Muminova Shaxnozaxon Akbarxanovna (Denov Tadbirkorlik va pedagogika instituti dotsenti),
Mirzayev Zafarbek Haitboy o‘g‘li (Denov Tadbirkorlik va pedagogika instituti talabasi),
Yadgarov Ishmumin Djabbarovich (FA Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti professori),
Kutliyev Uchqun Otaboyevich (Urganch davlat universiteti professori),
O‘ljayev O‘tkir Boymamatovich (Denov Tadbirkorlik va pedagogika instituti dotsenti);
e-mail: utkir.uljaev@outlook.com)

AZOT QO‘SHILGAN UGLERODLI NANOTRUBKALARNING MEXANIK XUSUSIYATLARIGA HARORATNING TA’SIRI

Annotatsiya. *Ushbu ishda uglerodli nanotrubkalarga kiritilgan azot atomlarining turli haroratlar ta’sirida mexanik xususiyatlarining o‘zgarishi molekulyar dinamika usuli yordamida tadqiq qilindi. Hisoblashlar natijasida harorat ortishi bilan Yung moduli, maksimal kuchlanish va deformatsiya xususiyatlarining o‘zgarishi aniqlandi.*

Kalit so‘zlar: *uglerodli nanotrubka, molekular dinamika, Yung moduli.*

Муминова Шахнозахон Акбархановна (доцент Деновского института предпринимательства и педагогики),
Мирзаев Зафарбек Хайтбой угли (студент Деновского института предпринимательства и педагогики),
Ядгаров Ишмумин Джаббарович (профессор Института ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз),
Кутлиев Учкун Отабоевич (профессор Ургенчского государственного университета),
Улжаев Уткир Боймаматевич (доцент Деновского института предпринимательства и педагогики)

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЗОТ-ДОПИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Аннотация. *В данном исследовании с использованием метода молекулярной динамики изучены изменения механических свойств азот-допированных углеродных нанотрубок при различных температурных условиях. Результаты расчетов показали, что с увеличением температуры наблюдаются изменения модуля Юнга, максимального напряжения и деформационного поведения.*

Ключевые слова: *углеродные нанотрубки, молекулярная динамика, модуль Юнга.*

Muminova Shaxnozaxon Akbarkhanovna (Associate Professor, Denau Institute of Entrepreneurship and Pedagogy),
Mirzayev Zafarbek Haitboy o‘g‘li (Student, Denau Institute of Entrepreneurship and Pedagogy),
Yadgarov Ishmumin Djabbarovich (Professor, Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan),
Kutliev Uchkun Otaboyevich (Professor, Urgench State University),
Uljayev Utkir Boymamatovich (Associate Professor, Denau Institute of Entrepreneurship and Pedagogy)

INFLUENCE OF TEMPERATURE ON MECHANICAL PROPERTIES OF NITROGEN DOPED CARBON NANOTUBES

Annotation. *In this study, the changes in the mechanical properties of nitrogen-doped carbon nanotubes under different temperature conditions were investigated using the molecular dynamics method. The calculations revealed that with increasing temperature, variations in Young‘s modulus, maximum stress, and deformation behavior were observed.*

