band gap 1,01 eV (x=0)dan 1,67 eV (x=1) gacha oshadi. Temperatura ta'siri natijasida 200–400 K diapazonda band gap qiymati o'rtacha 0,05–0,08 eV ga kamayadi. Masalan, x=0,3 holatda E_9 qiymati 1,22 eV (200 K)dan 1,16 eV (400 K)gacha kamayadi. Ushbu natijalar CIGS materialida galliy tarkibini o'zgartirish orqali band gap energiyasini 1,0–1,7 eV diapazonda boshqarish mumkinligini ko'rsatadi, bu esa yuqori samaradorlikka ega quyosh elementlarini loyihalashda muhim ahamiyatga ega.

Foydalanilgan adabiyotlar ro'yxati:

(1). Kim K.-B., Kim M., Lee H.-C., Park S.-W., & Jeon C.-W. (2017). Materials Research Bulletin, 85, p. 168–175. https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2016.09.018

(2). Zhou J., & Lia C. (2021). E3S Web of Conferences, 267, 02031. https://doi.org/10.1051/e3sconf/ 2021 26702031

(3). Kumar V., Prasad R., Chaure N.B., Singh U.P. (2022). Advances in Sustainability Science and Technology. Springer, https://doi.org/10.1007/978-981-19-3724-82

(4). Pianezzi F., Chirilă A., Blösch P., Seyrling S., Buecheler S., Kranz L., Fella C., & Tiwari A.N. (2012). Progress in Photovoltaics: Research and Applications, 20(3), p. 253–259. https://doi.org/10.1002/pip.1247

(5). Tang Y. (2017)., Nanostructured Solar Cells. IntechOpen. https://doi.org/10.5772/65291

(6). Li W., Chen L., Wang D., Liang B., Shao X., Sun Y., & Yang C. (2025)., Materials Futures, 4(4), 045105. https: //doi.org/10.1088/2752-5724/ae0ce4.

(7). Zeboudj H., & Hadri B. (2025). Physica Scripta, 100(11), 115918. https://doi.org/10.1088/1402-4896/ae 1900.

Qarshiyeva Adiba Chorshambiyevna (Denov Tadbirkorlik va pedagogika instituti talabasi),
Razzokov Alijon Shonazarovich (Urganch davlat universiteti professori),
Omonqulova Umida Husan qizi (Denov Tadbirkorlik va pedagogika instituti o'qituvchisi),
O'ljayev O'tkir Boymamatovich (Denov tadbirkorlik va pedagogika instituti dotsenti;
e-mail: utkir.uljaev@outlook.com)

GRAFENDAGI STRUKTURAVIY NUQSONLARNING VODOROD ADSORBSIYASIGA TA'SIRI

Annotatsiya. *Ushbu ishda nuqsonli grafenlarda H_2 molekulalarining fizisorbsiyasi reaktiv molekular dinamika usuli bilan o'rganildi. Nuqsonlar o'lchami va konsentratsiyasi ortishi qismiy zaryadlar qayta taqsimlanishi hisobiga adsorbsiyani kuchaytirishi, shuningdek, eng yuqori nuqson ulushida gravimetrik zichlik 2,16 wt.%ga yetdi.*

Kalit so'zlar: *vodorod saqlash, nuqsonli grafen, vodorod fizisorbsiyasi, reaktiv molekulyar dinamika.*

Каршиева Адиба Чоршамбиевна (студентка, Деновский институт предпринимательства и педагогики).
Раззоков Алижон Шоназарович (профессор Ургенчского государственного университета),
Омонкулова Умида Хусан кизи (преподаватель, Деновский институт предпринимательства и педагогики),
Улжаев Уткир Боймаматович (доцент, Деновский институт предпринимательства и педагогики).

