ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ ҲУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ

ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ

АЛЯБЬЕВ ДАНИЛА ВАЛЕРЬЕВИЧ

УГЛЕРОД НАНОТРУБКАЛАРИ ВА ФУЛЛЕРЕНЛАРНИНГ ПАСТ (КИЧИК) ЭНЕРГИЯЛИ ИОН МОДИФИКАЦИЯЛАРИНИ МОДЕЛЛАШТИРИШ

01.04.04 – Физик электроника

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

Тошкент - 2021

УДК 539.6 544.188 004.942

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

Алябьев Данила Валерьевич
Углерод нанотрубкалари ва фуллеренларнинг паст (кичик) энергияли ион модификацияларини моделлаштириш..... 3

Алябьев Данила Валерьевич
Моделирование низкоэнергетической ионной модификации углеродных нанотрубок и фуллеренов..... 21

Alyabev Danila Valerevich
Simulation of low-energy ionic modification of carbon nanotubes and fullerenes..... 39

Эълон қилинган ишлар рўйхати
Список опубликованных работ
List of published works..... 43

ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ ҲУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ

ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ

АЛЯБЬЕВ ДАНИЛА ВАЛЕРЬЕВИЧ

УГЛЕРОД НАНОТРУБКАЛАРИ ВА ФУЛЛЕРЕНЛАРНИНГ ПАСТ (КИЧИК) ЭНЕРГИЯЛИ ИОН МОДИФИКАЦИЯЛАРИНИ МОДЕЛЛАШТИРИШ

01.04.04 – Физик электроника

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

Тошкент – 2021

УДК 539.6 544.188 004.942

Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида B2017.3.PhD/FM114 рақам билан рўйхатга олинган.

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

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

Илмий раҳбар:	**Джурахалов Абдиравуф Асланович** физика-математика фанлари доктори, профессор
Расмий оппонентлар:	**Кутлиев Учқун Отобоевич** физика-математика фанлари доктори **Усманов Дилшодбек Турсунбоевич** физика-математика фанлари доктори
Етакчи ташкилот:	Фарғона политехника институти

Диссертация ҳимояси Ион-плазма ва лазер технологиялари институти ҳузуридаги DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 рақамли Илмий кенгашнинг 2021 йил «30» 04 соат 16^{00} даги мажлисида бўлиб ўтади (Манзил: 100125, Тошкент ш., Дўрмон йўли кўчаси, 33-уй. Тел./факс: (99871) 262-32-54, e-mail: info@iplt.uz, Ион-плазма ва лазер технологиялари институти мажлислар зали).

Диссертация билан Ион-плазма ва лазер технологиялари институтининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (2 рақами билан рўйхатга олинган). Манзил: 100125, Тошкент ш., Дўрмон йўли кўчаси, 33-уй. Тел./факс: (99871) 262-31-69.

Диссертация автореферати 2021 йил «19» 04 куни тарқатилди.

(2021 йил «19» 04 даги 2 рақамли реестр баённомаси).

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

И.Д. Ядгаров
Илмий даражалар берувчи
илмий кенгаш илмий котиби,
ф.-м.ф.д. катта илмий ходим

Б.Е. Умирзаков
Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш
қошидаги илмий семинар раиси
ф.-м.ф.д., профессор

КИРИШ (фалсафа доктори (PhD) диссертациясининг аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Ҳозирги кунда янги углеродли материаллар - углерод нанотрубкалари ва фуллеренларга катта эътибор қаратилмоқда. Бу қизиқиш ушбу объектларнинг «алоҳида» таркибдаги ёки композит материаллар, кўп қатламли структуралар ва бошқалар таркибидаги махсус физика-кимёвий хусусиятлари билан боғлиқ. Мутахассислар биринчи навбатда углеродли нанотрубкалар, ҳамда таркибида углерод бўлган композитларнинг (саноатда ишлаб чиқаришга яқин бўлган) механик хусусиятларига алоҳида эътибор қаратишади. Бундай композит материаллар етарлича катта мустаҳкамликка ва трибологик хусиятларга эга бўлиб, улардан нанотранзисторлар деб аталувчи ва бошқа замонавий ва келажак наноэлектроника элементларини олишда фойдаланиш мумкин. Шунга алоҳида эътибор қаратиш керакки, бундай композит материалларнинг оптик хусусиятлари ҳам назарий, ҳам амалий жиҳатдан катта қизиқиш уйғотади. Мисол сифатида шуни келтириб ўтиш жоизки, углеродли нанотрубкалар асосидаги композит материалларнинг ёруғликни ютиш коэффициенти бирга тенг эканлиги ёки маълум геометрияли углерод нанотрубкалри тўғри зонали ярим ўтказгичлар бўлиб, улардан оптоэлектроникада кенг фойдаланиш мумкин.

Фуллеренлар - углероднинг шаклларидан бири бўлган мономолекуляр бирикма бўлиб, углерод атомларидан ташкил топган қаварик берк кўпёқлардир. Мутахассислар фуллеренлардан микро, наноэлектроника (углерод трубкалари билан бир қаторда) ва медицина соҳаларида кенг фойдаланишга умид қилишмоқда. Фуллеренларнинг электроникада қўлланилиши уларнинг яримўтказгич хусусиятлари билан боғлиқ бўлса, медицина соҳасида улардан дори-дармонларни етказувчи контейнерлар сифатида ёки уларни ажратиш учун ЯМР ларда) фойдаланиш мумкин. Сўнгги фойдаланиш имконияти уларнинг биологик инертлиги билан характерланади. Фуллерен ва нанотрубкалар асосидаги эндоэдрал структураларни алоҳида эслатиш жоиз. Етарлича илгари кубитлар – квант компютерлар учун элементар ҳисоблаш ячейкаларини яратиш учун эндоэдрал фуллеренлардан фойдаланиш ғояси таклиф қилинган эди. Ушбу масала доирасида эндоэдраль фуллеренлар хусусиятларини назарий ҳисоб-китоб қилиш билан бир қаторда инкапсуляцияланган атомлар хусусиятларини бошқариш бўйича экспериментлар ўтказиб келинмоқда.

Ҳисоблаш имкониятлари тезлигининг ошиши билан бир қаторда физик жараёнлар соҳасида математик моделлаштиришнинг роли ортиб бормоқда. Сўнгги икки ўн йилликда бу соҳада салмоқли ривожланиш кузатилмоқдаки, бу микроскопик (атом,молекулаларнинг ўзаро таъсири молекуляр системалар хусусиятлари, шу жумладан кўп атомли-оқсиллар ва бошқалар) ва макроскопик (бино, иншоот, аэродинамик, гидродинамик системалар, шу жумладан ночизиқли хусусиятлар) системаларни муваффақиятли ҳисоблаш имконини бермоқда.

Ушбу диссертация иши Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 07 февралдаги "Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича ҳаракатлар Стратегияси тўғрисида"ги ПФ-4947-сонли Фармонида белгиланган вазифаларга мос келади[1]. Диссертация бўйича олиб борилган тадқиқотлар 2015-йил 15-декабрда қабул қилинган "2011-2015 йилларда Ўзбекистон Республикаси саноатини ривожлантиришнинг устувор йўналишлари тўғрисида" ги ПП-1442 сонли Президент Фармонини, 2017 йил 17-февралдаги "2017-2021-йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожлантиришнинг бешта устувор йўналишидаги ҳаракат стратегиясини амалга ошириш бўйича кейинги чора-тадбирлар тўғрисида" ги ва 2017-йил 17-февралдаги "Фанлар академияси фаолиятини янада такомиллаштириш, илмий-тадқиқот ишларини ташкил этиш, бошқариш ва молиялаштириш тўғрисида"ги П-2789-сонли қарорини, шунингдек, ушбу соҳада қабул қилинган бошқа ҳуқуқий ҳужжатларга киритилган вазифаларни бажаришда маълум даражада хизмат қилади.

Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги. Ушбу тадқиқотлар Ўзбектстон Республикаси фан ва технологияларни ривожлантиришнинг устувор йўналишларига мос ҳолда амалга оширилган: II. «Физика, астрономия, энергетика ва машинасозлик. III. «Тикланувчан энергия манбаларини ривожлантириш ва улардан фойдаланиш».

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Ушбу мавзу бўйича олинган ҳам назарий ҳам экспериментал ва амалий характерга эга бўлган илмий натижалар яқин ва узоқ хориждаги кўплаб илмий гурухлар томонидан ўрганилган. Юқори сифатли углерод материаллари ушбу турдаги маҳсулотларга ихтисослашган йирик ва нисбатан кичик компаниялар томонидан синтез қилинади (NanoTechCenter МЧЖ, Россия Федерацияси, Ocsial-бутун дунё бўйлаб офислари билан, Nanografi, АҚШ ва бошқалар). Кўпгина илмий гуруҳлар электрон элементларни ишлаб чиқиш билан шуғулланади (масалан, суперконденсаторлар учун материаллар, Панкратов Д.В, «Курчатов институти», РФ, D. R. Hines, V. W. Ballarotto, АҚШ, Chuang Peng, Shengwen Zhang, Daniel Jewell, Буюк британия), наноэлектроника (Stefan Frank, АҚШ,), функционалашган тузилмаларни ўрганиш, (Maria del Carmen Gimenez-Lopez, Испания, A. Chuvilin, Испания), эндоэдрал фуллеренлар (Nibras Mossa Umran, Ҳиндистон, H. Minezaki, Япония). Математик моделлаштириш учун дастурий таъминот тўпламлари ҳам очиқ манбали (LAMMPS, GROMACS, ORCA ва бошқалар), ҳам ишлаб чиқилган ва қўллаб-қувватланган. Бизнинг мамлакатимизда углерод тузилмалари соҳасидаги тадқиқотларни таниқли олимлар, А.С. Балтенков, А.А. Джурахалов, У.О. Кутлиев ва А.М. Коххаровлар олиб боради.

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

Тадқиқотнинг диссертация бажарилган илмий-тадқиқот муассасасининг илмий-тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги. Диссертация иши Ион-плазма ва лазер технологиялари институтида илмий-тадқиқот режалари доирасидаги қуйидаги лойиҳа мавзуларини бажариш мобайнида бажарилди: № ОТ-Ф2-46 «Углеродли нанотрубкалар ва фуллеренлар билан атом зарралари, электронлар ва фотонларнинг ўзаро таъсири жараёнини назарий тадқиқ этиш» (2016-2020 йй.), ва № Ф2-ФА-Ф164 «Фотон ва зарядланган заррачаларнинг кристаллар сиртида углерод наноструктуралари билан ўзаро таъсирини назарий йўл билан тадқиқ қилиш» (2012-2016).

Тадқиқот мақсади эркин ҳолатда ва тагликларда жойлашган углеродли наноструктуралар - углерод нанотрубкалари ва фуллеренлардан водород ва углерод атомлари сочилиш, сочилган атомлар адсорбцияси ва инкапсуляцияси жараёнларини классик молекуляр динамика методлари ёрдамида тадқиқ қилишдан, ҳамда олинган натижаларни замонавий экспериментал катталиклар асосида таҳлил қилишдан иборат.

Тадқиқот вазифалари:

углерод нанотрубкалари - яккаланган нанотрубка ва нанотрубкалар дастасида углерод ва водород атомлари сочилишида устувор жараёнларни аниқлаш (сочилиш, адсорбция, инкапсуляция);

фуллеренларда - яккаланган фуллерен, эркин ҳаракаланаётган фуллерен ва графит тагликлардаги фуллеренларда углерод, водород ва углерод димерларининг сочилиши (сочилиш, адсорбция, инкапсуляция) да устувор жараёнларни аниқлаш;

углерод нанотрубкалари ва фуллеренларда сочиладиган атомлар (димерлар) адсорбцияси ва инкапсуляциясининг сифатий ва миқдорий шарт-шароитларини (энергетик ва бурчак параметрларини) аниқлаш;

углерод нанотрубкалари ён қирраларида водород атомларининг сочилишидаги устувор жараёнларни ва характерли траекторияларни аниқлаш, каналлашиш шароитларини сифатий жиҳатдан қараб чиқиш.

Тадқиқот объектлари фуллеренларнинг геометрик моделлари, углерод нанотрубкалари, углерод нанотрубкалари дасталари, эркин тушаётган фуллеренлар ва графит тагликдаги фуллеренлар ҳиобланади.

Тадқиқот предмети сочилиш, адсорбция, киритиш**,** инкапсуляции, сочилган атомларнинг каналлашиши жараёнлари, шунингдек углерод нанотрубкалари ва графит тагликларда жойлашган ва эркин фуллеренларда сочилаётган атомларнинг бурчак тақсимотлари, сочилган атомларнинг инкапсуляция шароитлари ҳисобланади.

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

Тадқиқотларнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

илк бор атомлар инкапсуляциясини берувчи сочилган нейтрал заррачалар энергия (10-25эВ) диапозони аниқланган;

сочилган атомлар зичликларини назорат қилиш зарурлиги кўрсатиб берилган, шунингдек оқим зичлигининг катта қийматларида структуранинг локал қизиши аниқланган ва қисман структура бузилишлари кузатилган;

илк бор сочилган атомлар инкапсуляциясига таъсир қилувчи асосий параметрлардан бири структура билан сочилган атомлар орсасидаги боғланиш энергиялари эканлиги аниқланган;

илк бор юқорида кўрсатилган энергия диапозонида атомларнинг сочилиш жараёнларининг ноэластик характери аниқланган;

илк бор углерод нанотрубкаларида (ён томондан сочилишда) сочилган атомларнинг инкапсуляциясини назорат қилиш имкониятлари аниқланган.

