1]Национальный университет Республики Узбекистан
[2]Институт Ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз
muratbaevatumaris5@gmail.com

Распространение ультракоротких лазерных импульсов мультигигаваттной мощности в атмосфере сопровождается нелинейно-оптическим явлением филаментации. Данный процесс представляет критический интерес для задач дистанционного зондирования и лазерной локации (LIDAR). В реальных условиях эксплуатации оптико-электронных систем лазерные пучки распространяются под произвольными углами наклона к горизонту. Особенностью таких трасс является барометрическое изменение параметров воздушной среды (экспоненциальное падение давления, плотности и температуры с высотой). Изменение плотности воздуха напрямую модифицирует линейную и нелинейную восприимчивость среды: кубический показатель нелинейности Керра n_2 и профиль критической мощности самофокусировки P_{cr} становятся явными функциями высоты H.

Моделирование пространственной эволюции радиуса лазерного пучка $\omega(s)$ базируется на модифицированном волновом уравнении типа нелинейного уравнения Шрёдингера (НУШ) в приближении параксиальной оптики с учетом дифракции, Керровской самофокусировки, плазменной дефокусировки и турбулентного уширения [1]:

$$\frac{d^2\omega}{ds^2} = \frac{1}{k^2\omega^3} - \frac{P_{cur}(s)}{P_{cr}(H)} * \frac{1}{k^2\omega^3} + \vartheta_{plasma}(\omega) + \vartheta_{turb}(s,H) \qquad (1)$$

где $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ — волновое число, $\lambda = 800$нм. Профиль мощности импульса $P_{cur}(s)$ учитывает начальное частотное чирпирование, обеспечивающее постепенное дисперсионное сжатие пакета во времени к заданной области

трассы s_{focus} , а также экспоненциальное затухание за счет потерь энергии на ионизацию [2]:

$$P_{cur}(s) = P_0 * \gamma_{compress}(s) * \exp\left(-{}^{s}/_{s_{loss}}\right) * \eta_{energy} \quad (2)$$

Барометрический профиль атмосферы задается стандартной гидростатической моделью, определяющей падение плотности воздуха $\rho(H)/\rho_0$, нелинейного коэффициента $n_2(H) = n_{2\,0} * \rho(H)/\rho_0$ и рост критической мощности $P_{cr}(H) \propto 1/n_2(H)$. Случайные мелкомасштабные неоднородности показателя преломления генерируются в рамках колмогоровского спектра турбулентности и накладываются на трассу. Блуждание оптической оси пучка ΔY рассчитывается путем интегрирования случайных угловых флуктуаций совместно с регулярной атмосферной рефракцией, обусловленной высотным градиентом среднего показателя преломления воздуха dn_0/dH .

В результате проведенных численных экспериментов были получены совмещенные профили блуждания оси и эволюции радиуса пучка для пяти углов наклона трассы: 30°, 45°, 60°, 75° и 90°. Начальная пиковая мощность пучка была зафиксирована на уровне 32 ГВт.

Анализ динамики радиуса пучка $\omega(s)$ (правый график) показывает, что благодаря стартовому чирпированию на первых 1000 метрах трассы пучок распространяется без проявления нелинейных эффектов, испытывая лишь слабую геометрическую фокусировку. В диапазоне расстояний 1000–1400 метров, развивается Керровская самофокусировка, приводящая к формированию плазменного филамента радиусом $\omega = (70 - 100)$ мкм. Четко прослеживается влияние угла наклона трассы на точку зажигания филамента: для пологих трасс (30°) филамент формируется значительно раньше (на расстоянии около 1000 м), Для вертикальной трассы (90°) точка филаментации смещается дальше по трассе — к 1400 метрам. Это связано с падением плотности воздуха с высотой. Длина стабильного плазменного канала для всех углов составляет порядка 1500–1800

метров, после чего пучок выходит из нелинейного режима и плавно расширяется под действием дифракции.

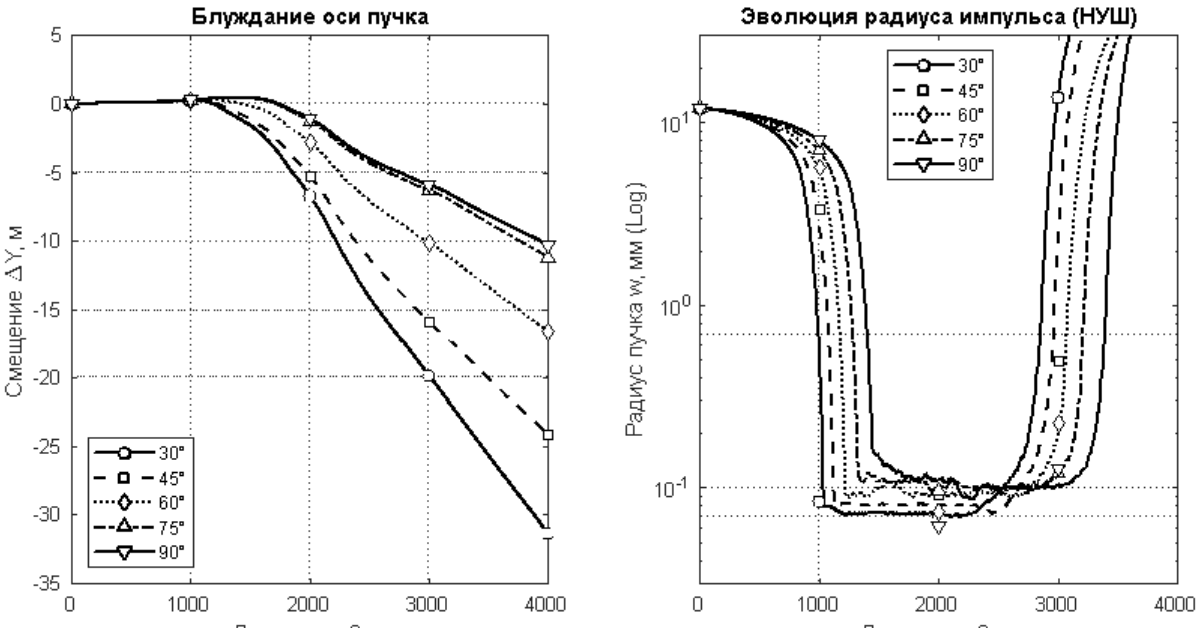


Рис.1. Блуждание центра пучка (левый рисунок) и эволюция радиуса лазерного импульса (левый рисунок).

Анализ стохастического блуждания оси пучка ΔY (левый график) выявил сильное расхождение траекторий при идентичном базовом шуме. Для трасс с малыми углами наклона (30° и 45°) наблюдается увод оси в отрицательную область (до -10метров к концу дистанции). Данный эффект обусловлен сильной регулярной рефракцией среды и турбулентностью атмосферы. При увеличении угла наклона до квазивертикального (75° и 90°) вклад регулярной рефракции стремится к нулю из-за ортогональности траектории к атмосферным слоям. Однако отклонения излучения за счет крупномастабных флуктуаций атмосферы сохраняется (-10 метров при 90°).

Литература:

1. Dergalyuk A. V., Ionin A. A., Shlenov S. A. Journal of Physics: Conference Series. — **2024**. — Vol. 2711, No. 1. — P. 012015.

2. Volkov R. V., Potemkin F. V., Bystrov D. A. Optics & Laser Technology. — **2025**. — Vol. 182. — P. 111840.

THERMAL OXIDATION OF SILICON SUBSTRATES: ELLIPSOMETRIC CHARACTERIZATION OF SiO_2 LAYER THICKNESS AND OPTICAL PROPERTIES

Mirzakandova Sokhibjamol Kholmumin kizi[1], Ismatov Askar Anvar ugli[1]
[1]Institute of Ion plasma and laser technologies, Tashkent, Uzbekistan
e-mail: sohi9093@gmail.com

Introduction. Silicon dioxide remains one of the most important dielectric materials in microelectronics, serving as a gate insulator, passivation layer, and diffusion mask. Thermal oxidation of silicon is the most widely used method for producing high-quality SiO_2 films due to its simplicity and the excellent electrical properties of the resulting oxide-silicon interface. Layer thickness and refractive index are highly sensitive to process parameters such as temperature, time, ambient composition, and furnace uniformity, so reliable optical characterization is essential for process control. Spectroscopic ellipsometry (SE) is a non-destructive optical technique that measures the change in polarization state of light reflected from a sample, expressed as the amplitude ratio Ψ and phase difference Δ, as functions of wavelength. Fitting an optical model (e.g., Cauchy dispersion for transparent SiO_2) to the measured $\Psi(\lambda)$ and $\Delta(\lambda)$ spectra allows simultaneous extraction of film thickness and refractive index with sub-nanometer sensitivity. In this work, SiO_2 layers grown by dry thermal oxidation at 800 °C for 90 minutes were characterized by SE, and both the raw ellipsometric spectra and the derived thickness/refractive-index statistics were analyzed to evaluate film quality and uniformity across a set of samples processed under nominally identical conditions.

Experimental part. Silicon dioxide layers were formed on silicon wafers by dry thermal oxidation at 800 °C for 90 minutes. Ten samples were processed simultaneously under identical furnace conditions. Spectroscopic ellipsometry measurements were performed over a wavelength range of approximately 300-1000 nm on a Sentech SpectraRay ellipsometer. The measured Ψ and Δ spectra were fitted

with a Cauchy dispersion optical model for SiO_2 on a silicon substrate to extract the film thickness and refractive index, using the mean squared error (MSE) as the goodness-of-fit criterion. All measurements were performed on the same instrument during a single session to eliminate systematic instrumental variation.

Results and Discussion. Figure 1a and 1b show the measured $\Psi(\lambda)$ and $\Delta(\lambda)$ spectra (blue) for a representative SiO_2/Si sample together with the best-fit model curves (red). The Ψ spectrum decreases monotonically from about 34° at 300 nm to 11° at 1000 nm, while Δ increases from about 90° to above 130°. This smooth, interference-free behavior is characteristic of a thin (<25 nm), optically transparent SiO_2 layer on silicon. The close agreement between experimental and fitted curves confirms that the Cauchy dispersion model adequately describes the oxide layer, supporting the reliability of the extracted thickness and refractive index values. The measured thickness ranged from 17.7 to 22.7 nm, with a mean of 19.94 nm and a standard deviation of 1.88 nm, corresponding to approximately 12.5% non-uniformity (Fig. 1c). The refractive index ranged from 1.431 to 1.467 (mean 1.454, $\sigma = 0.011$), consistent with reference values for thermally grown amorphous SiO_2 ($n \approx 1.45–1.47$ at 632.8 nm). The lower scatter in refractive index indicates reproducible film density and stoichiometry, whereas thickness variations are likely associated with non-uniform heat or gas-flow distribution in the oxidation furnace. Samples 1, 2, and 8 (21.8–22.7 nm) showed the largest positive deviations from the mean, indicating locally faster oxide growth. Figure 1d shows the correlation between refractive index and thickness, with points colored according to MSE. A weak-to-moderate positive correlation ($r = 0.60$) was observed, suggesting that thicker oxide regions tend to have slightly higher refractive indices, possibly due to a marginal increase in film density in locally faster-growing regions. All MSE values were below 0.8 (mean 0.656), indicating a good model fit and confirming the overall reliability of the extracted thickness and refractive

index values.

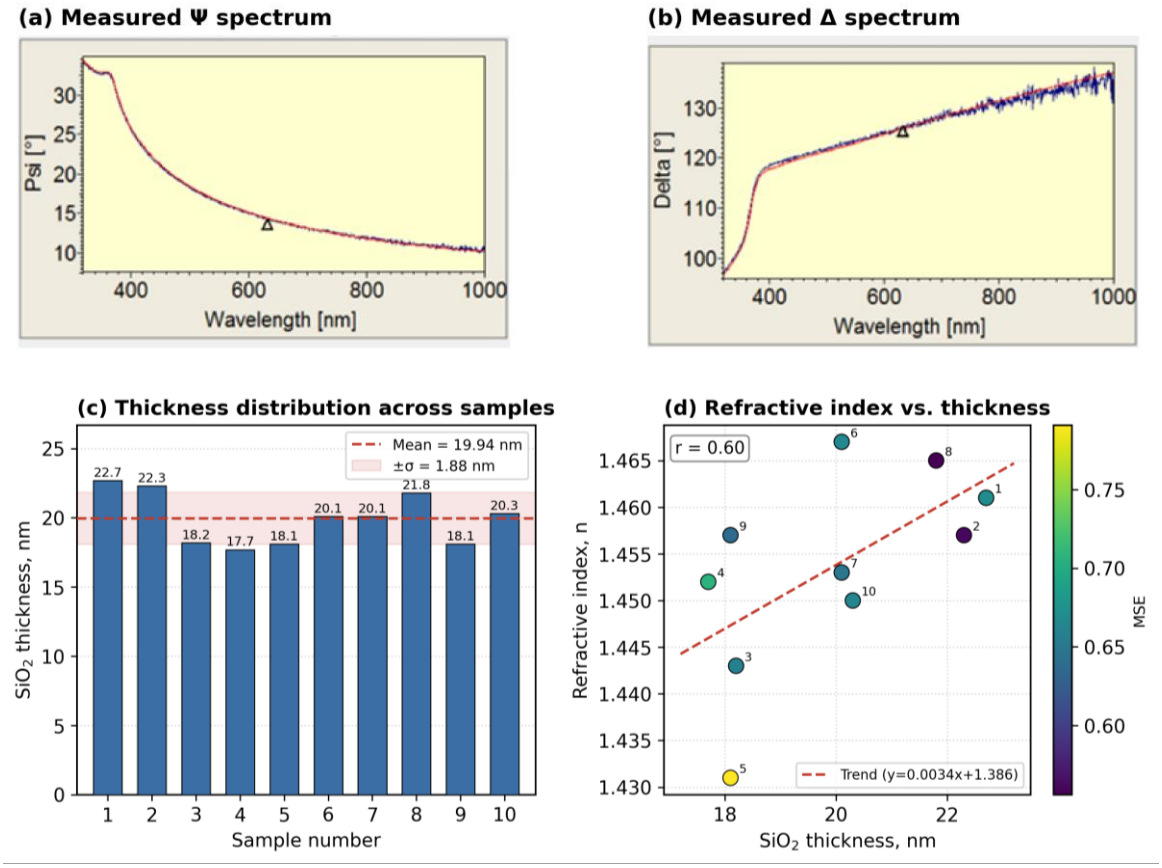


Fig. 1. Ellipsometric characterization of thermally grown SiO2 layers (800 °C, 90 min): (a) measured Ψ spectrum with model fit; (b) measured Δ spectrum with model fit; (c) SiO2 thickness distribution across the ten samples; (d) correlation between refractive index and thickness, colored by MSE.