Keywords: *Carbon nanotube, molecular dynamics, Young‘s modulus.*

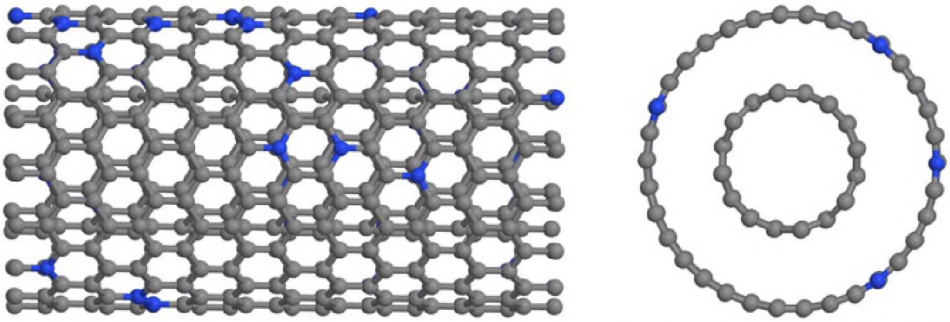
Kirish. Nanotexnologiya va materialshunoslik sohalarining rivojlanishi bevosita uglerod nanotrubka (UNT) larining noyob elektr, mexanik hamda termik parametrlari bilan bog‘liqdir. So‘nggi yigirma yillikda UNT tarkibini atom darajasida modifikatsiyalash, xususan, ularni azot atomlari bilan legirlash orqali materialning elektron va mexanik xususiyatlarini maqsadli boshqarish samarali uslubga aylandi [1]. Xususan, azot (N) atomlarining kiritilishi UNT kristall panjarasida strukturaviy nuqsonlarni yuzaga keltirib, atomlararo bog‘lanishlar topologiyasi hamda tizim barqarorligini jiddiy ravishda o‘zgartiradi. Zamonaviy izlanishlardan ma’lumki, N atomlarini legirlash orqali UNTlarning mexanik xususiyati o‘zgaradi, ya’ni, ideal silindrik shakldan qisman tartibsizlangan va o‘ziga xos deformatsiyaga moyil konfiguratsiyalar shakllanadi [2]. Jumladan, eksperimental va modellashtirish hisoblashlari shuni ko‘rsatadiki, legirlovchi element miqdorining ortishi materialning sof tuzilmalariga nisbatan tezroq egilishi, bukilishi va yemirilishiga sabab bo‘ladi [3]. Mazkur jarayonlar o‘rganilganda, N atomlari o‘ziga xos sochilish markazlarini hosil qilib, atomlar harakatchanligini oshirishi va tizimning kristallik darajasini pasaytirishi, bu esa mexanik turg‘ulikning pa-

sayishiga olib kelishi mumkin. Undan tashqari, N bilan legirlangan UNT tizimlarining mexanik tabiati bir qator eksperimental va ab-initio kvant-kimyoviy usullar yordamida tahlil qilingan. Xususan, zichlik funksionali nazariyasi (DFT) hamda MD usullarini birgalikda qo'llash orqali olingan natijalar shuni ko'rsatdiki, (6,1) indeksli bir qavatli UNT (BQUNT) tarkibidagi bitta azot qo'shilsa ham materialning cho'zilish mustahkamligini sof holatga qaraganda 55%gacha oshirishi mumkin. Biroq materialning Yung moduli turli konsentratsiyalarda deyarli barqaror qolgani aniqlangan [4]. Bu holat N li modifikatsiyaning ma'lum sharoitlarda material qattiqligini saqlagan holda uning cho'zilishga chidamliligini oshira olishidan dalolat beradi.

Polimer nanokompozitlar tarkibiga kiritilgan ko'p devorli azotlangan UNTlar ustida o'tkazilgan tajribalar ham ushbu mexanik o'sishni tasdiqladi. Plazma yordamida ishlov berilgan va azot bilan boyitilgan UNTlar sof UNTli tizimlarga qaraganda yuqoriroq issiqlik o'tkazuvchanlik hamda cho'zilish chegarasiga ega nanokompozitlar olindi. Bunda piroliz va piridin guruhlari kabi azot dopantlarining tipi va ulushi material xossalariga bevosita ta'sir ko'rsatdi. MD simulatsiyalari ham muayyan turdagi azot nuqsonlari tizimning mexanik va termik parametrlarini yaxshilashini tasdiqladi [5]. Shunga qaramay, yuqori konsentratsiyalarda va muvozanatsiz deformatsiya sharoitlarida kiritma konfiguratsiyasi, nuqson tuzilishi va mexanik xususiyat o'rtasidagi fundamental bog'liklar hali to'liq yoritilmagan.

Ushbu ishda molekulyar dinamika (MD) usuli yordamida N atomlari konsentratsiyasining UNT mexanik barqarorligiga va strukturaviy o'zgarishlariga ta'siri tizimli ravishda o'rganildi.

