Choriyeva Mohinur Berdiyorovna (O‘zRFA U.A.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti doktoranti, 100125, Toshkent sh., “Do‘rmon yo‘li”, 33; e-mail: chorievamohinur667@gmail.com),
Urolov Ikrom Zayniddinovich (O‘zRFA U.A.Arifov nomidagi Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti Fizik jarayonlarni modellashtirish laboratoriyasi kichik ilmiy hodimi, PhD; e-mail: fizik25@mail.ru),
Yadgarov Ishmumin Djabbarovich (O‘zRFA U.A.Arifov nomidagi Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti Fizik jarayonlarni modellashtirish laboratoriyasi professori, f-m.f.d., (Dsc); e-mail: ishmuminyadgarov@gmail.com)

FULLEREN C_{60} MOLEKULASINING ALUMINIY AL(001) VA AL (111) SIRTLARDA ADSORBSIYASI JARAYONLARINI KOMPYUTERDA MODELLASHTIRISH HAMDA TAHLIL QILISH

Annotatsiya. *Fulleren molekulalarining metall tagliklarning turli kesimli sirtlarida adsorbsiyasi dunyo olimlari tomonidan eksperimental va nazariy jihatdan keng o‘rganilmoqda, jumladan, fulleren C_{60} molekulasining alyuminiy Al(001) va Al(111) sirtlarida adsorbsiyasi o‘zining istiqbolli amaliy ishlanmalarni va’da qilayotganligi sababli keng o‘rganilmoqda. Ushbu tadqiqot ishida C_{60} molekulasining aluminiyning (001) va (111) kesimli yuzalarida adsorbsiyasi MD molekular dinamika usulida Tersoff atomlararo potensialidan foydalanib, LAMMPS paket dasturida modellashtirilgan holda nazariy tadqiq qilinib, ushbu jarayonda mazkur fulleren molekulasining pentagon va geksagon konfiguratsiyalar bilan adsorbsiyalanishi o‘rganilgan va ularga doir adsorbsiya energiyalari, Al-C bog‘lar uzunligi va bu bog‘larning tabiati haqida xulosalar qilingan.*

Kalit so‘zlar: *fulleren, alyuminiy, taglik, adsorbsiya, bog‘ uzunligi, modellashdirish, potensial, konfiguratsiya.*

Чориева Мохинур Бердияровна (Институт ионно-плазменных и лазерных технологий имени У.А. Арифова),
Уролов Икром Зайниддинович (Институт ионно-плазменных и лазерных технологий имени У.А. Арифова),
Ядгаров Ишмумин Джаббарович (Институт ионно-плазменных и лазерных технологий имени У.А.Арифова)

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ АДСОРБЦИИ МОЛЕКУЛЫ ФУЛЛЕРЕНА С60 НА ПОВЕРХНОСТЯХ АЛЮМИНИЯ AL(001) И AL(111)

Аннотация. *Адсорбция молекул фуллерена на поверхностях металлических подложек с различными кристаллографическими ориентациями широко изучается учёными всего мира как экспериментально, так и теоретически. В частности, адсорбция молекулы фуллерена C_{60} на поверхностях алюминия Al(001) и Al(111) интенсивно исследуется в связи с её перспективными практическими приложениями.В данной работе адсорбция молекулы C_{60} на поверхностях алюминия с ориентациями (001) и (111) теоретически исследована методом молекулярной динамики с использованием межатомного потенциала Терсоффа в программном пакете LAMMPS. В ходе данного процесса изучена адсорбция молекулы фуллерена в пентагональной и гексагональной конфигурациях, а также сделаны выводы относительно энергий адсорбции, длин связей Al–C и природы этих связей.*

Ключевые слова: *фуллерен, алюминий, основание, адсорбция, длина связи, моделирование, потенциал, конфигурация.*

Choriyeva Mokhinur Berdiyorovna (Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies named after U.A. Arifov),
Urolov Ikrom Zayniddinovich (Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies named after U.A.Arifov),
Yadgarov Ishmumin Djabbarovich (Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies named after U.A.Arifov)

COMPUTER MODELING AND ANALYSIS OF THE ADSORPTION PROCESSES OF THE FULLERENE C60 MOLECULE ON ALUMINUM AL(001) AND AL(111) SURFACES

