

ЗАХИРИДДИН
МУҲАММАД БОБУР
НОМИДАГИ АНДИЖОН
ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ

ANDIJAN STATE
UNIVERSITY NAMED
AFTER ZAKHIRIDDIN
MUKHAMMAD BABUR

ИЛМИЙ ХАБАРНОМА

Физика-математика
Тадқиқотлари
(Махсус сон)

SCIENTIFIC BULLETIN

Physical and
Mathematical Research
(Special Issue)

Андижон
2023 йил

Муассис

Захириддин Мухаммад Бобур номидаги Андижон давлат университети

ИЛМИЙ ХАБАРНОМА. ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ТАДҚИҚОТЛАРИ

Журнал бир йилда 2 марта чоп этилади.

Андижон вилояти ахборот ва оммавий коммуникациялар бошқармаси
томонидан 2019-йил 26 декабрда
0452 рақам билан рўйхатга олинган.

Нашр индекси: 344

Нашр учун масъул:
А.Й.Бобоев

Босишга рухсат этилди:
27.12.2019.

Қоғоз бичими: 60x81 1/8

Босма табоғи: 13,5

Офсет босма. Офсет қоғози.

Адади: 110 дона.

Баҳоси келишилган нархда.

Буюртъа №: 165.

“Мухаррир” нашриёти манбаа бўлимида чоп этилди.
Тошкент шаҳри, Сўгалли ота кўчаси 7-уй

Таҳририят манзили:

170100, Андижон шаҳри, Университет кўчаси, 129. Телефон: +998911602043.

Факс: (374) 223-88-30

E-mail: adu_xabarnoma@mail.ru Расмий сайт: uzjournals.edu.uz/adu

**Сборник статей международной научно-практической конференции по
«Полупроводниковая опто- и наноэлектроника, альтернативные
источники энергии и их перспективы» Андижан, 12-13 октября 2023 года**

ОГЛАВЛЕНИЕ

С.З. ЗАЙНАБИДИНОВ, А.Й. БОБОЕВ, Б.М. ЭРГАШЕВ Механизмы формирования квантово-размерных нанообъектов в многокомпонентных структурах GaAs/Ge/ZnSe и GaAs/Si/ZnSe.....	7
М.Х. АШУРОВ, Б.Л. ОКСЕНГЕНДЛЕР, С.Х. СУЛЕЙМАНОВ, С.Е. МАКСИМОВ, З.И. КАРИМОВ, Н.Н. НИКИФОРОВА, Ф.А. ИСКАНДАРОВА Современные аспекты радиационной деградации твердых тел и биообъектов.....	10
М.Т. НОРМУРАДОВ, Е.Н. ВЛАСОВА, К.Т. ДОВРАНОВ, Д.А. НОРМУРОДОВ, Х.Т. ДАВРАНОВ Измерение оптических параметров, диэлектрических материалов, созданных низкоэнергетическим ионно-плазменным методом.....	15
Е.С. РЕМБЕЗА, Т.В. СВИСТОВА, Н.Н. КОШЕЛЕВА, М.Б. РАСУЛОВА Гетероструктуры металлооксид-кремний, как перспективные структуры для создания солнечных элементов.....	24
О.О. МАМАТКАРИМОВ, В.Х. QUHQAROV, М.А. ERGASHEV, А.А. XOLMIRZAYEV Yarimo'tkazgich moddalariga asoslangan konvertorlarni ishlab chiqishda va uning asl parametrlarini saqlanishini o'rganish xossalari.....	28
S.Z. ZAINABIDINOV, H.J. MANSUROV, N.YU. YUNUSALIEV Photoelectric Properties of n-ZnO/p-Si Heterostructures.....	34
Х.Б. АШУРОВ, А.А. ЗАРИПОВ, А.А. РАХИМОВ, У.Ф. БЕРИДЕВ, И.Ж. АБДИСАИДОВ, М.М. АДИЛОВ Методы синтеза никелевого нанокатализатора для получения углеродных нанотрубок.....	39
Н.Ф. ЗИКРИЛЛАЕВ, М.М. ШОАБДУРАХИМОВА Особенности автоколебаний тока в компенсированном кремнии и их применение в электронике.....	46
Ш.Б. УТАМУРАДОВА, Ж.Ж. ХАМДАМОВ, В.Ф. ГРЕМЕНОК, К.А. ИСМАЙЛОВ, Х.Ж. МАТЧОНОВ, Х.Ю. УТЕМУРАТОВА Комбинационное рассеяние света в монокристаллическом Si, легированного атомами Gd.....	54
N.N. ABDURAZAKOV, R. ALIEV Power load forecasting using linear regression method of machine learning: Andijan regional case.....	58
И. Н. КАРИМОВ, М. ФОЗИЛЖОНОВ, А.Э. АБДИКАРИМОВ Вольт-фарадные характеристики SOI FINEFET структуры.....	63
О.А. АБДУЛХАЕВ, А.З. РАХМАТОВ Низковольтные ограничители напряжения на основе структур с эффектом смыкания.....	67
SH.X. YO'LCHIYEV, B.D. G'ULOMOV, J.A. O'RINBOYEV ZnO va ZnO:Al yuqqa plyonkalarini sintez qilish va ularni fizik xossalari o'rganish.....	75
Ш.Т. ХОЖИЕВ, С.Ф. КОВАЛЕНКО, С.Е. МАКСИМОВ, В.М. РОТШТЕЙН, О.Ф. ТУКФАТУЛЛИН, Б.Л. ОКСЕНГЕНДЛЕР, Ш.К. КУЧКАНОВ Кластеры Y_n^+ и $Y_nO_m^+$, распыленные ионной бомбардировкой: эксперимент и теоретические аспекты.....	79