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ ГРАФЕНА НА АДСОРБЦИЮ ВОДОРОДА

Аннотация. *В работе методом реактивной молекулярной динамики исследована физическая адсорбция молекул H_2 на дефектном графене. Показано, что увеличение размера и концентрации дефектов усиливает адсорбцию за счёт перераспределения частичных зарядов. При максимальной доле дефектов гравиметрическая плотность достигла 2,16 wt.%.*

Ключевые слова: *хранение водорода, дефектный графен, физическая адсорбция водорода, реактивная молекулярная динамика.*

Karshiyeva Adiba Chorshambiyevna (Student, Denov Institute of Entrepreneurship and Pedagogy).
Razzokov Alijon Shonazarovich (Professor of Urgench State University,
Omonqulova Umida Husan qizi (Teacher, Denov Institute of Entrepreneurship and Pedagogy),
Uljayev Utkir Boymamatovich (Associate Professor of the Denov Institute of Entrepreneurship and Pedagogy)

EFFECT OF STRUCTURAL DEFECTS IN GRAPHENE ON HYDROGEN ADSORPTION

Annotation. *In this work, the physisorption of H_2 molecules on defective graphene was studied using reactive molecular dynamics. The results show that increasing the size and concentration of defects enhances adsorption through the redistribution of partial charges. At the highest defect fraction, the gravimetric density reached 2.16 wt.%.*

Keywords: *hydrogen storage, defective graphene, hydrogen physisorption, reactive molecular dynamics.*

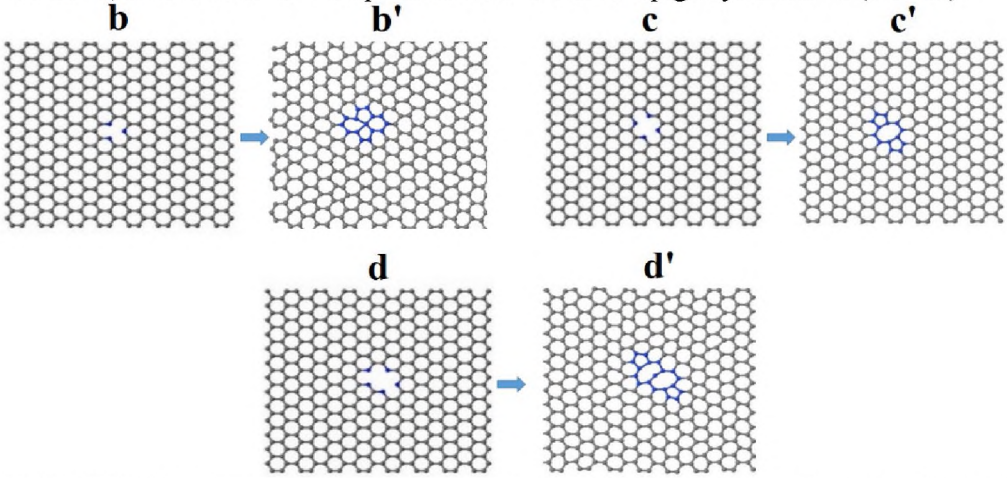
Kirish. So‘nggi yillarda dunyo miqyosida energiya ehtiyoji keskin ortib bormoqda. Sanoat, transport va aholi ehtiyojlari hanuzgacha asosan qazilma yoqilg‘ilar hisobiga qoplanmoqda, bu esa issiqxona gazlari ajralishini kuchaytirib, global iqlim o‘zgarishiga sabab bo‘lmoqda [1]. Shu bois ekologik xavfsiz va qayta tiklanuvchi energiya manbalariga, xususan, bioyoqilg‘i, quyosh energiyasi va vodorodga e’tibor oshmoqda. Vodorod (H_2) ekologik toza, zaharsiz va tabiatda keng tarqalganligi sababli “yashil” yoqilg‘i sifatida istiqbolli hisoblanadi. U yonilg‘i elementlari, elektronika va farmatsevtika sohalarida barqaror energiya manbayi sifatida qo‘llanilishi mumkin [1,2].

Vodorodni samarali saqlash uchun materiallar yengil, mexanik jihatdan barqaror, sintezi oson va iqtisodiy jihatdan samarali bo‘lishi, shuningdek, tezkor adsorbsiya–desorbsiya jarayonlarini ta’minlashi zarur. Vodorod asosan siqilgan gaz, kriogen suyuqlik va qattiq holatda saqlanadi; qattiq holatda saqlash nanomateriallar orqali hajmni kamaytiradi va energiya sarfini kamaytiradi, shu bois xavfsiz va tejamkor hisoblanadi [3]. So‘nggi tadqiqotlar metall va murakkab gidridlar, uglerod nanostrukturalarini vodorod saqlash materiali sifatida o‘rganmoqda. Grafen ikki o‘lchamli olti burchakli panjaraga ega bo‘lib, yuqori mexanik, kimyoviy va issiqlik xossalariga ega. Vodorod atomlari va molekulalari grafen qatlamining ikkala tomonida adsorbsiyalanishi mumkin, ammo xona haroratida samaradorlik yetarli emas [4].