4. Conclusion. SiO_2 layers grown by dry thermal oxidation of silicon at 800 °C for 90 minutes exhibit a mean thickness of 19.9 nm with about 12.5% non-uniformity and a mean refractive index of 1.454, close to reference values for thermal oxide. The measured Ψ and Δ ellipsometric spectra were well described by a Cauchy dispersion model across the full 300-1000 nm range, with MSE values below 0.8 for all samples, confirming reliable optical characterization. The observed thickness scatter points to the need for improved thermal or gas-flow uniformity during oxidation to achieve more consistent film growth across the wafer batch, which will be addressed in future process optimization.

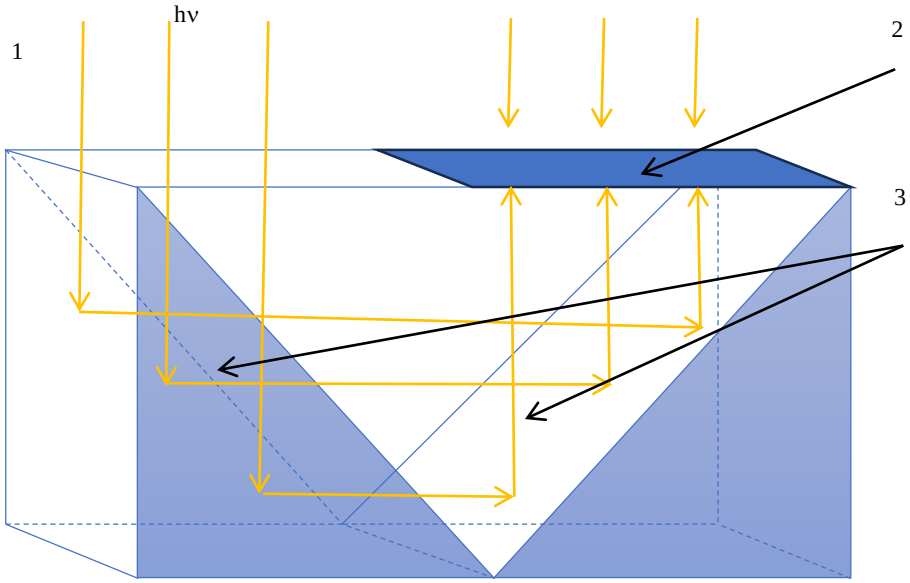
V-GEOMETRIK SHAKLDAGI KUMUSH KO‘ZGULI OPTIK KONSENTRATOR QO‘LLANILGAN FOTOELEKTRIK MODULNING ENERGETIK SAMARADORLIGINI EKSPERIMENTAL TADQIQ ETISH

N. Mirzaalimov[1]✉, R. Aliyev[1], A. Mirzaalimov[3], Sh. Tadjibayeva[1], T. Abdulazizov[1], A. Alijonov[2]
[1]Z.M. Bobur nomidagi Andijon davlat universiteti, Andijon, O‘zbekiston
[2]Andijon davlat texnika instituti, tayanch doktarant, Andijon, O‘zbekiston
[3]Tashkent International University, Andijon, O‘zbekiston
E-mail: mirzaalimov90@mail.ru

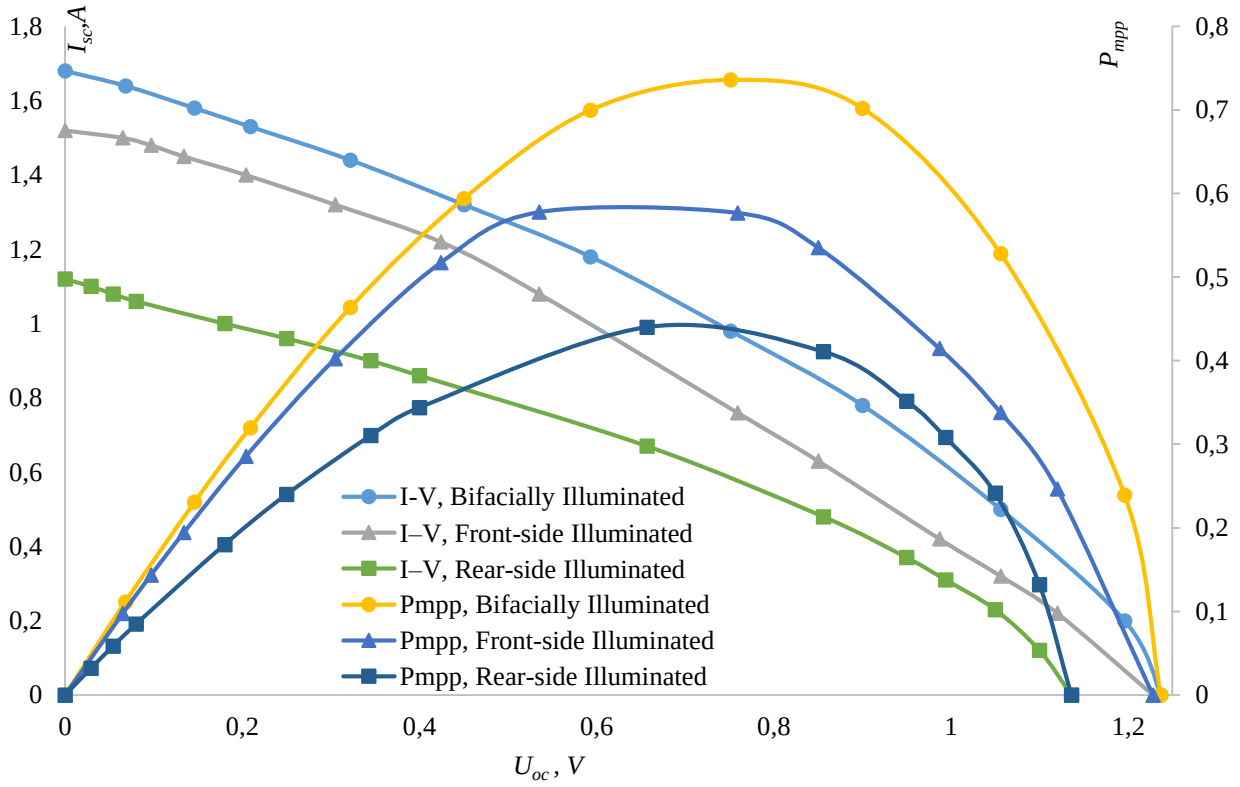
Ikki tomonlama sezgir quyosh fotoelektrik qurilmalarining energetik samaradorligi, avvalo, fotoelektrik element yuzasiga tushuvchi quyosh nurlanishi miqdoriga bog‘liq [1, 2]. Quyosh nurlanishining bir qismi fotoelektrik yuzaga optimal yo‘nalishda tushmasligi yoki konstruktiv sabablar tufayli foydalanilmasligi mumkin [3, 5]. Shu sababli mavjud quyosh nurlanishidan maksimal darajada foydalanish uchun optik qaytargichlar va konsentratorlardan foydalanish istiqbolli yo‘nalishlardan biri hisoblanadi.

Optik qurilmalarning geometrik shakli va ularning fotoelektrik qabul qiluvchi yuzaga nisbatan joylashishi nurlanishni qayta taqsimlash samaradorligiga sezilarli ta’sir ko‘rsatadi [4]. Ayniqsa, kumush ko‘zguli V-shaklidagi qaytargich yordamida turli yo‘nalishlardan keluvchi nurlanishni ikki tomonlama sezgir fotoelektrik element tomon qayta yo‘naltirish imkoniyati mavjud. Mazkur tadqiqotning maqsadi ikki tomonlama sezgir fotoelektrik elementning orqa yuzasiga tushuvchi qo‘shimcha quyosh nurlanishini V-shaklidagi optik qaytargich yordamida qayta yo‘naltirish va uning optik yig‘ish samaradorligiga ta’sirini eksperimental baholashdan iborat. Ikki tomonlama fotoelektrik qurilma uchun V-shaklidagi optik qaytargich konstruksiyasini qo‘llash, uning geometrik parametrlari asosida qaytarilgan nurlanishni fotoelektrik yuzaga yo‘naltirish hamda hosil bo‘ladigan qo‘shimcha optik oqim samaradorligini tajribaviy aniqlash rejalashtirildi.

Tajriba natijalari V- shaklidagi optik qaytargichdan foydalanish fotoelektrik element yuzasiga tushuvchi samarali nurlanish miqdorini oshirishini ko‘rsatdi. Qaytargichsiz holatda faqat fotoelektrik elementning bevosita qabul qilgan nurlanishidan foydalanilgan bo‘lsa, V-shaklidagi konstruksiya qo‘llanilganda qaytargich sirtlaridan aks etgan nurlanishning qo‘shimcha qismi ham aktiv yuzaga yo‘naltirildi.



1-rasm. Turli xil yoritish sharoitlarida kichik ikki tomonlama sezgir fotoelektrik modulni yoritish uchun ishlab chiqilgan V- shaklidagi kumush qoplamali ko‘zgu konstruksiyasining sxematik tasviri. 1 – quyosh nurlanishi; 2 – ikki tomonlama sezgir monokristalli kremniy quyosh elementlari; 3 – kumush qoplamali ko‘zgu.



2-rasm. Ikki tomonlama sezgir fotoelektrik modulning I–V volt-amper xarakteristikalari hamda mazkur yoritish sharoitlarida kuchlanishga bog‘liq chiqish quvvati (P–V) xarakteristikalari.

Tadqiqot davomida qaytargichning geometrik shakli va fotoelektrik qabul qiluvchi yuzaga nisbatan joylashishi nurlanishning qayta yo‘naltirilishiga bevosita ta’sir qilishi aniqlandi. V-shaklidagi qaytargichning ikki sirtidan foydalanish imkonini berib, tushuvchi nurlanishni markaziy qabul qiluvchi yuzaga yo‘naltirish uchun qulay optik geometriyani hosil qiladi.

Tadqiqot natijalari V-shaklidagi optik qaytargich quyosh nurlanishini fotoelektrik element yuzasiga samarali qayta yo‘naltirish imkonini berishini ko‘rsatdi. Tajribada optik yig‘ish samaradorligi 82 % gacha oshgani aniqlandi. Natijalar qaytargichning geometrik parametrlari va optik xususiyatlari fotoelektrik modulga tushuvchi nurlanish miqdoriga sezilarli ta’sir ko‘rsatishini tasdiqladi.
V- shaklidagi optik qaytargichdan foydalanish fotoelektrik qurilmalarning energetik samaradorligini oshirishning istiqbolli usuli sifatida tavsiya etiladi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. P. Fath, S. Keller, P. Winter, W. Joob, and W. Herbst, “Status and perspective of crystalline silicon solar cell production,” Conference Record of the IEEE Photovol-taic Specialists Conference, pp. 002471–002476, 2009, https://doi.org/10.1109/PVSC.2009.5411274.

2. C. Deline et al., "A simplified model of bifacial PV performance", IEEE Journal of Photovoltaics, vol. 8, no. 2, pp. 534–540, 2018.

3. A. Cuevas, M. Piliouras, “Bifacial solar cells,” Solar Energy, vol. 39, no. 5, pp. 419–425, 1987.

4. G. Honsberg et al., “Bifacial photovoltaic module performance prediction using optical modeling,” IEEE J. Photovoltaics, vol. 6, no. 3, pp. 719–726, 2016.

5. Mirzaalimov A., Gulomov J., Aliev R., Mirzaalimov N., Aliev S. A study of silicon p-n structures with mono- and multifacial photosensitive surfaces. Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2022, vol. 22, no. 1, pp. 25–32. https://doi.org/10.17586/2226-1494-2022-22-1-25-32.

$Ti_{22}Mo_{10}C_{32}$ QOTISHMASI UCHUN SQS ASOSIDAGI DFT PARAMETRLARINI TANLASH VA ULARNI NEYTRON DIFRAKSIYASI MA’LUMOTLARI BILAN TAQQOSLASH

I.J. Jaksimuratov, U.B. Xalilov

U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti,

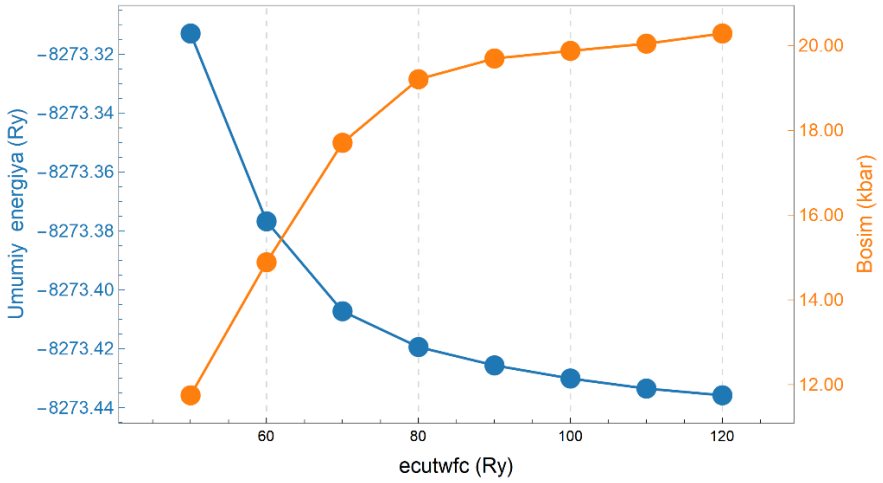
Ti(C,N)-Mo turidagi o‘tish metalli karbid-nitridlari yuqori qattiqligi va termik barqarorligi tufayli kesuvchi asboblar hamda himoya qoplamalarida keng qo‘llaniladi [1]. Bunday qotishmalarda Mo atomlarining TiC panjarasidagi tasodifiy taqsimlanishi strukturaviy va mexanik xossalarga sezilarli ta’sir ko‘rsatadi [2]. Ti(C,N)-Mo turidagi qotishmalar orasida istiqbolli tarkiblardan biri sifatida qaralayotgan $Ti_{22}Mo_{10}C_{32}$ qotishmasi ustida tadqiqotlar olib borilayotgan bo‘lsa-da, ushbu tarkibning tasodifiy atom taqsimlanishini tavsiflovchi zichlik funksionali nazariyasi (DFT) hisoblash natijalari neytron difraksiyasi ma’lumotlari bilan batafsil taqqoslanmagan.