M. RASULOVA	
Application of Solution of the Quantum Kinetic Equations for Renewable Energy problem.....	85
A.A.МИРЗААЛИМОВ, Р.АЛИЕВ, Н.А.МИРЗААЛИМОВ	
разработка высокоэффективных и ресурсосберегающих конструкций кремниевых высоковольтных фотоэлектрических устройств.....	89
D.G' KHAJIBAEV, B.Ya. YAVIDOV	
On correlation of T_c and Cu-O _{apex} distance in single layered cuprates.....	97
A. АБДУЛВАХИДОВ, С.ОТАЖОНОВ, Р.ЭРГАШЕВ	
Фоточувствительность солнечных элементов гетероструктуры p CdTe – n CdS и p CdTe – n CdSe с глубокими примесными уровнями.....	102
М.К. КУРБАНОВ, К.У. ОТАБАЕВА, Д.У. ХУДОЙНАЗАРОВА	
Распыление пленок льда при бомбардировке ионами Ag+.....	107
H.O. QO'CHQAROV S.B. FAZLIDDINOV B.B.BURXONJANOV	
Simmetrik bo'lgan silikon diodning statik parametrlarini hisoblash p-n-uch nuqtali zaryadlangan nuqsonlarning δ -qatlami o'tish.....	113
N.Yu. SHARIBAYEV, B.M. BAXROMOV R.M. JALALOV A.A. YUSUFJONOV	
Study of electrophysical properties of semiconductor materials based on lead-selenium.....	120
Ш.К.КУЧКАНОВ, Х.Б.АШУРОВ, Б.М.АБДУРАХМАНОВ, С.Е.МАКСИМОВ, О. Э. КИМИЗБАЕВА, Ш.А.МАХМУДОВ	
О роли структурных дефектов в процессах генерации при нагреве эдс и носителей заряда в эпитаксиальных плёночных кремниевых p-n-структурах.....	125
S.Z. ZAYNABIDINOV, I.M. SOLIYEV, SH.K. AKBAROV	
Kremniy monokristallarida elektro noaktiv nikel va kislorod atomlarining o'zaro tasirlashuvi.	128
M.A.MUYDINOVA, G.J. MAMATOVA	
Yarimo'tkazgich plastinalar sirti va p-n strukturalarning optik xususiyatlari va ularni takomillashtirish usullari.....	132
L.O.OLIMOV, I.I. ANARBOYEV	
Kremniy granulalari asosida termoelektrik material samaradorligini oshirish mexanizimi.....	136

Распыление пленок льда при бомбардировке ионами Ar^+

М.К. Курбанов, К.У. Отабаева, Д.У. Худойназарова

Ургенчский государственный университет. Ургенч, Узбекистан

Аннотация. В статье приведены результаты визуального исследования процесса распыления плёнки льда, покрытой на поверхности $\text{Au}(111)$ и состоящей из двенадцати слоёв, при бомбардировке ионами Ar^+ . Показано, что с увеличением значения начальной энергии усиливается эффект кулоновского взрыва и наблюдается быстрое разрушения пленки. Установлено, что увеличение энергии бомбардирующих частиц приводит к включению в процесс распыления атомов кристалла. Установлено, что при малых энергиях происходит распыления в виде кластеров молекул. Проведённые исследования создают предпосылки для разработки инженерных методик расчета очистки металлических поверхностей от пленок льда, что имеет важное техниическое значение.