Nazariy va amaliy tadqiqotlar shuni ko‘rsatadiki, grafenga turli nuqsonlar kiritish uning kimyoviy faolligini oshiradi va vodorod adsorbsiyasini kuchaytiradi [5]. Ushbu ishda nuqsonsiz hamda turli nuqsonli nuqsonga ega grafenlarda vodorod (H_2) adsorbsiyasining mexanizmlari va nuqsonlar konfiguratsiyasining adsorbsiyaga ta’siri o‘rganildi.

Hisoblash tafsilotlari. Ushbu ishda LAMMPS dasturiy paketidan foydalanib, H_2 molekulalarining turli grafen sirtlarida, jumladan, nuqsonsiz va nuqsonli sirtlarda adsorbsiya jarayonlarini simulatsiya qilish uchun reaktiv molekular dinamika (MD) simulyatsiyalarini amalga oshirildi va ReaxFF potensiali qo‘llanildi [6]. Model tizimlari sifatida biz turli grafen tuzilmalaridan, ya’ni, nuqsonsiz grafen (G) va bir (BNG), ikki (ING) va uch (UNG) nuqsonli grafenlardan foydalandik.

Grafendagi nuqsonlarning foizini aniqlash uchun nuqsonli (BNG, ING va UNG) grafenlarning sirt maydoni nisbati $S_{dG}= S_{BNG}+ S_{ING}+ S_{UNG}$ asl grafen S_G sirt maydoniga bo‘linadi. Jami yettita model grafen ishlatiladi: G, BNG-1, ING-1, UNG-1, BNG-4, ING-4 va UNG-4. Bitta (BNG), ikki barobar (ING) va uch barobar (UNG) vakansiya nuqsonlariga ega grafenlar harorat ta’sirida o‘zgaradi. BNG-1 va BNG-4 nuqsonlari 55–66 BNG, ING-1 va ING-4 nuqsonlari esa 5-8-5 ING tipiga aylantiriladi (1-rasm).

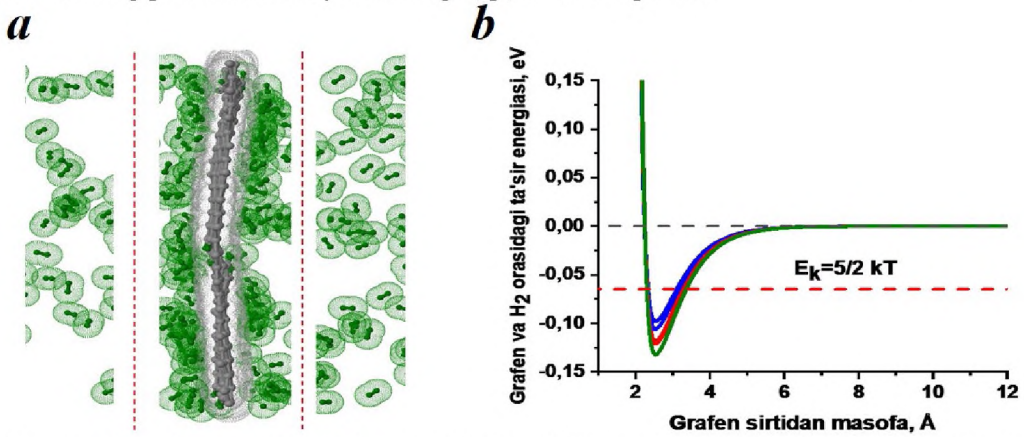


1-rasm. BNG (*b*), ING (*c*) va UNG (*d*) nuqsonlarining shakllanishi ko‘rsatilgan. Bu nuqsonlar ma’lum konfiguratsiyalarga aylanadi, mos ravishda, BNG (*b’*) uchun (55-66), ING (*c’*) uchun (5-8-5) va UNG (*d’*) uchun (58-85).

