

Choriyeva M.B.

O'z.RFA U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti,
100125, Toshkent sh., Do'rmon yo'li, 33.
e-mail: chorievamohinur667@gmail.com

Urolov I.Z.

O'z.RFA U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti,
100125, Toshkent sh., Do'rmon yo'li, 33.
Mirzo Ulug'bek nomidagi O'zbekiston Milliy Universiteti, 100174, Toshkent sh., Universitet
ko'chasi, 4.
e-mail: fizik25@mail.ru

Yadgarov I.D.

O'z.RFA 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 C₆₀ molekulasi alyuminiy Al(111) sirtida adsorbsiya jarayonlarini modellashtirish

Annotatsiya

Fulleren molekulalarining turli qattiq tagliklar sirtida adsorbsiyasining hosilasi bo'lgan yangi nanostrukturalar bugungi kun nanoelektronikasi va nanokompozit materiallar sohasida tubdan burilishlar yasamoqda. Ayniqsa, fullerenlar oilasining metall tagliklarning turli kesimli sirtlarida adsorbsiyasi dunyo olimlari tomonidan eksperimental va nazariy jihatdan keng o'rganilmoqda, jumladan, fulleren C₆₀ molekulasi alyuminiy Al(111) sirtida adsorbsiyasi o'zining istiqbolli amaliy ishlanmalarni va'da qilayotganligi sababli keng o'rganilmoqda. Ushbu tadqiqot ishida C₆₀ molekulasi alyuminiyning (111) kesimli yuzasida adsorbsiyasi molekulyar dinamika usulida Tersoff atomlararo potensialidan foydalanib modellashtirilgan holda nazariy tadqiq qilinib, ushbu jarayonda mazkur fulleren molekulasi bir qator konfiguratsiyalar bilan adsorbsiyalanishi aniqlangan 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, modellashtirish, potensial, konfiguratsiya.

Чориева М.Б.

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий имени У.А.Арифова,
100125, Ташкентское ш., дорога Дормон, 33.

Уролов И.З.

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий имени У.А.Арифова,
100125, Ташкентское ш., дорога Дормон, 33.
Национальный университет Узбекистана имени Мирзо Улугбека, 100174, г.

Ташкент, ул. Университетская, 4.

Ядгаров И.Д.

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий имени У.А.Арифова,
100125, Ташкентское ш., дорога Дормон, 33.

Моделирования процессов адсорбции молекулы фуллерена C₆₀ на поверхности алюминия Al(111)

Аннотация

Новые наноструктуры, являющиеся результатом адсорбции молекул фуллеренов на поверхностях различных твердых подложек, вносят сегодня фундаментальные изменения в область нанoeлектроники и нанокomпозитных материалов. В частности, адсорбция семейства фуллеренов на поверхностях различных сечений металлических подложек широко изучается экспериментально и теоретически мировыми учеными, в том числе адсорбция молекулы фуллерена C₆₀ на поверхности алюминия Al(111), что обещает многообещающие практические разработки. В данной исследовательской работе теоретически изучена адсорбция молекулы C₆₀ на поверхности алюминия (111) с использованием межатомного потенциала Терсоффа, смоделированного методом молекулярной динамики, и при этом была определена адсорбция этой молекулы фуллерена с рядом конфигураций, и сделаны выводы об их энергиях адсорбции, длине связей Al-C и природе этих связей.

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

Choriyeva M.B.

Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies named after U.A. Arifov,
Uzbekistan Academy Sciences, Tashkent, 100125 Uzbekistan.

Urolov I.Z.

Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies named after U.A. Arifov,
Uzbekistan Academy Sciences, Tashkent, 100125 Uzbekistan.
National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek,
Tashkent, 100174, Uzbekistan.

Yadgarov I.D.

Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies named after U.A. Arifov,
Uzbekistan Academy Sciences, Tashkent, 100125 Uzbekistan.

