(10). L.B.Rao, C.K.Rao. Vibrations of a circular plate supported on a rigid concentric ring with translational restraint boundary. Engineering Transactions·January 2016, 64, 3, 259–269 pp. https://www.researchgate.net/ publication / 307902036.

(11). I.Senjanovic, N.Hadzic, N.Vladimir, D.-S. Cho. Natural vibrations of thick circular plate based on the modified Mindlin theory. Arch. Mech., 66, 6, pp. 389–409, Warszawa, 2014.

(12). Ying Meng, Xiaoye Mao, Hu Ding, Liqun Chen. Nonlinear vibrations of a composite circular plate with a rigid body. Applied mathematics and mechanics 44(6), 2023, 857–876 pp. https://doi.org/10.1007/s10483-023-3005-8.

(13). Yos Sompornjaroensuk, Patiphan Chantarawichit. Vibration of Circular plates with Mixed Edge Conditions. Part I: Review of Research. July – December 2020, vol.14, №. 2, p. 136–157.

(14). M.Y.Aiyesimi, A.A.Mohammed, S.Sadiku. A finite element analysis of the dynamic response of a thick uniform elastic circular plate subjected to an exponential blast loading. American journal of computational and applied mathematics 2011, 1(2), p. 57–62.

(15). Renu Chaudhary, Rajendra Kumar. Damped vibrations of an isotropic circular plate of parabolically varying thickness resting on elastic foundation. International journal of engineering research an technology ISSN: 2278-0181, Vol. 8, Issue 06, 2019, p. 1465–1469.

(16). Sumant Goel, Vakul Bansal, Rajendra Kumar. Damped vibrations of a linearly tapered homogeneous orthotropic circular plate. Indian J.Phys, 81 (4), 2007, pp. 477–484.

(17). S.P.Timoshenko and S.Woinowsky-Krieger, Theory of Plates and Shells, 2nd ed. New York, NY, USA: McGraw-Hill, 1959.

(18). Павловский М.А., Рыжков Л.М., Яковенко В.Б., Дусматов О.М. Нелинейные задачи динамики виброзащитных систем. К., "Техника", 1997, с. 204.

Отабоева Камола (преподаватель Ургенчского государственного университета имени Абу Райхана Беруни; e-mail: otaboyevakamola.u@gmail.com),
Мадримова Мафтунахон Адилбековна (магистрант Ургенчского государственного университета имени Абу Райхана Беруни),
Жаббарова Шахло Наримон кизи (магистрант Ургенчского государственного университета имени Абу Райхана Беруни),
Исмоилов Жалоладдин Уткир угли (студент Ургенчского государственного университета имени Абу Райхана Беруни)

АДСОРБЦИЯ И ДЕСОРБЦИЯ СЛОЯ ЛЬДА НА ПОВЕРХНОСТИ Au (111)

Аннотация. *В этой статье рассматриваются особенности адсорбции воды и формирования двумерных ледяных структур на поверхности Au(111) и их десорбция. Анализируются механизмы роста ледяного слоя, роль водородных связей и влияние кристаллографических особенностей поверхности золота на пространственную организацию молекул воды. Особое внимание уделяется экспериментальным данным, полученным методами сканирующей туннельной микроскопии, а также температурной зависимости устойчивости ледяных фаз. Показано, что поверхность Au (111) является удобной модельной системой для исследования процессов самоорганизации воды и фазовых переходов в двумерных молекулярных слоях. А также изучены десорбция пленок льда покрывающий поверхность Au (111). Получены и проанализированы масс-спектры десорбированых частиц.*

Ключевые слова: *адсорбция, десорбция, тонкие плёнки, компьютерное моделирование, молекулярная самоорганизация.*