Model tizimlarining potensial energiyasi konjugat gradient usuli bilan minimallashtiriladi, so‘ngra NpT ansambli va 1 $K \cdot ps^{-1}$ harorat gradiyenti yordamida 300 K gacha qizdiriladi, Berendsen termostati va barostati 100 fs va 5000 fs ulanish konstantalari bilan qo‘llaniladi. Keyin 300 K harorat NVT ansamblida Bussi termostati yordamida 100 ps davomida boshqariladi. H_2 molekulalari grafen yuzasini (10,18 nm^2) o‘rab turgan muhitga har 10 ps da kiritiladi [7]. Tushayotgan H_2 oqimi 9,82 $nm^{-2} \cdot ns^{-1}$ va unga mos bosim 0,90 atm tashkil qiladi. H_2 molekulalarining bosimi $p = J\sqrt{2\pi MRT}/N_A$ orqali hisoblanadi. Grafen yuzasida

fizisorbsiyalangan H_2 molekulalarining konsentratsiyasi gravimetrik zichlik ($wt.\%$) sifatida o‘lchanadi. Barcha MD simulatsiyalarida 3 ns, vaqti uchun 0,1 fs vaqt qadami qo‘llanildi.

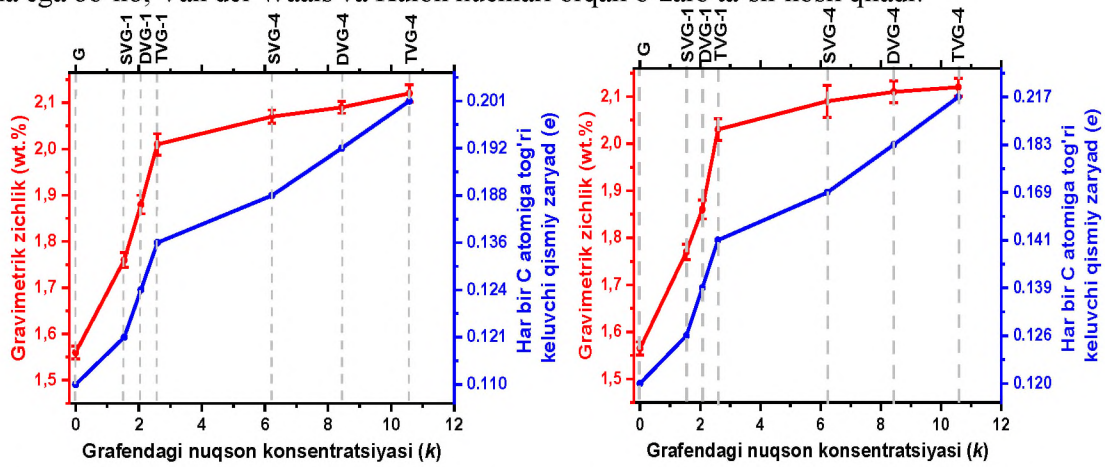
Natijalar va ularning tahlil. Nuqsonli UNG-4 grafeni va uning atrofidagi H_2 molekulalari 3*a*-rasmda ko‘rsatilgan. Uglerod nanomateriallari H_2 molekulalarini 2,7-3 Å masofada fizisorbsiyalashini namoyon qiladi, shuning uchun fizisorbsiyalangan H_2 molekulalari sonini aniqlashda grafen yuzasidan 3 Å kesish masofasi ishlatildi. Eng ko‘p H_2 molekulalari (umumiyning 43%) UNG-4 grafenida adsorbsiyalangan. Grafen yuzasidagi H_2 molekulalarining o‘rtacha bog‘lanish masofasi 3,12 Å, o‘rtacha kinetik energiyasi 0,065 eV (300 K) ga teng. Grafen-H_2 o‘zaro ta’siri 0-6,25 Å masofada va 0-0,098 eV energiya diapazonida sodir bo‘ladi (2*b*-rasm). Nuqsonlar konfiguratsiyasi BNG-1→BNG-1(55-66), ING-1→ING-1(5-8-5), UNG→UNG (5-8-5) o‘tishda o‘zaro ta’sir masofasi deyarli o‘zgarmadi, ammo energiya diapazoni mos ravishda 0-0,106 eV, 0-0,121 eV va 0-0,132 eV gacha oshdi (2-rasm. *b*). Uglerodli nanomateriallar reaktivligi C atomlarining piramidalizatsiya burchagi (θp) bilan aniqlanadi.