Modeling of adsorption processes of the fullerene C₆₀ molecule on the surface of aluminum Al(111)

Annotation

New nanostructures, which are the result of the adsorption of fullerene molecules on the surfaces of various solid substrates, are making fundamental changes in the field of nanoelectronics and nanocomposite materials today. In particular, the adsorption of the fullerene family on the surfaces of various cross-sections of metal substrates is widely studied experimentally and theoretically by world scientists, including the adsorption of the fullerene C₆₀ molecule on the aluminum Al(111) surface, which promises promising practical developments. In this research work, the adsorption of the C₆₀ molecule on the aluminum (111) cross-section surface was theoretically studied using the Tersoff interatomic potential modeled by the molecular dynamics method, and in this process, the adsorption of this fullerene molecule with a number of configurations was determined, and conclusions were made about their adsorption energies, the length of the Al-C bonds, 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, Robert Curl va Richard Smalley boshchiligidagi amerikalik va britaniyalik olimlar tomonidan fullerenlarning dastlabki vakili fulleren C₆₀ 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 C₆₀ molekulasi fullerenlar ichida eng barqarori va shu bilan birgalikda har tomonlama keng o'rganilgandir. C₆₀ 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, bu shakl unga fulleren ichida eng seferik shaklga o'xshashlik xususiyatini beradi [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 eksperimental, ham nazariy yo'llar bilan

tadqiq qilinmoqda. Ushbu tadqiqot ishlarida fulleren molekularining sirtida adsorbsiyalanish energiyalari, ta'sirlar vaqtida yuzaga keluvchi metall-uglerod bog'larining uzunligi, bog'ning fizik-kimyoviy tabiati va sanab o'tilgan kattalik va xususiyatlarning sirtning qanday kesimli ekanligiga va fulleren molekulasi qanday konfiguratsiya bilan adsorbsiyalanishiga bog'liq bo'lishligi o'rganilmoqda. Ta'kidlab o'tilgan tadqiqotlar faqatgina nanoelektronika sohasidagina amaliy ahamiyatga ega hisoblanadi, balki metall-organik gibrid materiallar, molekulyar elektronika va o'ta o'tkazuvchanlik sohalarida ham yorqin amaliy istiqbolidir.

Shunga qaramasdan, fulleren molekularining 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} molekulasi alyuminiy Al(111) sirt bilan o'zaro ta'sir jarayoni nazariy usullar yordamida molekulaning sirtida adsorbsiyalanish energiyalari, Al-C bog'larning uzunligi, ushbu bog'larning fizik-kimyoviy xarakterini va shu bilan ushbu qiymatlar va xususiyatlarning sirt orientatsiyasi va adsorbsiyalanish konfiguratsiyalariga qay darajada bog'liqligini aniqlashdir.