Тадқиқотнинг амалий натижалари қуйидагилардан иборат:

углерод нанотрубкаларининг (ихтиёрий диаметр ва узунликдаги), нанотрубкалар дасталарининг, графит тагликдаги фуллерен молекулаларининг ва фазовий тарқалган фуллерен молекулаларининг геометрик моделлари ишлаб чиқилган;

углерод трубкаларининг ён қирраларида водород атомлари сочилиши бўйича модель эксперимантал тадқиқотлар, углерод нанотрубкалари деворларида водород атомларининг сочилиши ва трубкалар ичида уларнинг каналлашиши, адсорбция жараёнлари таҳлили ўтказилди, сочилган водород атомларининг каналлашиши шароитлари аниқланган;

углерод нанотрубкаларида атомларнинг ён қирралардаги сочилиши бўйича ўтказилган модель экспериментлар асосида сочилган атомлар инкапсуляциясини назорат қилиш имкониятлари кўрсатиб берилган;

қуйида эслатиб ўтилган, олинган натижалар асосида структураларда инкапсуляцияланган атомларни олиш учун сочилган атомларнинг (уларнинг бу структураларда сочилиш жараёнларида) оптимал энергия (10-25 эВ) диапазонлари аниқланган;

эркин ва графит тагликда жойлашган фуллерен молекулалари гуруҳларида водород, углерод атомлари ва углерод димерларининг сочилиши бўйича модель экспериментлар ўтказилди, атомлар сочилиши, адсорбция ва инкапсуляция жараёнлари тадқиқ қилинди. Сочилган атомларнинг танланган энергия диапазонида ҳал қилувчи жараён бу атомларнинг адсорбциялари эканлиги аниқланган;

фуллерен молекулаларидаги димер углеродларнинг сочилиши жараёнларини тадқиқ қилиш, димерларнинг ориентациялари сочилган димер атомларининг инкапсуляцияси жараёнларига таъсири кўрсатилган.

Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги масаланинг тўғри қўйилганлиги, узоқ вақтда ўзининг тўғрилигини кўрсатган кенг фойдаланиладиган математик методларнинг қўлланилганлиги, ҳисоблашлардаги асосий параметрларнинг (боғланиш энергияси) аниқлиги ва

назорат қилиниш имкониятларининг мавжудлиги, жараёнларнинг экспериментал натижалар билан мос тушиши билан асосланади.

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

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

Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши. Углеродли наноструктуралардан атом зарраларининг сочилиши бўйича ўтказилган ҳисоблаш экспериментлари натижалари асосида:

инкапсулятцияланган атомларни олишда сочилаётган нейтрал заррачаларнинг энергия (10-25 эВ) диапазонини аниқлаш, шунингдек сочилган атомларнинг фуллеренлар билан ўзаро таъсирининг ноэластик хусусиятини ҳисобга олиш № Ф2-ФА-Ф146 рақамли «Фуллеренлар эритмаларида кластерланиш, ўз-ўзидан йиғилиш ва ўз-ўзидан ташкилланиш жараёнлари» мавзусидаги фундаментал лойиҳада фойдаланилган. (Ўзбекистон Республикаси Фанлар Академиясининг 2020-йил 02-сентябрдаги № 2/1255-1798 сонли маълумотномаси); Илмий натижалардан фойдаланиш бир ва икки компонентли эритмалардаги фуллерен C_{60} молекуласида углерод атомларининг жойлашишини баҳолаш имконини берган;

сочилган атомларнинг боғланиш энергиясининг структурадаги инкапсулятцияга таъсирини баҳолаш № ОТ-Ф2-53 рақамли «A^3B^5 ва A^2B^6 пленкаларнинг юзаси ва юза ости соҳаларида ҳосил қилинган икки қатламли наноўлчамли тизимларнинг квант ўлчамли эффектлари ва электрон хоссалари» мавзусидаги фундаментал лойиҳада фойдаланилган. (Ўзбекистон Республикаси Олий ва ўрта махсус таълим вазирлигининг 2020 йил 28-августдаги 89-03-2986 - сон маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш AsGa ва CdS пленкалари юзасидаги ҳосил қилинган наноўлчамли тизимлар структурасини ўрганиш ҳамда пленкалар сиртида структураларнинг мукаммаллигига боғланиш энергиясининг таъсирини аниқлаш имконини берган.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Диссертация иши натижалари 7 та яқин ва узоқ чет элларда ўтказилган ҳалқаро анжуманларда баён қилинди.

Тадқиқот натижаларининг эълон қилиниши. Диссертация мавзуси бўйича олинган натижалар 10 та илмий ишда чоп этилган, шу жумладан

ЭҲМ учун дастурни рўйчатдан ўтказиш бўйича авторлик гувоҳномаси олинган.

Диссертация ҳажми ва тузилиши. Диссертация кириш, тўртта боб, хулоса ва фойдаланилган адабиётлар рўйхатини ўз ичига олган. Диссертация ҳажми 104 бетни ташкил этади.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Кириш қисмида диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати асосланган, тадқиқотнинг мақсад ва вазифалари шакллантирилган, объекти ва предмети аниқланган, тадқиқотнинг Ўзбекистон Республикасида фан технологияларни ривожлантиришнинг устувор йўналишларига мослиги кўрсатилган, тадқиқотнинг илмий янгилиги ва амалий натижалари баён қилинган, уларнинг ишончлилиги асосланган, олинган натижаларнинг назарий ва амалий аҳамияти очиб берилган, ишланмаларни амалиётга жорий қилиш, ишнинг апробацияси натижалари, эълон қилинган ишлар ва диссертациянинг тузилиши тўғрисида маълумотлар келтирилган.

Диссертациянинг «**Диссертация мавзуси бўйича адабиётлардаги манбалар таҳлили» деб номланувчи биринчи бобида** наноструктураларнинг умумий классификацияси, углеродли наноструктуралар - углеродли нанотрубкалар, фуллеренлар, эндоэдрал фуллеренлар соҳасининг замонавий ҳолати тўғрисидаги долзарб таҳлил: синтез қилиш усуллари, ҳозирги вақтда кенг фойдаланилаётган углеродли наноструктураларни ажратиш, турли соҳаларда (материалшунослик, оптика, наноэлектроника, медицина, спинтроника, квант ҳисоблаш қурилмалари ва бошқалар) углеродли нанотрубкаларнинг амалий қўлланилиши, эндоэдраль фуллеренларни олиш мисолида ушбу наноструктураларнинг юқорида эслатиб ўтилган баъзи функционаллаш методлари (масалан, «молекуляр хирургия») келтирилган. Водородли ёнилғи элементларида истиқболли катализатор сифатида $N@C_{60}$ эндоэдрал фуллеренлари устида иш юритилади.

«Физик жараёнларни компьютер моделлаштириш методлари» деб номланган иккинчи бобда физик жараёнларни моделлаштиришда асосан Шредингер тенгламасидан (молекуляр система, атомларнинг квант хусусиятларин тадқиқ қилиш учун) ёки Ньютон тенгламаларидан (сочилишнинг «классик» жараёнларини тадқиқ қилишда, киритиш ва бошқаларда) фойдаланишни аниқлаштирувчи мос тенгламалар, яқинлашишлар ва яқинлашишлардан фойдаланишдаги асосий ёндошувларнинг қисқача таҳлили келтирилган. Квант ҳисоблашларга муқобил бўлган DFT методи (Кон-Шэм теоремасига асосланган, функционал зичлиги назарияси) деб аталувчи ёндошувнинг қисқача баёни келтирилган. Методнинг моҳияти Шредингер тўлқин функциясини электронлар тақсимот функцияси билан алмаштиришдир. Бу ерда алмашувчи электрон-электрон тўқнашишларни ифодаловчи «корреляция функция» си киритилган. Ньютон тенгламалари асосида атом-молекуляр системаларни ҳисоблашнинг

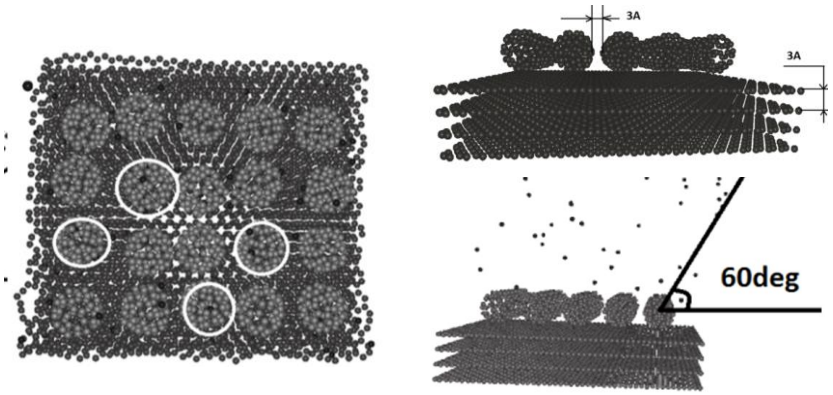
«классик» алгоритмлари қисқача баёни келтирилган. Модель системаларни яратиш ва бошланғич, ҳамда чегаравий шартларни берилиш кетма-кетликлари (ўзаро таъсирнинг модель потенциалини танлаш, атомлар структурларининг бошланғич координаталарини берилиши, структура «термолизация» си – атомларнинг бошланғич тезликлари, даврий чегаравий шартларнинг берилиши ва ҳаракат тенгламаларини интеграллашнинг асосий методлари) қисқача баён қилинган.

Учинчи бобда углеводородли системалардаги модель ҳисоблашларда аксарият ҳолларда ишлатиладиган ва углерод-водород ва углерод-углерод ўзаро таъсирларни ифодалаб берувчи REBO потенциалининг қисқача баёни келтирилган бўлиб, унда бундай системалар учун қатор модель ҳисоблашлар бир неча ишларда келтирилган. Ушбу ишда қўлланилган алгоритм ва ёндошувлар қисқача баён қилинган. C_{60} фуллерен молекулаларида водород, углерод ва углерод димери атомларининг сочилиш жараёнларининг модель ҳисоблари натижалари келтирилган. Ушбу бобда икки модель система: графит тагликда жойлашган фуллерен молекулалари гуруҳи ва боғланмаган, таъсирлашмайдиган фуллерен молекулалари (фазовий ажратилган) кўрилган.

Биринчи модель система учун, сочилган атомлар энергия диапазонига мос келувчи ва устувор жараёнларни (сочилиш, инкапсуляция, киритиш) аниқлаш мақсадида водород атомларининг сочилиши бўйича модель экспериментлар ўтказилди.

Иккинчи модель система бўйича ўтказилган модель экспериментларнинг асосий вазифаси фуллерен молекулалари орқали атомларнинг адсорбция, инкапсуляция ва сочилиш (тўғри ва иккиламчи), ҳамда фуллеренлардаги димерс (углерод) ларнинг сочилиши жараёнларини қараб чиқиш эди. Асосий мақсад сочилган атомлар инкапсуляцияси жарёнларини бошқа жараёнлар адсорбция ва киритиш таъсирларини камайтирган ҳолда аниқлаш ҳисобланди.

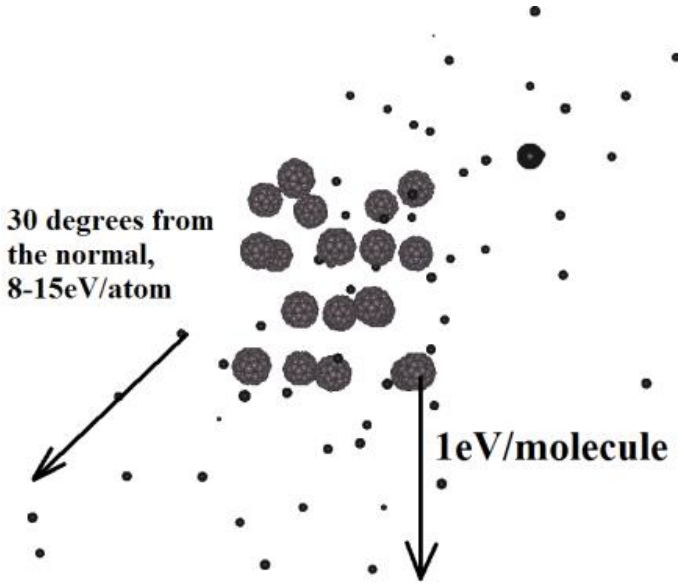
Ораларидаги масофа 3Å бўлган қатламлардан иборат уч графен қатламли графит тагликни қараб чиқамиз (1-расм) (бу реал графитдаги қатламлар орасидаги масофага мос келади), унда 20 та фуллерен молекуласи жойлаштирилган. Модель экспериментнинг мазмун-моҳияти шундан иборатки, бундай структурада водород атомлари турли бурчакларда тор дасталар бўйича сочилади.



1-расм. Сиртида фуллеренлар мавжуд бўлган графит таглик. Фуллеренларда водород атомлари турли бурчакларда сочилади. Сочилган атомлар инкапсуляцияга учрайдиган даста характеристикалари аниқланган

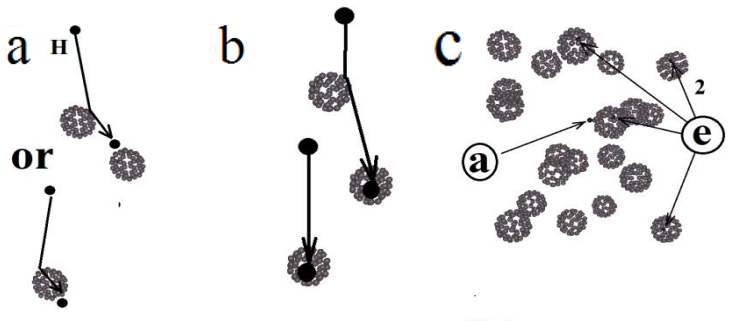
Қатор ишларда сочилган атомларнинг дастлабки энергиялари қийматлари 100 эВ дан ошмайдиган қилиб танлаб олинган. Атомларнинг энергиялари 100эВ/атом бўлганда намунанинг тешилиб колиши кузатилади ва қисман нуқсонлар юзага келади, шу сабабли энегияларни камайтиришга тўғри келади (10-20эВ/атом диапазонда ётувчи энергияларгача). Бу диапазонда инкапсуляциялан атомларни олиш мумкин, бундай атомлар миқдори - 5-7% ни ташкил қилади. Шунингдек, структура сиртида адсорбцияланган ва графит тагликларга киритилган атомларни кузатиш мумкин. Киритиш чуқурлиги сочилган заррачалар энергияларининг ортиши билан ортар экан. Атомларнинг нормалдан фарқ қилувчи бурчаклар остида сочилиши нормал сочилиш натижаларидан сифат жиҳатдан унчалик фарқ қилмайди. Умумий ҳолда ҳал қилувчи ролни сочилган заррачалар энергияси ўйнайди, ориентацион параметрлар эса уларга кучсиз таъсир кўрсатади (нормалдан 0-60 град. оралиғида бўлган силжимайдиган бурчакларда). Бундай ёндошув айнан фуллеренлар модификациялари учун (эндоэдрал фуллеренлар олишда) унчалик мақсадга мувофиқ эмас, чунки атомларнинг асосий қисми тагликда тутиб қолинади, яъни сиртда ёки ичида ва бу сиртнинг «ифлосланиши» га олиб келади.