Ushbu ishda $Ti_{22}Mo_{10}C_{32}$ tarkibi uchun ATAT dasturining *mcsqs* moduli yordamida SQS strukturasi yaratildi [3]. Simulyatsion tavlash asosida olingan 11 ta mustaqil *mcsqs* konfiguratsiyasi orasidan korrelyatsion mosligi eng yaxshi bo‘lgan SQS tanlanib, uning objective function qiymati taxminan -1.98 ni tashkil etdi. Tanlangan SQS uchun Quantum ESPRESSO dasturida zichlik funksionali nazariyasi doirasida tekislik to‘lqinlar energiya kesimining *ecutwfc*=50-120 Ry qiymatlari hamda Monkhorst-Pack k-to‘rining 4×4×4, 5×5×5 va 6×6×6 variantlari bo‘yicha yaqinlashish testlari bajarildi. Hisoblash parametrlarining ishonchliligi muvozanat panjara parametrini neytron difraksiyasi ma’lumotlari bilan taqqoslash orqali baholandi.

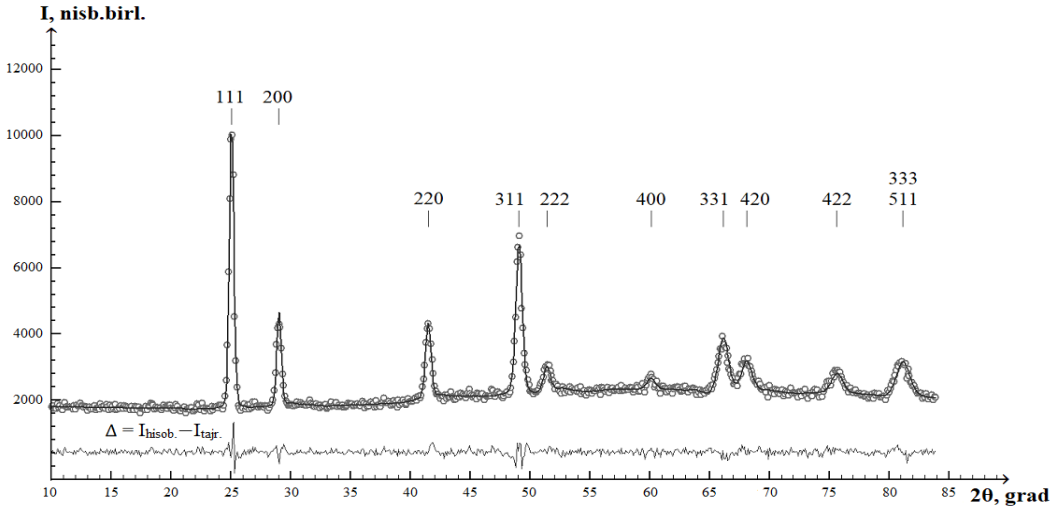
Yaqinlashish testlari natijasida *ecutwfc*=100 Ry va 6×6×6 k-to‘r optimal DFT parametrlari sifatida tanlandi. Jumladan, 90→100 Ry va 100→110 Ry intervallarida umumiy energiya farqlari mos ravishda 0.947 va 0.728 meV/atomni tashkil etib, 1 meV/atom kimyoviy aniqlik mezonidan kichik bo‘ldi [4]. 1-rasmda umumiy energiyaning *ecutwfc* ortishi bilan yaqinlashib borishi va 100 Ry dan so‘ng uning o‘zgarishi keskin kamayishi ko‘rsatilgan. Bosimning *ecutwfc* ortishi bilan 11.75 dan

20.29 kbargacha o‘sishi, energiyaga nisbatan esa sekinroq barqarorlashishi tekislik-to‘lqin bazisi cheklanganligi bilan bog‘liq Pulay kuchlanishi orqali izohlanadi [5].

Tanlangan parametrlar asosida hisoblangan muvozanat panjara parametri a_0=4.334 Å ni tashkil etdi. 2-rasmda keltirilgan neytronogramma asosida $Ti_{22}Mo_{10}C_{32}$ qotishmasining yuzlari markazlashgan kub kristall tuzilishi tavsiflanib, undan aniqlangan a=4.330 Å panjara parametrining hisoblangan qiymat bilan 0.09% farqda



1-rasm. *$Ti_{22}Mo_{10}C_{32}$ SQS strukturasi uchun umumiy energiya va bosimning tekislik to‘lqinlar energiya kesimi (ecutwfc) ga bog‘liqligi.*



2-rasm. *$Ti_{22}Mo_{10}C_{32}$ namunasining neytron difraksiya spektri [7].*

mos kelishi tanlangan SQS struktura hamda DFT parametrlarining mazkur tarkib uchun adekvatligini ko‘rsatdi [6].

Shunday qilib, tanlangan SQS strukturasi va *ecutwfc*=100 Ry hamda 6×6×6 k-to‘rga asoslangan DFT hisoblashlari $Ti_{22}Mo_{10}C_{32}$ qotishmasining strukturaviy tavsifi uchun ishonchli ekanligi neytron difraksiyasi ma’lumotlari bilan tasdiqlandi. Mazkur hisoblash parametrlari keyingi kvant-mexanik hisoblashlarda ushbu qotishmaning panjara parametrlari va boshqa strukturaviy xossalarini ishonchli baholash uchun asos bo‘la oladi.

ADABIYOTLAR

1. Jhi S.–H., et al. Nature. 1999, 399, 132–134. https://doi.org/10.1038/20148
2. Ivashchenko V.I., et al. Materials Chemistry and Physics. 2022, 275,125178. https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2021.125178
3. Zunger A., et al. Physical Review Letters. 1990, 65(3), 353–356. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.65.353
4. Lejaeghere K., et al. Science. 2016, 351, 6280−1394. DOI: 10.1126/science.aad3000
5. Pulay P. Molecular Physics. 1969, 17(2), 197-204. https://doi.org/10.1080/00268976900100941
6. Khidirov I., et al. Inorganic Materials. 2024, 60(4), 425-430. https://doi.org/10.1134/S0020168524700663

TASHQI KVANT SAMARADORLIGINI SPEKTRAL O‘LCHASH USULIDA ORGANIK QUYOSH ELEMENTLARINI TADQIQ ETISH

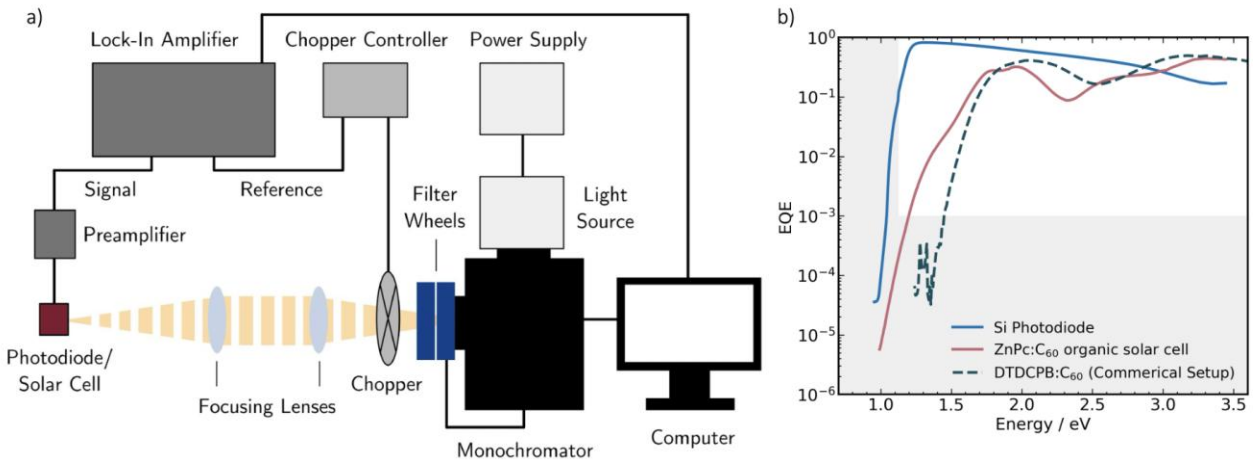
[1]Ibragimova K.H., [2]Saparbayev A.A.
[1]Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy universiteti
[2]U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti
ibragimovakaromat53@gmail.com

Tashqi kvant samaradorligi (External Quantum Efficiency, EQE) fotoelektrik qurilmaga ma’lum to‘lqin uzunligida tushayotgan fotonlar soniga nisbatan tashqi zanjirda yig‘ib olinadigan fotogeneratsiyalangan zaryadlar sonini ifodalaydi. Yuqori sezgir tashqi kvant samaradorligi (EQE) ni o‘lchash tizimining tuzilishi va amaliy ishlash prinsipi maxsus metodik tadqiqotda batafsil bayon qilingan. EQE optoelektron qurilmalarda fotonlarning erkin va yig‘ib olinadigan zaryadlarga aylanish samaradorligini baholovchi asosiy parametr sifatida qaraladi. Tashqi kvant samaradorligi $EQE(\lambda) = \frac{N_e(\lambda)}{N_{ph}(\lambda)}$ orqali ifodalanadi. Bu yerda N_e— tashqi elektr zanjirida qayd etilgan elektronlar soni, N_{ph}— esa fotoelement sirtiga tushayotgan fotonlar sonidir. Demak, EQE qiymatining ortishi tushayotgan fotonlardan elektr tokini hosil qilish jarayonining samaradorligi yuqoriligini ko‘rsatadi. Organik fotoelementlarda EQE faol qatlam tomonidan yutilgan fotonlar ulushi va ichki kvant samaradorligi bilan ham bog‘liq bo‘lib, EQE=A\cdot IQE ko‘rinishida ifodalanishi mumkin [1].

1(a)-rasmda yuqori sezgirlikdagi EQE o‘lchash tizimining eksperimental sxemasi keltirilgan. Tizim yorug‘lik manbai, monoxromator, filtr g‘ildiraklari, optik modulyator (chopper), fokuslovchi linzalar, fotodiod yoki quyosh elementi, dastlabki kuchaytirgich (preamplifier) va sinxron kuchaytirgich (lock-in amplifier) dan tashkil topgan. Monoxromator yordamida kerakli spektral nurlanish ajratiladi, modulyator yordamida optik signal modulyatsiyalanadi, fotoelementda hosil bo‘lgan kuchsiz signal dastlabki kuchaytirgich orqali kuchaytirilib, sinxron kuchaytirgich yordamida qayd etiladi [1].

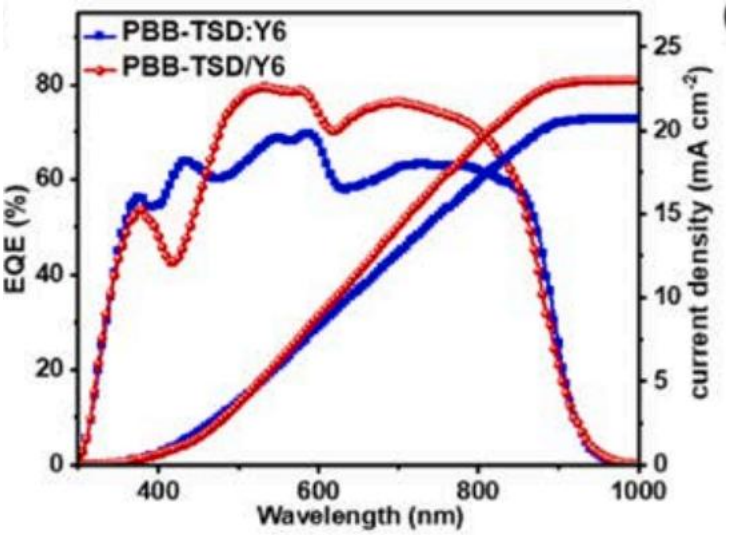
1(b)-rasmda kremniy fotodiodi va ZnPc:C60 organik quyosh elementining ushbu EQE qurilmasida o‘lchangan EQE spektrlari hamda taqqoslash uchun

DTDCPB:C60 organik quyosh elementining QE R3011 tizimida o‘lchangan spektri logarifmik masshtabda keltirilgan. Och kulrang soha standart EQE tizimlari erisha olmaydigan past signal diapazonini ifodalaydi. Natijalar yuqori sezgir sEQE usuli yordamida juda kichik fotoelektrik javoblarni qayd etish mumkinligini ko‘rsatadi [1].



1-rasm. a) Yuqori sezgirlikdagi tashqi kvant samaradorligini (sEQE) o‘lchash qurilmasining sxemasi; b) kremniy fotodiodi (Thorlabs FDS100), sEQE qurilmasida o‘lchangan ZnPc:C60 (1:1 hajmiy nisbat) organik quyosh elementi va tijoriy EQE qurilmasida (QE R3011, Enli Technology) o‘lchangan DTDCPB:C60 (1:1 hajmiy nisbat) organik quyosh elementining EQE spektrlari. Och kulrang soha standart EQE tizimlari qayd eta olmaydigan signal diapazonini ko‘rsatadi [1].