Annotation. *The adsorption of fullerene molecules on metal substrates with different crystallographic surface orientations is widely studied by researchers worldwide, both experimentally and theoretically. In particular, the adsorption of the C_{60} fullerene molecule on aluminum Al(001) and Al(111) surfaces has been extensively investigated due to its promising potential for practical applications.In this study, the adsorption of the C_{60} molecule on aluminum surfaces with (001) and (111) orientations is theoretically investigated using the molecular dynamics (MD) method. The simulations are carried out in the LAMMPS software package employing the Tersoff interatomic potential. During this process, the adsorption of the fullerene molecule in pentagonal and hexagonal configurations is analyzed, and*

conclusions are drawn regarding the adsorption energies, Al–C bond lengths, and the nature of these bonds.

Key words: *fullerene, aluminum, substrate, adsorption, bond length, modeling, potential, configuration.*

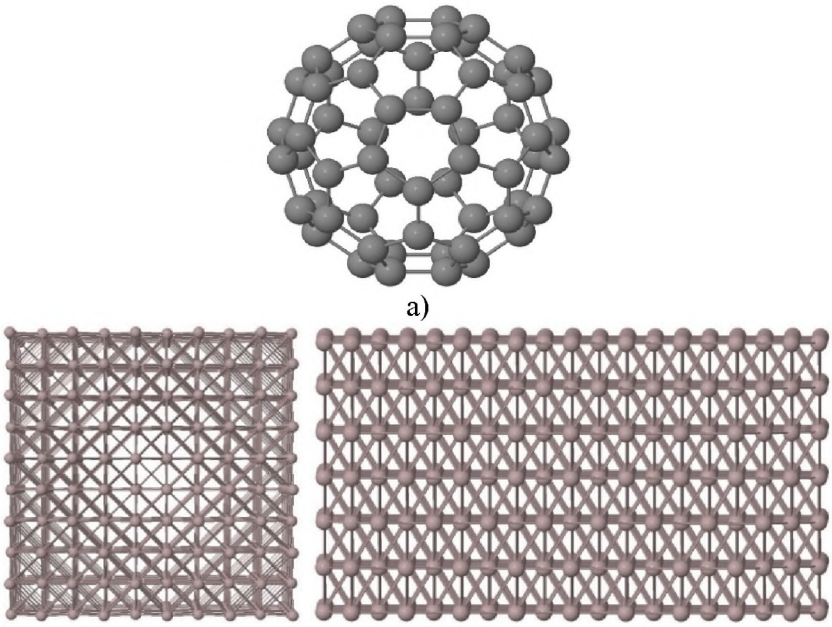
Kirish. Fullerenlar uglerodning allotropik shakllaridan biri hisoblanib, ularning barcha vakillari yopiq gumbazsimon (sfera, ellipsoid) shaklga ega. Fullerenlar o'ziga xos geometrik tuzilishi va noyob fizik-kimyoviy xossalari bilan nafaqat uglerodning allotrop shakllarida ichida, balki barcha nanostrukturalar ichida ajralib turadi. 1985-yilda Harold Kroto va uning hamkasblari tomonidan fullerenlarning dastlabki vakili fulleren C_{60} molekulasining kashf etilishi [1] uglerod nanostrukturalari kimyosi va fizikasida yangi yo'nalishlar va izlanishlar davrini boshlab berdi va ushbu kashfiyotning natijasi o'laroq, dunyo olimlarining ko'pgina sohalarda, jumladan, nanoelektronika, nanomateriallar, nanokompozit materiallar va meditsina kabi zamonaviy fan sohalarida yorqin yutuqlarga erishdi va hanuzgacha bu kabi sohalarda izlanishlar uzliksiz davom etib kelmoqda. Fulleren C_{60} molekulasi fullerenlar ichida eng barqarori va shu bilan birgalikda har tomonlama keng o'rganilgandir. C_{60} molekulasi 12 ta beshburchak va 20 ta oltiburchak ko'rnishidagi uglerod atomlari hosil qilgan halqalardan tashkil topgan geodezik gumbaz yoki futbol to'piga o'xshash shaklga ega [2]. So'ngi yillarda fulleren molekulalarining qattiq sirtlar, xususan metall sirtlar, masalan, alyuminiy (Al) [3-6], mis (Cu) [7], titan (Ti) [8], magniy (Mg) [9] va temir (Fe) [10] singari metallar sirtlari bilan o'zaro ta'sir jarayonlari ham eksperemental, ham nazariy yo'llar bilan tadqiq qilinmoqda. Ushbu tadqiqot ishlarida fulleren molekularining sirtda adsorbsiyalanish energiyalari, ta'sirlar vaqtida yuzaga keluvchi metall-uglerod bog'larining uzunligi, bog'ning fizik-kimyoviy tabiatlari va sanab o'tilgan kattalik va xususiyatlarning sirtning qanday kesimli ekanligiga va fulleren molekulasining qanday konfiguratsiya bilan adsorbsiyalanishiga bog'liq bo'lishligi o'rganilmoqda. Ta'kidlab o'tilgan tadqiqotlar nafaqat nanoelktronika sohasidagina amaliy ahamiyatga ega hisoblanadi, balki metall-organik gibrid materiallar, molekular elektronika va o'ta o'tkazuvchanlik sohalarida ham yorqin amaliy istiqbollidir.