ADSORTION AND DESORTION OF ICE LAYER ON THE Au (111) SURFACE

Annotation. *This article examines the features of water adsorption and the formation of two-dimensional ice structures on the Au (111) surface and their desorption. The mechanisms of ice layer growth, the role of hydrogen bonding, and the influence of the crystallographic properties of the gold surface on the spatial organization of water molecules are analyzed. Special attention is given to experimental data obtained using scanning tunneling microscopy, as well as to the temperature dependence of the stability of ice phases. It is shown that the Au (111) surface represents a convenient model system for studying water self-organization processes and phase transitions in two-dimensional molecular layers. The desorption of ice films covering the Au (111) surface was also studied. Mass spectra of the desorbed particles were obtained and analyzed.*

Keywords: *adsorption, desorption, thin films, computer simulation, molecular self-organization.*

Au (111) SIRTIDA MUZ QATLAMINING ADSORBSIYASI VA DESORBSIYASI

Annotatsiya. *Maqolada Au (111) sirtida suvning adsorbsiyasi va ikki o'lchamli muz tuzilmalarining hosil bo'lish xususiyatlari va ularning desobtsiyasi ko'rib chiqilgan. Muz qatlamining o'sish mexanizmlari, vodorod bog'lanishlarining roli hamda oltin sirtining kristallografik xususiyatlarining suv molekulalari-*

ning fazoviy tashkil topishiga ta'siri tahlil qilinadi. Asosiy e'tibor skanerlovchi tunnel mikroskopiyasi usullari yordamida olingan eksperimental ma'lumotlarga, shuningdek, muz fazalarining barqarorligining haroratga bog'liqligiga qaratiladi. Au (111) sirti suvning o'z-o'zini tashkil etish jarayonlari va ikki o'lchamli molekular qatlamlardagi fazaviy o'tishlarni o'rganish uchun qulay model tizim ekanligi ko'rsatildi. Shu bilan birga, Au (111) sirti qoplangan muz qatlamlarining desorbsiya o'rganildi. Desorbsiyalaangan zarrachalarning mass-spektrlari olindi va tahlil qilindi.

Kalit so'zlar: *adsorbsiya, desorbsiya, yupqa qatlam, kompyuterda modellashtirish, molekulalarning hosil bo'lishi.*

Введение. Изучение взаимодействия воды с металлическими поверхностями представляет значительный интерес для современной физики поверхности, химии и нанотехнологий. Особое внимание в последние годы уделяется процессам адсорбции и структурообразования воды на благородных металлах, в частности на поверхности золота Au (111). Формирование упорядоченных слоев льда на данной поверхности является модельной системой для исследования водородных связей, двумерных фазовых переходов и механизмов роста молекулярных пленок.

Материалы и методы. Поверхность Au(111) характеризуется высокой химической инертностью и хорошо упорядоченной кристаллической структурой, что делает ее удобной платформой для фундаментальных исследований. В условиях ультравысокого вакуума и при низких температурах молекулы воды адсорбируются на поверхности золота преимущественно за счет слабых ван-дер-ваальсовых взаимодействий. Несмотря на относительно слабое взаимодействие между водой и золотом, молекулы воды способны образовывать устойчивые двумерные структуры благодаря развитию сети водородных связей [1].

Процесс образования ледяного слоя на поверхности Au (111) начинается с адсорбции отдельных молекул воды, которые при низких температурах проявляют ограниченную подвижность. По мере увеличения покрытия поверхности происходит самоорганизация молекул в кластеры и цепочки, которые затем трансформируются в более протяженные двумерные структуры. Эти структуры часто описываются как двумерный лед, отличающийся от объемного льда своей геометрией и симметрией водородных связей.

Результаты и обсуждение. Изучение взаимодействия воды с металлическими поверхностями представляет значительный интерес для современной физики поверхности, химии и нанотехнологий. Особое внимание в последние годы уделяется процессам адсорбции и структурообразования воды на благородных металлах, в частности на поверхности золота Au (111). Формирование упорядоченных слоев льда на данной поверхности является модельной системой для исследования водородных связей, двумерных фазовых переходов и механизмов роста молекулярных пленок.