EQE metodining organik quyosh elementlarini tavsiflashdagi amaliy imkoniyati PBB-TSD donor va Y6 akseptoriga asoslangan tizimda ko‘rib chiqilgan .Hajmiy getereostrukturali (PBB-TSD:Y6) va qatlamma qatlam (PBB-TSD/Y6) qurilmalarining EQE spektrlari Zolix Solar Cell Scan 100 yordamida o‘lchangan. Har ikkala qurilmada 300–900 nm oralig‘ida keng spektral fotojavob qayd etilgan, biroq qatlamma qatlam qurilmasining EQE qiymati 460–840 nm sohada hajmiy getereostruktura qurilmasinikidan yuqori bo‘lgan. Bu farq qatlamma qatlam faol qatlamida fotogeneratsiyalangan zaryadlarning ajralishi, tashilishi va yig‘ilishi samaraliroq kechishi bilan bog‘lanadi.[3]



2-rasm. PBB-TSD:Y6 (BHJ) va PBB-TSD/Y6 (LBL) organik quyosh elementlarining EQE spektrlari.

EQE spektrini standart quyosh spektrining foton oqimi bilan integrallash orqali qisqa tutashuv tok zichligi (JSC) ni mustaqil ravishda baholash mumkin. EQE spektridan hajmiy getereostrukturali va qatlamma qatlam qurilmalari uchun mos ravishda 20,67 va 22,99 mA·cm^{-2} qiymatlari hisoblangan; J–V o‘lchovida esa 21,19 va 23,52 mA·cm^{-2} qiymatlari olingan. Hisoblangan va bevosita o‘lchangan qiymatlar orasidagi farq 5 % dan kichik bo‘lgan. Bu holat EQE o‘lchovi yordamida nafaqat spektral fotojavobni, balki fotoelementning tok hosil qilish xususiyatini ham mustaqil tekshirish mumkinligini ko‘rsatadi.[3]

Metodning boshqa donor–akseptor tizimida qo‘llanishi PM6:L8-BO asosidagi BHJ va LbL fotoelementlarida ham ko‘rib chiqilgan. Ushbu tizimda ham EQE Zolix Solar Cell Scan 100 yordamida o‘lchangan; qatlamma qatlam qurilmasida spektral diapazon bo‘ylab hajmiy getereostrukturali qurilmasiga nisbatan biroz yuqori EQE qayd etilgan. EQE spektridan hisoblangan qisqa tutashuv toki qiymatlari hajmiy getereostruktura uchun 25,75 mA·cm^{-2}, qatlamma qatlam uchun 26,14 mA·cm^{-2} bo‘lib, J–V o‘lchovlari bilan yaxshi moslik kuzatilgan [4].

Shunday qilib, EQE spektroskopiyasi yorug‘lik manbai, monoxromator, optik filtrlar, optik modulyator, kalibrlangan fotodiod, kuchaytirgich va sinxron kuchaytirgichni yagona o‘lchash zanjiriga birlashtiruvchi optik-elektrik metod

hidsoblanadi [1,2]. Uning asosiy afzalligi fotoelementning to‘lqin uzunligiga bog‘liq real fotoelektrik javobini aniqlash, kichik signallarni shovqin fonidan ajratish hamda spektrdan qisqa tutashuv tokini mustaqil hisoblash imkoniyatidir. PBB-TSD/Y6 va PM6/L8-BO tizimlaridagi natijalar ushbu metodning organik quyosh elementlari faol qatlam arxitekturasidagi farqlarni sezgir qayd etishini ko‘rsatadi [3,4].

Foydalanilgan adabiyotlar ro’yxati:

[1] A. Jungbluth, L. M. Hanauske, M. Zhu, G. Christoforo, P. Kaienburg, M. Riede, An Open Source Sensitive External Quantum Efficiency Setup for Characterising Optoelectronic Devices, Journal of Open Hardware 9 (2025). DOI: 10.5206/joh.v9i1.22285.

[2] S. Zeiske, C. Kaiser, P. Meredith, A. Armin, Sensitivity of Sub-Bandgap External Quantum Efficiency Measurements of Solar Cells under Electrical and Light Bias, ACS Photonics 7 (2020) 256–264. DOI: 10.1021/acsphotonics.9b01531.

[3] X. Liang, S. Zhang, Y. Wu, J. Wang, C. Yang, A. Saparbaev, S. Wen, X. Bao, Layer-by-layer solution-process enables higher crystallinity and desirable phase separation in non-fullerene organic solar cells, Organic Electronics 107 (2022) 106560. DOI: 10.1016/j.orgel.2022.106560.

[4] J. Zhang, W. Xu, H. Tian, Z. Liu, F. Zhang, Bulk Heterojunction or Layer-by-Layer Structure PM6:L8-BO Based Polymer Solar Cells Exhibiting an Efficiency of 17.84% or 18.43%, ChemPhotoChem 8 (2024) e202300348. DOI: 10.1002/cptc.202300348.

PARA-KSILOL + XLOROFORM TIZIMIDAGI KUCHSIZ MOLEKULALARARO O‘ZARO TA’SIRLARNI RAMAN SPEKTROSKOPIYASI ASOSIDA TADQIQ QILISH

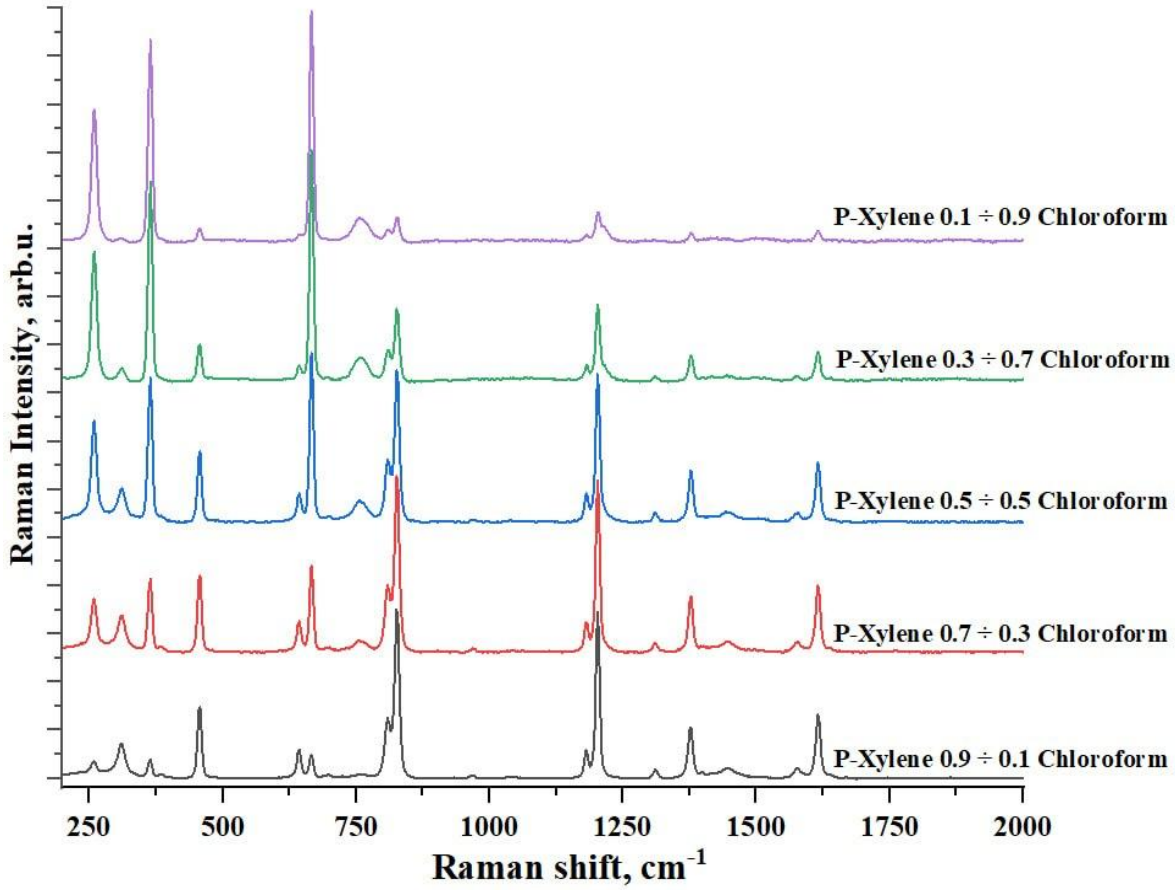
A. Absanov, SH. Umidullayev, M. Shoimov
Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universiteti
e-mail: shoimovmurodjon@gmail.com

Aromatik uglevodorodlar delokalizatsiyalangan π-elektron tizimiga ega bo‘lib, ularning molekulalararo o‘zaro ta’sirlari fizik kimyo va molekulyar spektroskopiyada muhim ahamiyatga ega. Aromatik halqaning π-elektron buluti C–H···π, dispersiya va van-der-Vaals kabi zaif no-kovalent o‘zaro ta’sirlarning shakllanishida muhim rol o‘ynaydi [1]. p-Ksilol (1,4-dimetilbenzol) yuqori simmetriyaga va elektronlarga boy π-tizimga ega bo‘lgani sababli molekulalararo o‘zaro ta’sirlarni o‘rganish uchun qulay model molekula hisoblanadi [2]. Xloroform esa qutblangan C–H bog‘i tufayli aromatik π-elektron buluti bilan elektrostatik hamda C–H···π tipidagi o‘zaro ta’sirlarga kirishishi mumkin [3]. Ushbu zaif o‘zaro ta’sirlar molekulalarning elektron va tebranish xossalariga ta’sir ko‘rsatadi. Ularni eksperimental aniqlashda Raman spektroskopiyasi samarali usullardan biri hisoblanadi. Ushbu usul molekulaning qutblanuvchanligidagi o‘zgarishlarga yuqori sezgir bo‘lib, tebranish chastotalaridagi kichik siljishlar va intensivliklarning o‘zgarishi orqali zaif no-kovalent o‘zaro ta’sirlarni aniqlash imkonini beradi [4].

Tajribada kimyoviy tozalangan asetilaseton va xloroformning suyuq holatdagi 0,8; 0,6; 0,4 va 0,2 mol ulushli aralashmalari o‘rganildi. Barcha tajribalar xona harorati va normal atmosfera bosimida olib borildi. Raman spektrlari 1200 shtrix/mm difraksion panjarali InVia Raman spektrometrida, 10 s ekspozitsiya vaqti hamda 0,01 cm^{-1} ajratish qobiliyatida qayd etildi.

Raman spektroskopiyasi yordamida p-ksilol (P-Xylene) va xloroform ($CHCl_3$) aralashmalarining turli konsentratsiyalardagi spektrlari o‘rganildi (1-rasm). P-Xylene : Chloroform nisbatining 0,9:0,1 dan 0,1:0,9 gacha o‘zgarishi bilan Raman chiziqlari intensivligi va ayrim cho‘qqilar shaklida o‘zgarishlar kuzatildi. Bu o‘zgarishlar

komponentlar ulushining almashishi hamda molekulalararo Van-der-Vaals va dipol-induksiyalangan dipol o‘zaro ta’sirlari bilan bog‘liq. Spektrdagi 450–550 sm^{-1} diapazondagi chiziqlar p-ksilen aromatik halqasining skelet deformatsion va C–H bog‘larining tekislikdan tashqari tebranishlariga tegishli bo‘lib, p-ksilen miqdori ortishi bilan kuchayadi. 650–700 sm^{-1} sohadagi cho‘qqilar aromatik halqaning deformatsion tebranishlari va benzol yadrosining ichki tebranishlariga mos keladi. 725–850 sm^{-1} oralig‘idagi intensiv cho‘qqilar aromatik halqaning simmetrik “ring breathing”, C–C valent va C–H deformatsion tebranishlari bilan bog‘liq.



1-rasm. Raman spektroskopiyasi yordamida p-ksilen (P-Xylene) va xloroform ($CHCl_3$) aralashmalarining turli konsentratsiyalardagi spektrlari.

800–830 sm^{-1} atrofidagi maksimum p-ksilenning xarakterli Raman chizig‘i bo‘lib, uning intensivligi p-ksilen miqdori ortishi bilan keskin oshadi. 1150–1230 sm^{-1} oralig‘idagi maksimumlar aromatik halqaning C–C valent tebranishlari va metil

guruhlarining deformatsion tebranishlariga mos keladi. 1200 sm^{-1} yaqinidagi cho‘qqi barcha spektrlarda kuzatilib, p-ksilenning aromatik strukturasi saqlanganligini ko‘rsatadi. 1300–1450 sm^{-1} diapazondagi signallar esa CH_3 guruhlarining simmetrik va assimmetrik deformatsion tebranishlari bilan bog‘liq. 1370–1390 sm^{-1} hamda 1440 sm^{-1} atrofidagi cho‘qqilar CH_3 guruhlarining egilish (bending) tebranishlarini ifodalaydi.

Ushbu cho‘qqilar p-ksilen miqdori ortishi bilan yanada ravshanlashadi. Spektrdagi 1600–1660 sm^{-1} oralig‘idagi intensiv maksimumlar aromatik halqaning C=C valent tebranishlariga mos keladi. 1615–1630 sm^{-1} atrofidagi cho‘qqi benzol yadrosining simmetrik C=C tebranishi bo‘lib, p-ksilenning muhim identifikatsion belgilaridan biridir. Uning intensivligi p-ksilen konsentratsiyasi ortishi bilan muntazam oshadi. Spektrlarning tahlili shuni ko‘rsatadiki, xloroform miqdori yuqori bo‘lgan namunalarda 260–400 sm^{-1} diapazondagi C–Cl tebranishlari ustunlik qiladi, p-ksilen ulushi ortishi bilan esa 800, 1200 va 1600 sm^{-1} atrofidagi aromatik halqa tebranishlari kuchayadi. Cho‘qqilarning kichik siljishlari komponentlar orasidagi zaif molekulalararo o‘zaro ta’sirlarni ko‘rsatadi. Umuman, Raman spektrlari p-ksilen va xloroform aralashmalarining tarkibini aniqlash hamda molekulalararo ta’sirlarni baholashda samarali usul ekanligini tasdiqlaydi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

[1] Lindenmaier, R., Scharko, N. K., Tonkyn, R. G., Nguyen, K. T., Williams, S. D., & Johnson, T. J. (2017). Journal of Molecular Structure, 1149, 332-351.