Шу сабабли, фақатгина эркин, ўзаро таъсирлашмайдиган фуллеренлардагина сочилиш жараёнлари моделлаштирилди (2-расм). 1эВ/молекула энергияли ингичкалаштирилган фуллерен молекулаларида водород атомлари нормалдан 30 градус бурчак остида сочилади. Сочилган атомлар энергияларининг қиймати 8-15 эВ/атом диапазонида.



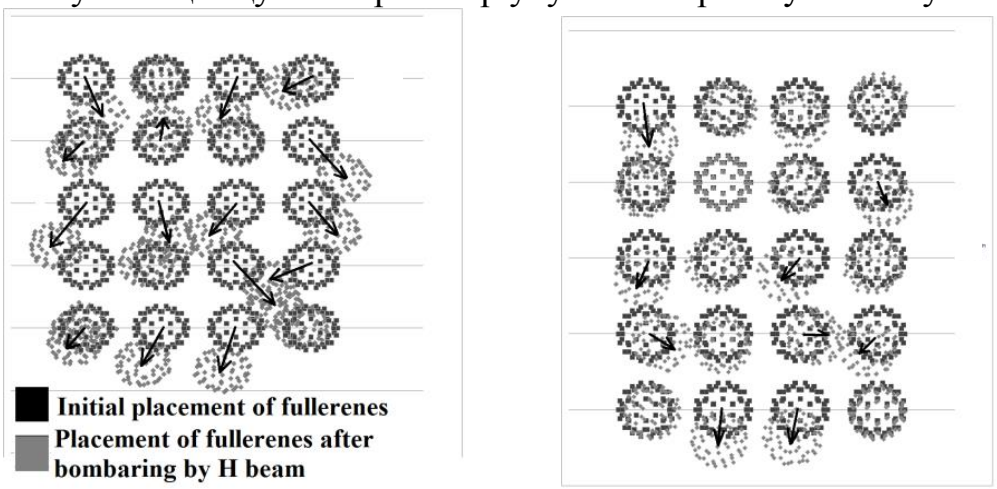
2-расм. 1эВ/молекула энергия билан ҳаракатланаётган, ўзаро таъсирлашмайдиган фуллеренлар. Уларда водород атомлари дастаси турли бурчакларда сочилади.

Бу ерда атомлар инкапсуляцияси ва адсорбцияси жараёнлари ажратилди ва қаралди (2а-расм). Атомлар адсорбцияси ва инкапсуляцияси жараёнларининг қуйидаги икки механизм бўйича содир бўлиши аниқланди: бирламчи тўқнашишлар, уларнинг фуллерен молекулаларида сочилиши ва кейинги бошқа фуллерен молекулаларидаги адсорбция, инкапсуляция жараёнлари туфайли. 8 эВ энергия атрофида устувор жараён адсорбция (ноэластик ўзаро таъсир) ҳисобланса, 15 эВ энергия атрофида устувор жараён инкапсуляция ҳолати экан. Умумий ҳолда, атомларнинг эркин фуллеренларда сочилиши тагликни фуллеренлар билан бомбардимон қилиш жараёнларидан (юқорида баён қилинган модель эксперимент) кўра кўпроқ инкапсуляцияланадиган атомларни олиш (сочилган атомлар бирлигида) имконини берар экан. Адсорбцияланган атомлар сони минимал бўладиган энергия қийматларини танлаб олиш мумкин. Лекин бу ҳолда, атомлар энергиясининг ортиши фуллеренларнинг бузилишига олиб келади.



2а-расм. Адсорбция ва инкапсуляция механизмлари: a) сочилган атомлар адсорбцияси, b) сочилган атомлар инкапсуляцияси, c) мисол учун адсорбцияланган ва инкапсуляцияланган атомларга мисоллар.

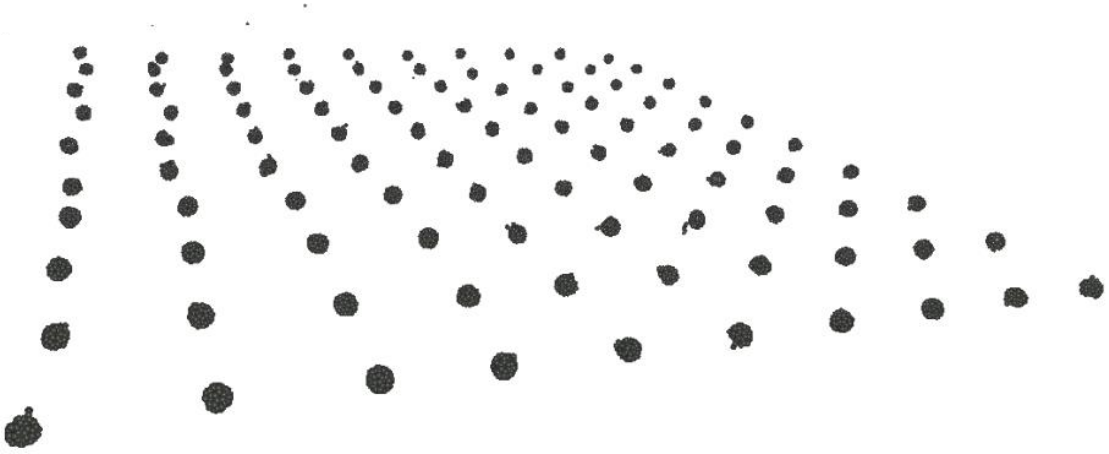
Шунингдек фуллеренлар оқимида сочилган дастанинг кинетик таъсирлари ҳам баҳоланди (бунда фуллеренларнинг горизонтал текисликдаги дастлабки тақсимотидан силжишлар кузатилди). Фуллеренларнинг силжиши сочилган атомларнинг тўла учиб ўтиш вақтларида кузатилади. Атомлар энергиясининг қуйи чегаралари учун (8эВ) атомларнинг фуллеренлар билан ўзаро таъсири яққол кузатиладиган ноэластик характерга эга бўлди, фуллеренларнинг горизонтал текисликлардаги оғиши фуллерен ўлчамларига тенг қийматларга эришади (10Å дан кўпроқ). Атомлар энергиясининг юқори чегаралари учун (15эВ), фуллеренлар оқими силжиши унча яққол сезилмайди. Шундай қилиб, тагликка фуллеренларнинг тўла қопланиш жараёнларини назорат қилиш учун, бир вақтнинг ўзида содир бўладиган сочилишлар билан бир қаторда уларнинг горизонтал силжишини ҳисобга олиш керак. Бу айниқса қуйи энергиялар учун сезиларли бўлиши мумкин.



3-расм. Фуллеренлар дастасида водород атомларининг сочилиши: чапда - 8,3эВ/атом, ўнгда -15эВ/атом энергияли водород атомларининг сочилиши жараёнида (x,y) текислигида фуллеренларнинг силжиш проекцияси. Тўқ кулранг «доғ» - (x,y) текислигида фуллерен атомлари бошланғич координаталари проекцияси, оч-кулранг «доғ» лар - (x,y) текислигида фуллерен атомларининг улар сиртида водород атомлари сочилгандан кейинги координаталари проекцияси.

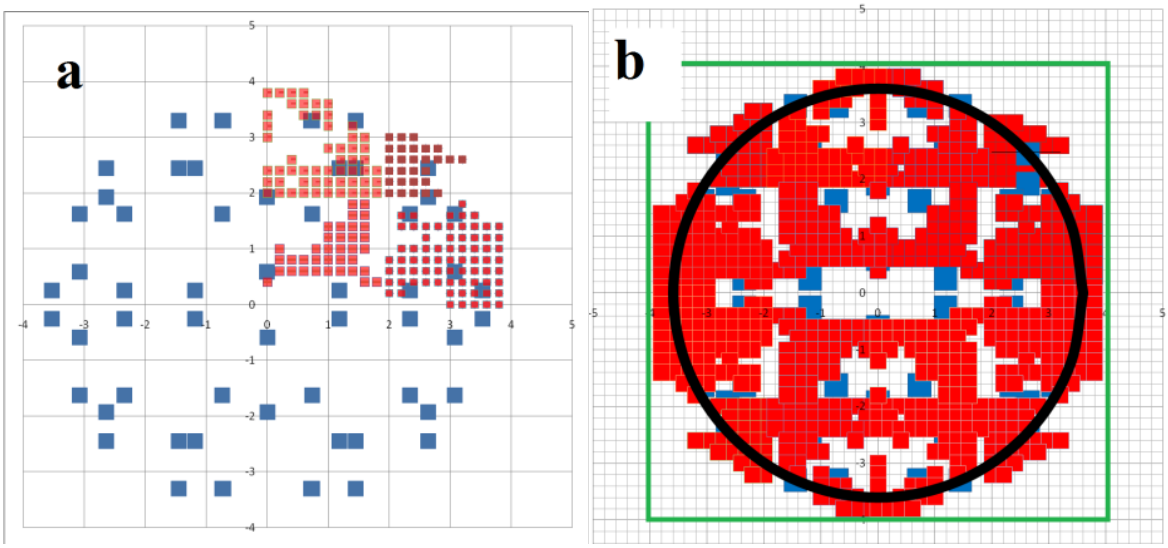
Эркин фуллеренлардаги атомлар ва углерод димерларининг сочилиш жараёнлари қараб чиқилди. Маълумки углерод - водород боғланиши энергиялари (2 эВ атрофида) дан углерод - углерод боғланиши энергиялари (7 эВ атрофида) бир неча бор юқори. Қуйида баён қилинган модель экспериментлар шуни кўрсатадики, бундай фарқ туфайли атомлар сочилишида асосан адсорбция кузатилади.

Шундай қилиб, углерод атомлари сочилган турли нуқталардан иборат 100 та фуллерен молекуласи системаси қараб чиқилди. Устувор жараёнлар адсорбция ва киритиш жараёнлари ҳисобланади (фуллерен молекулаларининг ялпи бузилишлари кузатилмайдиган танланган энергия диапазонида).



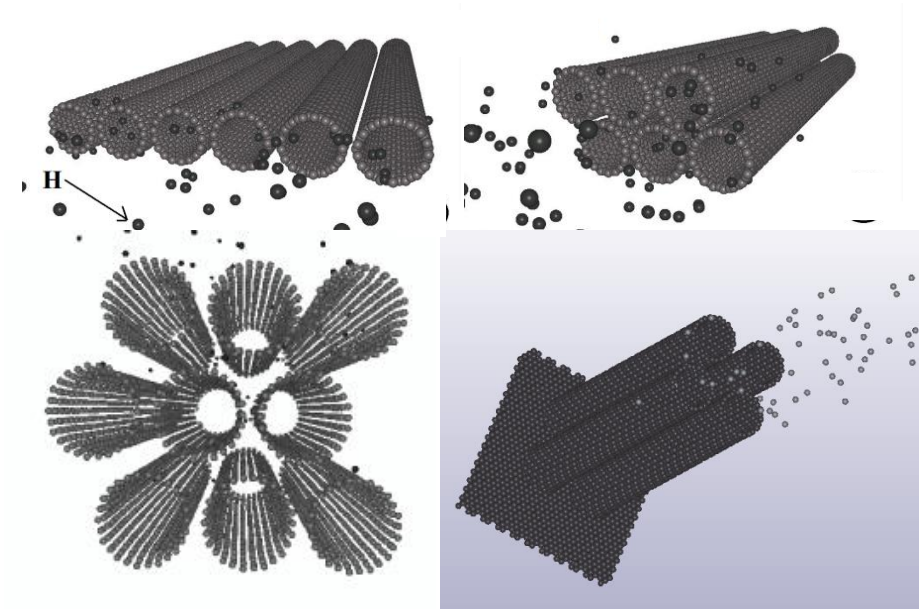
4-расм. Углерод атомлари сиртида сочилган 100 та фуллерен молекуласи.

Фуллерен молекулаларининг симметриясини ҳисобга олиб YZ – текислик танланди, нишон нуқталари шундай танландики, уларда 400 тагача углерод атомлари сочилади. Фуллерен молекулаларининг симметриясини ҳисобга олиб, углерод атомлари адсорбцияси содир бўладиган сирт профили олинди (сочилган атомларнинг 25 эВ/атом энергиялари учун, 5-расм).



5-расм. a - фуллерен атомларининг YZ-текислигидаги проекцияси (катта квадратчалар), углерод атомлари сочилаётган жараёндаги нишон нуқталари (кичик квадратчалар), b – фуллеренларда углерод атомлари сочиладиган соҳа, тушган чоғида углерод атомлари адсорбцияланадиган соҳа қизил рангда кўрсатилган, қора чизиқ - фуллеренларнинг геометрик чегаралари, яшил чизиқ-атомлар сочиладиган юзачалар чегараси (0,2 ангстрем қадамли тўр).