Shunga qaramasdan, fulleren molekulalarning turli metall sirtlari bilan o'zaro ta'sir jarayonini tadqiq qilish o'rganilmagan jihatlar keng uchraydi. Ana shunday yechimini kutib kelayotgan tadqiqotlardan biri fulleren C_{60} molekulasining alyuminiy sirtlar bilan o'zaro ta'sir jarayoni nazariy usullar yordamida molekulaning sirtda adsorbsiyalanish energiyalari, Al-C bog'larning uzunligi, ushbu bog'larning fizik-kimyoviy xarakterini va shu bilan ushbu qiymatlar va xususiyatlarning sirt oreientatsiyasi va adsorbsiyalanish konfiguratsiyalariga qay darajada bog'liqligini aniqlashdir.

Mazkur tadqiqot ishida fulleren C_{60} molekulasi, aluminiy Al(111) va Al(001) sirtlar tadqiqot ob'ekti sifatida tanlab olindi. Bunga sabab sifatida quyidagilarni ko'rsatishimiz mumkin: ma'lumki, alyuminiy Yer qobig'ida keng tarqalgan uchta elementdan biri va toza alyumiyni olishning nisbatan oson ekanligi uni metallar ichida arzon bo'lishligini ta'minlaydi va ushbu xususiyat undan eksperemental tadqiqot ishlarida iqtisodiy qiyinchiliklarsiz foydalanish imkonini beradi [11–13]. Bu esa ushbu nazariy ishni amalyotga tatbiq qilinishini osonlashtiradi. Bundan tashqari alyuminiy organik fotovoltaik qurilmalarda elektrod materiali sifatida keng qo'llanilib, u elektronlarni qabul qiluvchi funksionalizatsiyalangan fulleren bilan interfeys hosil qilishi kabi amaliy ishlatilishi aluminiyni nafaqat nazariy balki amaliy ishlarda muhim elementlardan biri ekanligini ko'rsatadi. Elementning yo'qoridagi kabi bir qator ustunliklari sabab ushbu tadqiqot ob'ekti sifatida tanlab oldik. Aluminiy (001) va (111) sirtlar ham bir biridan yetarli darajada farq qiladi. Al(001) sirt atomlari bir biri bilan kamroq bog'langan bo'lgani uchun faolroq bo'lib, sirt bilan kuchli o'zaro ta'sir va adsorbsiya jarayonlarini o'rganish uchun qulaydir. Al (111) atomlari zich joylashgani sababli eng barqaror sirt hisoblanadi va molekulalar bu sirtga nisbatan tartibli holda adsorbsiyalanadi [14–17]. Aluminiyga tegishli bu kabi xususiyatlar uni aerokosmik texnika, mikroelektronika va nanokompozit materiallar uchun asosiy komponentga aylantiradi. Aluminiyning asosiy kamchiligi yuqori mexanik mustahkamlikka ega emasligi bo'lib, ushbu nuqsonni bartaraf etish uchun aluminiy va fulleren nanokompozitini ya'ni matritsasi va to'ldiruvchisi, mos ravishda, aluminiy va fulleren bo'lgan nanokompozit material yaratish bu soha tadqiqotchilarining diqqatini tortmoqda.