[2] Venkatesh, G., Govindaraju, M., Kamal, C., Vennila, P., & Kaya, S. A. V. A. (2017). RSC advances, 7(3), 1401-1412.

[3] Kınaytürk, N. K., Kalaycı, T., Tunalı, B., & Altuğ, D. T. (2023). Chemical Physics, 570, 111905.

[4] Xu, L., Miao, X., Ying, X., & Deng, W. (2012). The Journal of Physical Chemistry C, 116(1), 1061-1069.

KREMNIYLI QUYOSH ELEMENTINING BIR O‘LCHAMLI GEOMETRIK MODELINI MATEMATIK MODELLASHTIRISH ASOSIDA FOTOELEKTRIK PARAMETRLARINI ANIQLASH VA TAHLIL QILISH

Abdulazizov Toxirjon Botirjon o‘g‘li [1], R.Aliev [1], A.A.Mirzaalimov [2], N.A.Mirzaalimov [1], A.A.Alijonov [3], S.I.Temirov[1]

[1] Andijon davlat universiteti, Andijon, O’zbekiston
[2] Andijon davlat pedagogika instituti, Andijon, O’zbekiston
[3] Andijon davlat texnika instituti, Andijon, O’zbekiston
toxirjonbotirovich@gmail.com

Annotatsiya. Ushbu tezisda p–n o‘tishli kremniy asosidagi quyosh elementining bir o‘lchamli (1D) elektr-fizik modeli COMSOL Multiphysics 6.4 dasturining Semiconductor Module vositasida ishlab chiqildi. Modellashtirishda AM1.5G quyosh spektri, Beer qonuniga asoslangan fotogeneratsiya mexanizmi va Shockley–Read–Hall (SRH) rekombinatsiya modeli qo‘llanildi. Simulyatsiya natijalariga ko‘ra elementning qisqa tutashuv toki I_{sc} = 80 mA, ochiq zanjir kuchlanishi V_{oc} = 0.6 V, to‘ldirish faktori FF = 70.3% va samaradorlik PCE = 16.9% ni tashkil etdi. Olingan natijalar sanoat va laboratoriya sharoitidagi kremniy quyosh elementlari ko‘rsatkichlari bilan yaxshi mos kelishi ko‘rsatildi.

Kalit so‘zlar: quyosh elementi, COMSOL Multiphysics, kremniy, p–n o‘tish, fotogeneratsiya, SRH rekombinatsiyasi, PCE.

Quyosh elementlarining energetik samaradorligini oshirish ularning ishlash mexanizmini belgilovchi fundamental fizik jarayonlarni, xususan, zaryad tashuvchilarning fotogeneratsiyasi, diffuziyasi, dreyfi va rekombinatsiya jarayonlarini chuqur o‘rganishni talab etadi [1]. Mazkur jarayonlarning o‘zaro ta’sirini eksperimental usullar yordamida kompleks tadqiq etish ko‘p vaqt va moddiy resurslarni talab qilishi sababli, matematik hamda sonli modellashtirish usullaridan foydalanish samarali ilmiy yondashuvlardan biri hisoblanadi [2].

Ushbu tadqiqotning asosiy maqsadi p–n o‘tish asosida ishlovchi kremniyli quyosh elementining bir o‘lchamli (1D) elektr-fizik modelini COMSOL Multiphysics dasturiy muhiti yordamida ishlab chiqishdan iborat. Modelda yorug‘lik ta’sirida zaryad tashuvchilarning generatsiyasi hamda Shockley–Read–Hall (SRH) rekombinatsiya mexanizmi hisobga olinadi. Model asosida quyosh elementining asosiy fotoelektrik xarakteristikalari, jumladan, volt-amper xarakteristikasi (I–V) va quvvat-kuchlanish (P–V) bog‘lanish grafiklari aniqlanadi hamda olingan natijalar fizik nuqtayi nazardan tahlil qilinadi.

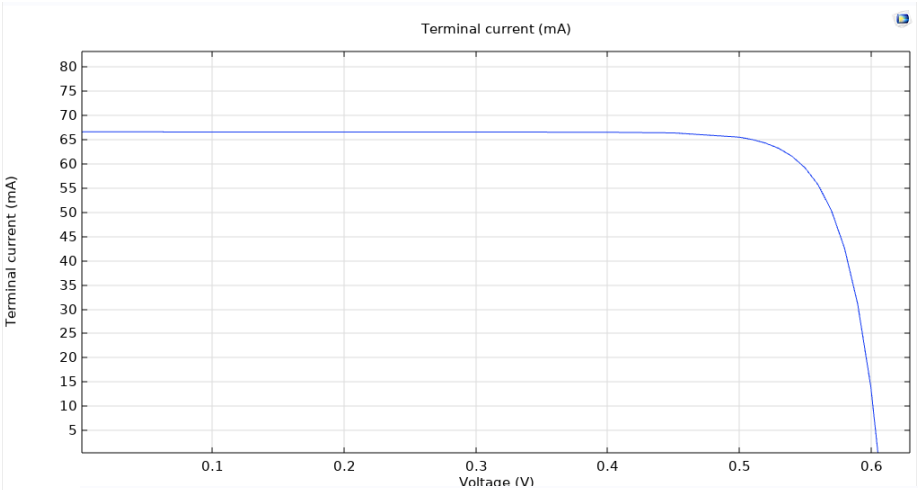
Tadqiqot COMSOL Multiphysics 6.4 dasturining Semiconductor moduli yordamida amalga oshirildi. Model bir o‘lchamli (1D) p–n o‘tishli kremniy strukturasidan iborat bo‘lib, sirt yuzasi 2 cm^2 va umumiy qalinligi 150.4 μm qilib olindi. p–n o‘tish n-tipli kremniy plastinkaning oldingi sirtiga p-tipli akseptor aralashma kiritish orqali hosil qilindi[3]. Kremniy plastinkaning hajmiy qismidagi bir jinsli donor konsentratsiyasi $N_D=1\times10^{16}$ cm^{-3} deb qabul qilindi. Oldingi sirtdagi akseptorlarning maksimal konsentratsiyasi $N_A=1\times10^{19}$ cm^{-3} etib belgilandi va uning chuqurlik bo‘yicha taqsimoti Gauss funksiyasi bilan ifodalandi. p–n o‘tish chuqurligi 0.25 μm deb qabul qilindi. Hisoblash ikki bosqichda amalga oshirildi: birinchi bosqichda muvozanat holati (Semiconductor Equilibrium) topildi, ikkinchi bosqichda esa statsionar (Stationary) rejimda kuchlanish 0 V dan 0.61 V gacha bosqichma-bosqich (0.05 V, so‘ngra 0.01 V qadam bilan) oshirib borildi. Bunda Puasson tenglamasi (elektr potensial uchun) hamda elektron va kovaklar uchun uzluksizlik tenglamalari birgalikda yechildi. Mesh ‘Finer’ darajasida hosil qilindi, p–n o‘tish chegarasi yaqinida esa mesh 10 nm gacha lokal ravishda zichlashtirildi.

Ishlab chiqilgan model asosida olingan asosiy elektr xarakteristikalari 1-jadvalda keltirilgan.

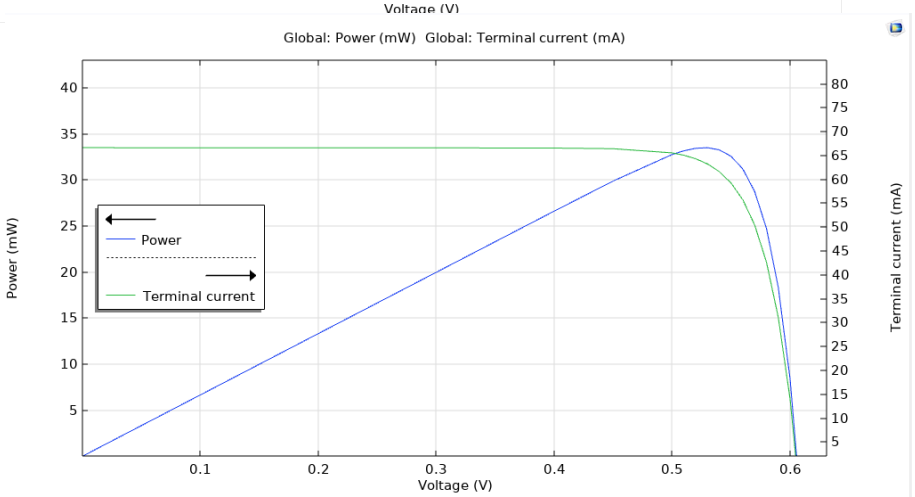
Parametr	**Qiymati**
Qisqa tutashuv toki (I_{sc})	80 mA
Ochiq zanjir kuchlanishi (V_{oc})	0.6 V
Maksimal quvvat nuqtasidagi kuchlanish (V_{mp})	~0.45 V
Maksimal quvvat nuqtasidagi tok (I_{mp})	~75 mA
Maksimal quvvat (P_{max})	~33.75 mW
Fill-faktor (FF)	70.3 %
Quyosh elementi samaradorligi (PCE)	16.9 %

1-jadval. Modellashtirish natijasida olingan quyosh elementi parametrlari.

a)



b)



1-rasm. Modellashtirish natijasida olingan quyosh elementi I-V xarakteristikasi (a) va quvvat grafigi(b).

Ishlab chiqilgan model fotogeneratsiya, rekombinatsiya va legirlash (doping) parametrlari quyosh elementi samaradorligiga qanday ta’sir ko‘rsatishini miqdoriy baholash imkonini beradi va kelgusida quyosh elementlari konstruksiyasini optimallashtirish uchun asos bo‘lib xizmat qilishi mumkin.

Adabiyotlar:

1. Chery, P. Modeling Recombination in Solar Cells. Macalester Journal of Physics and Astronomy, Vol. 6, Iss. 1, Article 2.

2. Lundstrom, M.S. Numerical Analysis of Silicon Solar Cells. PhD dissertation, Purdue University, 1980.

3. COMSOL Multiphysics. Si Solar Cell 1D — Semiconductor Module, Application Gallery, COMSOL Documentation (v.6.4). URL: https://doc.comsol.com/6.4/doc/com.comsol.help.models.semicond.si_solar_cell_1d/si_solar_cell_1d.html

ВЛИЯНИЕ АТМОСФЕРНЫХ АЭРОЗОЛЕЙ И ВОДЯНОГО ПАРА НА ПАРАМЕТРЫ ФИЛАМЕНТАЦИИ УЛЬТРАКОРОТКИХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ

Абдихалилова[1)] М.Е., Касимов[2)] А.К.
[1)]Национальный университет Республики Узбекистан
[2)]Институт Ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз
abdixalilova9771@gmail.com

Пространственно-временная эволюция мощных ультракоротких лазерных импульсов (УКЛИ) фемтосекундной длительности в атмосфере сопровождается формированием протяженных световых каналов — филаментов. Динамика данного процесса определяется нелинейным балансом между Керровской самофокусировкой и дефокусирующим действием генерируемой лазерной плазмы. В то время как для чистой сухой атмосферы закономерности филаментации изучены достаточно подробно, влияние реальных метеорологических факторов (флуктуации влажности, наличие капельных и пылевых аэрозолей) требует дальнейшей детализации. Целью настоящей работы является установлении взаимосвязи между микроскопическим составом атмосферного тракта и макроскопическими параметрами филамента лазерного пучка в атмосфере.

Присутствие водяного пара в оптическом тракте локально изменяет кубический нелинейный показатель преломления среды n_2. Из-за высокой электронной поляризуемости асимметричных молекул H_2O парциальный вклад нелинейности водяного пара превосходит отклик основных атмосферных газов. В результате эффективное значение n_2 смеси возрастает, что ведет к падению критической мощности самофокусировки $P_{cr} \propto {}^{1}/_{n_2}$. Для сухого воздуха расчетный порог составляет $P_{cr} \approx 3.5$ ГВт, тогда как во влажной среде он снижается до ≈ 3.1 ГВт.

Наличие в среде рассеивающих аэрозольных частиц с концентрацией N_α — приводит к фазовым искажениям волнового фронта. Это нарушает когерентное

сжатие пучка и эквивалентно повышает энергетический, барьер самофокусировки. Для описания процесса филаментации используется пространственная эволюция пиковой интенсивности излучения $I(x, y, z)$. В режиме филаментации распространение лазерного излучения сопровождается непрерывными потерями энергии импульса на многофотонную ионизацию газов и экстинкцию (рассеяние Ми и поглощение) на каплях аэрозоля.

Для выполнения поставленной задача был создан скрипт с использованием среды MATLAB, в котором решалось нелинейное уравнение Шреденгера, описывающее распространение излучения в нелинейной и случайно-неоднородной среде. В численных экспериментах мощность лазерного импульса считалась равной $P_0 = 13$ ГВт. На рисунке 1**,** а представлены результаты численного моделирования пространственной динамики интенсивности излучения на трассе длиной 100 метров для трех метеорологических сценариев.