Поверхность Au (111) характеризуется высокой химической инертностью и хорошо упорядоченной кристаллической структурой, что делает ее удобной платформой для фундаментальных исследований. В условиях ультравысокого вакуума и при низких температурах молекулы воды адсорбируются на поверхности золота преимущественно за счет слабых ван-дер-ваальсовых взаимодействий. Несмотря на относительно слабое взаимодействие между водой и золотом, молекулы воды способны образовывать устойчивые двумерные структуры благодаря развитию сети водородных связей [1].

Процесс образования ледяного слоя на поверхности Au (111) начинается с адсорбции отдельных молекул воды, которые при низких температурах проявляют ограниченную подвижность. По мере увеличения покрытия поверхности происходит самоорганизация молекул в кластеры и цепочки, которые затем трансформируются в более протяженные двумерные структуры. Эти структуры часто описываются как двумерный лед, отличающийся от объемного льда своей геометрией и симметрией водородных связей [2-4].

Экспериментальные исследования с использованием сканирующей туннельной микроскопии показали, что ледяные слои на Au (111) могут формировать гексагональные и квазигексагональные структуры. При этом наблюдается наличие различных фаз, зависящих от температуры, степени покрытия и условий осаждения воды. В некоторых случаях образуются островки льда с четко выраженными границами, что свидетельствует о фазовом разделении между адсорбированным льдом и чистой поверхностью золота.

Важной особенностью ледяных слоев на Au (111) является влияние реконструкции поверхности золота. В ряде исследований показано, что ледяные структуры могут частично следовать периодичности реконструкции, что приводит к формированию анизотропных доменов и изменению локальной плотности водородных связей [5].

Образование слоя льда на поверхности Au (111) имеет не только фундаментальное, но и прикладное значение. Понимание механизмов адсорбции и структурирования воды на металлических поверхностях важно для разработки катализаторов, сенсоров, антикоррозионных покрытий и наноустройств. Кроме того, такие исследования способствуют более глубокому пониманию процессов, происходящих на границе раздела фаз в атмосферных и криогенных условиях [6].

Особый интерес представляет влияние субмонослойных покрытий на начальные стадии образования льда. В условиях низкого покрытия молекулы воды преимущественно образуют малые кластеры и линейные структуры, взаимодействие между которыми носит локальный характер[4]. Теоретические и экспериментальные исследования показывают, что ориентация дипольных моментов молекул и конфигурация водородных связей зависят от локального потенциала поверх-ности Au (111). В результате могут формироваться области с различной ориентацией молекул, что приводит к возникновению доменной структуры внутри ледяного слоя. Для исследования данного процесса нами использован метод молекулярной динамики. Молекулярная динамика (МД) – это техни-ка компьютерного моделирования, позволяющая проследить эволюцию системы взаимодействую-щих атомов во времени с помощью интегрирования уравнений движения. Несомненным преиму-ществом метода МД является возможность моделирования системы при заданной температуре или при заданных скоростях атомов (ионов) с достаточно высокой скоростью расчета. Следует отме-тить, что потенциалы взаимодействия имеют одно из основных мест при моделировании процесса взаимодействия ион-атом [7;10 с.].

Нами получены масс-спектры распыленных частиц при бомбардировке ионами Ar^+ с E_0=400 эВ и 700 эВ поверхности Au(111), покрытой двумя слоями пленки воды(рис.1). В масс-спектре наблюдается несколько отчетливых пиков, соответствующих молекулам и кластерам воды, и в том числе также атомам золота. Первый пик относится к молекулам воды, и он является самым интенсивным, так как именно здесь в процессе бомбардировки наблюдается более интенсивное распыление молекул пленки.

Следующий пик относится к молекулярным кластерам, которые содержат в своём составе две молекулы воды. Структура этих кластеров является более устойчивой, и они сохраняют свои водородные связи.