Tadqiqot metodologiyasi. Mazkur tadqiqot ishi doirasida ko'rib chiqilgan barcha o'zaro ta'sir jarayonlari molekulyar dinamika (MD) usuliga asoslangan ochiq manba LAMMPS (Large-Scale Atomic/ Molecular Massively Parallel Simulator) paket dasturida simulatsiya qilingan [18]. LAMMPS paket dasturi turli atomlararo potensiallar (kuch maydonlari) va o'rganilayotgan obyektlari xusuyatlari va shaklidan kelib chiqqan holda belgilanuvchi ma'lum chegaraviy shartlardan foydalangan holda turli sistemalarni, masalan, qattiq holatdagi strukturalar (metall, keramika) kabi bir nechta atomdan tortib milliardlab sondagi atom ega bo'lgan turli o'lchamli (bir o'lchamdan uch o'lchamgacha) struktura holatidagi stmakroskopik tizimlar bi-

lan bog‘liq jarayonlarni modellashtirish imkoniga ega. Shunga ko‘ra, mazkur tadqiqot ishining ob’ektlari bo‘lgan alyuminiy tagliklar va fulleren C_{60} molekulasini tashkil etuvchi atomlar orasidagi Al-Al, C-C va Al-C ta’sirlar Tersoff atomlararo potensiali yordamida ifoda qilingan. Ushbu potensialni qo‘llash natijasida erishilgan natijalar alumiy taglik va C_{60} molekulasi uchun olingan nazariy va amaliy o‘rtacha qiymatlar bilan solishtirilgan holda tekshirilgan. Fulleren C_{60} molekulasi atomlarining koordinatalari (1-rasm a) Nanotube Modeller kompyuter dasturi yordamida olindi. Al (001) va Al (111) monokristallari (1-rasm *b*) atomlariga tegishli koordinatalar esa dastlab LAMMPS paket dasturida yozilgan yordamchi dastur orqali olinib, JMOL kompyuter dasturida bajarilgan shakl berish ishlari yordamida olindi. Tadqiqot ishida foydalanilgan Al(001) taglik atomlarining koordinata o‘lchamlari 18.34×18.34×18.34 Å ga, atomlari soni 500 ga teng monokristall bo‘lib, yoqlari markazlashgan rombik (fcc) panjara ko‘rinishiga ega., uning kristall panjara doimiysi 4.05 Åga teng. Al(111) taglik esa 760 ta atomdan iborat monokristall bo‘lib, uni o‘lchamlari 14.32×24.80×25.77 (Å)dan iborat parallelopiped deyish mumkin. Alumiy taglik va fulleren C_{60} molekulasiga tegishli parametrlar adabiyotlarda berilgan qiymatlar bilan solishtirilib, ular bilan teng qiymatliligi tekshirilgan.



a)

b)

1-rasm: a) fulleren C60 molekulasi; b) Al(001) va Al(111) kristall taglik.

Adsorbsiya energiyasini hisoblash. Fulleren C_{60} molekulasining aluminiy Al(001) va Al(111) taglik sirtlarida adsorbsiya energiyasini hisoblash nazariy tadqiqot ishlarida keng qo‘llaniladigan usul yordamida aniqlandi. Har bir taglik uchun alohida hisoblash ishlari olib borildi. Bunda dastlab o‘zaro ta’sirlashmayotgan aluminiy tagliklar va fulleren C_{60} molekulasining muvozanat holatida yakkalangan tarzda, 0 K haroratda ularning har biriga tegishli atomlarning o‘zaro ta’sir potensial energiyalari hisoblanadi va yig‘indisi olinadi. Bundan keyin esa fulleren molekulasi taglik sirtiga adsorbsiyalangan holatida 0 K haroratda butun sistemaning to‘liq potensial energiyasi hisoblanadi va undan dastlab hisoblangan yig‘indi potensial energiyaning farqini hisoblash orqali fulleren molekulasining taglik sirtida adsorbsiya energiyasi aniqlanadi. Quyida ushbu usulning matematik ifodasi berilgan:

$$E_{\text{ads}} = E_{\text{tag/mol}} - \left(E_{\text{tag}} + E_{\text{mol}}\right).$$

Bunda E_{ads} – adsobsiya energiyasi, E_{tag} va E_{mol}, mos ravishda, taglik va fulleren C_{60} molekulasining yakkalangan holatlaridagi erkin potensial energiyalari, $E_{\text{tag/mol}}$ – molekula taglik sirtida adsorbsiyalangan holatidagi umumiy potensial energiyasi. Ushbu qiymatlar tadqiqot metodologiyasida nazarda tutilgan shartlar va atomlararo potensialdan foydalangan holda temperatura 0K bo‘lgan holatda energiyani minimaltirish usuli asosida, LAMMPS dasturi yordamida aniqlandi.