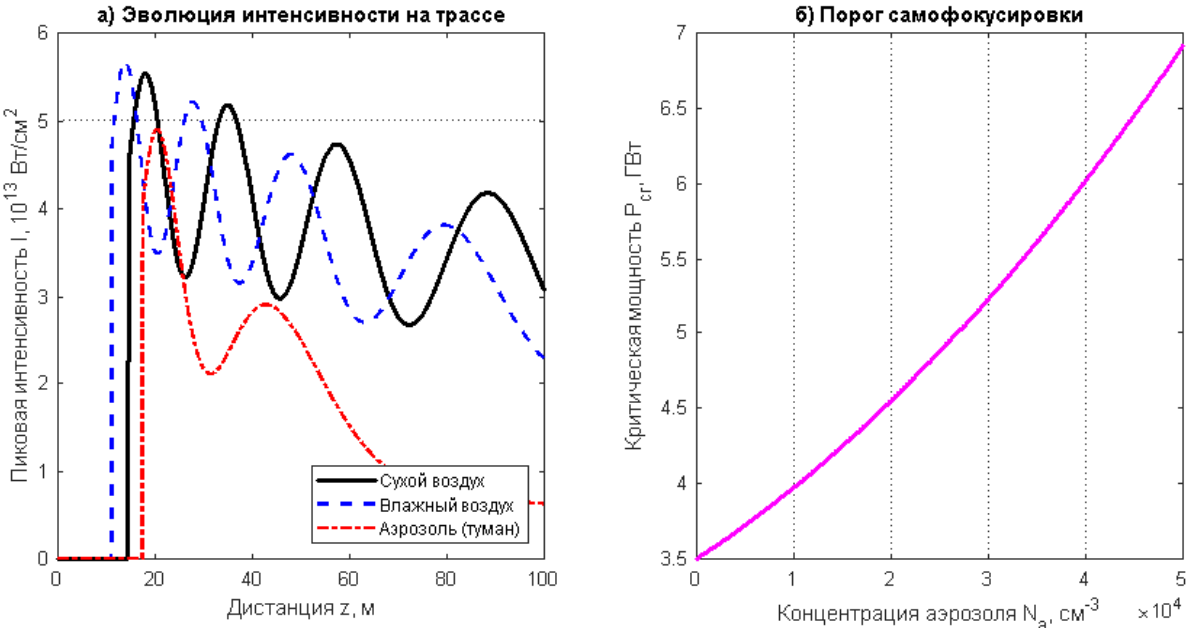


Рис 1, **а** – Значение пиковой интенсивности в зависимости от пройденного расстояния, **б** – Зависимость критической мощности самофокусировки излучения от концентрации аэрозолей в атмосфере.

Как видно из рис. 1 **а**, в случае сухого воздуха (сплошная линия), нелинейный фокус формируется на дистанции $z \approx 14.5$ метров. Пучок входит в режим ограничения интенсивности на уровне $\approx 5.5 * 10^{13}$ $Вт/см^2$.

Наблюдается серия затухающих рефокусировок. Расстояние между первым и вторым пиками составляет ≈ 15 м, в то время как между третьим и четвертыми пиками период возрастает до ≈ 22 м.

В случае влажного воздуха (штриховая линия), повышенный Керровский отклик смещает точку «поджига» филамента ближе к источнику — на дистанцию $z \approx 11.2$ метра. Начальная амплитуда осцилляций выше, однако более высокая плотность генерируемой плазмы обуславливает ускоренное вымывание энергии, приводя к более интенсивному росту пространственного периода пульсаций на дальних участках трассы .

При наличии в воздухе аэрозолей (штрихпунктирная линия), из-за фазовых искажений и роста порога P_{cr} нелинейный фокус отодвигается до $z \approx 17.5$ метров. За счет высокой экстинкции на частицах амплитуда пиков падает наиболее интенсивно. Система успевает совершить лишь два полноценных цикла рефокусировки, после чего на дистанциях $z > 65$ м интенсивность спадает ниже плазменного порога, и филамент гаснет.

На основании представленных экспериментов можно утверждать, что водяной пар ускоряет процесс самофокусировки и смещает точку поджига филамента бдиже к источнику. Аэрозольные компоненты, напротив, замедляют процесс самофокусировки и повышают величину критической мощности P_{cr} .

Литература

1. Кандидов В. П., Шленов С. А., Косарева О. Г. Филаментация мощного фемтосекундного лазерного излучения в атмосфере // Квантовая электроника. — 2009. — Т. 39, № 3. — С. 205-214.

2. Couairon A., Mysyrowicz A. Femtosecond filamentation in transparent media // Physics Reports. — 2007. — Vol. 441, No. 2-4. — P. 47-189.

SKYRMIONICS—COMPUTING AND MEMORY TECHNOLOGIES BASED ON TOPOLOGICAL EXCITATIONS IN MAGNETS

Yuldashev Ozodbek Yuldash ugli, Karshieva Zarnigor Alisher qizi
Doctoral Student, Center for the Development of Nanotechnology under the National University of Uzbekistan
e-mail: ozodbekyoldoshev@mail.com

One of the performance metrics of any binary switch is its energy-delay product, arguing for schemes that lower both their power dissipation and overall latency. The energy-delay product can be written as $I^2R_{on}t^2=Q_2R_{on}$ with t=Q/I, where Q is the amount of charge needed to switch from off to on and Ron is the on-state resistance. The charge Q needed to switch a small magnet is set by (a) the minimum critical charge Qc needed to switch magnetization, mandated by angular momentum conservation and (b) an added overdrive $Q/Q_c=1$ required to reduce the dynamic write error rate (WER) or switching time to application-specific targets. This charge gets smaller for small volume magnetic excitations but so does the energy barrier that sets the thermal stability for data retention. Technologies such as Heat Assisted Magnetic Recording (HAMR) and bit patterned recording attempt to address this specific challenge. HAMR reduces the anisotropy barrier quickly through spot heating over a localized size and then allowing it to restore through fast cooling. Bit Patterned Recording breaks the magnet into tinier lithographically patterned ordered grains that can individually switch quickly but gain volume stability through strong inter-grain exchange interactions. A third way to get small stable magnetic excitations is by nucleating metastable skyrmions, essentially tiny mobile magnets, held together against thermal fluctuations by their topological properties.

We can study the temporal statistics of a small magnet using the Landau–Lifschitz–Gilbert–Slonczewski (LLGS) equationwith a stochastic thermal torque or, equivalently, a Fokker–Planck equation for the probability distribution function of the magnetization. For a small magnet with perpendicular magnetic anisotropy in an MTJ, we can get the time-dependent WER from an analytical solution to the 1D Fokker–Planck equation. For large overdrive STT current $\iota=I/I_\chi >>1$, this works out to be

$$WER_{STT}(t) \approx \frac{\pi^2 \Delta_{th}}{4} e^{-2Q/Q_c}, Q = It \quad (1)$$

where the critical current I_χ is set in turn by a critical charge that satisfies angular momentum conservation between conduction electron and flipped magnetization,

$$\underbrace{\left(\frac{Q_c}{q}\right)\frac{\bar{h}}{2}}_{N=n\Omega} P\gamma = M_c\Omega(1+\alpha^2) \qquad (2)$$

where Π is the spin polarization of the current, ν is the electron density, θ is the charge of an electron, $\gamma=\gamma\mu_B/\square$ is the electron gyromagnetic ratio, η is the reduced Planck’s constant, γ is the electron dimensionless magnetic moment or g-factor, μ_B is the Bohr magneton, μ_0 is the permeability of free space, M_σ is the saturation magnetization, α is Gilbert damping, Ω is the volume of the magnetic layer, and $\Delta_{th}=E_B/(\kappa_B T)$ is the energy barrier, with $E_B=\mu_0 H_\kappa M_\sigma \Omega/2$ for magnetization reversal divided by the thermal energy and Boltzmann’s constant κ_B times the temperature T. The critical current density is given by

$$j_C^{STT} = \frac{2q\alpha}{\hbar P}\mu_0 M_S H_k t_F \qquad (3)$$

where τ_F is the magnetic layer thickness and H_κ is the anisotropy field. The interesting observation is that the critical switching time set by the ferromagnetic resonance frequency and the damping, $\tau_\Delta=(1+\alpha^2)/(\alpha\gamma\mu_0 H_\kappa)$, increases as we reduce the damping. However, the critical current *I* decreases such that Θ_χ is independent of anisotropy and weakly dependent on damping and is σετ πριμαριλψ βψ ανγυλαρ μομεντυμ χονσερϖατιον. The equations above set the charge Θ required for writing information at a given speed and error rate. The demand for a low error rate, $\backsim 10^9$ for memory and $\backsim 10^{15}$ for logic, will require a significant overdrive $\Theta>>\Theta\chi$. In a 20 nm diameter magnetic layer of 2 nm thickness, CoFeB magnet of saturation magnetization $\mu_0 M_\sigma$H1 T with about 10^4 spins, assuming a Gilbert damping of α=0.01 and polarization Π=0.7, we get Θ_χ/θ about $8x10^4$ electrons for destabilization. Assuming an anisotropy energy $\backsim$350 Kj/m^3, we get an energy barrier E_B 30κ_BT, which implies an overdrive with $\Theta/\theta \approx 10^6$ electrons at an error rate

of 10^9. At 1 ns switching time, the current density ≈50 MA/cm^2. While the critical current is set by the magnet’s energy barrier E_B and the charge by angular momentum conservation, the dissipated energy $E_{diss}=I^2P_{on}\tau$ is several orders of magnitude higher. This is because the voltage needed to produce the necessary current is set by the resistance of the oxide tunnel barrier P_{on}, whose energy barrier is much larger than that of the switching magnet. The energy dissipated can be reduced in all metallic devices such as proposed race track memories , where a spin current is injected into a metallic magnet from a heavy metal underlayer and the magnetization state read with a vertical current (e.g., a current passing through a tunnel barrier between the magnetic film and a fixed magnet with much higher anisotropy barrier), thus separating the read and write paths. Spin–orbit interactions in the heavy metal inject a spin perpendicular to the metal– magnet interface. The corresponding spin–orbit torque (SOT) can be used to flip a magnet. The current density can once again be obtained from energy considerations, while the write error rate obtained using a 2D Fokker–Planck equation with in and out-of-plane fields.

References

1. Normuradov M.T, et al. “Resistive switching behavior of Si/TiO Thin films for non-volatile Memory application “east European journals of pyhsics. 2. 275-279 (2026).

2. Weiwei Zhang, et al. “Longitudinal Magneto-Optical Kerr Effect of Nanoporous CoFeB and W/CoFeB/W Thin Films” Coatings 2022, 12, 115.

3. Guoqiang Yu, et al. “Room-Temperature Skyrmion Shift Device for Memory Application” pubs.acs.org/NanoLet

4. Sheng Yang; et al. “Fundamentals and applications of the skyrmion Hall effect” Appl. Phys. Rev. 11, 041335 (2024)

1. МУНДАРИЖА

Andriyko L.S., Khora O.V., Gorelov B.M., Marynin A.I. *Electrokinetic properties of functionalized carbon black in a water-alcohol medium*	**5**
А.А. Яблочкина, Д.Б. Элмуротова. *Нанокомпозитные сцинтилляторы для оптической спектроскопии: управление люминесцентными характеристиками.*	**8**
Рахматуллаев И.А., Абдусаттаров Б.А. *Структурные и спектральные характеристики микроструктур znse под воздействием гамма-излучения*	**11**
Соатиллаев А.У., Тажибаев И.И., Рузиев Ф.М., Бойназаров И.Р. *TFH–POE/PIB синергетик капсулалаш орқали перовскит қуёш элементларининг термик ва атмосферавий барқарорлигини ошириш*	**14**
Х.Х. Зохидов, Т.К. Турдалиев, Р.Х. Ашуров. *Фазовая идентификация наноплёнок tio2, полученных термическим атомно-слоевым осаждением с использованием ttip и H_2O*	**17**
Х.Х. Зохидов, Т.К. Турдалиев, Р.Х. Ашуров *Оптические характеристики наноплёнок TiO_2 при 750, 1000 и 1250 циклах термического аса из ttip и* H_2O	**20**
J.A. Yoqubjonov, Z. Bekmurodov, D.T. Sidiqaliyev, U.K. Makhmanov. *Uv–vis spectral properties of C_{70} fullerene solutions in n,n-dimethylformamide*	**23**
J.Sh. Xudoykulov, H.U. Mahmudjonov, U.A. Shaislamov. *Vertikal tartiblangan TiO_2 nanostrukturalari asosidagi fotoelektrodlarni sintez qilish hamda ularning mikrostrukturaviy va fotoelektrokimyoviy xossalarini tadqiq etish*	**26**
D.M. O‘razqulova, N.O. Dilmurodova, S. Abdukarimova V.O. Kuvondikov. *Organik quyosh elementlarida ibp qattiq qo‘shimchasi qo’llashning ahamiyati*	**29**
B.K. Sobirova, Sh.Z. Urolov. *Titan dioksidi nanorodlarining fotokatalitik xossalarini tadqiq qilish*	**32**
D.T. Bozorova, U.K. Makhmanov. *Features of fullerene C_{60} in binary solutions of aromatic hydrocarbons*	**34**
Makhmanov U.K., Tursunkulov E.A., Kudratov E.U. *Optical properties of polystyrene/C_{70} thin films*	**36**
Turg’unboyev A. Y., Zaxidov E. A. *Termik toblashning BBTSM-3:Y6 asosli organik quyosh elementlari faol qatlamining optik va spektroskopik xossalariga ta’siri*	**39**
Тажибаев И.И., Бойназаров И.Р., Турғунбоев А.Й., Соатиллаев А.У. *Аммоний альгинатнинг перовскит қатламида дуаль пассивация ва кристаллик тузилишни бошқаришдаги роли*	**42**
Т.К. Турдалиев, Ф.И. Абдурахманов. *Исследование оптических свойств тонких пленок NiO, полученных методом атомно-слоевого осаждения, с использованием спектроскопической эллипсометрии*	**45**
Tulaganov Sardor Anvvarovich. *Amorf SiO_2 nanomateriallari sirtida adsorbsiya jarayonlarining iq-furye spektroskopik tahlili*	**48**
Тажибаев И.И., Бойназаров И.Р., Соатиллаев А.У. *3,4,5-трифторанилин гидройодид (tfh) орқали перовскит қуёш элементларида интерфейс нуқсонларини пассивациялаш ва заряд ташишни яхшилаш*	**51**
B.K. Sobirova, M.A. Alibekova, M.B. Berdaliyeva, Sh.Z. Urolov. *Titan dioksidi nanostrukturalarining morfologik va optik xossalariga reaksiya muhitining ta’siri*	**54**
D.T. Sidigaliyev, Z. Bekmurodov, J. Yoqubjonov, U.K. Maxmanov. *Analysis of the optical response of C_{70} in dmf solutions*	**57**