Ключевые слова. Кластер, компьютерное моделирование, распыление, плёнка, дефект.

Введение. Исследование поверхностей с помощью методов ионной бомбардировки широко используются при решении, как фундаментальных, так и прикладных задач в направлении модификации характеристик и разработки новых материалов с заданным комплексом свойств. Одним из методов в этом направлении является метод вторично-ионной масс-спектрометрии (ВИМС). Возможности получения сведений о составе внешнего атомного слоя твердого тела значительно расширились в связи с разработкой и усовершенствованием метода вторично-ионной масс-спектрометрии (ВИМС) и других методов. Большинство таких методов близки к тому, чтобы анализировать саму поверхность поскольку основная информация о составе материала поступает из его приповерхностной области, а чувствительность всех таких методов достаточна для обнаружения малых долей моноатомного слоя большинства элементов.

Взаимодействие быстрых ионов с твердым телом приводит к выбиванию атомов и молекул материала, как в нейтральном, так и в заряженном состоянии. На таком явлении сравнительного эффективного образования заряженных частиц (вторичных ионов) и на принципе высокочувствительных масс-спектрометрических измерениях и основан метод ВИМС.

Самое важное значение в вопросе о возможностях ВИМС как метода анализа поверхностей имеет взаимосвязь между параметрами пучка первичных ионов, скоростью распыления поверхности и порогом чувствительности для элементов.

Этот метод также используется при изучении тонких пленок, покрывающих различные поверхности [1-4]. Известно, что лед в основном покрывает поверхность материалов. Лед является одним из основных компонентов твердых тел Солнечной системы, которой сыграл важную роль при формировании всех планет. Лед в солнечной системе при воздействии различных факторов подвергается эрозии и в разных состояниях может эмитироваться на космос. Регистрация этих частиц даёт возможность определить образование жизни в этой планете. Исследования водных кластеров обеспечивают основное понимание водородного соединения, водяные решения фазы, а также явления важные в атмосферной науке. Связь между физическим и химическим свойствами и структурами водных групп изучены при различных экспериментальных условиях. Другие количественные исследования также сделаны включая те посвященные мере образования и показатель разделения, а также показатели различные интра окружают реакции групп гидрата. Тема значительного интереса соответствует началу волшебных номеров, нарушений в определенных размерах в в противном случае гладко varying массовые спекральные распределения. Несколько

экспериментов обеспечивают подтверждение, которое показывает, что волшебные числа понаблюдаанные в кластерных распределениях имеют отношение к стабильным структурам, факт, который поддержан теоретическими соображениями. Значительное усилие истрачено, чтобы имитировать структуру водных групп и, чтобы вычислять их связь энергии. Результаты предусмотрели лучшее понимание этого простого и уникального растворителя.

Распыление льда также изучалось в экспериментах с помощью разных ионов таких как Ar^+ , Ne^+ , N^+ и He^+ с разными значениями начальной энергии. При изучении распыления льда они пришли к выводу, что коэффициенты распыления чувствительны к зарядовому состоянию иона, но не зависят от толщины льда и температуры ниже 60 К. Последующие исследователи подтвердили отсутствие зависимости от толщины льда или температуры, причем последнее исследование не обнаружило изменений до $T = 140$ К. Кроме того обнаружили, что водяной лед имеет выход 10 молекул на ион при 10 К при бомбардировке He^+ с энергией 1,5 МэВ, что было в хорошем состоянии [5-7]. Во всех этих работах не исследовано визуальна сама процесс распыления.

Поэтому в настоящей работе приведены результаты визуального исследования процесса распыления пленки льда, покрытой Au (111) при бомбардировке ионами Ar^+ с начальной энергиями 300 эВ, 500 эВ и 700 эВ.