Hisoblash tafsilotlari. Ushbu tadqiqitda N atomlari kiritilgan ikki qavatli UNT (IQUNT) larning harorat ta'sirida mexanik xususiyatlarining o'zgarishi MD modellashtirish usuli orqali LAMMPS dasturlash paketi yordamida tahlil qilindi [6]. N-C, C-C va N-N atomlararo o'zaro ta'sir reaktiv ta'sir potensiali (ReaxFF) yordamida tavsiflandi. Model sifatida (8,0)@(17,0) xirallikdagi IQUNT tanlab olingan bo'lib, bunda sof (0%) (N_0-IQUNT(8,0)@(17,0)) va turli xil (1% dan 10% gacha) foizda N kiritilgan IQUNT (N_n-IQUNT(8,0)@(17,0)lar hosil qilindi [7] (1-rasm). 600 ta uglerod (C) atomidan tashkil topgan IQUNTning ichki va tashqi diametrlari, mos ravishda, 6.37 Å va 13.57 Å, uzunligi 29.76 Å ga teng va z o'qi bo'ylab davriy shartlar qo'llanildi. N-IQUNT (8,0) @ (17,0)ga tasodifiy ravishda 0÷10% oralig'ida N atomlari kiritilgan.



1-rasm. N-IQUNT (8,0) @ (17,0) model tizimining yon va yuqoridan ko'rinishlari. Uglerod (C) va azot (N) atomlari, mos ravishda, kulrang va ko'k ranglarda ko'rsatilgan.

Har bir konfiguratsiya mexanik barqarorlikka erishish uchun konjugat gradient algoritmi yordamida energiyasi minimallashtirildi. Shundan so'ng barcha tizimlar Berendsen termo-barostati (NpT) yordamida 300 Kdan 1500 K harorat oralig'igacha 1 K/ps qizdirish tezligi bilan qizdirildi [8]. Qizdirilgan struktura Bussi termostati (NVT) yordamida 200 ps davomida ushbu haroratlarda ushlab turildi.

Sof IQUNT sirtlaridagi azot kiritilgan joylarining nisbiy konsentratsiyasini (%) quyidagi formula yordamida hisoblandi:

$$\rho = \frac{\text{number of doping boron atoms } (N_N)}{\text{total atoms in a pristine DWNT } (N_C)} * 100\% \qquad (1)$$

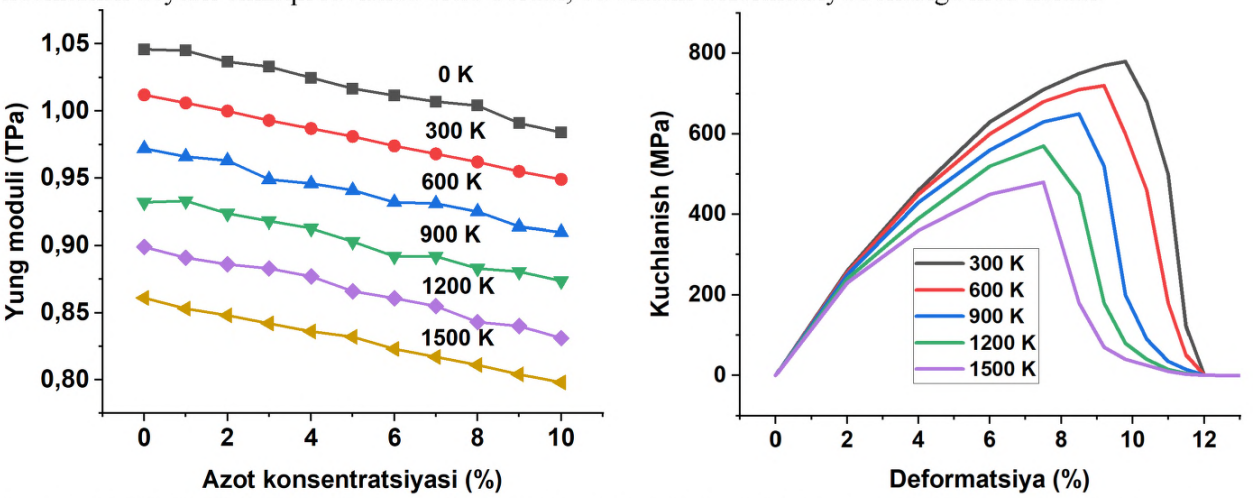
bu yerda: N_N – kiritilgan azot (N) atomlari soni, N_C – uglerod (C) atomlari sonini bildiradi. Barcha simulatsiyalarda atomlararo o'zaro ta'sirlarni aniq tasvirlash uchun MD vaqt qadamini 0.1 fs qilib belgilandi. Har bir tadqiqot holati uchun simulatsiyalar 5 marta bajarildi va natijalar tegishli fizik kattaliklarning o'rtacha qiymati orqali olindi.