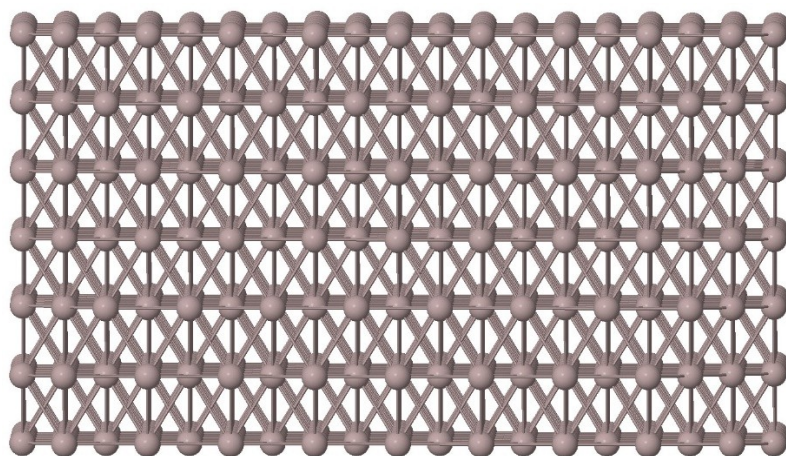
Mazkur tadqiqot ishida fulleren C_{60} molekulasi adsorbsiyasi kuzatiladigan taglik sifatida alyuminiy Al(111) sirtining tanlanishiga sabab sifatida quyidagilarni ham ko'rsatishimiz mumkin: ma'lumki, alyuminiy Yer qobig'ida keng tarqalgan uchta elementdan biri va toza alyuminiy olishning nisbatan oson ekanligi uni metallar ichida arzon bo'lishligini ta'minlaydi va ushbu xususiyat undan eksperimental tadqiqot ishlarida iqtisodiy qiyinchiliklarsiz foydalanish imkonini beradi. Bu esa ushbu nazariy ishni amaliyotga tatbiq qilinishini osonlashtiradi. Shuningdek, alyuminiy sanoatda keng qo'llaniladigan metallardan biri bo'lib, u o'zining yengilligi, mustahkamligi, korroziyaga chidamliligi kabi mexanik, yuqori issiqlik va elektr o'tkazuvchanlik kabi elektrik xossalari bilan ham boshqa metallardan ajralib turadi. Alyuminiyga xos yana bir muhim jihatlardan biri uning (111) kesimli sirtidagi yuqori simmetriya bo'lib, bu holat C_{60} fulleren molekulasiga singari sferik molekularga sirtida tartibli joylashuv imkonini bersa, boshqa tomondan fulleren molekularining ushbu sirt bilan o'zaro ta'sir jarayonini modellashtirishda qulaylikni yuzaga keltiradi. Bu kabi holatlar sirtida kuzatiladigan molekulyar rekonstruksiya, zarralar adsorbsiyasi va elektron almashinuv jarayonlarini o'rganish imkonini beradi.

Alyuminiyga tegishli bu kabi xususiyatlar uni aerokosmik texnika, mikroelektronika va nanokompozit materiallar uchun asosiy komponentga aylantiradi. Alyuminiyning asosiy kamchiligi yuqori mexanik mustahkamlikka ega emasligi bo'lib, ushbu nuqsonni bartaraf etish uchun alyuminiy va fulleren nanokompozitini ya'ni matritsasi va to'ldiruvchisi mos ravishda alyuminiy va fulleren bo'lgan nanokompozit material yaratish bu soha tadqiqotchilarining diqqatini tortmoqda.

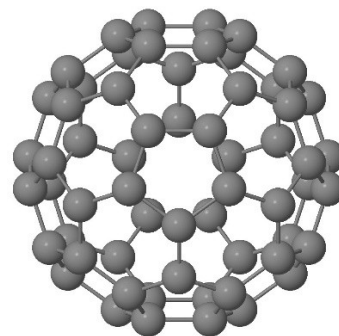
Tadqiqot metodologiyasi

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 simulyatsiya qilingan [11]. LAMMPS paket dasturi turli atomlararo potentsiallar (kuch maydonlari) va o'rganilayotgan ob'ektlari xususiyatlari 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 bilan bog'liq jarayonlarni modellashtirish imkoniga ega. Shunga ko'ra, mazkur tadqiqot ishining ob'ektlari bo'lgan alyuminiy taglik va fulleren C_{60} molekulasini tashkil etuvchi atomlar orasidagi Al-Al, C-C va Al-C ta'sirlar Tersoff atomlararo potentsiali yordamida ifoda qilingan. Ushbu potentsialni qo'llash natijasida erishilgan natijalar alyumiy taglik va C_{60} molekulasiga uchun olingan nazariy va amaliy o'rtacha qiymatlar bilan solishtirilgan holda tekshirilgan.