Метод и результаты исследования. Метод молекулярной динамики был использован для достижения нашей цели. Развитие молекулярной динамики шло двумя путями. Первый, обычно называемый классическим, (когда вычисляются траектории атомов) имеет довольно длительную историю. Он относится к задаче двух частичного рассеяния, которая может быть решена аналитически. Однако, как хорошо известно, даже уже для трех частиц появляются трудности, затрудняющие аналитическое решение. Примером может служить простая химическая реакция $\text{H} + \text{H}_2 = \text{H}_2 + \text{H}$. Для такой реакции Топлей и Эйринг в 1936 году провели попытку расчета нескольких шагов вдоль одной из траекторий. Это было за 30 лет до того, как возможности такого расчета стали возможны на компьютере. Позднее классический подход был подкреплён полуклассическими и квантово-химическими расчетами в тех областях, где влияние квантовых эффектов становилось значимым [149].

Вторым путем развития метода молекулярной динамики стало исследование термодинамических и динамических свойств систем. Идеи, лежащие в основу этого пути, восходят к работам Ван-дер-Ваальса и Больцмана.

Суть метода молекулярной динамики является заключается в следующем: -задаются исходные координаты частиц в соответствии с кристаллической структурой вещества, его плотностью и температурой, -рассчитывается движение некоторого числа характерных частиц рассматриваемого вещества под действием приложенных сил, - по характеристикам смещений атомов, произошедших вследствие приложенных сил или каких-либо возмущений в веществе, определяются макроскопические характеристики состояния этого вещества [8-12]. Для описания взаимодействия ионов с поверхностных атомов используется потенциалы взаимодействия.

Так как настоящей время не существует потенциалов межатомного взаимодействия, которые удовлетворительно описывали бы взаимодействие в достаточно широком диапазоне расстояний между атомами, то используется комбинация потенциальных функций, т.е. расчеты разделяются по различным потенциальным функциям в зависимости от расстояния между частицами. При взаимодействии иона с атомами мишени и взаимодействия атомов мишени друг с другом описана в работе [13]. Для каждого иона была рассмотрена одна траектория и каждая траектория длилась несколько пикосекунд. Система, которая использована в настоящей работе, также хорошо описана в работе [14].

МД представленной в этой работе является моделью микроскопического движения атомов льда, осаждённых на поверхность металла. Основной частью МД моделирования - потенциалы взаимодействия, которые очень важны для описания силы между атомами, будут представлены в этом разделе. Так как система состоит из атомов металла и молекул воды (состоит из атомов водорода и кислорода) необходимо выбрать потенциал взаимодействия, который может описывать реальный характер взаимодействия между этими атомами.

На рис. 1а. представлена падающая частица и мишень при $t=0$ пикосекунд (пкс). Ион Ag^+ падает на мишень при угле падения 90° с начальной энергией 300 эВ. На рис. 1б показано состояние мишени, когда после падения иона прошел $t=2$ пкс. Видно, что плёнка льда разорвалась почти на две части в зоне падения иона Ag^+ . К этому моменту ион Ag^+ успел обратно выходит в вакуум. Также можно увидеть несколько молекул и маленьких распылённых кластеров. Эти молекулы покидали пленки с самых нижних частей. А некоторые начали образовывать ленты молекул воды по краям кристалла. А на самом кристалле увеличилось колебания атомов, которые расположены по двум краям. Из-за большой передачи энергии нижнем правой части и верхнем левой части кристалла колебания атомов золота больше чем остальные части. При $t=3,6$ пкс ион находится вдали мишени. Тот размер той части пленки, которая разделилась увеличилось (открытое пространство). А атомы золота в правой нижней части и верхней левой части подвергаются большую колебанию. Распыление молекул воды тоже увеличиваются (рис. 1в). На рис. 1 г представлено состояние мишени при $t=5$ пкс. К этому моменту размер открытого пространства еще увеличился, процесс распыления молекул почти закончился. Следует отметить, что число колеблющихся атомов тоже увеличилось и некоторые атомы, расположенные в центральной части кристалла не участвуют в процессе колебании.

На рис. 2 представлен процесс ионной бомбардировки мишени Au (111) покрытой двенадцатью слоями пленки воды с начальной энергией $E_0=500$ эВ. На рис. 2 б представлено состояния мишени при $t=3$ пкс. Видно, что процесс распыления очень мала так как малое количество молекул воды покидали пленку. А левая часть пленки почти оторвалось от кристалла. Также наблюдается колебание всех атомов кристалла. При $t=4$ пкс левая часть пленки начинает подниматься вверх и большая часть молекул воды находится в этой оторванной пленке в виде большого кластера. Колебания атомов кристалла увеличивается особенно по краям пару атомов покидали кристалл с правой части (рис. 2 в). На рис. 2 г представлен состояния при $t=6$ пкс. Видно, что ширина того участка связывающей правую и левую части уменьшилось и левая часть еще перемещается вверх. Колебания атомов золота ещё увеличились. Следует отметить, что правая часть пленки все еще остается на поверхности кристалла.