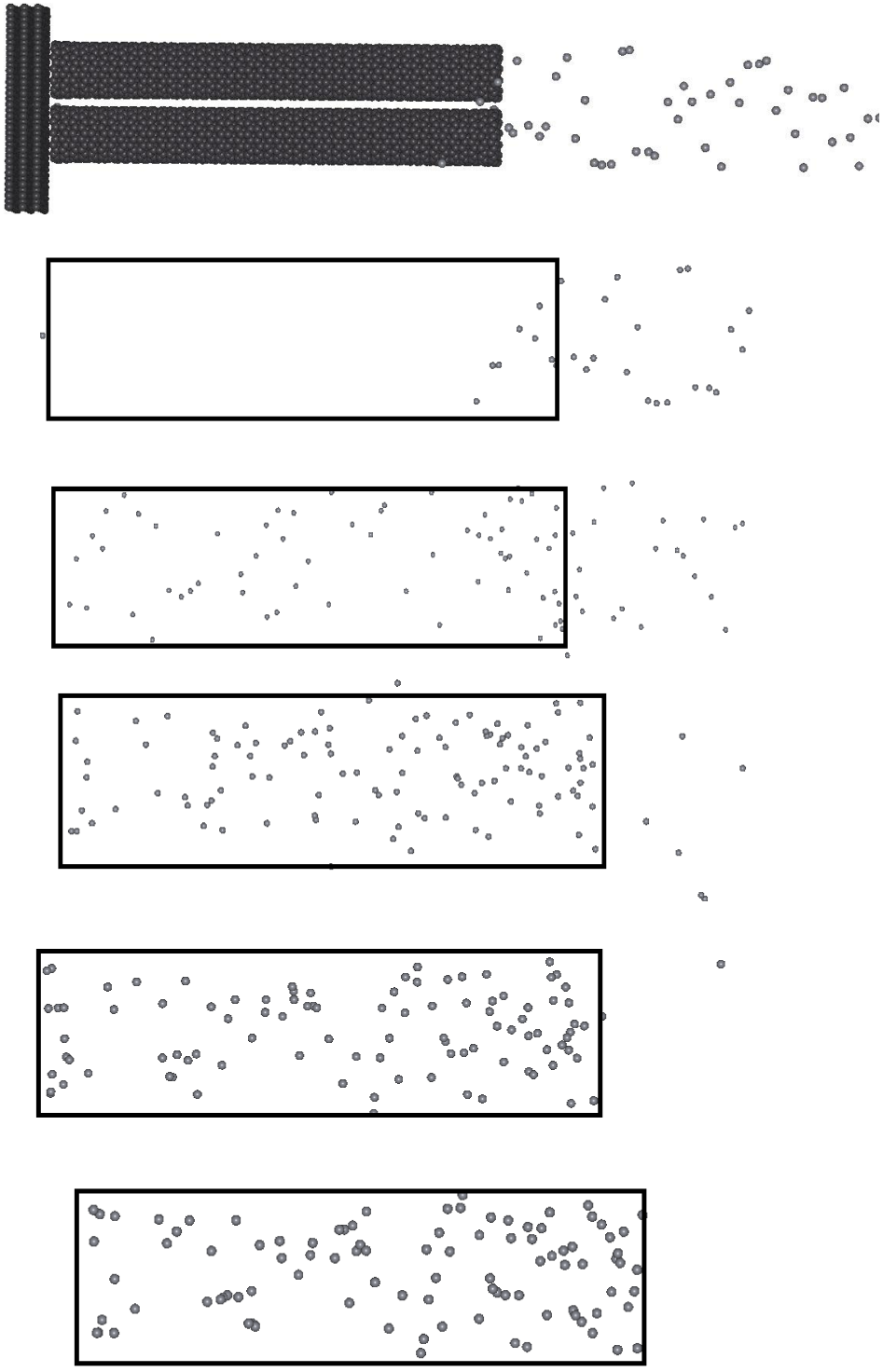
Тўртинчи бобда эркин ва графит тагликдаги углерод ннотрубкалари дасталарида водород атомларининг сочилиши жараёнларини моделлаштириш натижалари келтирилган (6-расм). Ён қирралардаги ва углерод нанотрубкалари сиртларидаги сочилиш жараёнлари қараб чиқилган.



6-расм. Водород атомлари дастаси сочиладиган углерод нанотрубкаларининг баъзи геометрик моделлари.

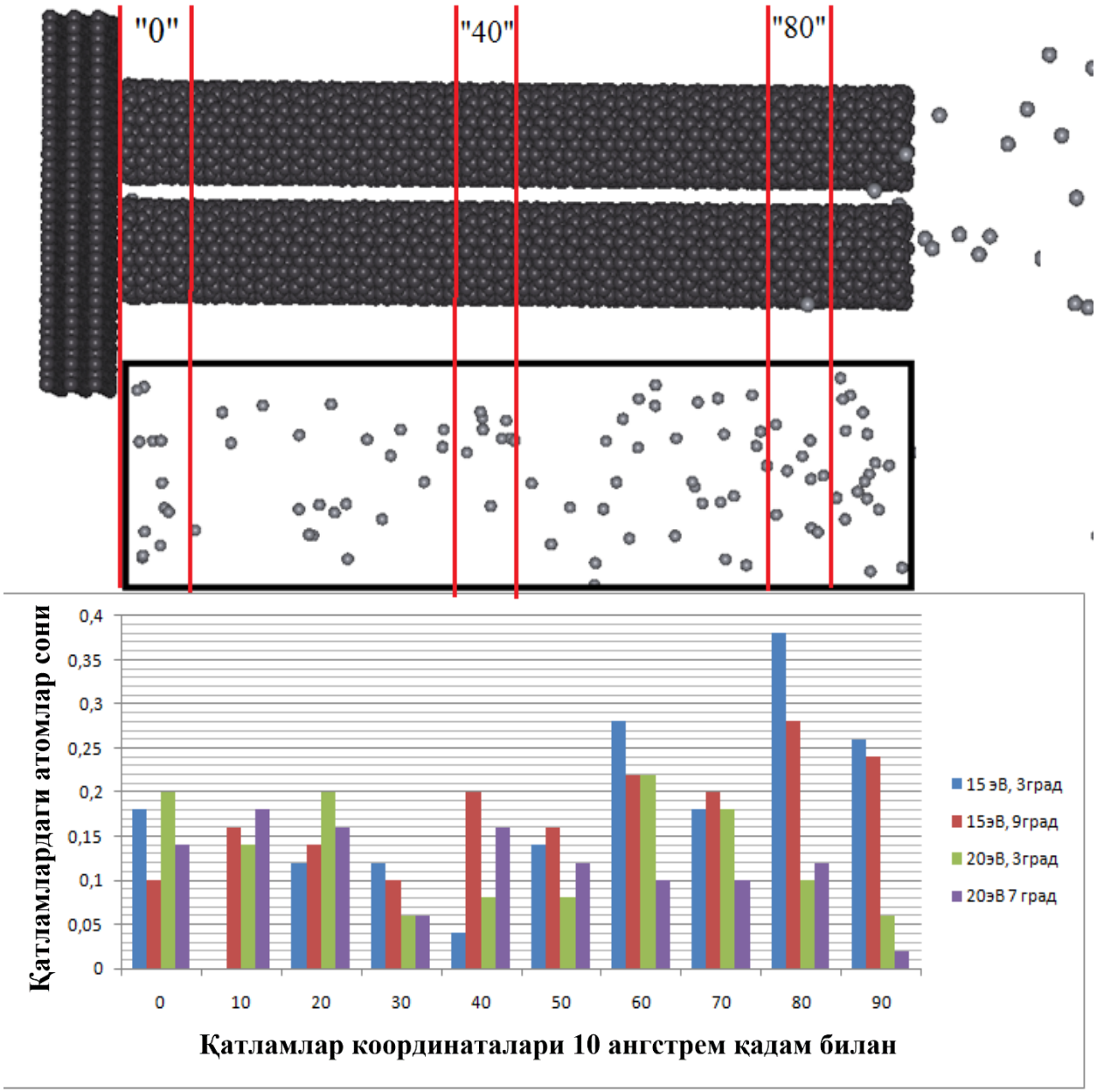
Ён қирралардаги сочилиш жараёнларини таҳлили натижасида нанотрубкалар ён қирраларидаги водород атомларининг нормал сочилиши жараёнлари қараб чиқилди ва бу жараёнда атомларнинг бир қисми нанотрубкалар билан таъсирлашмасдан улардан учиб чиқиб кетиши кўрсатиб берилди (балки, атомлар ва нанотрубка орасидаги масофа модель потенциал кесими билан чегараланган боғланишнинг эффектив узунлигидан катта). Ушбу жараёнда атомларнинг бир қисми структура чегарасида нанотрубканинг ён томонида, бошқа бир қисми эса трубка ичида бир ёки бир неча марта тўқнашишларга учраб унинг ички деворларида сочилади, қолган қисми трубка ичи бўйлаб ҳеч қандай тўқнашувларсиз учиб чиқиб кетади. Фақатгина ҳеч қандай тўқнашувларсиз нанотрубканинг ўртасидан тўғри чиқиб кетадиган атомларни (улар умумий атомлар сонининг 40-50% ни ташкил қилади) атомларнинг аксарият қисми 0-20 градус бурчак остида сочилиши ва бу атомларнинг тахминан ярми 0-1 градус бурчак диапазонида сочилиши аниқланди. 20 -180 градус диапазонда умумий атомларнинг трубка орқали ўтган 10 % гина сочилар экан. Тақсимот яққол ажралиб турган чўққиларсиз узлуксиз характерга эга экан.

Шунингдек, сочилган атомларнинг трубка ичидаги каналлашиши ва инкапсуляция жараёнлари қараб чиқилди. Нанотрубкалар ичида сочилган атомларнинг инкапсуляцияси жараёнларини маълум шароитларда назорат қилиш мумкин эканлиги кўрсатиб берилди. 7-расмда атомларнинг трубка ичидаги инкапсуляцияси динамикаси келтирилган. Нанотрубкалар дастаси чегаралари расмда қора тўртбурчаклар орқали тасвирланган. Суратнинг охирги икки қисми турғунлашган инкапсуляцияланган атомларга мос келади.



7-расм. Ён томонда сочилишда водород атомлари инкапсуляциясининг динамикаси. Вақт оралиғи 5000 пикосекунд қадам билан «0» дан «40 000» пикосекундгача (юқоридан пастга).

8-Расмда инкапсулланган атомларнинг тақсимоти график кўринишда келтирилган.



8-расм. Инкапсуляцияланган атомларнинг нанотрубка ичидаги тақсимоти. Графикда инкапсуляланган атомларнинг қатламлар бўйича тақсимоти (15 ва 20 эВ/атом энергия ва турли бурчакларда сочилган атомлар учун).

Водород атомларининг углерод нанотрубкаларидаги сочилиши жараёнларининг таҳлили натижасида сочилган атомларнинг асосан трубкалар орасидаги фазода тақсимланиши, шунингдек нанотрубкалар деворларига кириб қолиши аниқланди (9-расм).



9-расм. Нанотрубкалар дастаси сиртида сочилган водород атомлари сочилиши натижалари - Атомларнинг киритилиши фақатгина юқори қатламларда содир бўлади.

Умуман олганда сочилган атомларни қатламлар бўйича назорат қилишнинг имконияти йўқ- атомлар асосан структура сиртида ёки биринчи ва иккинчи қатламлар орасида жойлашади. Сочилган атомлар энергияси ортиши бидан сиртнинг қисман бузилишлари кузатилади.

ХУЛОСА

1. Сочилган заррачаларнинг инкапсулланган атомларни олиш мумкин бўлган энергия (10-25эВ) диапазони аниқланди. Сочилган атомлар инкапсуляциясига асосий таъсир қилувчи параметр (заррачаларнинг сочилиш энергиясидан ташқари) уларнинг структура билан боғланиш энергияси эканлиги кўрсатиб берилди ва бундан ташқари дастанинг нишонга нисбатан ориентацияси бу жараёнга кучсиз таъсир кўрсатиши (агар силжимайдиган сочилиш бурчаги – нормалга нисбатан 60 градусдан катта бўлмаса) аниқланди.

2. Моделлаштириш натижалари шуни кўрсатдики, танланган энергия диапазонининг пастки қисмида атомларнинг наноструктуралар билан адсорбцияси жараёнлари кузатилса, юқори қисмида эса сочилган атомлар оқими зичлигини назорат қилиш натижасида наноструктураларнинг бузилиши билан борадиган сочилиш жараёнлари аниқланди. Катта оқим зичликларида структуранинг локал қизиши юзага келди ва структура бузилиши кузатилди.

3. Сиртида атомлар сочилиши орқали амалга ошириладиган углерод наноструктураларининг модификацияси қийин кечадиган жараёнлардан бўлиб, атомларнинг бу наноструктуралар сиртида сочилишида адсорбция жараёни устунроқ, тагликдаги наноструктураларда атомларнинг сочилишида эса наноструктураларнинг мақсадли модификацияси билан бир қаторда тагликнинг «ифлосланиши» кузатилди.

4. Қаралаётган энергия диапазонида атомларнинг сочилиш жараёнининг ноэластик характерга эга эканлиги аниқланди, фуллеренларда атомларнинг сочилиши йўли билан олинадиган эндоэдрал фуллеренларнинг олиниши қийинлашди, бунга сабаб энергиянинг юқори чегараларидаги энергияли сочилган атомларнинг фуллерен клеткаларда адсорбцияси ва атомларнинг киритилиши жараёнларига сезиларли таъсир қилди.

5. Углерод нанотрубкалари ичида инкапсуляцияланадиган атомларни назорат қилиш уларда атомларнинг ён томонлардан (нормалга яқин бурчакларда) сочилиш жараёнларидагина мумкин эканлиги кўрсатиб берилди, бунда нанотрубкалар синтез қиладиган дасталарнинг идеал эмаслигини ҳисобга олган ҳолда, бизнингча атомларнинг ён қирраларда сочилиши етарли бўлди.