Natijalar va muhokama. UNTlar yuqori mustahkamlik va elastiklikka ega bo'lgan nanomateriallar hisoblanadi. Ularning mexanik xususiyatlari, jumladan Yung moduli, maksimal kuchlanish va deformatsiyaga chidamliligi harorat hamda kiritilgan atomlar darajasiga sezilarli darajada bog'liq. N atomlari C atomlari o'rnini egallashi natijasida UNT panjarasida lokal nuqsonlar hosil bo'ladi. C–N bog'ining C–C

bog‘iga nisbatan uzunroq bo‘lishi panjaraning ideal simmetriyasini buzadi va mexanik xususiyatlarning pasayishiga olib keladi [9].

2-rasmda (chap tomon) N_n-IQUNT (8,0) @ (17,0) tizimining Yung moduli N atomlarining konsentratsiyasi va haroratga bog‘liqligi keltirilgan. Natijalar barcha haroratlarda azot konsentratsiyasining ortishi, Yung moduli qiymatining kamayishiga olib kelishini ko‘rsatadi. Toza IQUNT uchun 0 Kda Yung moduli taxminan, 1.05 TPa ni tashkil etsa, N konsentratsiyasi 10%gacha oshirilganda u 0.98 TPa gacha kamayadi. Xuddi, shuningdek, harorat 1500 K gacha oshirilganda Yung moduli barcha legirlash darajalarida muntazam pasayib, toza IQUNTda 0.86 TPa, 10% azot legirlanishida esa, taxminan, 0.80 TPa.ni tashkil etadi. Bu natijalar harorat va azot legirlangan nanotubkaning elastik qattiqligini birgalikda kamaytirishini ko‘rsatadi.

2-rasmda (o‘ng tomon) N-IQUNT(8,0)@(17,0) nanotubkasining turli haroratlardagi kuchlanish-deformatsiya bog‘lanishlari keltirilgan. Grafiklardan ko‘rinadiki, deformatsiyaning dastlabki bosqichida kuchlanish deyarli chiziqli ravishda ortib boradi, bu elastik deformatsiya sohasiga mos keladi.



2-rasm. N-IQUNT(8,0)@(17,0) nanotrubkasida Yung modulining kiritilgan azot konsentratsiyasi va haroratga bog‘liqligi (chap tomon), N-IQUNT(8,0)@(17,0)ning turli haroratlardagi kuchlanish-deformatsiya bog‘lanishi (o‘ng tomon).

Deformatsiya ortishi bilan kuchlanish maksimal qiymatga erishadi va undan keyin IQUNTning buzilish jarayoni boshlanadi. Eng katta maksimal kuchlanish 300 Kda kuzatilib, taxminan, 780 MPa.ni tashkil etadi. Harorat oshishi bilan maksimal kuchlanish hamda unga mos deformatsiya qiymati bosqichma-bosqich kamayadi. Buning asosiy sababi atomlarning issiqlik tebranishlari kuchayishi natijasida atomlararo bog‘lanishlarning zaiflashishi va strukturaviy nuqsonlarning faollashishidir. Ayniqsa, 1200–1500 K haroratlarda maksimal kuchlanishdan keyin egri chiziqlarning keskin pasayishi IQUNTning buzilishi tezlashishini ko‘rsatadi. Bundan tashqari, harorat ortishi IQUNTning energiyani yutish qobiliyatini ham kamaytiradi. Kuchlanish-deformatsiya egri chizig‘i ostidagi yuzaning kichrayishi yuqori haroratlarda mexanik barqarorlik va zarbaga chidamlilikning pasayishini bildiradi.