На рис. 3 представлен процесс бомбардировки иона Ag^+ с $E_0=700$ эВ поверхность Au(111), покрытой двенадцатью слоями льда. При $t=3$ пкс (рис. 3 б) можно увидеть распыляющиеся молекулы, кластеры в малых количествах, а также образование открытой части внутри пленки. Некоторые молекулы также покидают пленки её с краёв. Из-за больших значений начальной энергии некоторые атомы кристалла с нижней части кристалла за счет каскадного механизма. На рис. 3 в представлен состояния при $t=4$ пкс. Видно, что открытая часть пленки увеличилось еще. Следует отметить, при малых значениях начальной энергии разрушенная часть пленки в основном в одной части, то в этом случае разрушения пленки наблюдаются по всей пленке. Из-за передачи энергии с пленки на кристалл, число атомов золота, выбитых с нижней части также увеличилось. Колебания атомов золота тоже увеличилось. На рис. 3 г представлен мишень при $t=6$ пкс. Видно, что часть пленки двигается в верхнем направлении. Открытая часть пленки увеличилась. Атомы кристалла не участвуют отдельно в процессе колебании, а вес кристалл подвергается колебаниями. Этот изгиб кристалла золота приводит к отталкиванию пленки от кристалла. Следует отметить, что ион Ag^+ остается внутри пленки.

При этом распыленными частицами, считались те, которые отлетали от поверхности в направлении вверх, а частицы, которые вышли из системы в боковом направлении или в направлении вниз, не учитывались как распыленные.