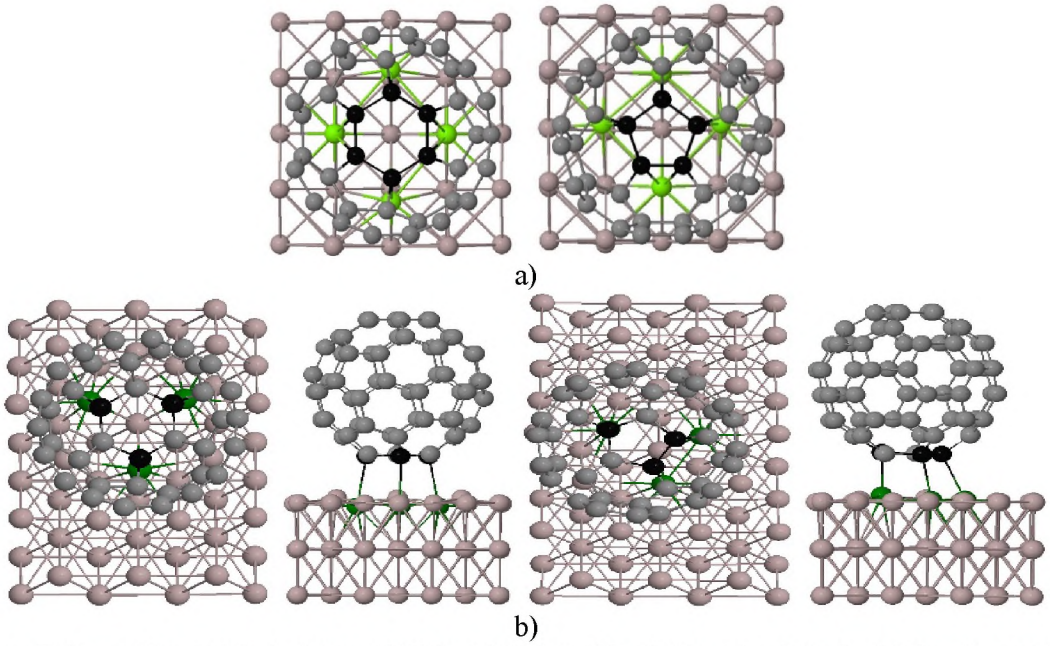
Natijalar tavsifi va tahlili. Tadqiqot ishida C_{60} fulleren molekulasining alyuminiy Al(001) va Al (111) sirtlariga ikki xil konfiguratsiya bilan adsorbsiyalanishi simuliyatsiya qilinib, har bir konfiguratsiyaga mos adsorbsiya energiyasi va Al-C bog‘larning o‘rtacha uzunligi aniqlandi. Ta’kidlab o‘tilgan natijalar quyida 1-jadvalda taqdim qilingan. Jadvaldagi natijalardan ko‘rinadiki, fulleren C_{60} molekulasining aluminiy Al(001) sirt bilan kimyoviy bog‘lanish hosil bo‘ladi. Al (111) taglik sirti bilan esa taglikda atomlar jich

joylashgan bo‘lgani uchun adsorbsiyasida yuzaga keluvchi barcha Al-C bog‘lar kimyoviy xarakterga yaqin ya’ni ular kuchsiz kimyoviy yoki fizik bog‘lardir, negaki, adabiyotlarda Al-C kovalent bog‘lar uzunligi 2.07 Å [12] bo‘lishligi ko‘rsatilgan. Fulleren molekulasining alyuminiy taglikda adsorbsiya energiyasi ushbu ta’sirlashuv vaqtida yuzaga keluvchi Al-C bog‘larning soniga kuchli bog‘lanmagan deyish mumkin. Chunki Al-C bog‘lar soni ikki yoki uchtani tashkil qilgan konfiguratsiyalarda mazkur energiya miqdorlari bir-biriga yaqinligi jadvaldagi hexagon tipidagi konfiguratsiyalarga tegishli adsorbsiya energiyalarida namoyon bo‘ladi. Olingan konfiguratsiyalar ichida pentagon tipidagi konfiguratsiyada Al-C bog‘lar uzunligi eng qisqasi ekanligini ko‘rish mumkin, lekin shunga qaramasdan, ushbu konfiguratsiyaga xos adsorbsiya energiyasi, Al-C bog‘ uzunliklari katta bo‘lgan hexagon tipidagi konfiguratsiyalarga xos adsorbsiya energiyalaridan kichikdir. Bu kabi qarama-qarshilikni mazkur konfiguratsiyali adsorbsiya jarayonida alyumiy taglik sirtidagi aluminiy atomlarining vaziyatining o‘zgarishi va ba’zi Al-Al bog‘larning uzilishi bilan bog‘lash mumkin.