6. Углеродли нанотрубкалар ичида (уларнинг ён томонда сочилишида) сочилган атомлар тақсимотининг асосий механизми атомларнинг трубка деворлари билан кўп марталик урилиши туфайли атомларнинг каналлашишлари эканлиги, атомларнинг трубка бўйлаб тақсимланишини атомлар дастаси энергияларининг турли қийматларидан ва уларнинг нанотрубка ўқига нисбатан ориентацияларининг турли қийматларини олиб назорат қилиш мумкин эканлиги аниқланди (бунда атомлар дастасининг нормалга нисбатан силжиши 20 градусдан кам бўлиб, нанотрубкалардаги атомлар дастасининг идеал эмаслигини эътиборга олган ҳолда фақатгина даста энергиясини турли қийматларгача ўзгартириб текшириш мумкин).

НАУЧНЫЙ СОВЕТ ПО ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНЫХ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК DSc. 02/30.12.2019.FM.65.01 ПРИ ИНСТИТУТЕ ИОННО-ПЛАЗМЕННЫХ И ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

ИНСТИТУТ ИОННО-ПЛАЗМЕННЫХ И ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

АЛЯБЬЕВ ДАНИЛА ВАЛЕРЬЕВИЧ

МОДЕЛИРОВАНИЕ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ИОННОЙ МОДИФИКАЦИИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И ФУЛЛЕРЕНОВ

01.04.04 – Физическая электроника

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам

Ташкент - 2021

УДК 539.6 544.188 004.942

Тема диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за номером B2017.3.PhD/FM114.

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

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

Научный руководитель:	**Джурахалов Абдурауф Асланович** доктор физико-математических наук, профессор
Официальные оппоненты:	**Кутлиев Учкун Отобоевич** доктор физико-математических наук
	Усманов Дилшодбек Турсунбоевич доктор физико-математических наук
Ведущая организация:	**Ферганский политехнический институт**

Защита диссертации состоится «30» 04 2021 года в 16^{00} часов на заседании Научного совета DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 при Институте ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз .(Адрес: 100125,г.Ташкент, улица Дўрмон, д. 33. Тел./факс: (+99871) 263-32-54, e-mail:info@iplt.uz,зал заседаний Института ионно-плазменных и лазерных технологий.)

Диссертация зарегистрирована в Информационно-ресурсном центре Института ионно-плазменных и лазерных технологий (регистрационный номер №2),с диссертацией можно ознакомиться в ИРЦ (Адрес: 100125, г.Ташкент, улица Дўрмон, д. 33. Тел./факс: (+99871) 263-32-54).

Автореферат диссертации разослан «19» 04 2021 г.
(реестр протокола рассылки № 2 от 19. 04 2021 г.).

Х.Б.Ашуров
Председатель научного совета по присуждению ученых степеней, д.т.н., профессор

И.Д. Ядгаров
Ученый секретарь научного совета по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., с.н.с

Б.Е.Умирзаков
Председатель научного семинара при научном совете по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., профессор

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD)

Актуальность и востребованность темы диссертации. В настоящее время большое внимание уделяется относительно новым углеродным материалам – углеродным нанотрубкам и фуллеренам. Это обусловлено специфическими физико-химическими свойствами этих объектов, как в «самостоятельном» составе, так и в составе композитов, многослойных структур и пр. В первую очередь, специалистами выделяются механические свойства как самих углеродных нанотрубок, так и композитов, полученных на их основе (как наиболее близких к промышленной реализации). Такие композиты обладают значительно улучшенными прочностными и трибологическими характеристиками. Также, композиты на основе углеродных нанотрубок могут быть применены при изготовлении т. н. нанотранзисторов и других элементов будущей наноэлектроники. Отдельно стоит отметить оптические свойства таких композитов, представляющих как теоретический, так и прикладной (практический) интерес. Как примеры можно упомянуть, что коэффициент поглощения материалов на основе углеродных нанотрубок близок к единице, или что углеродные нанотрубки определенной геометрии являются прямозонными полупроводниками, что представляет интерес для оптоэлектроники.

Фуллерен — молекулярное соединение, одна из форм углерода, представляющая собой выпуклые замкнутые многогранники, составленные из атомов углерода. Специалисты ожидают, что фуллерены найдут свое широкое применение в областях микро- наноэлектроники (наряду с углеродными нанотрубками), медицины. Применение фуллеренов в электронике обеспечится их выраженными полупроводниковыми свойствами, в области медицины фуллерены планируется использовать как контейнеры для доставки лекарств или т. н. «контрастов» (для ЯМР). Последнее определяется их биологической инертностью. Отдельно стоит упомянуть т. н. эндоэдральные структуры на базе фуллеренов и нанотрубок. Достаточно давно была предложена идея использования эндоэдральных фуллеренов для создания кубитов – элементарных вычислительных ячеек для квантовых компьютеров. Проводятся как теоретические расчеты свойств эндоэдральных фуллеренов, так и эксперименты по управлению свойствами инкапсулированных атомов в плоскости данной задачи.

На фоне быстрого роста вычислительных возможностей, растет роль математического моделирования в области физических процессов. Существенный прогресс в этой области за последние два десятилетия, позволяет успешно рассчитывать как макроскопические системы (здания, сооружения, аэродинамические, гидродинамические системы и пр., в том числе и с нелинейными свойствами), так и микроскопические системы (взаимодействии атомов, молекул, свойства молекулярных систем, в том числе и многоатомных – например белковых).

Данная диссертационная работа в определенной степени соответствует задачам, предусмотренных в Указе Президента Республики Узбекистан № УП-4947 «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан» от 07-февраля 2017 года.[1] Данное диссертационное исследование в определенной степени служит выполнению задач, предусмотренных в Постановлении Президента Республики Узбекистан ПП–1442 «О приоритетных направлениях развития индустрии Республики Узбекистан на 2011-2015 гг.» от 15 декабря 2015 года, № УП-4947 «О мерах по дальнейшей реализации Стратегии действий по пяти приоритетным направлениям развития Республики Узбекистан в 2017-2021 годах» от 7 февраля 2017 года и №ПП-2789 «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организации, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности» от 17 февраля 2017 года, а также в других нормативно-правовых документах, принятых в Республике за последние годы данной сфере.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики Узбекистан. Данное исследование выполнено в соответствии с приоритетными направлениями развитии науки и технологий Республики Узбекистан: II. «Физика, астрономия, энергетика и машиностроение». III. «Развитие и использование возобновляемых источников энергии».

Степень изученности проблемы. Результаты по этой тематике, как теоретические, экспериментальные, так и практического характера были получены многими научными группами, как ближнего, так и дальнего зарубежья. Синтезом высококачественных углеродных материалов занимаются как крупные компании, так и относительно небольшие, специализирующиеся именно на этом виде продукции (ООО "НаноТехЦентр", Российская Федерация, «Ocsial» - с представительствами по всему миру, «Nanografi», США и др.)**.** Многие научные группы занимаются разработкой элементов электроники (к примеру, материалы для суперконденсаторов, Панкратов Д.В, «Курчатовский институт», РФ, D. R. Hines, V. W. Ballarotto, США, Chuang Peng, Shengwen Zhang, Daniel Jewell, Великобритания), наноэлектроники (Stefan Frank, США,), изучением функционализированных структур (Maria del Carmen Gimenez-Lopez, Испания, A. Chuvilin, Испания), эндоэдральными фуллеренами (Nibras Mossa Umran, Индия, H. Minezaki, Япония). Разрабатываются и поддерживаются программные пакеты для математического моделирования, как с открытым исходным кодом, (LAMMPS, GROMACS, ORCA и др.), так и проприетарные. В нашей стране, исседования в области углеродных структур велись и ведутся признанными учеными Балтенковым, А.С., Джурахаловым А.А., Кутлиевым У.О., Коххаровым, А.М.

1 Стратегия действий по пяти приоритетным направлениям развития Республики Узбекистан в 2017-2021 годах // приложение № 1 к Указу Президента Республики Узбекистан от 7 февраля 2017 года № УП-4947, п. 3.2.

Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертация. Диссертационная работа выполнена в рамках следующих проектов Института ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз: № ОТ-Ф2-46 «Теоретическое исследование процессов взаимодействия фотонов, атомных частиц и электронов с фуллеренами и углеродными нанотрубками» (2016-2020), № Ф2-ФА-Ф164 «Теоретическое исследование процессов взаимодействия фотонов и заряженных частиц с углеродными наноструктурами на поверхности кристаллов» (2012-2016).

Целью исследования является изучение процессов рассеяния атомов водорода и углерода на углеродных наноструктурах – углеродных нанотрубках и фуллеренах, как свободных, так и расположенных на подложке, процессов адсорбции и инкапсуляции рассеиваемых атомов методами классической молекулярной динамики, интерпретация получаемых результатов на основе современных экспериментальных данных.

Задачи исследования:

выявление процессов, преобладающих при рассеянии атомов углерода водорода, на углеродных нанотрубках – одиночной нанотрубке и пучке нанотрубок (рассеяние, адсорбция, инкапсуляция);

выявление процессов, преобладающих при рассеянии атомов углерода водорода, димеров углерода на фуллеренах – единичном фуллерене, свободно перемещающихся фуллеренах, фуллеренах на графитовой подложке (рассеяние, адсорбция, инкапсуляция);

выявление качественных и количественных условий (энергетические и угловые параметры) адсорбирования и инкапсуляции рассеиваемых атомов (димеров) углеродными нанотрубками и фуллеренами;

выявление характерных траекторий и преобладающих процессов при рассеянии атомов водорода на торце (ах) углеродной нанотрубки, рассмотрение качественных условий каналирования.

Объектами исследования являются геометрические модели фуллерена, углеродной нанотрубки, пучка углеродных нанотрубок, свободно падающих фуллеренов, фуллеренов на графитовой подложке.

Предметом исследования являются процессы рассеяния, адсорбции, внедрения, инкапсуляции, каналирования рассеиваемых атомов, а также угловые распределения атомов, рассеянных на углеродных нанотрубках и фуллеренах, как свободных, так и размещенных на графитовой подложке, условия инкапсуляции рассеиваемых атомов.

Методы исследования. В работе применены методы численного моделирования, путем применения методов классической молекулярной динамики, на основе эмпирического потенциала REBO, оптимизированного для расчетов углеродных структур.

Научная новизна исследования заключается в следующем:

впервые уточнен диапазон энергий рассеиваемых нейтральных частиц, в котором можно получить инкапсулированные атомы – 10-25эВ;

получено, что необходим контроль плотности потока рассеиваемых атомов – большие значения плотности потока приводят к локальному перегреву структуры и её частичному разрушению;

впервые установлено, что одним из ключевых параметров, влияющим на инкапсулирование рассеиваемых атомов, является их энергия связи со структурой;

впервые получено, что процесс рассеяния атомов в заявленном диапазоне энергий имеет неупругий характер;

впервые показана возможность контролируемой инкапсуляции рассеиваемых атомов углеродными нанотрубками (при торцевом рассеянии).

Практические результаты исследования заключается в следующем:

разработаны геометрические модели углеродных нанотрубок (произвольного диаметра и длины), пучка нанотрубок, молекул фуллеренов на графитовой подложке, пространственно распределенных молекул фуллеренов;

проведены модельные эксперименты по торцевому рассеянию атомов водорода на углеродных нанотрубках, проведен анализ процессов адсорбции, рассеяния атомов водорода стенками углеродных нанотрубок и каналирования атомов водорода внутри углеродных нанотрубок, выявлены условия каналирования рассеиваемых атомов водорода;

результаты модельных экспериментов по торцевому рассеянию атомов на углеродных нанотрубках показали возможность контролируемого инкапсулирования рассеиваемых атомов;

на основе результатов, упомянутых ниже, выявлен оптимальный диапазон энергий рассеиваемых атомов, для получения в структурах инкапсулированных атомов (в процессе рассеяния их на этих структурах) – 10-25эВ;

проведены модельные эксперименты по рассеянию атомов водорода, углерода, димеров углерода на группах молекул фуллерена, как свободных, так и расположенных на графитовой подложке, исследованы процессы рассеяния, адсорбции, инкапсуляции рассеиваемых атомов. Выявлено, что преобладающим процессом в выбранном диапазоне энергии рассеиваемых атомов является процесс адсорбции этих атомов;

исследование процессов рассеяния димеров углерода на молекулах фуллерена показало влияние ориентации димера на процесс инкапсуляции рассеиваемых атомов димера.

Достоверность результатов исследования обусловлена корректной постановкой задач, применением широко используемых математических методов, доказавших временем свою корректность, контролем и корректностью базовых параметров при расчетах (таких как энергия связи),

совпадением качественной картины процессов с результатами, представленными в экспериментальных работах.

Научная и практическая значимость результатов исследования заключается в возможности сопоставления результатов моделирования вышеописанных процессов с экспериментальными данными по углеродным наноструктурам, в получении информации о преобладающих процессах (адсорбция, рассеяние) при рассеянии атомов на углеродных наноструктурах, диапазонах энергии, пространственных ориентациях рассеиваемых пучков атомов, влиянии этих параметров на модификацию этих структур.

Практическая значимость результатов исследования определяется тем, что полученные информация и данные по вышеупомянутым процессам углубить понимание процессов и механизмов взаимодействия рассеиваемых пучков с углеродными наноструктурами, оценить возможность управляемого инкапсулирования рассеиваемых атомов.

Внедрение результатов исследования. На основе результатов проведенных модельных экспериментов по рассеянию атомных частиц на углеродных наноструктурах:

уточнен диапазон энергий рассеиваемых нейтральных частиц, в котором можно получить инкапсулированные атомы (10-25эВ), а также учет неупругого характера взаимодействия рассеиваемых атомов с фуллеренами, были использованы в работе Проекта № Ф2-ФА-Ф146 «Процессы кластерообразования, самосборки и самоорганизации фуллеренов в растворах» (Справка № 2/1255-1798 Академия наук РУз от 02.09.2020). Использование результатов диссертационной работы позволило определить локализацию атомов углерода в молекуле фуллерена C_{60} в одно- и двукомпонентных растворителях;

оценено влияния энергии связи рассеиваемых атомов на инкапсуляцию в структуре, оценка была использована в работе Проекта № ОТ-Ф2-53 «Квантово-размерные эффекты и электронные свойства двухслойных наноразмерных структур, созданных на поверхности и приповерхностные области пленок A_3B_5» (Справка № 89-03-2986 Министерство высшего и среднего специального образования РУз от 28.08.2020). Использование результатов позволило углубить понимание формирования наноразмерных структур на поверхности пленок AsGa и CdS, оценить влияние энергии связи на локализацию этих структур на поверхности пленок.