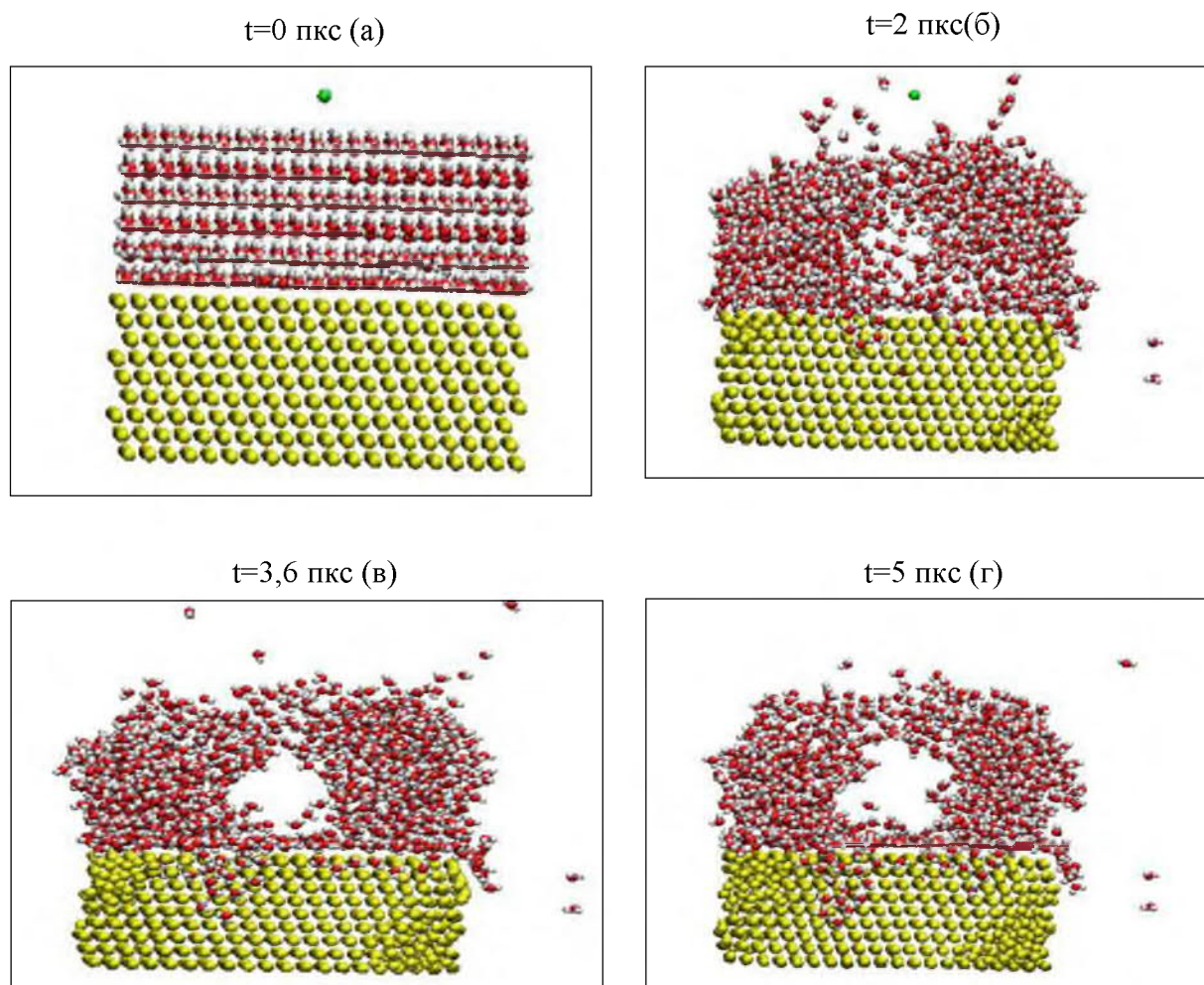
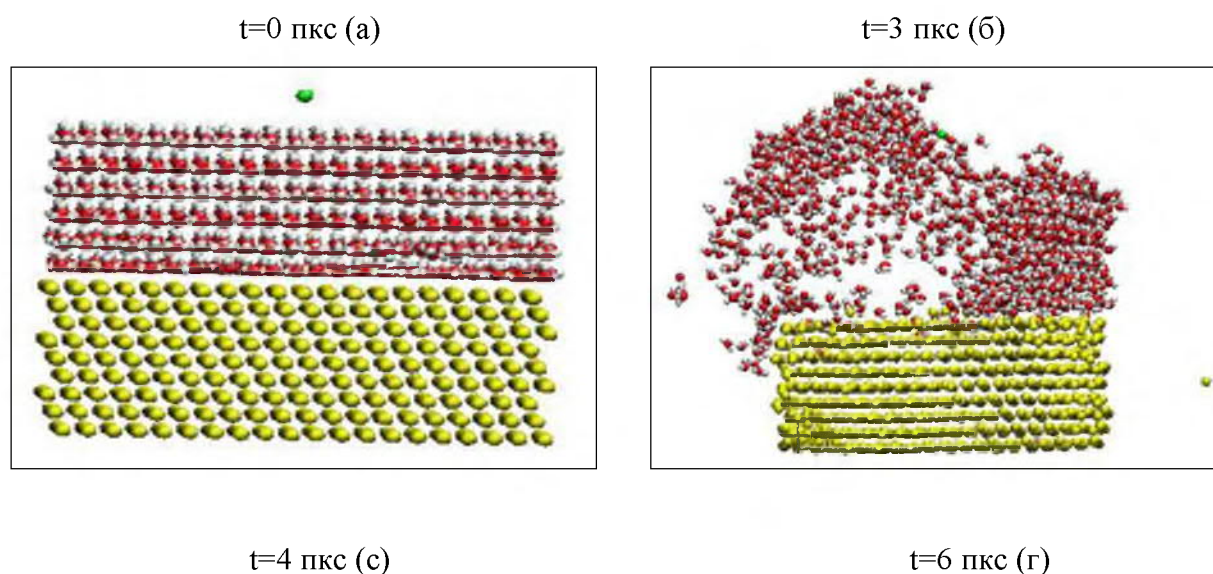


Рис.1 Процесс распыления при бомбардировке ионами Ar^+ с начальной энергией $E_0=300$ эВ. а- 0 пкс, б-2пкс, в-3,6 пкс и г- 5 пкс