2-rasm: a) Nuqsonli grafen va atrofidagi H_2 molekulalari (H-yashil, C-kulrang); b) Grafen-H_2 o‘zaro ta’sir energiyasi (BNG-ko‘k, ING-qizil, UNG-yashil).

Nanotrubkalarda egrilik lokal kuchlanish va reaktivlikni oshiradi, yassi grafen esa sp^2 gibridlangan C atomlari tufayli past reaktivlikka ega. Shuning uchun H_2 molekulalari grafen yuzasida asosan fizisorbsiyalanadi. 4*a* va 4*b* rasmlarda H_2 gravimetrik zichligi nuqson konsentratsiyasi bilan ko‘rsatilgan. G grafenida H_2 zichligi 1,56 wt% bo‘lsa, UNG-4 (eng yuqori nuqson) uchun 2,12-2,16 wt% ga yetadi. Boshqa nuqsonlar uchun BNG-1, ING-1, UNG-1, BNG-4 va ING-4 uchun zichlik 1,76-2,10 wt% oralig‘ida. 300 K da toza grafen uchun vodorod bilan qoplanish darajasi ~18,75%, nuqson konsentratsiyasi 1,54-10,27% bo‘lgan grafenlarda esa maksimal 25,74%ga yetadi.

Shunday qilib, nuqsonlar konsentratsiyasi oshishi bilan grafen yuzasida adsorbsiyalanadigan H_2 molekulalari soni ham ortadi (3-rasm. *a* va *b*). Grafen yuzasida fizisorbsiyalangan H_2 molekulalarining gravimetrik zichligi nuqson konsentratsiyasi ortishi bilan oshadi, bu C atomlarining qismiy zaryadlarining o‘zgarishi bilan izohlanadi (3-rasm, ko‘k). Grafendagi C atomlari H atomlariga nisbatan yuqori elekt-rmanfiylikka ega bo‘lib, Van der Waals va Kulon kuchlari orqali o‘zaro ta’sir hosil qiladi.



3-rasm. Chapda o‘zgartirilgan, o‘ngda o‘zgarmas nuqsonli holat ko‘rsatilgan; qizil egri - H_2 gravimetrik zichligi, ko‘k egri - grafendagi C atomlarining o‘rtacha qismiy zaryadi nuqson konsentratsiyasiga bog‘liq.

Nuqson konsentratsiyasining oshishi C atomlarining o‘rtacha qismiy zaryadini oshiradi, natijada grafen yuzasida H_2 miqdori ortadi va adsorbsiyalanish kuchayadi. 3*a* va 3*b* rasmlarda ko‘rsatilganki, past konsentratsiyalarda nuqson hajmining oshishi H_2 adsorbsiyasini tezlashtiradi (BNG-1, ING-1, UNG-1 uchun ~0,175–0,178 wt%). Ammo BNG-4, ING-4, UNG-4 holatlarida adsorbsiya tezligi ~12 marta kamayadi, chunki kattaroq nuqsonlar va ularning o‘zaro ta’sirlari adsorbsiyani sekinlashtiradi.

Xulosa. Molekular dinamika natijalari grafendagi nuqsonlar hajmi va konsentratsiyasi ortishi H_2 fizisorbsiyasini kuchaytirishini ko‘rsatdi. Eng yuqori nuqson ulushida (10,27%) 300 K va 0,9 atm.da gravimetrik zichlik 2,16 wt.%ga yetdi. Natijalar nuqson muhandisligi grafenda vodorod saqlashni yaxshilashini tasdiqlaydi.

Minnatdorchilik. Modellashtirishlar Denov tadbirkorlik va pedagogika instituti qoshidagi “Fizik jarayonlarni modellashtirish” ilmiy laboratoriyasida joylashgan yuqori unumdor hisoblash kompyuterlarida amalga oshirildi.

Foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxati:

[1]. J.O. Abe et al., Hydrogen energy, economy and storage. Review and recommendation, International Journal of Hydrogen Energy 44, 15072 (2019).