1-jadval

C_{60} molekulasi va Al(001), Al(111) tagliklar o‘rtasidagi bog‘lanish parametrlari

	Sirtlar	Konfiguratsiyalar	Bog‘lanish energiyasi (eV)	Bog‘ uzunligi (Å)
1	Al(001)	Pentagon	-2.101	2.46
2	Al(001)	Hexagon	-2.19	2.42
3	Al(111)	Pentagon	-2.267	2.39
4	Al(111)	Hexagon	-2.313	2.60



2-rasm. Fulleren C_{60} molekulasining Al(001), Al(111) taglik sirtida adsorbsiyalanish konfiguratsiyalarining yuqoridan va yondan ko‘rinishlari.

2-rasmda fulleren C_{60} molekulasining Al(001) va Al(111) taglik sirtlarida ikki xil konfiguratsiya bilan adsorbsiyalanish holatlarining yondan va Al(111) sirtning tepadan ham ko‘rinishlari aks etgan. Ushbu rasmlarda fulleren C_{60} molekulasining aluminiy taglik bilan o‘zaro ta’sirlashuv vaqtida Al-C bog‘lar hosil qilgan atomlari to‘q qora rangda, taglikning Al-C bog‘lanishdagi atomlari esa yashil rangda berilgan.

Xulosa. Tadqiqot ishi davomida olingan natijalar shuni ko‘rsatadiki, C_{60} molekulasining aluminiy sirtlariga adsorbsiyasi sirt orientatsiyasiga sezilarli darajada bog‘liq. Zich qadoqlangan Al(111) sirti C_{60} uchun nisbatan zaif adsorbsiya energiyasini ta’minlasa, ochiq va reaktiv Al(001) sirti kuchliroq Al–C o‘zaro ta’sirlarni yuzaga keltiradi. C_{60} molekulasining taglik sirti bilan o‘zaro ta’sirlashuvi vaqtida Al-Al bog‘larning uzilishi va adsorbsiyalanish nuqtalarida lokal deformatsiyalar kuzatiladi. Adsorbsiya energiyasi adsorbsiya vaqtida kuzatiladigan Al-C bog‘lar soniga kuchsiz bog‘lanishi kuzatildi. Bu farq sirt atomlarining koordinatsiyasi va elektron holatlari bilan izohlanadi hamda Al/C_{60} asosidagi nanokompozit materiallarning xossalarini boshqarishda muhim ahamiyatga ega.

Foydalanilgan adabiyotlar ro'yxati:

(1). Seema Thakral & R.M.Mehta, Fullerenes: An Introduction and Overview of Their Biological Properties, IJPS, 2006 DOI: 10.4103/0250-474X.22957

(2). H.W.Kroto, J.R.Heath, S.C.O'Brien, R.F.Curl va R.E.Smalley. "C_{60}: Buckminsterfullerene", Nature, 318 (1985), p. 162–163.