Апробация результатов исследования. Результаты диссертационной работы представлялись на 7 международных конференциях.

Публикация результатов исследования. Результаты, полученные по теме диссертации, были опубликованы в 10 научных трудах, получено одно свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованной литературы. Объем диссертации составляет 104 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении раскрывается актуальность темы исследования, формулируются цели и задачи исследования, описываются объект и предмет исследования, приводятся краткий обзор по востребованности выбранных объектов исследования, показано соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики, приводятся научная новизна и практические результаты исследования, раскрываются научная и практическая значимость, внедрение в практику полученных результатов. Описана структура диссертации и приведена информация о количестве опубликованных работ по теме диссертационного исследования.

В первой главе диссертации «Анализ литературных источников по тематике диссертации» приведена общая классификация наноструктур, представлен актуальный обзор современного состояния области углеродных наноструктур – углеродных нанотрубок, фуллеренов, эндоэдральных фуллеренов: способы синтеза, выделения углеродных наностуктур, применяемые в настоящее время, приведены примеры практического применения углеродных нанотруктур в различных областях (материаловедение, оптика, наноэлектроника, медицина, спинтроника, квантовые вычислительные устройства), упомянуты некоторые методы функционализации этих наноструктур (например, т.н. «молекулярная хирургия») на примере получения эндоэдральных фуллеренов. Упомянуты работы по эндоэдральным фуллеренам $N@C_{60}$, как перспективного катализатора в водородных топливных элементах.

Во второй главе «Методы компьютерного моделирования физических процессов» приводятся краткий обзор основных подходов в моделировании физических процессов – использование соответствующих уравнений, приближений и подходов, в зависимости от размеров исследуемой системы, в основном определяющих использование уравнения Шредингера (для исследования квантовых свойств атомных, молекулярных систем), или уравнений Ньютона (при исследовании «классических» процессов рассеяния, внедрения и пр.). Приведено краткое описание альтернативного подхода к квантовым расчетам, т. н. метод DFT (теории функционала плотности, основанный на теоремах Кона-Шэма), суть которого заключается в замене Шредингеровской волновой функции функцией распределения электронов. Здесь вводится т.н. «функция корреляции», описывающая обменные электрон - электронные взаимодействия. Приведено краткое описание «классических» алгоритмов расчета атомно-молекулярных систем, на основе уравнений Ньютона. Кратко описана последовательность создания модельной системы и задания начальных и граничных условий (выбор модельного потенциала взаимодействия, задание начальных координат атомов структуры, «термолизация» структуры – задание начальных скоростей атомов, задание периодических граничных условий, основные методы интегрирования уравнений движения).

В третьей главе приведено краткое описание потенциала REBO, описывающего углерод-водородные, углерод-углеродные взаимодействия и часто применяемого при модельных расчетах углеводородных систем, приведены примеры, в которых рассмотрен ряд модельных расчетов для таких систем. Кратко описаны применяемые в настоящей работе алгоритмы и подходы. Приведены результаты по модельным расчетам процессов рассеяния атомов водорода, углерода, димеров углерода на молекулах фуллерена C_{60}. В этой главе, рассмотрены две модельные системы: группа молекул фуллерена, находящаяся на графитовой подложке и несвязанные, невзаимодействующие молекулы фуллерена (пространственно разделенные).

Для первой модельной системы, проведены модельные эксперименты по рассеянию атомов водорода, с целью установления преобладающих процессов (рассеяние, инкапсуляция, внедрение) и соответствующих диапазонов энергий рассеиваемых атомов.

Основными задачами модельных экспериментов, проведенных над второй модельной системой, были рассмотрение процессов инкапсуляции, рассеяния, адсорбции атомов молекулами фуллеренов, (как прямых, так и вторичных), процессов рассеяния димеров (углерода) на фуллеренах. Основной целью было выявление условий инкапсуляции рассеиваемых атомов, с одновременным уменьшением «вклада» других процессов – адсорбции (внедрения).

Рассмотрим графитовую подложку, состоящую из трех графеновых слоев (рис. 1), расстояние между которыми равно 3 Å (что примерно соответствует расстоянию между слоями в реальном графите), с размещенными на ней 20 молекулами фуллерена. Суть модельного эксперимента заключалась в рассеянии сколлимированного пучка атомов водорода на этой структуре под различными углами.

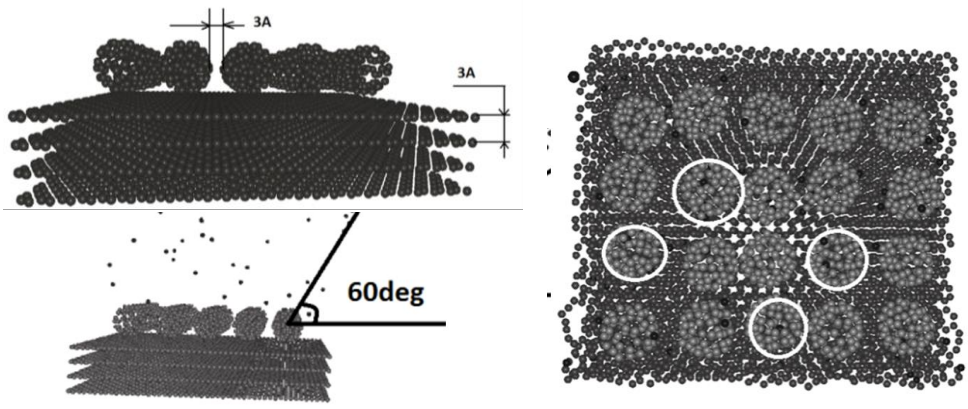


Рис. 1. Графитовая подложка с фуллеренами на ней. На фуллеренах рассеиваются атомы водорода, под различными углами. Выявляются характеристики пучка, для которых можно получить инкапсуляцию рассеиваемых атомов.

Исходное значение энергии рассеиваемых частиц определилось рядом работ и приняло значение, не превысившие 100эВ. При энергии атомов в 100эВ/атом, наблюдалось сквозное пробитие мишени, с частичным её разрушением, что потребовало кратного её уменьшения (до значений, лежащих в диапазоне 10-20 эВ/атом). В этом диапазоне энергий удалось получить инкапсулированные атомы. Количество инкапсулированных атомов – 5-7%. Также наблюдались как адсорбция атомов на поверхности структуры, так и внедрение атомов в графитовую подложку. Глубина внедрения ожидаемо увеличивалась с увеличением энергии рассеиваемых частиц. Результаты рассеяния атомов под углами, отличными от нормального, качественно не отличаются от результатов нормального рассеяния. В целом, определяющую роль в процессах несет энергия рассеиваемых частиц, ориентационные параметры слабо на них влияют (при нескользящих углах, 0-60 град. от нормали). Однако, по-видимому, такой подход в модификации именно молекул фуллерена (получение эндоэдральных фуллеренов) следует считать нецелесообразным, по той причине, что основная часть атомов, задерживается подложкой, как поверхностью, так и внутри нее, т.о. «загрязняясь».

По этой причине, была смоделирован тот же процесс рассеяния, только на свободных, невзаимодействующих фуллеренах (рис.2). На сколлимированных молекулах фуллерена с энергией 1эВ/молекулу, были рассеяны атомы водорода, под углом 30 град. от нормали. Значения энергия рассеиваемых атомов лежали в диапазоне 8-15 эВ/атом.

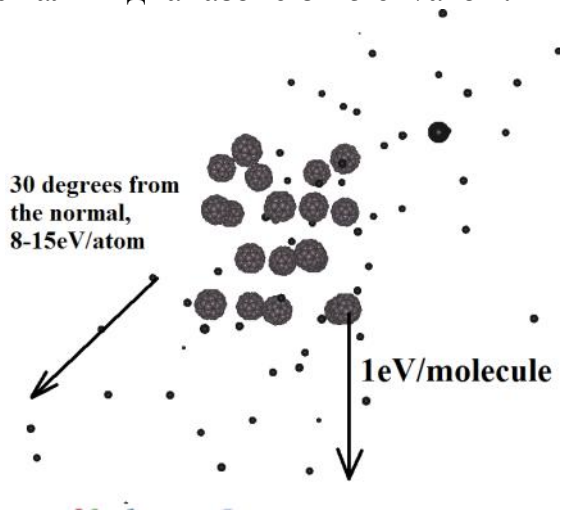


Рис. 2. Свободные невзаимодействующие фуллерены, движущиеся с энергией 1эВ/молекула. На них рассеивается пучок атомов водорода под различными углами.

Здесь были выделены и рассмотрены процессы адсорбции и инкапсуляции атомов (рис. 2а). Было обнаружено что адсорбция и инкапсуляция атомов происходит по двум механизмам: как в результате первичных соударений, так и в результате рассеяния их молекулой фуллерена с последующей адсорбцией/инкапсуляцией другим фуллереном. Ближе к энергии 8эВ, ожидаемо преобладает процесс адсорбции (неупругое взаимодействие), ближе к 15эВ – инкапсуляция. В целом, рассеяние атомов

на свободных фуллеренах позволило получить большее число инкапсулированных атомов (на единицу рассеянных), чем если бомбардировать подложку с фуллеренами (модельный эксперимент, описанный выше). По-видимому, можно подобрать такое значение энергии, при котором число адсорбированных атомов будет минимальным. Однако в этом случае, при увеличении энергии атомов, возможно разрушение фуллеренов.

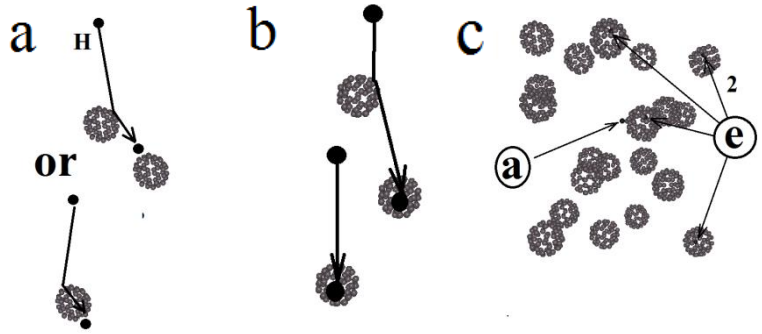


Рис. 2. Механизмы адсорбции и инкапсуляции: a) – адсорбция рассеиваемых атомов, b) – инкапсуляция рассеиваемых атомов, c) – примеры адсорбированных и инкапсулированных атомов

Также было оценено кинетическое влияние рассеиваемого пучка на поток фуллеренов (наблюдалось смещение фуллеренов в горизонтальной плоскости относительно начального их распределения). Смещение фуллеренов было зафиксировано на момент полного пролета рассеиваемых атомов. Для нижних пределов значений энергий атомов (8эВ), взаимодействие атомов с фуллеренами имело выраженный неупругий характер, отклонения фуллеренов в горизонтальной плоскости достигали значений, сравнимых с размерами фуллеренов (более 10А). Для верхних пределов значений энергий атомов (15эВ), смещение потока фуллеренов уже не такое выраженное. Таким образом, для полного контроля процесса осаждения фуллеренов на подложку(?), с одновременным рассеянием на них атомов, возможно, следует учитывать их горизонтальное смещение, оно может быть значительным, особенно для низких значений энергии (рис. 3).

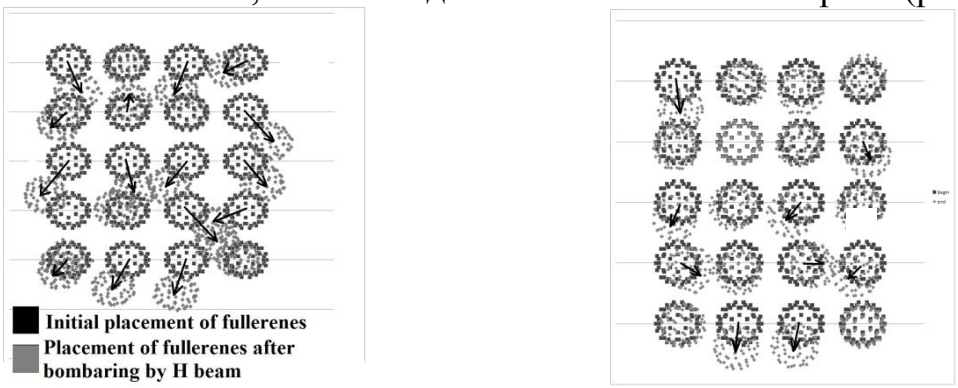


Рис. 3 Рассеяние атомов водорода на пучке фуллеренов: смещение фуллеренов в проекции на плоскость (x,y) при рассеянии на них атомов водорода (слева-8эВ/атом, справа-15эВ/атом). Темно серые «пятна» - проекция начальных координат атомов фуллеренов на плоскость (x,y), светло-серые пятна - проекция координат атомов фуллеренов, на плоскость (x,y), после рассеяния атомов водорода на них.

Был рассмотрен процесс рассеяния атомов и димеров углерода на свободных фуллеренах. Как известно, энергия углерод-углеродной связи (ок. 7эВ) кратно превышает энергию углерод-водородной связи (около 2 эВ). Результаты описанных ниже модельных экспериментов показывают, что по причине этого кратного различия, наблюдается в основном адсорбция рассеиваемых атомов.