Umuman olganda, olingan natijalar N konsentratsiyasi hamda haroratning ko‘tarilishi N-IQUNT (8,0) @ (17,0)ning Yung moduli, maksimal kuchlanishi va deformatsiyaga qarshiligini muntazam ravishda kamaytirishini ko‘rsatdi. Shunday qilib, N bilan modifikatsiyalangan IQUNTlarni nanoelektronika, nanosensorlar va nanokompozit materiallarda samarali qo‘llash uchun N kiritishning optimal darajasini tanlash hamda ularning ishchi harorat diapazonini hisobga olish muhim hisoblanadi.

Xulosa. Molekular dinamika hisoblashlari natijasida azot konsentratsiyasi va temperaturaning ortishi N-IQUNT(8,0)@(17,0) nanotubkasining Yung moduli, maksimal kuchlanishi hamda deformatsiyaga chidamliligini kamaytirishi aniqlandi. Olingan natijalar azot kiritilish darajasi va ishchi temperatura diapazonini optimallashtirish nanotubkalarning mexanik barqarorligini saqlashda muhim omil ekanligini ko‘rsatdi.

Minnatdorchilik. Modellashtirishlar Denov Tadbirkorlik va pedagogika instituti qoshidagi “Fizik ja-rayonlarni modellashtirish” ilmiy laboratoriyasida joylashgan yuqori unumdor hisoblash kompyuterlarida amalga oshirildi.

Foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxati:

[1]. T.Ren, K.Wang, X.Lian, C.Xu, H.Niu, Nitrogen-doped carbon nanotubes on carbon nanofibers for applications as supercapacitors with long lifetimes, ACS Appl. Nano Mater. 8 (22) (2025), 11359-11369.

[2]. A.L.Mihalchik, et al., Toxicology 333 (2015), p. 25–36.

[3] Y.Singh, P.Patra, K.Obodo, D.Rai, J.Mol. Graph. Model. 111 (2022), 108111.

[4] H.Jung, H.K.Choi, Y.Oh, H.Hong, J.Yu, Sci.Rep. 10 (1) (2020), 405.
[5]. Thompson A., Aktulga H.M., Berger R., et al (2021), Comput Phys Commun 271:108171.
[6]. Eatemadi A., Daraee H., Karimkhanloo H., et al (2014). Nanoscale Res Lett 9:393.
[7]. Herman J.C Berendsen et al (1984), The Journal of Chemical Physics, 81:3684.
[8]. Hong-Lae Park et al (2008), Jpn. J.Appl. Phys, 47 5062.
[9]. U.Uljayev, et al, (2024), Mod. Electron. Mater. 10, 3.

Atanazarova Shoira Erkinovna (O‘zFA V.I.Romanovskiy nomidagi Matematika instituti kichik ilmiy xodimi; atanazarova94@gmail.com)

MOSLANGAN MANBALI MANFIY TARTIBLI MODIFITSIRLANGAN KORTEVEG-DE FRIZ TENGLAMASINING BIR SOLITONLI YECHIMI

Annotatsiya. *Mazkur maqolada moslangan manbali manfiy tartibli modifitsirlangan Korteveg-de Friz (KdF) tenglamasining bir solitonli yechimi "tez kamayuvchi" funksiyalar sinfida sochilish nazarisining teskari masalasi usuli yordamida qurilgan.*

Kalit so‘zlar: *potensial, xos qiymat, xos funksiya, tez kamayuvchi funksiya, operator.*

Атаназарова Шоира Эркиновна (Младший научный сотрудник Института математики имени В.И.Романовского АНРУз.; atanazarova94@gmail.com)