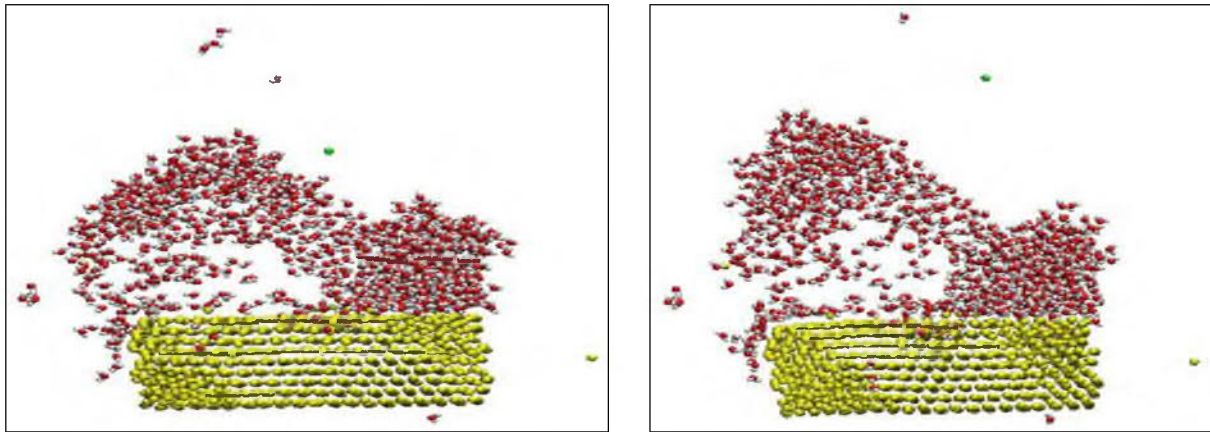
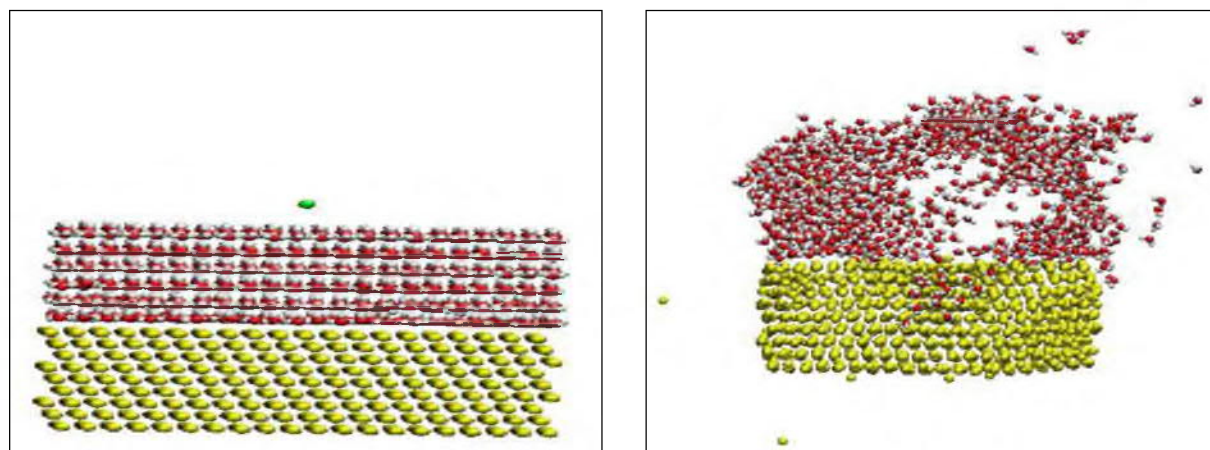


Рис.2 Процесс распыления при бомбардировке ионами Ar^+ с начальной энергией $E_0=500$ эВ. а- 0 пкс, б-3пкс, в-4 пкс и г- 6 пкс

t=0 пкс (а)

t=3 пкс(б)



t=4 пкс (в)

t=6 пкс (г)