Итак, была рассмотрена система из ста молекул фуллерена, на различных точках поверхности которого были рассеяны атомы углерода (рис. 4). Преобладающими процессами являлись адсорбция и внедрение рассеиваемых атомов (в выбранном диапазоне энергий, в котором не происходит тотального разрушения молекул фуллерена)

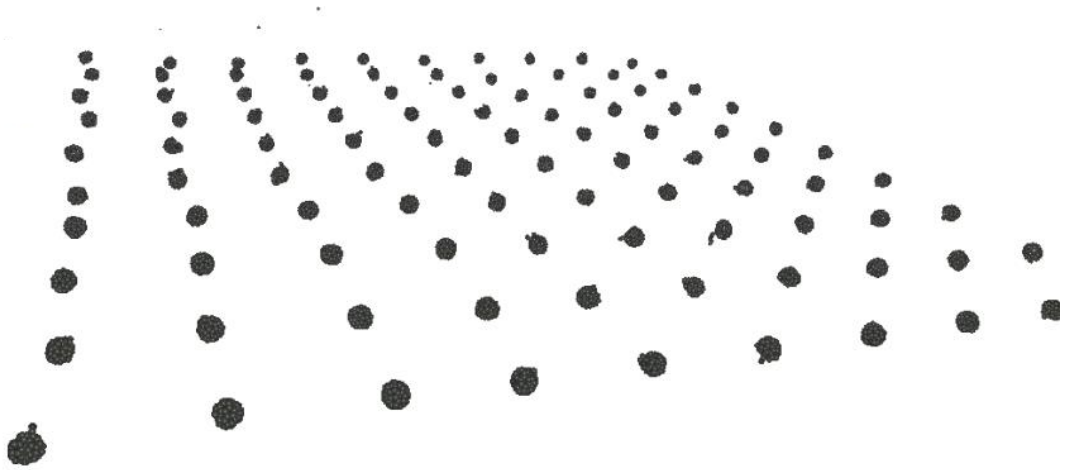


Рис. 4. Сто молекул фуллерена с рассеиваемыми на них атомами углерода.

Была выбрана YZ – плоскость, учитывая симметрию молекулы фуллерена, были выбраны прицельные точки, на которых были рассеяны 400 атомов углерода. С учетом симметрии молекулы фуллерена, был получен профиль поверхности, на которой происходит адсорбирование атомов углерода (для энергии рассеиваемых атомов 25 эВ/атом, рис. 5).

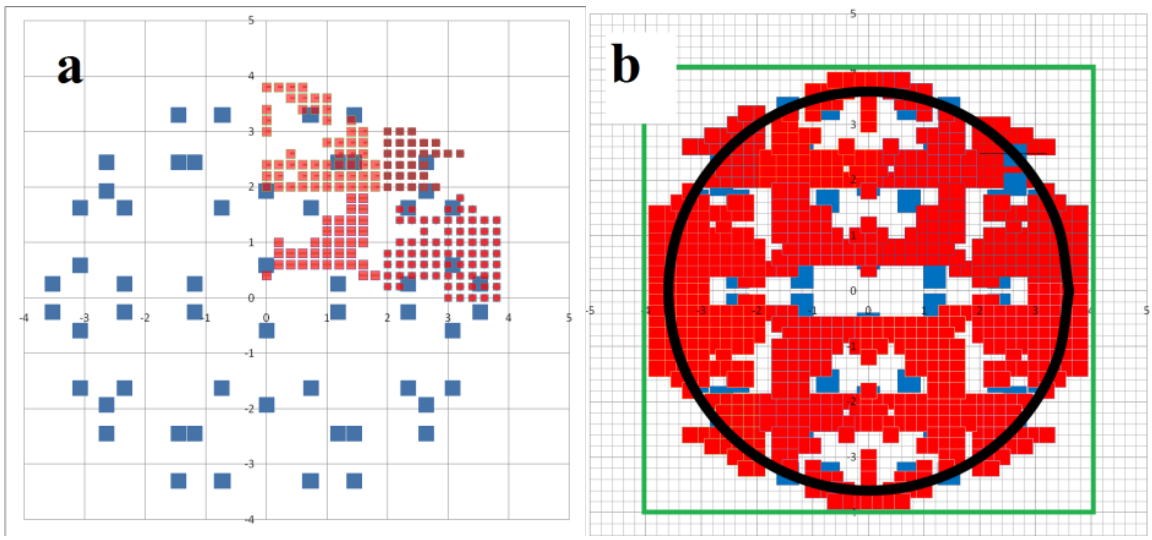


Рис. 5. a - проекция атомов фуллерена на YZ-плоскость (большие квадратики), прицельные точки при рассеянии атомов углерода (маленькие квадратики), b – область рассеяния атомов углерода на фуллерене, красным выделены области, при попадании в которые атомы углерода адсорбируются, черная линия - геометрическая граница фуллерена. Зеленая линия-граница площадки, в которой рассеивались атомы (с шагом сетки 0,2 ангстрема).

В четвертой главе представлены результаты моделирования процессов рассеяния атомов водорода на пучках углеродных нанотрубках, как свободных, так и размещенных на графитовой подложке (рис. 6). Рассматривались процессы торцевого рассеяния и рассеяния поверхностью углеродных нанотрубок.

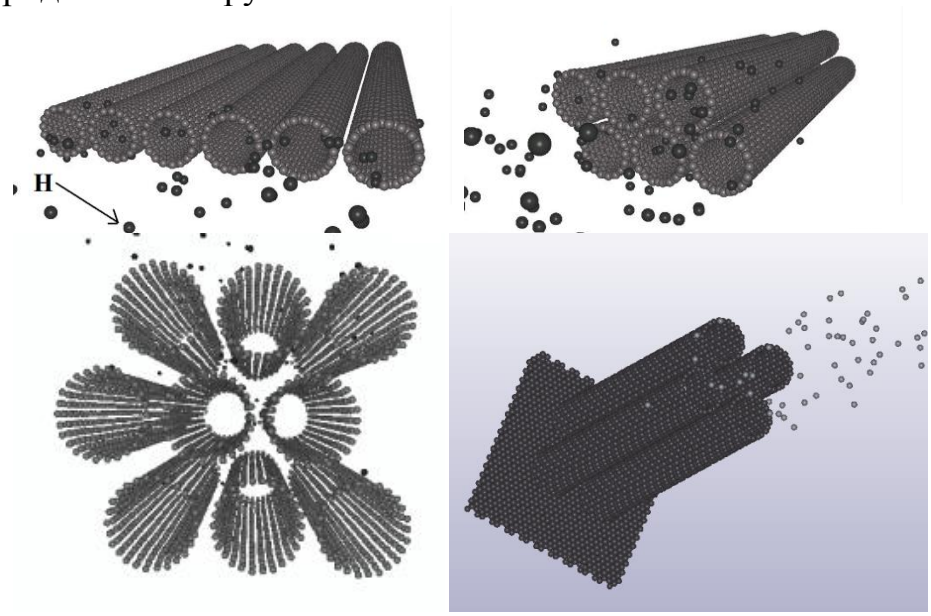


Рис. 6. Некоторые геометрические модели углеродных нанотрубок, на которых рассеиваются пучки атомов водорода.

В части анализа процессов торцевого рассеяния, было рассмотрен процесс нормального рассеяния атомов водорода торцом нанотрубок, получено, что в ходе этого процесса, часть атомов пролетает нанотрубки, не взаимодействуя с ними (очевидно, если расстояние между атомами и нанотрубками превышает эффективную длину связи, ограниченную в т. ч. и обрезкой модельного потенциала). В процессе, часть атомов рассеивается на торце трубки на границе структур, часть атомов, претерпев одно или несколько столкновений внутри трубки, рассеивается через ее стенки, часть атомов пролетает сквозь трубки. Рассматривая только те атомы, которые пролетели сквозь трубки (их получится 40-50% от общего числа атомов), получено, что, большая часть атомов рассеяна в диапазоне углов 0 – 20 градусов, и примерно половина из этих атомов рассеяна в диапазоне углов 0 - 1 градус. В диапазоне 20 -180 градусов рассеяно не более 10 % от общего числа атомов, прошедших через трубки. Распределение несет непрерывный характер без выраженных пиков.

Также были рассмотрены процессы каналирования и инкапсулирования рассеиваемых атомов внутри нанотрубок. Было получено, что можно определенным образом контролировать процесс инкапсулирования рассеиваемых атомов внутри нанотрубок. На рис. 7 показана динамика процесса инкапсулирования атомов внутри нанотрубок. Черным прямоугольником обозначена геометрическая граница пучка нанотрубок. Последние две части рисунка соответствуют стабилизировавшимся инкапсулированным атомам.

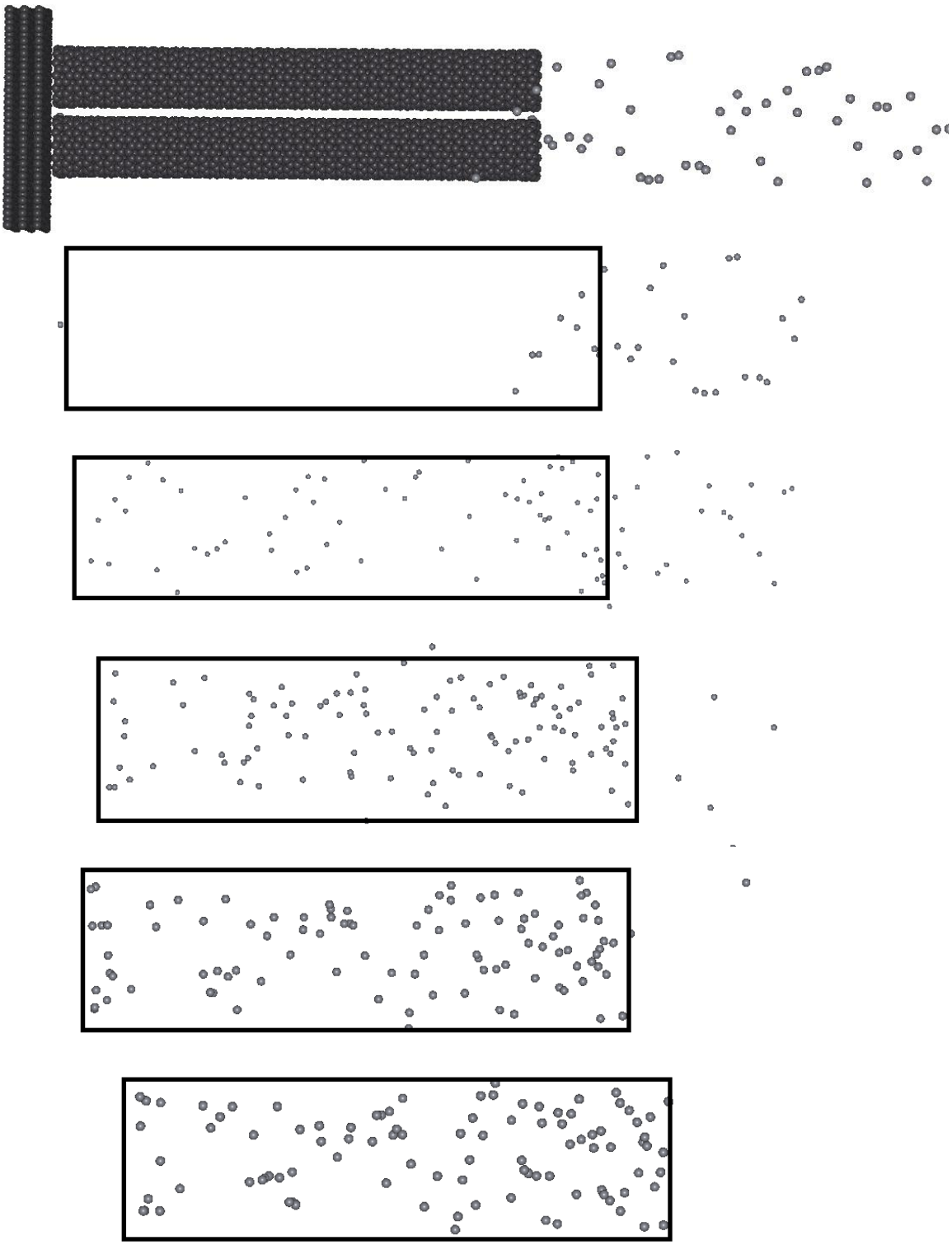


Рис. 7. Динамика инкапсулирования атомов водорода при их торцевом рассеянии. Временной промежуток от «0» до «40 000» пикосекунд, с шагом 5000 пикосекунд (сверху вниз).

Пример графического представления распределения инкапсулированных атомов представлен на рис. 8.

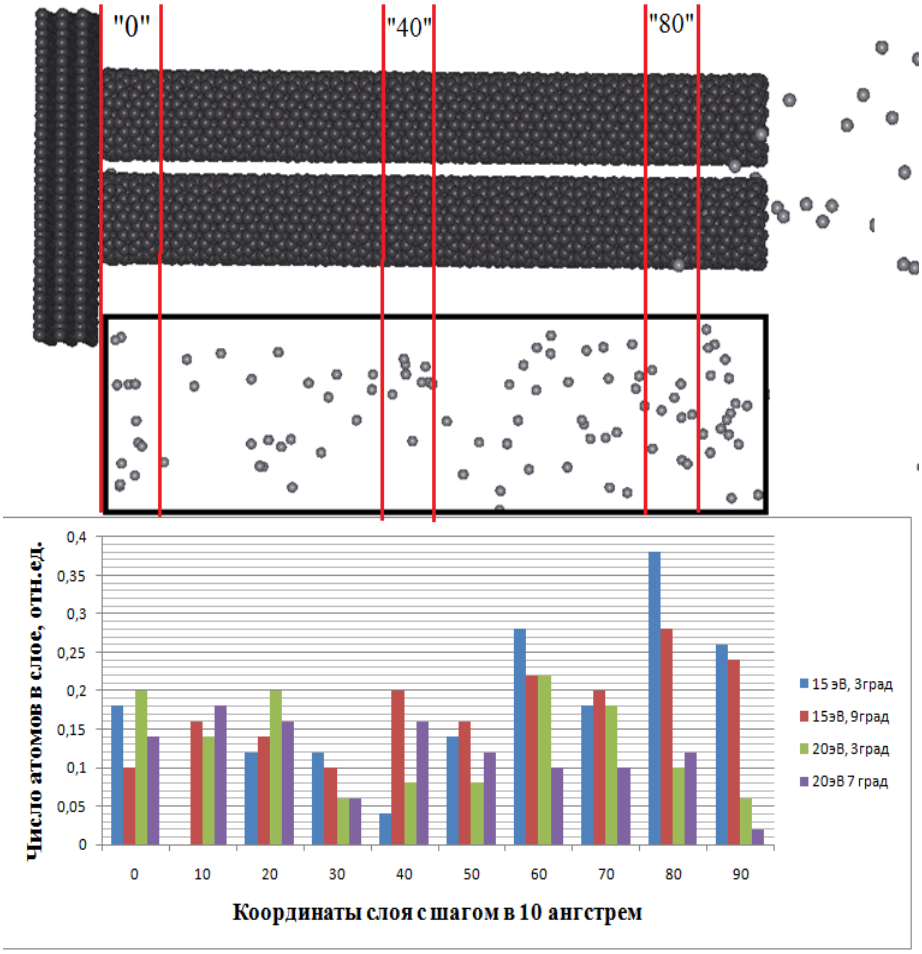


Рис. 8. Распределение инкапсулированных атомов внутри нанотрубок. На графике представлены послойные распределения инкапсулированных атомов (для энергий рассеиваемых атомов 15 и 20 эВ/атом и различных углов)

В части анализа процессов рассеяния атомов водорода поверхностью углеродных нанотрубок, было получено, что рассеиваемые атомы в основном распределяются в межтрубочном пространстве, а также внедряются в стенки нанотрубок (рис. 9).