[2]. Y.-P. Chen S. Bashir, and J.L. Liu, editors , Nanostructured Materials for Next-Generation Energy Storage and Conversion: Hydrogen Production, Storage, and Utilization (Springer, Berlin, Heidelberg, 2017).

[3]. J.G M,S. Iniyan et al., A review of wind energy technologies. Renew Sustain Energy Rev, Renewable and Sustainable Energy Reviews 11, 1117 (2007).

[4]. I.A.Baburin et al., Hydrogen adsorption by perforated graphene, International Journal of Hydrogen Energy 40, 6594 (2015).

[5]. B.J.Alder and T.E.Wainwright, Phase Transition for a Hard Sphere System, The Journal of Chemical Physics 27, 1208 (1957).

[6]. S.I.Kundalwal and V. Choyal, Transversely isotropic elastic properties of carbon nanotubes containing vacancy defects using MD, Acta Mech 229, 2571 (2018).

[7]. U.Uljayev et al., Boron interaction with double-walled carbon nanotubes across temperature ranges, Mod. Electron. Mater. 10, 3 (2024).

O‘rolov O‘tkir Abdunazar o‘g‘li (Toshkent Kimyo-texnologiya instituti tayanch doktoranti; legolas08101993@mail.com),
Choriyev Mirjalol (Toshkent kimyo-texnologiya instituti “Oliy matematika” kafedrasi (PhD) katta o‘qituvchisi; choriyevm56@gmail.com),
Mirzaqobilov Bekzod Norqo‘ziyevich (Toshkent Kimyo-texnologiya instituti PhD katta o‘qituvchisi; bmirzakabilov@inbox.ru)

IKKI QATLAMLI QOVUSHQOQ-ELASTIK PLASTINKALARNING DINAMIK ZARBA YUKLAMALARIGA JAVOBI: ENERGIYA DISSIPATSIYASINI OPTIMALLASHTIRISH

Annotatsiya. *Ushbu tadqiqot aluminiy va qovushqoq-elastik polimerdan iborat sendvich panellarning dinamik yuklanish sharoitidagi tebranishlarni so‘ndirish xususiyatlarini o‘rganishga bag‘ishlangan. Ishning maqsadi qatlamlar qalinligi nisbatining konstruktsiyaning dinamik javobiga ta’sirini tahlil qilishdir. Abaqus/Explicit dasturiy muhitida olib borilgan raqamli modellashtirish natijalari shuni ko‘rsatdiki, alyuminiy qatlamining qalinligi 2.0 mm.dan 8.0 mm gacha oshirilganda, maksimal Mises kuchlanishi 583.21 MPa dan 348.79 MPa gacha pasaygan. Biroq, polimer qatlamining qisqarishi Qovushqoq-elastik energiya dissipatsiyasini 199.06 J dan 34.87 J gacha sezilarli darajada kamaytirdi. Tadqiqot natijalari mustahkamlik va tebranishlarni so‘ndirish samaradorligi o‘rtasidagi muvozanatni optimallashtirish bo‘yicha amaliy tavsiyalar beradi.*

Kalit so‘zlar: *sendvich panellar, qovushqoq-elastik qatlam, tebranishlarni so‘ndirish, dinamik javob, chekli elementlar usuli.*

ИЗУЧЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ПАССИВНОГО ДЕМПФИРОВАНИЯ ВИБРАЦИЙ В СЕНДВИЧ-ПАНЕЛЯХ: ДИНАМИЧЕСКИЙ ОТКЛИК НА СИЛОВЫЕ НАГРУЗКИ ДВУХСЛОЙНОГО ЭЛАСТИЧНОГО ПЛАСТИКА

Аннотация. *Данное исследование посвящено изучению характеристик пассивного демпфирования вибраций в сэндвич-панелях, состоящих из слоев алюминия и вязкоупругого полимера, в условиях динамической нагрузки. Основная цель – анализ влияния соотношения толщин слоев на динамический отклик конструкции. Численное моделирование, выполненное в среде Abaqus/Explicit, показало, что увеличение толщины алюминиевого слоя с 2.0 мм до 8.0 мм приводит к снижению максимального напряжения по Мизесу с 583.21 МПа до 348.79 МПа. Однако уменьшение толщины*