ОДНОСОЛИТОННОЕ РЕШЕНИЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО УРАВНЕНИЯ КОРТЕВЕГА–ДЕ ФРИЗА ОТРИЦАТЕЛЬНОГО ПОРЯДКА С САМОСОГЛАСОВАННЫМ ИСТОЧНИКОМ

Аннотация. *В данной статье методом обратной задачи рассеяния построено односолитонное решение модифицированного уравнения Кортевега–де Фриза (мКдФ) отрицательного порядка с самосогласованным источником в классе быстро убывающих функций.*

Ключевые слова: *потенциал, собственное значение, собственная функция, быстроубывающая функция, оператор.*

Atanazarova Shoira Erkinovna (Junior researcher of the Institute of Mathematics Uzbekistan Academy of science; atanazarova94@gmail.com)

ONE-SOLITON SOLUTION OF THE NEGATIVE-ORDER MODIFIED KORTEWEG–DE VRIES EQUATION WITH A SELF-CONSISTENT SOURCE

Annotation. *In this paper, a one-soliton solution of the negative-order modified Korteweg–de Vries (mKdV) equation with a self-consistent source is constructed in the class of rapidly decreasing functions using the inverse scattering transform method.*

Key-words: *potential, eigenvalue, eigenfunction, rapidly decreasing function, operator.*

Kirish. Manfiy tartibli integrallanuvchi sistemalar sayoz suv to‘lqinlarining sinishi va cho‘qqisimon tuzilishga ega bo‘lgan shakllarini modellashtirishda muhim o‘rin tutadi. Shuningdek, ular nosilliq to‘lqin shakllarini tavsiflash imkonini berib, nochiziqli akustika hamda bosim to‘lqinlari dinamikasidagi jarayonlarni o‘rganishda samarali qo‘llaniladi. Xususan, manfiy tartibli modifitsirlangan Korteveg–de Friz (mKdF) tenglamasi ichki to‘lqinlar dinamikasi, nochiziqli panjara tebranishlari va magnitogidrodinamik jarayonlarni modellashtirishda, ayniqsa, energiyaning lokal to‘planishi, nochiziqli fokuslanish yoki anomal dispersiya ustunlik qiladigan rejimlarni tadqiq etishda yuzaga keladi. Mazkur tenglama, odatda, nolokal xarakterga ega bo‘lib, uning xossalari musbat tartibli analoglaridan sifat jihatidan sezilarli darajada farq qiladi. Jumladan, bunday tenglamalar nochiziqli dispersiya va to‘lqinlarning sinishi kabi hodisalarni namoyon qilishi mumkin. Shunga qaramay, manfiy tartibli mKdF tenglamasi o‘zining integrallanuvchanlik xususiyatini saqlab qoladi hamda Laks juftligi ko‘rinishidagi tasvirga ega bo‘ladi.

Nochiziqli evolyutsion tenglamaning integrallanuvchanligi solitonsimon yechimlarning mavjudligi hamda ularga sochilish nazariyasining teskari masalasi usulini qo‘llash mumkinligi bilan tavsiflanadi. Ushbu usul ayrim nochiziqli xususiy hosilali differensial tenglamalarni ularga mos chiziqli spektral sochilish nazariyasi masalasiga keltirish orqali aniq integrallash imkonini beradi.

Adabiyotlar tahlili. Sochilish nazariyasining teskari masalasi usuli dastlab K.S.Gardner, J.M. Greene, M.D.Kruskal va R.M.Miura [1], V.E.Zaxarov va A.B.Shabat [2], M.J.Ablowitz, D.J.Kaup, A.C. Nyuel va H.Segur [3]larning fundamental ishlarida matematik fizikaning nochiziqli klassik modellariga nisbatan ishlab chiqilgan. [4–5] ishlarda esa teskari sochilish usulining muhim fizik jarayon va hodisalarni matematik modellashtirishda uchraydigan keng sinfdagi klassik nochiziqli evolutsion tenglamalarga tatbiq etishdagi samaradorligi va universalligi yanada yaqqol namoyon etilgan.