U.K. Makhmanov, A.X. Shukurov, K.N. Musurmonov. *Optical properties of pani/ni–cnt nanocomposite dispersions studied by photoluminescence spectroscopy*	**60**
З.Ш. Шаймарданов, Р.Р. Джалолов, Б.Г. Атабаев, Ш. Маликов, О.О. Аманов, А.М. Сарсенбаев. *Влияние γ-излучения на фотолюминесцентные свойства наноструктур оксида цинка*	**63**
Saidqulova A.A., Saparbayev A.A. *PZH-F, PZF-F, PZCl-F va L8-Bo fullerensiz akseptorlarning optik xossalarini tadqiq etish*	**65**
Z.Sh. Shaymardanov, A.M. Sarsenbaev. *Yuqori haroratda qizdirish natijasida sun’iy opallarda hosil bo’lgan sekin davom etuvchi lyuminessensiyani o’rganish*	**68**
B.N. Rustamova, R.R. Jalolov, M.Z. Abdullayeva. *Photocatalytic properties of Ag-doped ZnO nanostructures*	**70**
Рахматуллаев И.А., Хошимов К.Х.. *Влияние гамма-излучения на структурные и оптические характеристики микропорошков ZnO*	**72**
A.R. Qodirov, M.A. Davlatov, N. Bozorova. *Termik oksidlanish natijasida hosil bo‘lgan niobiy oksid yupqa plyonkalarining raman-spektroskopik xususiyatlari*	**75**
B.R. Kaxramonov., I.X. Xudayqulov., V.N. Arustamov., G.P. Kaxramonova. *Vakuum-yoy razryadi ta’sirida aisi 430 po‘lati yuzasining element tarkibi va morfologiyasining o‘zgarishi*	**78**
Ne’matova Zumrad Zayniddin qizi, Daminov Rahimjon, Ochilov Odil. *Grafen oksidida qoldiq sulfatning ikki holati va ularning raman spektridagi izlari*	**81**
U.K. Makhmanov, K.N. Musurmonov, A.X. Shukurov. *Mass-spectrometric investigation of C_{60} fragmentation and Ba–C cluster formation induced by Ba+ ions*	**84**
А. Х. Рамазанов, Ф.С. Мукимбоев. *Графен–MOS_2 гетероструктуры как перспективная элементная база гибкой оптоэлектроники*	**87**
Muxamadqulov Shokhboz Jonibek Ugli, Ashurov Rustam Khatamovich. *Design of a steam-resistant cobalt/silicalite-1 catalyst for propane dehydrogenation*	**90**
Умирзаков Б.Е., Донаев С.Б., Ширинов Г.М., Абдуваитов А.А., Мирзаева Р.С. *Влияние термического и лазерного отжига на состав и структуру ионно-имплантированных Si(111) И CdSe(111)*	**94**
Muxamadqulov Shokhboz Jonibek Ugli, Ashurov Rustam Khotamovich. *Particle-size-controlled silicalite-1 as a support for selective cobalt-catalyzed propane dehydrogenation*	**97**
Mirzakandova Sokhibjamol Kholmumin kizi. *Synthesis and raman spectroscopic characterization of carbon nanotubes on a Si(100)/SiO_2/Al_2O_3/Fe/Ni substrate*	**101**
Малышева М.Е., Реймбаева С.Р. *Эффект фарадея и магнитная восприимчивость монокристалла KTb_3F_{10}*	**104**
Имомов Муҳибжон Хабибжонович. *Табиий фотосенсибилизаторларнинг спектрал хусусиятлари*	**107**
Khudoykulov J.Sh. Abdumutalov M.X. Odilova N.O. Azimova M.Sh. *Photoluminescence and optical properties of sol–gel spin-coated nio thin films annealed at 400 °C*	**110**
Keneshbekova Aruzhan, Liu Guowei, Wang Shunuo, Zhang Yang, Makhmanov Urol and Jiang Xiaohong. *Growth, structure, and photocatalytic performance of C_{60} fullerene nanotubes.*	**113**
Jumayeva Maxfuza, Mamatkulov Shavkat, Butanov Hakimjon. *Gidrotermal usulda sintez qilingan Cu_2O/g-C_3N_4 geterotuzilmalarining strukturaviy xususiyatlari*	**116**
J.K. Jamolov, E.A. Tursunkulov, U.K. Makhmanov. *Optical and raman spectroscopic study of C70 dispersion in lldpe/xylene solutions*	**118**
R.R. Jalolov, Z.Sh. Shaymardanov, Sh.Z. Urolov, B.N. Rustamova. *Modulating the physico-chemical properties of ZnO nanostructures via doping with diverse atomic species (Al, Ag, and S): a comparative study*	**121**

R.R. Jalolov, B.N. Rustamova. *Effect of sulfur atoms on the nature of defects in ZnO nanostructures*	**123**
Boynazarov I.R. Tajibayev I.I. Ro‘ziyev F.M. Mamarajabov F.B. *NiOx/Perovskit interfeysining tcep molekulasi bilan passivatsiyalanishini XPS spektroskopiyasi orqali tahlil qilish*	**126**
G’ulomjanova Sevaraxon G’ofurjon qizi. *Uglerod nanonaychalarini metall katalizator qoldiqlaridan tozalashning bir bosqichli usuli*	**128**
A.A. Zaripov, B.A. G’oipov. *Optical properties of Ti-Fe-Eu-Cr-Ni nanoparticles*	**131**
Eshburiyeva M.U., Isakova S.S., Usmanov D.T., Xayrullayeva G. *Nebutamol preparatining raman spektroskopiyasi va sirt ionlashuv massa-spektrometriyasi usullari yordamida tahlili*	**134**
K.B. Egamberdiyev, B.E. Umirzakov, X.T. Bozorova, A.A. Abuvayitov *NiO-Suv nanosuyuqligi issiqllik o’tkzuvchanligining tashqi elektromagnit maydoni ta’sirida nanozarralar konsentratsiyasiga bog’liqligini tadqiq qilish.*	**136**
Х.Т. Бозорова, Б.А. Аллаев, В.Н. Авдиевич, К.Б. Эгамбердиев, О.В. Трунилина, С.З. Мирзаев. *Влияние размера наночастиц SiO_2 и концентрации TiO_2 на динамическую вязкость гибридных наножидкостей SiO_2-TiO_2 на водной основе*	**139**
G.A. Boboqambarova, J.Sh. Xudoyqulov, M.X. Abdumutalov, X. F. Rejamatov. *Effect of Fe concentration on the optical and electrophysical properties of ZnFeO thin films*	**142**
Makhmanov U.K., Kokhkharov A.M., Bakhramov S.A., Aslonov B.A. *C_{70} nanostructures and polymer hybrid systems: formation and optical properties*	**144**
Арустамов В.Н, Худайкулов И.Х, Харьяков В.Н, Кахрамонов Б.Р. *Анализ нанодисперсных порошков карбида вольфрама вакуумно дуговой обработки*	**146**
Ашуров Р., Адилов М. *ЭПР, Рамановская и фотоэлектронная спектроскопия анионных вакансий в наноструктурированных электродных материалах различного структурного типа*	**148**
Касимов А.К., Халиков Г.А. *Применение нейронных сетей для дешифровки сигналов широкополосного лидарного зондирования атмосферы*	**152**
Д.Ж. Асанов, М.И. Маркевич, Е.Н. Щербакова. *Морфология и структура пленок оксида цинка на кремниевой подложке, формируемых методом термического распыления*	**155**
D. B. Yusupov, R. A. Ganeev, V. V. Kim and S. B. Isamov. *Generation third harmonic in laser-induced plasmas: experiment and theory*	**159**
Umarov Otabek Abdullaevich, Karimbayev Eldor Xalmuratovich. *The role of the fast fourier transform spectrum of an applied laser pulse*	**162**
Цой Э. Н. *Свойства оптических солитонов в средах с высшей дисперсией.*	**164**
F. M. Tojinazarov, V.V. Kim and R. A. Ganeev. *Third- and fifth-harmonic generation from cds thin films of varying thickness in the near-infrared region*	**167**
Shermatova Feruza, Payziyev Shermakhamat, Begimqulov Sherzod. *LED end-pumped Dy:YAG yellow laser*	**169**
Matchonov Quvonchbek Po‘lat o‘g‘li. *Optical high harmonic generation in a one-dimensional relativistic atom*	**171**

B.A. G’oipov, A.A. Zaripov *Analysis of the surface oxide layer on TI-6AL-4V alloy powders using Raman spectroscopy*	**173**
Y.A. Buriyev Sh.R. Kamalov, V.V. Kim and R.A. Ganeev. *Nonlinear optical properties of the thin films containing $CuGaS_2$ nanocrystallites*	**176**
Юсупова Ю.О, Касимов А.К. *Генерация суперконтинуума при филаментации и оптимизация вторичного излучения для атмосферной спектроскопии*	**177**
К.А. Турсунметов. *Эффект Киркендалла и закон Фика*	**180**
Д.Старокадомский, М.Решетник, А.Хора, О.Качоровская. *Физико-механические свойства эпоксидных композитов с высоким содержанием карбидов, нитридов и боридов (TiC, B_4C, Mo_2C, SiC, ZrC, CrC, TiB_2, TiN)*	**182**
Қурбонова С., Рахмонов Ғ.Т. *Органик бирикмаларнинг термодесорбцион спектрлар таҳлили*	**185**
Sh. Aminov, I.D. Yadgarov, I.Z. Urolov. *Grafen sirtiga bog'langan fulleren C_{20}+C_1 VA C_{20}+C_3 ning presessiya harakatining haroratga bog'liqligi.*	**187**
И.Дж. Ядгаров, М.У.Отабаев. *Исследования рассеяния ионов Ar^+ с дефектной поверхности InP(001)<110>*	**189**
Kamoladdin Egamberdiev, Dilfuza Xusanova, Zuhra Iskandarova, Sirojiddin Mirzayev, Umedjon Xalilov. *Metan plazmasi radikallari orqali ni nanozarralari barqarorligini boshqarish: molekulyar dinamika tahlili*	**192**
K. Egamberdiyev, D. Xusanova, U. Turayeva, S. Mirzayev, U. Xalilov. *Ni/NiO va Si/SiO_2 yadro-qobiq nanozarralarida energetik barqarorlik va kuchlanish taqsimotini atomistik modellashtirish.*	**195**
D. Husanova, A. Azamjonov, S. Mirzaev, U. Khalilov. *Electronic structure of perylene trimers in basic π-stacking configurations: a dft study*	**197**
Д.С. Кучакшоев, А.Г. Джабаров, А. Холов. *Особенности электропроводности стекол системы (Bi_2O_3–$2B_2O_3$) + βNaOH в интервале 300–680 K*	**200**
М.Х. Ашуров, И. Нуритдинов, С.Т. Бойбобоева, С.М. Утаров. *Фотолюминесценция монокристаллических твёрдых растворов CaF_2:SrF_2:YbF_3 и CaF_2:YbF_3*	**204**
Axmedjanov Farxad Rashidovich, Ulashov Asror Axmad o‘g‘li. *BSO, BGO va LGS kristallarida raman-nath difraksiyasi yordamida akustik to‘lqin tezligini aniqlash*	**207**
Tursunova Rushana Muhammadjon qizi, Soliyev Muxammadyor Vaxobjon o‘g‘li. *Effect of technological factors on the percolation threshold in doped silicate glass*	**210**
Axmedjanov Farxad Rashidovich, Tursunov Ixvoliddin baxtiyor o‘g‘li *Akustik to‘lqinlar tezligi va so‘nish koeffitsientini Williams-Lamb usulida aniqlash*	**213**
С.А. Байтелесов, Ф.Р. Кунгуров, Г.Н. Турдиева *Влияние нейтронного облучение на физико-механические, свойства конструкционных материалов реактора*	**215**
I.Sh. Toshpulatov, V.N. Avdiyevich. *Temperature dependence of attenuation coefficient of acoustic waves in Si*	**218**

Б. Х. Турманов, S. R. Adxamov. *Блоховские осцилляции атомной примеси в диполярном конденсате Бозе-Эйнштейна*	**221**
Temirov O.F., Ahadov A.A. Djurayev D.R. *O‘ta o‘tkazuvchan NbN nanoplyonkalarda kritik haroratga ta’sir etuvchi omillar*	**223**
Ш.Т. Тоиров, С.С. Исхакова. *Исследования ветеринарного препарата галоперидола методом термоионной эмиссии на поверхности окисленного вольфрама*	**225**
Sh.X. Tadjibayeva, N.N. Abdurazakov, N.A. Mirzaalimov, R. Aliev. *Kremniyli quyosh elementi i-v xususiyatiga haroratning ta’sirini superellips modeli asosida tahlil qilish*	**228**
Suyunov L.A., Tsoy E.N. *Parameters of the generic quartic solitons*	**231**
J.N. Sulaymonov. *Investigation of the nature of halogen bonding in PhX (X = Cl, Br, I)-1,4-dioxane complexes using dft*	**233**
A. Jumabaev, A.A. Absanov, H.A. Xushvaqtov, J.N. Sulaymonov. *Nature of halogen bonding in phx-dmf (X=Cl, Br, I) complexes: experimental and theoretical (DFT) consistency*	**236**
Axmedjanov Farxad Rashidovich, Soliyeva Nilufar Mashrabboy qizi. *Nanosuyuqliklarda akustik to‘lqinlari so‘nishining nanozarrachalar konsentratsiyasiga bog‘liqligi*	**238**
M. Shukurullayeva, K. Urakova, and H. Raximov. *Grafenda bir va ikki o‘lchamli superpanjaralari orqali to‘lqin paketining sochilish*	**240**
Lizhi Wu, Jingyuan Zhang, Lu Yao, Ruiqi Shen. *Research progress on laser-controlled combustion of adn-based solid propellants*	**242**
I.M. Saydumarov, D.T. Usmanov. *Oksidlangan volfram yuzasida trisiklik antidepressantlarning dissotsiativ sirtiy ionlashuvi: β-bog’ selektivligi va dft asosidagi sirtiy faollashuv modeli*	**243**
Саидов Сафо Олимович, Худайкулов Ильёс Холмурадович, Хамроева Турсуной Собиржон кизи, Тогаев Арслонбек Шухрат угли. *Рамановские и морфологические признаки неоднородности Ni/Si до термического силицидообразования*	**246**
Saidov Safo Olimovich, Khamroeva Tursunoy Sobirjon qizi, Togaev Arslonbek Shukhrat ugli. *Raman and ftir constraints on retained heterogeneity in EuO-treated kef-80 silicon*	**249**
F.M. Safarov, U.B. Khalilov. *Substrate impact on NiPt-catalyzed SWNT nucleation*	**252**
Tajibayev Ilhom Ibrohimjonovich, Ro‘ziyev Farid Murtoza o‘g‘li, Boynazarov Ilhom Rustam o‘g‘li, Mengliyev Doniyor Erkin o’g’li. *$CsPbI_2Br$ asosidagi noorganik perovskitlarda metall ionlari yordamida defekt passivatsiyasi va barqarorlikni yaxshilash*	**253**
Z.R. Ramazonova, A.A. Ahadov, D.R. Djurayev. *Vismut asosli kuprat o’ta o’tkazgichlarda effektiv massa anizotropiyasiga bog’liqligi*	**256**
D.M.O‘razqulova, N.O.Dilmurodova, S.Abdukarimova V.O.Kuvondikov. *IBP qattiq qo‘shimchasining PM6:A4T-16 faol qatlami strukturaviy xususiyatlariga ta’siri*	**259**
П.Б. Парчинский, А.А. Насиров, Х.Ф. Режаматов, С.А. Хахомов, А.В. Семченко, Н. А. Кулагина. *Изучение структурных характеристик фазового состава оксида фтора-олова (fto) содержащего частицы нанографена*	**262**
Otaqulova Nilufar Farxod qizi, Nurumbetova Lobar Rimbayevna. *$CsPbI_2Br$ asosidagi perovskit quyosh elementlarining fotovoltaik parametrlariga qizdirish haroratining ta’siri*	**265**