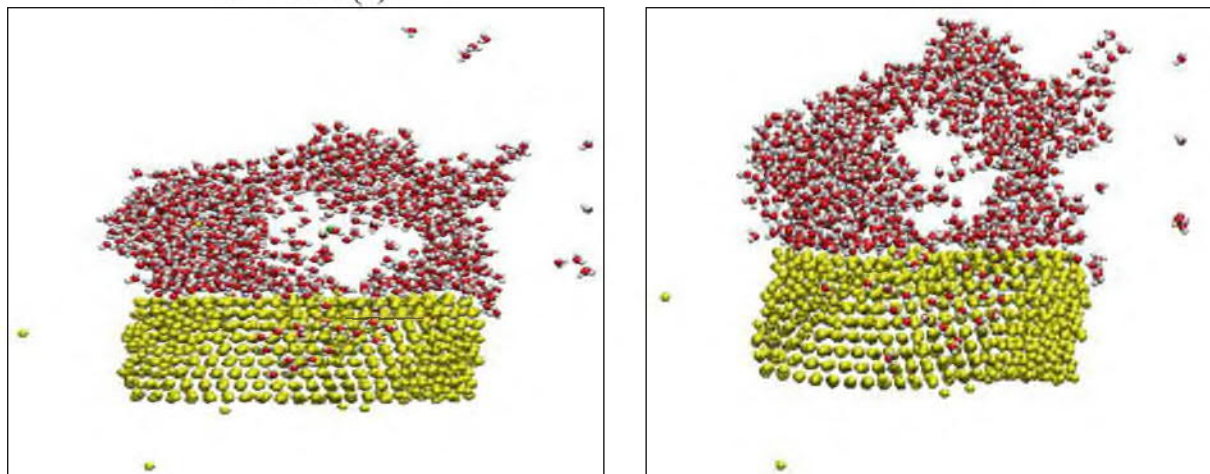


Рис.3 Процесс распыления при бомбардировке ионами Ar^+ с начальной энергией $E_0=700$ эВ а- 0 пкс, б-3 пкс, в-4 пкс и г- 6 пкс.

Заключение. Визуально изучен процесс бомбардировки двенадцати слоёв льда, покрывающих Au(111), ионами Ar^+ с $E_0=300$ эВ, 400 эВ и 700 эВ. Показано, что при значениях начальной энергии до 300эВ наблюдается обрыв пленки льда, покрытой металлической

Сборник статей международной научно-практической конференции по «Полупроводниковая опто- и наноэлектроника, альтернативные источники энергии и их перспективы» Андижан, 12-13 октября 2023 года

мишени, до 500 эВ наблюдается отрыв какой-то части пленки, а до 700 эВ наблюдается полное разрушение пленки и изгиб кристалла мишени. При этом также наблюдается распыления молекул и кластеров воды, а также выбитых атомов золота по краям и нижней части кристалла.

Литература

1. Брандон Д., Каплан В. Микроструктура материалов. Методы исследования и контроля. -М.: Техносфера, 2006. 384 с.
2. Масс-спектрометрия, Химическая энциклопедия. Т. 2. - М.: Большая Российская энциклопедия, 1998. С. 658–663.
3. Boxer S.G., Kraft M.L. and Weber P.K. "Advances in imaging secondary ion mass spectrometry for biological samples," *Annu. Rev. Biophys.* 2009. 38, 53–74. doi: 10.1146/annurev.biophys.050708.133634.
4. Brahmi C, Domart-Coulon I, Rougée L, Pyle D, Stolarski G, Mahoney J. J., et al.. "Pulsed ^{86}Sr -labeling and NanoSIMS imaging to study coral biomineralization at ultra-structural length scales". *Coral Reefs* 31. 2012, 741–752. doi: 10.1007/s00338-012-0890-3
5. Sittler Jr. E. C. et al. *Planet. Space. Sci.*, 2007.56, 3.
6. Famá M et al. *Surf. Sci.*, 2008. 602, P.156-160.
7. Cooper J. F. et al. *Icarus*, 2007. 149, P.133-136.
8. W. L.Jorgensen, and J.Tirado-Rives." Monte Carlo vs molecular dynamics for conformational sampling," *The Journal of Physical Chemistry* 100 (34), 1996. P.14508-14513.
9. J. R.Gullingsrud J.R., Braun R and Schulten K." Reconstructing potentials of mean force through time series analysis of steered molecular dynamics simulations," *Journal of Computational Physics* 151 (1), 1999. P190-211.
10. Akimov A. V. and Kolomeisky A.B." Recursive Taylor series expansion method for rigid-body molecular dynamics," *Journal of chemical theory and computation* 7 (10). 2011, P3062-3071.
11. Kutteh R. "New methods for incorporating nonholonomic constraints into molecular dynamics simulations," *The Journal of chemical physics* 111 (4), 1999. P1394-1406.
12. Streett W., Tildesley D and Saville G." Multiple time-step methods in molecular dynamics," *Molecular Physics* 35 (3), 1978. P.639-648
13. Rosenthal S.J., Jimenez R, Fleming G.R., P. Kumar and Maroncelli M. "Solvation dynamics in methanol: Experimental and molecular dynamics simulation studies," *Journal of Molecular Liquids* 60 (1-3), 1999. 25-56.
14. Kutliev U.O. "Sputtering of ice films by the bombardment of Ar ions" *Computational Materials Science* 43(4) 2008.: P.700-703. DOI: 10.1016/j.commatsci.2008.01.047