Самый последний пик в масс-спектре наблюдается при распылении атомов золота. Атомы золота, расположенные на верхних слоях подложки, выбиваются падающими ионами. Интенсивность этого пика зависит от числа падающих частиц. Чем больше число падающих частиц, тем интенсивнее наблюдается рост пика. Прежде всего, это объясняется тем, что падающие частицы распыляют пленку, и вероятность столкновения иона с атомами подложки увеличивается. Теперь рассмотрим вышеуказанную систему с начальной энергией иона равной E_0=700 эВ.

В этом случае также, как и в предыдущем случае самый интенсивный пик относится к молекулам воды. На масс-спектре также наблюдаются несколько пиков молекулярных кластеров, в том числе пики атомов золота.

Наши расчеты показали, что в этом случае молекулярные кластеры содержат два, три, пять и восемь молекул воды. Следует отметить, что молекулярные кластеры, которые состоят из пяти и двух молекул воды, имеют более отчетливую интенсивность.

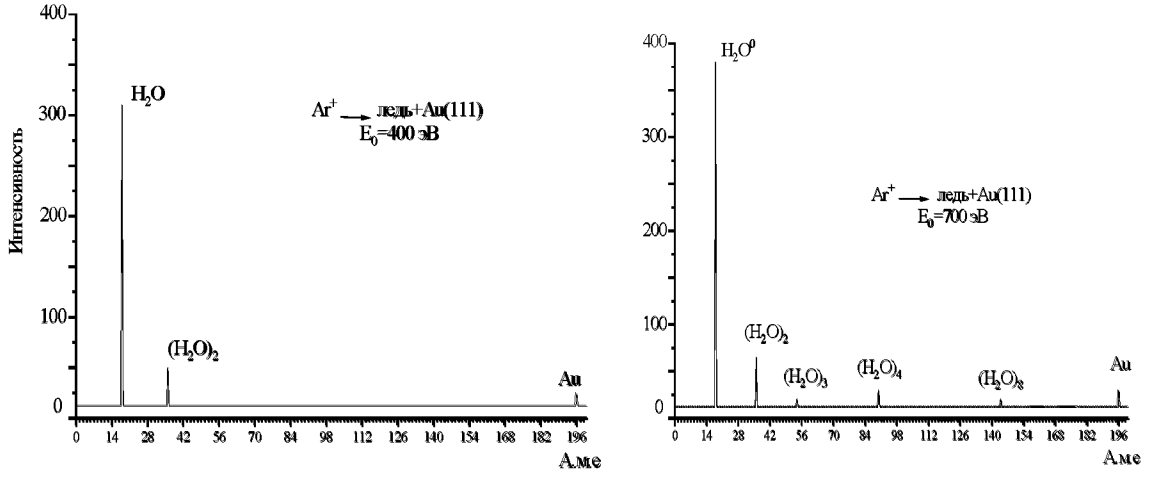


Рис. 1. Масс-спектры распыленных частиц при бомбардировке ионами Ar^+ с E_0=400 эВ и 700 эВ поверхности Au (111) покрытой двумя слоями пленки воды.

В совокупности рассмотренные аспекты показывают, что образование слоя льда на поверхности Au (111) является многофакторным процессом, зависящим не только от природы адсорбата и подложки, но и от кинетики, структуры поверхности и внешних условий. Такое комплексное понимание процессов адсорбции и самоорганизации воды расширяет возможности контроля молекулярных систем на наноуровне и способствует развитию современной физики поверхности.

Заключение. Образование слоя льда на поверхности Au (111) представляет собой сложный физико-химический процесс, определяемый взаимодействием молекул воды между собой и с металлической подложкой. Несмотря на химическую инертность золота, молекулы воды способны формировать устойчивые и упорядоченные двумерные структуры за счет развития сети водородных связей. Экспериментальные исследования показывают, что геометрия и стабильность ледяных слоев зависят от температуры, степени покрытия и особенностей реконструкции поверхности Au (111). А также изучены десорбции молекул воды при малоэнергетической ионной бомбардировке и показаны механизмы десорбции их от поверхности. Полученные результаты имеют важное значение для фундаментального понимания процессов адсорбции и фазовых переходов в низкоразмерных системах, а также могут быть использованы при разработке функциональных поверхностей и наноструктурированных материалов.