Otajonov Sardorbek Mahmud ugli, Yavidov Bakhrom Yangibaevich, Saburova Gulnoza Gulumbaevna, Alibekova Shaxnoza batirbaevna, otajonov asadbek mahmud ugli. *Polaron mass in $la_{2-x}sr_xcuo_4$ cuprate: effect of the 1/8 anomaly*	**268**
Otaboyev Sh.Sh., Usmanov D.T. *Direct detection of narcotic analgesics in bioflids using thermal ionization mass spectrometry*	**271**
J. OCHILOV, SH. KHASANOV, A. AZAMJONOV, R. DILMURAT, U. KHALILOV. *Machine-learning-assisted dft screening for the discovery of thermodynamically stable janus mxenes*	**274**
O.I. Boliyev, D.T. Usmanov. *Oksidlangan vanadiy termoemitterida kortizon molekulasining sirtiy ionlanish xususiyatlari*	**277**
Ф.Р. Ахмеджанов, С.З. Мирзаев, Г.С. Нуждов. *Сравнительный анализ анизотропии сноса энергии в кристаллах GaAs и $PbMoO_4$*	**279**
Нуждов Г.С., Оксенгендлер Б.Л., Салихов А., Тураева Н.Н., Максимов С.Е. Сулейманов С.Х. *Применение методов теории графов и общей топологии в анализе процессов синтеза и фазовой стабильности высокоэнтропийных и других сложных материалов*	**282**
Nurumbbetova Lobar, Reyimbayeva Sanobar. *Polimer faol qatlamlarning morfologik xossalarini giwax usulida tadqiq qilish*	**285**
А.А. Некбоев, Б.Т. Куйлиев, И.Ю. Дорошенко. *Конформационный анализ кластеров этанола, изолированных в аргоновой матрице*	**287**
M.M. Nazarov, Sh.Dj. Akhunov, Sh.M. Akhmedov, D.T. Usmanov. *Study of the kinetic characteristics of haloperidol molecules on an oxidized tungsten surface using the voltage modulation method*	**291**
N.O. Dilmurodova, S.A. Abdukarimova, V.O. Kuvondikov. *P3HT va P3HTT polimer aralashmalarining optik, mikrostrukturaviy va morfologik xususiyatlariga tarkibiy nisbatlarning ta’siri*	**294**
Р.Х. Ашуров, Э.Э. Мухторов, И.Х. Худойкулов, Т.К. Турдалиев. *Влияние технологической добавки на структурные изменения системы Ti6Al4 V–Re при высокоэнергетическом легировании*	**297**
Tajibaev I.I., Zaxidova M.A., Mengliboyev D.E., Boynazarov I.R. *CsPbI2Br perovskit plyonkalarining optik barqarorligiga gdcl3 qo’shilishining ta’siri*	**299**
Sh. Matnazarova, M. Isakjanova, U. Khalilov, M. Yusupov. *Hydrophilicity of functionalized C_{84} fullerene*	**302**
Muazzamxon Mamadaliyeva, Ishmumin Yadgarov, Dilfuza Husanova, Umedjon Khalilov. *Si@C_{60} endofullerenlarining grafen sirtidagi adsorbsion konfiguratsiyalari va energetik barqarorligini molekulyar dinamika usulida modellashtirish*	**304**
F.R. Akhmedzhanov, N.M. Maharov, V. N. Avdievich. *MgO, NaCl, NaBr va KBr kristallarida yuqori chastotali akustik to‘lqinlarning so‘nish anizotropiyasi*	**306**
М.О. Нормуродова, А.Ш. Раджабов, Д.Т. Усманов. *Холодная поверхностная ионизация молекул органических соединений*	**308**
Камилов Ш.Х. Рахимова Я. Саидкулов Д, Абдурахманов У. *Разработка излучающих компонентов для оптических сенсоров на основе композитов содержащих наночастицы*	**311**
Tursunpulat Juraboev, Umedjon Khalilov. *Early carbon clustering on Ni(100) and Ni(110) surfaces under pecvd-relevant conditions: a reactive molecular dynamics study*	**314**
Kh.I. Jabborov, B.E. Umirzakov, I.D. Yadgarov. molecular dynamics investigation of thermally activated Ni exoatom migration on C_{60} fullerene	**316**
Chorshanbiyeva N, Iskandarova Z, Xalilov U.B. *Metan plazmasidan vodorod ajratib olishda Ni-Pt nanozarrachalarining adsorbsion va dissotsiatsion samaradorligi*	**320**

M. Jabborova, N. Iskandarov, X. Butanov, K. Bobojonov, X. Raximov. *Grafenda to‘lqin paketi dinamikasiga asimmetrik elektrostatik sochuvchi markazlarning ta’siri*	**322**
С.С. Исхакова, Т.Х. Эрова, Ш.М. Ахмедов, З.А. Улашева. *Исследования психотропного препарата сибутрамина методом термоионной масс-спектрометрии*	**325**
Исаханов З.А., Джурахалов А.А., Умирзаков Б.Е., Хужаниязова А.У., Ташмухамедова Д.А. *Рассеяние ионов монокристаллом, при адсорбции O_2*	**328**
З.А. Исаханов, Б.Э. Умирзаков, Ж.Б. Хужаниёзов, Гаибназаров Б.Б., Р.Т. Курбанов. *Влияния эффекта каналирования на выход оже-электронов из монокристалла ZnTe*	**330**
Ибадуллаева М.И., Усманов Д.Т. *Закономерности ионизации бактерий trichoderma sp методом пиротермической ионизационной масс-спектрометрии*	**333**
Gupta Ganesh, Yusupov Ahmed. *Semiconductor optical amplifiers for reliable free-space optical communication systems: physical principles and performance challenges*	**336**
M. Komilov, R. Aliyev, N. Mirzaalimov, Sh. Tadjibayeva, A. Mirzaalimov. *Numerical study of the effect of gold nanoparticle size on the photoelectric performance of silicon solar cells by using SENTAURUS TCAD*	**338**
Niyozkulov J.K., Eshonqulov G‘.B., Vahobova Z., Turotov F.K., Abduraimova K. *LIBS texnologiyasi yordamida oltin va kumush plazmasining emissiya spektrlarini tahlil qilish*	**341**
A. Ergasheva, I. Juraev, U. Khalilov. *Reactive molecular dynamics study of amorphous network formation from Zn_4O clusters and 2,6-naphthalenedicarboxylate ligands in ethanol*	**344**
Eraliev A.A., Otajonov A.M., Yavidov B.Ya., Khajibaev D.G. *Spin-polarized pbe+u study of the doped hole in La2−xSrxCuO4 AT x = 0.25*	**346**
Досымова Бигуль Умиткаримовна, Долгополов Михаил Вячеславович. *Роль квантовой ёмкости графена и параметра η = CQ/Cgeo в электростатической инженерии mr-dwell наноструктур: спектроскопия d2I/dV2 как предлагаемый метод экспериментальной оценки*	**349**
O.I. Boliyev, Sh.M. Akhmedov, Sh.Dj. Akhunov, A.Sh. Radjabov, D.T. Usmanov. *Metall va oksidlangan volfram termoemitterlarida deksametazon molekulasining sirtiy ionlanish jarayonlari*	**352**
Ахунов Ш.Дж., Махманов У.К., Усманов Д.Т. *Исследование неаддитивных эффектов при распылении нанопленок фуллерена C_{60} бомбардировкой положительными ионами цезия в диапазоне энергий E0=1–5 кэВ*	**355**
Ахунов Ш.Дж., Усманов Д.Т., Ахмедов Ш.М., Назаров М.М., Болиев О. *Исследование неаддитивных эффектов при бомбардировке пленок фуллерена (C_{60}) полиатомными ионами Au_m^+ (m=1-7)*	**358**
Sh.M. Axmedov, S.S. Isxakova, Sh.Dj. Axunov, O.I. Boliyev, M.M. Nazarov, Sh.T. Toirov, D.T. Usmanov. *Trigeksifenidil (siklodol) molekulasining sirtiy ionlashuv qonuniyatlari*	**359**
М. Авазов, Н. Искандаров, К. Бобожонов, Х. Рахимов. *Влияние границы асимметричного электростатического потенциала на динамику электронного волнового пакета в монослойном графене*	**361**
Асатов А.А. *Наноматериалы на основе углерода в качестве анода для натрий-ионных аккумуляторов*	**363**
Н.А. Нурматов, Р.А. Алимов, Б.Т. Туракулова, М. Абдужабборова. *Особенности образования фотоэлектронных спектров Si (111) в области ближнего ультрафиолета*	**366**
Р. У. Алиев, Ю. В. Царенко, Н. А. Мирзаалимов, Г. А. Алиева. *Стимулирование параметров радиационно-облученных поликристаллических кремниевых структур*	**369**
Abdullo Ahadov, Davron Dzhuraev. *Exact layer-odd checkerboard constraint at ν = 3/2 in a bilayer extended hubbard model*	**371**
Abdullo Ahadov; Davron Dzhuraev. *Pressure-driven decoupling of interlayer hybridization*	**372**

and the superconducting scale in $La_3Ni_2O_7$	
Ашуров Р., Адилов М. *Колебательная спектроскопия температурной эволюции сольватных структур в концентрированных электролитных системах*	**373**
M.A. Zaxidova, S.E. Abdurashidova. *Sintez haroratining ZnO yupqa plyonkalari tuzilishi va morfologiyasiga ta’siri: XRD va SEM tahlili*	**376**
Абдуллаев Р.М., Содикова Ш.М., Камилов Ш.Х., Юнусов А.Х. *Проникновение атомов углерода между графеновой пленкой и поверхностью палладия*	**379**
Ibodova Maftunabonu Ilyoz qizi, Fayziyev Shaxobiddin Shavkatovich. *Ga_2Gd kristallining kristall tuzilishini rentgen-difraksion usulda tadqiq etish*	**382**
A. Absanov, M. Shoimov. *Meta-ksilol–xloroform tizimidagi ch··π molekulalararo ta’sirlarning nazariy va mep tahlili*	**385**
Saparbayev A.A., Ibragimova K.H. *Polimer quyosh elementlarining tashqi kvant samaradorligini tadqiq etish*	**388**
Jumabayev Abduvaxid, Norkulov Asliddin, Ernazarov Zoxid. *Investigation of benzophenone-acetone reaction through raman spectra of c=o vibration modes*	**391**
Муратбаева Т.К. , Касимов А.К. *Влияния угла наклона трассы на процесс филаментации ультракоротких лазерных тмпульсов*	**393**
Mirzakandova Sokhibjamol Kholmumin kizi, Ismatov Askar Anvar ugli. *Thermal oxidation of silicon substrates: ellipsometric characterization of SiO_2 layer thickness and optical properties*	**396**
N. Mirzaalimov, R. Aliyev, A. Mirzaalimov, Sh. Tadjibayeva, T. Abdulazizov, A. Alijonov. *V-geometrik shakldagi kumush ko‘zguli optik konsentrator qo‘llanilgan fotoelektrik modulning energetik samaradorligini eksperimental tadqiq etish*	**399**
I.J. Jaksimuratov, U.B. Xalilov. *$Ti_{22}Mo_{10}C_{32}$ qotishmasi uchun sqs asosidagi DFT parametrlarini tanlash va ularni neytron difraksiyasi ma’lumotlari bilan taqqoslash*	**402**
Ibragimova K.H., Saparbayev A.A. *Tashqi kvant samaradorligini spektral o‘lchash usulida organik quyosh elementlarini tadqiq etish*	**405**
A. Absanov, SH. Umidullayev, M. Shoimov. *Para-ksilol + xloroform tizimidagi kuchsiz molekulalararo o‘zaro ta’sirlarni raman spektroskopiyasi asosida tadqiq qilish*	**409**
Abdulazizov Toxirjon Botirjon o‘g‘li, R.Aliev, A.A.Mirzaalimov, N.A.Mirzaalimov, A.A.Alijonov, S.I.Temirov. *Kremniyli quyosh elementining bir o‘lchamli geometrik modelini matematik modellashtirish asosida fotoelektrik parametrlarini aniqlash va tahlil qilish*	**412**
Абдихалилова М.Е., Касимов А.К. *Влияние атмосферных аэрозолей и водяного пара на параметры филаментации ультракоротких лазерных импульсов*	**415**
Yuldashev Ozodbek Yuldash ugli, Karshieva Zarnigor Alisher qizi. *Skyrmionics—computing and memory technologies based on topological excitations in magnets*	**418**

i

ii