(3). Review–The Beautiful Molecule: 30 Years of C60 and Its Derivatives Steve F.A.Acquah, a,z Anastasia V. Penkova, Denis A. Markelov, b, c Anna S. Semisalova, d,e Branden E. Leonhardt,a and James M. Magia

(4). Poulomi Bhakta & Bhavna Barthunia. Fullerene and its Applications: A Review, J Indian Acad Oral Med Radiol, 2020 DOI:10.4103/jiaomr.jiaomr_191_19

(5). Al Feng D., Zang Q., Liu Y., Lee Y. Aluminum Alloys and Aluminum-Based Matrix Compo-sites. Metals 2023, 13, 1870. Https://doi.org/10.3390/met13111870

(6). Al. Gao C., Liu X., Zhao D., Guo Y., Chen S., Gao F., Liu T., Cai Z., Liu D., Li J. Recent Progress in Testing and Characterization of Hardenability of Aluminum Alloys: A Review. Materials 2023, 16, 4736. Https://doi.org/10.3390/ma16134736

(7). Al. Dhanalakshmi K., Subramanian R., Karthikeyan R. Review of recent trends and developments in aluminium 7075 alloy and its metal matrix composites (mmcs) for aircraft applications. Reviews in Engineering, 2023. Https://doi.org/10.1016/j.reeng.2023.100098

(8). Al. Patle T.K., Singh N., Khaira H.K., Choudhary S.K. A Review on Abrasive Wear of Aluminum Composites: Mechanisms and Influencing Factors. Journal of Composites Science, 2024, 8(1), 25. Https://doi.org/10.3390/jcs8010025p

(9). Peng W.-T., Chen F.-R., & Lu M.-C. (2021). Thermal conductivity and electrical resistivity of single copper nanowires. Physical Chemistry Chemical Physics, 23(36), 20359–20364. Https://doi.org/ 10.1039/D1CP02774C

(10). Zheng H., & Jaganandham K. (2014). Thermal Conductivity and Interface Thermal Conductance in Composites of Titanium With Graphene Platelets. Journal of Heat Transfer, 136(6), 061301. Https://doi.org/ 10.1115/1.4026488

(11). PENELOPE J. BROTHERS, PHILIP P. POWER, Multiple Bonding Involving the Heavier Main Group 3 Elements Al, Ga, In, and TI, ADVANCES IN ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, VOL. 39, 1976.

(12). Chawla K.K. Composite Materials: Science and Engineering, 3rd ed.; Springer.

(13). Science + Business Media: New York, NY, USA, 2013; p. 542. ISBN 978-0-387-74364-6.

(14). Kumar V.M., Venkatesha C.V. Effect of ceramic reinforcement on mechanical properties of aluminum matrix composites producedby stir casting process. Mater.

(15). Today Proc. 2018, 5, 2466–2471 [crossref]. Kablov E.N. Innovative developments of FSUE "VIAM" of the State Research Center of the Russian Federation on the implementation of "Strategic directions for the development of materials and technologies of their processing for the period up to 2030.Aviat. Mater. Technol. 2015, 34, 3–33.

(16). Yufeng W.; Gap-Yong K.; Alan M.R. Mechanical alloying of carbon nanotube and Al6061 powder for metal matrix composites.Mater. Sci. Eng. A 2012, 532, 558.

(17). Bakshi S.R., Lahiri D., Argaval A. Carbon nanotube reinforced metal matrix composites-a review. Int.Mater. Rev. 2013, 55,41–64. [crossref].

(18). A.P.Thompson и др., «LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales», Comput. Phys. Commun., 271, p. 108171, 2022, doi: 10.1016/j.cpc.2021.108171.

Mamadaliyeva Muazzamxon Abdumannon qizi (U.A.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, doktorant),
Urolov Ikrom Zayniddinovich (U.A.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, doktorant),
Yadgarov Ishmumin Djabbarovich (U.A.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, professor; e-mail: muazzamxon.zubayr@gmail.com)

FULLEREN C_{60} VA SI@C_{60} ENDOFULLERENLARNING O'ZARO TA'SIR JARAYONLARINI MODELLASHTIRISH

Annotatsiya. *Ushbu ish fulleren-fulleren, fulleren-endofulleren, endofulleren-endofullerenlarning o'zaro ta'sir jarayonlarini molekulyar dinamika (MD) usuli asosida o'rganishga bag'ishlangan. Endofulluren hosil qilishda kremniy tanlab olinganligi sababli, C-C, C-Si o'zaro ta'sirlarini ifodalashda Tersoff potensialidan foydalanilgan. LAMMPS ochiq paket dasturi yordamida modellashtirilgan. Ta'sirlashuv jarayonlaridagi bog'lanish energiyalari hisoblangan.*

Kalit so'zlar: *fulleren molekulasi, endofulleren, modellashtirish, Tersoff potensiali, atom, bog' uzunligi, potensial energiya.*