Al(111) monokristali (1- rasm *a*) atomlariga tegishli koordinatalar dastlab Al(001) kesimli nuqsonsiz alyuminiy monokristali atomlarining koordinatlari LAMMPS paket dasturida yozilgan yordamchi dastur yordami olinib, JMOl kompyuter dasturida bajarilgan shakl berish ishlari yordamida olindi. Tadqiqot ishida foydalanilgan Al(111) taglik rasmdagi kabi yetti qavatli va 760 ta atomdan iborat monokristall bo'lib, uni o'lchamlari $14.32 \times 24.80 \times 25.77$ (Å) dan iborat parallelopiped deyish mumkin. Fulleren C_{60} molekulasiga atomlarining koordinatalari (1- rasm *b*) esa Nanotube Modeller kompyuter dasturi yordamida olindi. Alyumiy taglik va fulleren C_{60} molekulasi tegishli parametrlar adabiyotlarda berilgan qiymatlar bilan solishtirilib, ular bilan teng qiymatliligi tekshirilgan.



a



b

1- rasm. *a*) Al(111) taglik va *b*) fulleren C_{60} molekulasini.

Adsorbsiya energiyasini hisoblash

Fulleren C_{60} molekulasining alyuminiy Al(111) taglik sirtida adsorbsiya energiyasini hisoblash nazariy tadqiqot ishlarida keng qo'llaniladigan usul yordamida aniqlandi. Bunda dastlab o'zaro ta'sirlashmayotgan alyuminiy taglik 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 molekulasini 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:

$$E_{ads} = E_{tag/mol} - (E_{tag} + E_{mol}).$$

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

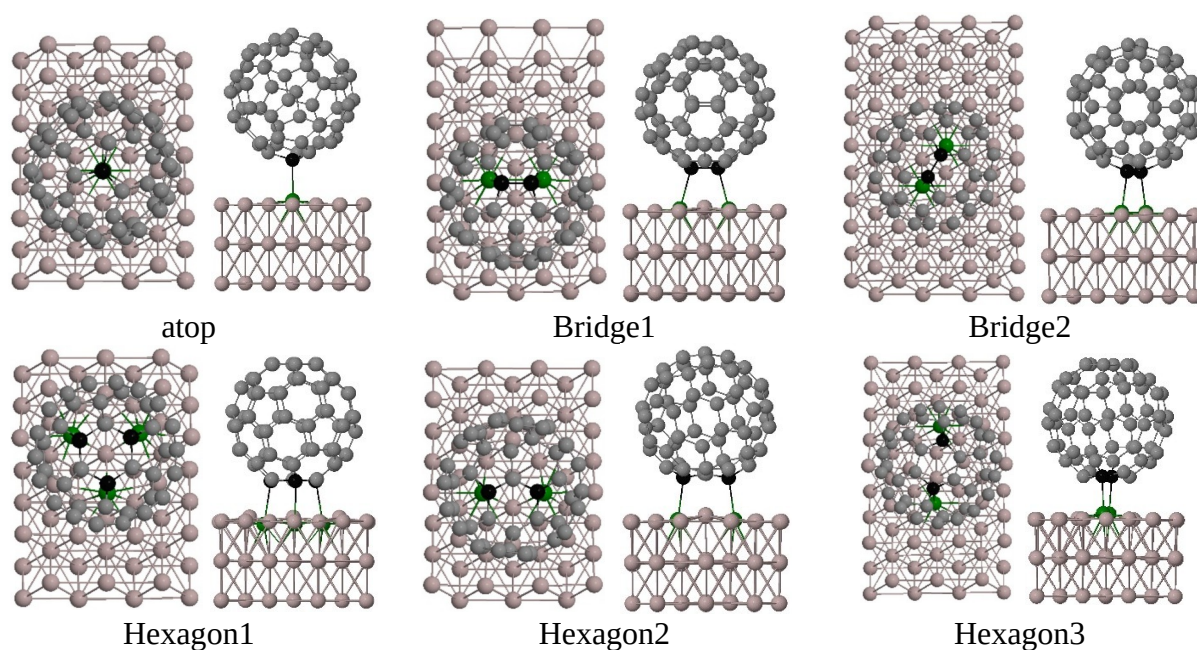
Natijalar tavsifi va tahlili

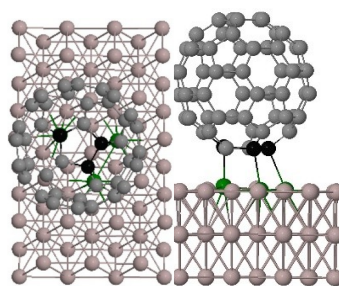
Tadqiqot ishida C_{60} fulleren molekulasining alyuminiy Al(111) sirtga yetti xil konfiguratsiya bilan adsorbsiyalanishi simulyatsiya qilinib, har bir konfiguratsiyaga mos adsorbsiya energiyasi va Al-C bog'larning o'rtacha uzunligi aniqlandi. Ta'kidlab o'tilgan natijalar quyida 1- jadvalda taqdim qilingan. Jadvaldagi natijalardan ko'rinadiki, fulleren C_{60} molekulasining alyuminiy Al(111) taglik sirtida adsorbsiyasida yuzaga keluvchi barcha Al-C bog'lar kimyoviy xarakterda bo'lmasdan, fizik xarakterda, ya'ni ular kuchsiz yoki zaif 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 bridge va hexagon tipidagi konfiguratsiyalarga tegishli adsorbsiya energiyalarini o'zaro solishtirishganda 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 atop konfiguratsiyadagi adsorbsiya energiyasidan yuqori

bo'lsada, Al-C bog' uzunliklari katta bo'lgan bridge va hexagon tipidagi konfiguratsiyalarga xos adsorbsiya energiyalaridan kichikdir. Bu kabi qarama-qarshilikni mazkur konfiguratsiyali adsorbsiya jarayonida alyuminiy taglik sirtidagi alyuminiy atomlarining vaziyatining o'zgarishi va ba'zi Al-Al bog'larning uzilishi bilan bog'lash mumkin. Barcha kuzatilgan konfiguratsiyalardagi adsorbsiya energiyalari 1 eV dan yuqori bo'lsada, bitta Al-C bog'ga mos keluvchi o'rtacha adsorbsiyasi energiyasi, atop konfiguratsiyasini istisno qilganda, barcha hollarda 1 eV dan kichik qiymatni tashkil qiladi. Ushbu holat ham fulleren C_{60} molekulasining alyuminiy Al(111) taglik sirtida adsorbsiyasini fizik adsorbsiya deb hisoblashga imkon beradi.

1-jadval. C_{60} molekulasini va Al(111) taglik o'rtasidagi bog'lanish parametrlari.

No	Konfiguratsiya	Bog'lanish energiyasi (eV)	Al-C bog' uzunligi (Å)
1	Atop	-1.099	2.45
2	Bridge1	-2.051	2.47
3	Bridge2	-1.989	2.48
4	Pentagon	-1.267	2.39
5	Hexagon1	-2.313	2.60
6	Hexagon2	-1.924	2.50
7	Hexagon3	-1.908	2.48





Pentagon

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

2- rasmda fulleren C_{60} molekulasining Al(111) taglik sirtida yetti xil konfiguratsiya bilan adsorbsiyalanish holatlarining tepadan va yondan ko'rinishlari aks etgan. Ushbu rasmlarda fulleren C_{60} molekulasining alyuminiy 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 natijalarning tahlili va ularni o'zaro va ilmiy adabiyotlarda berilgan natijalar bilan taqqoslash natijasida quyidagicha xulosalar kelib chiqdi: a) fulleren C_{60} molekulasining alyuminiy Al(111) taglik sirtida adsorbsiyasi kuzatilgan barcha konfiguratsiyalarda fizik adsorbsiya ekanligi ko'rsatildi; b) C_{60} molekulasining taglik sirti bilan o'zaro ta'sirlashuvi vaqtida Al-Al bog'larning uzilishi va adsorbsiyalanish nuqtalarida lokal deformatsiyalar kuzatiladi; c) adsorbsiya energiyasi adsorbsiya vaqtida kuzatiladigan Al-C bog'lar soniga kuchsiz bog'lanishi kuzatildi.

Adabiyotlar

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), sah. 162–163.
3. Review—The Beautiful Molecule: 30 Years of C_{60} and Its Derivatives Steve F. A. Acquah,^{a,z} Anastasia V. Penkova,^b 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 Composites. *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. 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

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