Список использованной литературы:

(1). Verdaguer A., Sacha G.M., Bluhm H., Salmeron M. Molecular structure of water at interfaces: Wetting at the nanometer scale. Chemical Reviews. 2016, vol. 106, № 4, p. 1478–1510.

(2). Michaelides A., Morgenstern K. Ice nanoclusters at hydrophobic metal surfaces. Nature Materials, 2017, vol. 6, p. 597–601.

(3). Morgenstern K., Michely T., Comsa G. Scanning tunneling microscopy studies of ice formation on metal surfaces. Surface Science. 2012, vol. 497, p. 1–13.

(4). Thürmer K., Bartelt N.C. Growth dynamics of ice on Pt (111). A molecular view. Physical Review B. 2018, vol. 77, 195425.

(5). W.Ekstein. “Computer simulation of ion-solid collision”. Springer-Verlag, p. 341–348, 1991.

(6). Евдокимов И.Н. “Взаимосвязь эффектов рассеяния и распыления при ионной бомбардировке поверхности кристаллов”, Поверхность, №8. с. 31–38, 1988.

(7). Курнаев В.А., Машкова Е.С., Молчанов В.М. “Отражения легких ионов от поверхности твердого тела”, Москва, 1985, с. 192.

(8). “Sputtering by Particle Bombardment II”. Ed.by R. Behrisch. Berlin–Heidelberg–New York–Tokyo: Springer–Verlag, 1983.

(9).Frenkel D., Smit B. “Understanding molecular simulation”. Academic Press. Amsterdam, 2001, ISBN 0-12-267351-4.

(10). Schlick T. “Molecular modeling and simulation”. Springer. Amsterdam, 2002. ISBN 0-387-95404-X.

Kurbanov Davron Shavkatovich (Urgench State University named after Abu Rayhon Beruni, senior lecturer; davronkurbanow89@gmail.com),
Yakubov Komlijon Ruzmetovich (Urgench State University named after Abu Rayhon Beruni, associate professor),
Bazarbayev Rustam Bahrambayevich (Urgench State University named after Abu Rayhon Beruni, PhD, associate professor),
Rakhimboyev Rakhmatjon Shavkat oglu (PhD student, Urgench State University named after Abu Rayhon Beruni)

IMPACT OF Fe DOPING ON THE ELECTRONIC STRUCTURE OF KAOLINITE

Annotation. *Hybrid functional density functional theory calculations were employed to investigate the effect of iron (Fe) doping on the electronic properties of kaolinite ($Al_2Si_2O_9H_4$). The results show that pristine kaolinite has a wide band gap of 6.24 eV, which significantly decreases to 2.8 eV when Fe is introduced at a concentration of 25% relative to silicon atoms (2.94% of total atoms). Density of states analysis reveals that Fe d-orbitals are primarily responsible for the band gap reduction. Bader charge and electron localization analyses indicate a decrease in electron density around oxygen atoms bonded to iron. As a result, Fe doping induces semiconducting behavior and enhances photosensitivity, suggesting potential applications in solar energy conversion, photocatalysis, and sensor technologies.*

Key words: *Kaolin, DFT, VASP, PBE, GGA, PAW, HSE06*

KAOLIN ELEKTRON TUZILISHIGA Fe KIRITMASINING TA’SIRI

Annotatsiya*. Ushbu ishda gibrid funksional zichlik funksional nazariyasi asosida temir (Fe) dopingi kaolinit ($Al_2Si_2O_9H_4$)ning elektron xususiyatlariga ta’siri o‘rganildi. Sof kaolinitning tarmoqli oralig‘i 6.24 eV bo‘lib, Fe dopingi 25% (Si atomlariga nisbatan) kiritilganda u 2.8 eVgacha kamayadi. Holatlar zichligi tahlili tarmoqli oralig‘ining qisqarishida Fe ning d-orbitallari asosiy rol o‘ynashini ko‘rsatdi. Bader zar-*