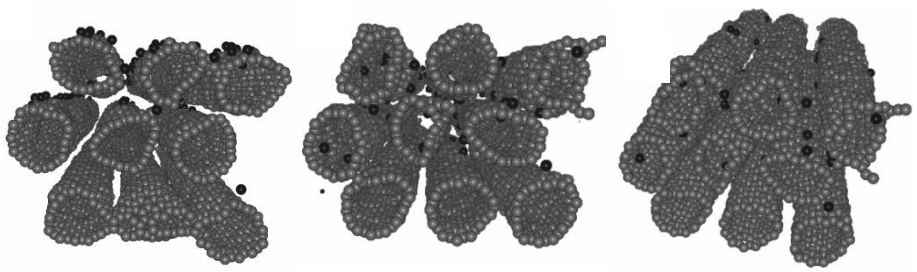


Рис. 9. Результаты рассеивания атомов водорода поверхностью пучка нанотрубок, - внедрение атомов происходит только в верхних слоях.

В целом, контролировать послойное внедрение рассеиваемых атомов, по-видимому, не представляется возможным, - атомы локализуются в основном на поверхности структуры или между первым и вторым слоем. При увеличении энергии рассеиваемых атомов, происходит частичное разрушение поверхности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Установлен диапазон энергий рассеиваемых частиц, в котором можно получить инкапсулированные атомы – 10-25эВ, получено, что ключевым параметром (помимо энергии рассеиваемых частиц), влияющим на инкапсулирование рассеиваемых атомов, является их энергия связи со структурой, ориентация пучков относительно мишеней на результат влияет слабо (если углы рассеяния нескользящие – не более 60 градусов от нормали).
2. Результаты моделирования показывают, что по нижней границе выбранного диапазона энергий преобладает процесс адсорбции нанотруктурами атомов, по верхней границе – рассеяние, с возможным разрушением наноструктур, необходим контроль плотности потока рассеиваемых атомов – большие значения плотности потока приводят к локальному перегреву структуры и её частичному разрушению.
3. Модификация углеродных наностуктур путем рассеяния на их поверхности атомов, по-видимому, представляется затруднительной – при рассеянии атомов поверхностью этих наностуктур, преобладают процессы адсорбции, при рассеянии атомов на наностуктурах на подложке, помимо модификации целевых наностуктур, происходит «загрязнение» подложки.
4. Установлено, что процесс рассеяния атомов в заявленном диапазоне энергий имеет неупругий характер, получение эндоэдральных фуллеренов путем рассеяния на них атомов, по-видимому затруднительно – адсорбция и внедрение атомов в фуллереновую клетку вносят заметный вклад, рассеяние атомов с энергиями по верхней границе.
5. контролируемая инкапсуляция атомов внутри углеродных нанотрубок возможна при торцевом рассеянии атомов на них (под углами, близкими к нормальным), с учетом неидеальности синтезируемых пучков нанотрубок, по – видимому, будет достаточно нормального рассеяния атомов на их торцах.
6. Получено, что основным механизмом распределения рассеиваемых атомов внутри углеродных нанотрубок (при их торцевом рассеянии) является каналирование атомов, с кратными соударениями их внутри нанотрубок, распределение атомов вдоль нанотрубки можно контролировать варьированием энергии пучка и ориентацией его относительно оси нанотрубки (причем отклонение пучка от нормали не превысит 20 градусов, с учетом неидеальности пучков нанотрубок, для модификации нанотрубок достаточным будет варьирование только энергии пучка).

SCIENTIFIC COUNCIL ON AWARDING OF SCIENTIFIC DEGREES DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 INSTITUTE OF ION-PLASMA AND LASER TECHNOLOGIES

ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF UZBEKISTAN INSTITUTE OF ION-PLASMA AND LASER TECHNOLOGIES NAMED AFTER U.A.ARIFOV

ALYABEV DANILA VALEREVICH

MODELING OF PROCESSES OF ION MODIFICATION OF CARBON NANOTUBES AND FULLERENES

01.04.04 – Physical electronics

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

Tashkent – 2021

The theme of the dissertation of doctor of philosophy (PhD) on physical and mathematical sciences was registered at the Supreme Attestation Commission of the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under number B2017.3.PhD/FM114.

Dissertation has been prepared at the Institute of ion-plasma and laser technologies named after U.A.Arifov of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan.

The abstract of the dissertation in three languages (Uzbek, Russian, English (resume)) has been posted on the website of the Scientific Council (www.iplt.uz) and on Information-educational portal «ZiyoNet» (http://www.ziyonet.uz).

Scientific supervisor:	**Dzhurakhalov Abdiravuf Aslanovich** Doctor of Physical and Mathematical Sciences
Official opponents:	**Kutliyev Uchkun Otoboevich** Doctor of Physical and Mathematical Sciences
	Usmanov Dilshodbek Tursunboevich Doctor of Physical and Mathematical Sciences
Leading organization:	**Ferghana polytechnical institute**

The defense will take place on «30» 04 2021 at 16^{00} at the meeting of the Scientific Council number DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 at Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies
(Address: 100125, Uzbekistan, Tashkent, 33 Durmon yuli street. Phone/fax: (+99871) 262-32-54, e-mail: info@iplt.uz).

The PhD dissertation is can be looked through in the Information-Resource Centre of the Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies (is registered № 2) (Address: 100125, 33,Durmon yuli str., Tashkent, Uzbekistan. Phone: (+99871) 262-31-69).

The abstract of the dissertation is sent out on «19» 04 2021.

(Mailing report № 2 on «19» 04 2021).

Kh.B.Ashurov
Chairman of scientific councilon award of scientific degrees, doctor of technical science, professor

I.D.Yadgarov
Scientific secretary of scientific council on award of scientific degrees, doctor physical and mathematical science, senior researcher

B.E.Umirzakov
Chairman of scientific seminar under scientific council on award of scientific degrees doctor of physical and mathematical science, professor

INTRODUCTION (abstract of PhD dissertation)

The aim of the research is to study processes of scattering of hydrogen and carbon atoms on carbon nanostructures (carbon nanotubes and fullerenes), processes adsorption and encapsulation scattered atoms, quantity and quality conditions of encapsulation scattered atoms by molecular dynamics methods, in accordance with modern tasks of practical interest. Obtained results has interpreted on the basis of modern experimental data.

The objectives of the research are as follows.

- investigation of the processes prevailing during the scattering of hydrogen atoms on carbon nanotubes – a single nanotube and a bundle of nanotubes (scattering, adsorption, encapsulation);
- investigation of the processes prevailing during the scattering of hydrogen, carbon atoms, carbon dimers on fullerenes – on single fullerenes, beam of free fullerenes and fullerenes on graphite surface (scattering, adsorption, encapsulation);
- investigation of quantity and quality conditions (energy and angular parameters) for adsorption and encapsulation of scaterred atoms (atoms of dimers) by carbon nanotubes and fullerenes.
- investigation of specific trajectories and prevailing processes during face scattering hydrogen atoms on carbon nanotubes, investigation of quality conditions for channeling through nanotubes.

The objects of the study are geometrical models of fullerene, carbon nanotube, bundle of carbon nanotubes, free moving fullerenes, fullerenes onto graphite surface.

The subject of the study is processes of scattering, adsorption, encapsulation, channeling scattered atoms, angular distributions of atoms scattered on carbon nanotubes and fullerenes, both free and placed on a graphite substrate, conditions for encapsulation of scattered atoms, conditions for channeling scattered atoms (though carbon nanotubes).

The scientific novelty of the research consists of the following.

- For the first time the energy range of scattered neutral particles, in which encapsulated atoms can be obtained, has been defined – 10-25ev;
- It was found that it is necessary to control the beam density of scattered atoms

(too large values of the beam density lead to local overheating of the structure and its partial destruction);

- For the first time it is found that one of the main parameters affecting the encapsulation of scattered atoms is their cohesive energy to the structure;
- For the first time it was found that process of scattering of atoms is non-elastic;
- For the first time the possibility of control for process of encapsulation of scattered atoms in carbon nanotubes (during face scattering) has been shown.

Implementation of the research results. Clarifications of the energy range of scattered neutral particles in which encapsulated atoms can be obtained (10-25eV), and account the inelastic nature of the interaction of scattered atoms with fullerenes have been used in the Project №F2-FA-F146 «Processes of cluster formation, self-assembly and self-organization of fullerenes in solutions» under Institute of ion-plasma and laser technologies, Academy of Sciences or the Republic of Uzbekistan (Reference Letter № 2/1255-1798 Academy of Sciences or the Republic of Uzbekistan, 02.09.2020). These results of the dissertation work allowed determining the localization of carbon atoms in the C_{60} fullerene molecule in one-and two-component solvents.

Results of the evaluation of impact cohesive energy of scattered atoms to encapsulation process in the structure have been used in the Project №OT-F2-53 «Quantum-dimensional effects and electronic properties of two-layer nanoscale structures created on the surface and near-surface region of films » under Tashkent state technical university (Reference Letter № 89-03-2986 Ministry of Higher and Secondary Special Education of the Republic of Uzbekistan, 28.08.2020). Usage of the results allowed to deepen the understanding of the formation of nanoscale structures on the surface of AsGa и CdS films and to assess impact of cohesive energy on localization of these structures on the surface of films.

The structure and volume of the dissertation. The dissertation consists of Introduction, four Chapters, Conclusion and Reference. The dissertation volume is 104 pages.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (Часть I, Part I)

1. D V Alyabev et al Simulation of the processes of carbon atom and nanographene interaction with a molecule of fullerene C_{60} // 2020 J. Phys.: Conf. Ser. 1686 012060 (IF 0,5)
2. Д.В. Алябьев, А.А. Джурахалов, И.Д. Ядгаров «Моделирование процессов рассеяния атомов водорода на молекулах фуллерена, адсорбированных графитовой поверхностью» //Узбекский физический журнал, №3, 2017г. [01.00.00, №5]
3. Д.В. Алябьев, А.А. Джурахалов И. Ядгаров, В.Г. Стельмах В.Г., Расулов А.М., Кулдашев О.А. Образование примесных атомов углерода и водорода на графене при низкоэнергетическом осаждении этих атомов. Научно-технический журнал ФерПИ (спецвыпуск, 2014, стр. 110-111) [05.00.00, №20].
4. Д.В. Альябев, А.А. Джурахалов И. Ядгаров, В.Г. Стельмах В.Г., Н.Ю. Тураев Влияние вакансий атомов на стабильность графена и графана. //ДАН АН РУз №5, стр. 23-24. 2014. [01.00.00, №7]
5. Алябьев Д.В. Жаббаров Х.И. Программа для задания координат углеродной нанотрубки произвольного диаметра и длины. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ, Агентство по интеллектуальной собственности Республики Узбекистан, №DGU 03420 от 02.11.2015, Ташкент (2015)

II бўлим (Часть II, Part II)

6. D. Alyabev, A.A. Dzhurakhalov «Modeling Processes of scattering of low energy hydrogen atoms onto sheaf of carbon nanotubes», ACNS'2017,13th International Conference Advanced Carbon NanoStructures Saint-Petersburg, Russia, July 3-7, 2017
7. D. Alyabev, I.D. Yadgarov,A.A. Dzhurakhalov. Processes of decollimation of the beam of fullerenes during scattering on it beam of hydrogen.//CCP 2016 XXVIII IUPAP Conference on Computation Physics, South Africa.
8. D. Alyabev, I.D. Yadgarov, and A.A. Dz hurakhalov *Mechanisms of processes of absorption and encapsulation of the hydrogen atoms scattered onto fullerenes* 27th International Conference on Atomic Collisions in Solids, ICACS2016 Lanzhou, China 24 - 29 July 2016 p175
9. D. Alyabev, I.D. Yadgarov, A.A. Dzhurakhalov. Processes of adsorption and encapsulation of hydrogen atoms during scattering them onto beam of fullerene.// AVS 63rd International Symposium and Exhibition, November 6-11, Nashville, Tennessee, USA.

10. Yadgarov, Ishmumin , Prof.Dzhurakhalov, Abdiravuf, Alyabev, Danila “Hydrogen Atoms Channeling through Carbon Nanotubes”, Channeling 2014, Capri-Naples, Italy, p.23
11. I.D. Yadgarov, A.A. Dzhurakhalov, D.V. Alyabev «Penetration of Low-energy Hydrogen Atoms into Fullerene/Nanographite Surface», ALD2015, Portland, Oregon