

FAZOVIIY DIAGRAMMALARNI TADQIQ QILISH. BETA (B) OLTINGUGURTNING TUZILISHI VA FAZOVIIY XUSUSIYATLARI

Murodullayev Otabek Alisher o'g'li

Xalikulov Xamro Jasur o'g'li

O'zbekiston – Finlandiya pedagogika instituti xodimi

Pastdarg'om tuman 84- maktab o'qituvchisi

Anotatsiya: *Bugungi kunda jadal rivojlanib borayotgan fazoviy diagrammalarga ega bo'lgan moddalar va ularni tadqiq qilish. Fazoviy diagrammani beta (β) oltingugurt misolida o'rganish. Chuqur va keng diagrammali ma'lumotlar to'plami orqali mavzuni bayon etish. Molekulyar dinamik (MD) simulyatsiyalari va fazoviy diagramma modellari yordamida beta (β) oltingugurtning fazoviy xususiyatlarini o'rganish zamonaviy materialshunoslikda keng qo'llaniladigan yondashuvlardir. Eksperimental tadqiqotlar uchun sintez metodlari, rentgen diffaktsiyasi (RD), skanerlash elektron mikroskopiyasi (SEM) va issiqlikni differensial tahlil qilish usullarini qo'llash bo'yicha izlanishlar olib borildi.*

Kalit so'zlar: *Fazoviy diagramma, beta (β) oltingugurt, rentgen diffaktsiyasi, kristalli tuzilishi, skanerlash elektron mikroskopiyasi, Molekulyar dinamik (MD) simulyatsiyalari, fazoviy diagramma modellari, mexanik xususiyatlar.*

STUDY OF SPATIAL DIAGRAMS. STRUCTURE AND SPATIAL PROPERTIES OF BETA (B) SULFUR

Murodullayev Otabek Alisher o'g'li

Khalikulov Khamro Jasur o'g'li

Employee of the Uzbekistan-Finland Pedagogical Institute

Teacher of school 84, Pastdarg'om district

Annotation: *Nowadays, there is rapid progress in the study of materials with phase diagrams and their investigation. This work focuses on the study of the phase diagram using beta (β) sulfur as an example. The topic is elaborated through a comprehensive dataset of detailed and extensive diagrams. Investigating the phase properties of beta (β) sulfur using Molecular Dynamics (MD) simulations and phase diagram models is a widely adopted approach in modern materials science. Research has been conducted on applying synthesis methods, X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM), and differential thermal analysis (DTA) for experimental studies.*

Keywords: *Phase diagram, beta (β) sulfur, X-ray diffraction, crystalline structure, scanning electron microscopy, Molecular Dynamics (MD) simulations, phase diagram models, mechanical properties.*

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ. СТРУКТУРА И ФАЗОВЫЕ СВОЙСТВА БЕТА (В) СЕРЫ

Муродуллаев Отабек Алишерович

Халиқулов Хамро Жасулович

Сотрудник Узбекско-Финского педагогического института

Учитель школы №84 Пастдаргомского района

Аннотация: В настоящее время активно развиваются исследования материалов с фазовыми диаграммами. В данной работе изучается фазовая диаграмма на примере бета (β) серы. Тема раскрыта на основе глубокого и обширного набора данных с диаграммами. Изучение фазовых свойств бета (β) серы с использованием молекулярно-динамических (MD) симуляций и моделей фазовых диаграмм является широко применяемым подходом в современной материаловедении. Для экспериментальных исследований проведены работы по применению методов синтеза, рентгеновской дифракции (XRD), сканирующей электронной микроскопии (SEM) и дифференциального термического анализа (DTA).

Ключевые слова: Фазовая диаграмма, бета (β) сера, рентгеновская дифракция, кристаллическая структура, сканирующая электронная микроскопия, молекулярно-динамические (MD) симуляции, модели фазовых диаграмм, механические свойства.

KIRISH

Oltingugurt, o'zining turli allotroplariga ega bo'lib, fizikaviy-kimyo va materialshunoslikda muhim ahamiyatga ega. Oltingugurtning turli fazalari, shu jumladan beta (β) oltingugurt, o'zining o'ziga xos fizik va kimyoviy xususiyatlari bilan ilmiy izlanishlar uchun qiziqarli bo'lib qolmoqda. Beta (β) oltingugurt, o'zining noan'anaviy kristalli tuzilishi va fazoviy o'tishlari bilan ajralib turadi. Ushbu maqolada, beta-oltingugurtning tuzilishi, fazoviy diagrammalari va uning fazoviy xususiyatlarini o'rganish maqsadida amalga oshirilgan tadqiqotlar natijalari taqdim etiladi.

METODOLOGIYA

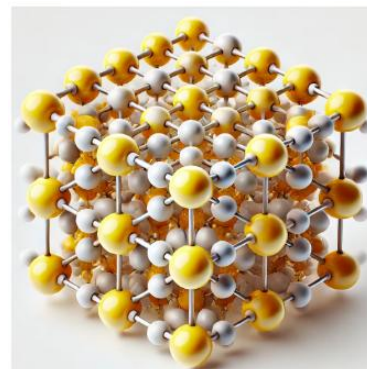
Beta (β) oltingugurtning fazoviy diagrammasini o'rganish uchun bir nechta eksperimental va nazariy metodlardan foydalanildi. Eksperimental tadqiqotlar uchun sintez metodlari, rentgen diffaktsiyasi (RD), skanerlash elektron mikroskopiyasi (SEM) va issiqlikni differensial tahlil qilish (DSC) usullari qo'llanildi. Nazariy tahlil esa molekulyar dinamik simulyatsiyalar va fazoviy diagramma modellari yordamida amalga oshirildi. Molekulyar dinamik (MD) simulyatsiyalari va fazoviy diagramma modellari yordamida beta (β) oltingugurtning fazoviy xususiyatlarini o'rganish zamonaviy materialshunoslikda keng qo'llaniladigan yondashuvlardir. Ushbu metodlar o'zining yuqori aniqligi va xatti-harakatlarni prognoz qilish imkoniyati bilan ilmiy tadqiqotlarda keng qo'llanilmoqda. Quyida bu yondashuvlar haqida batafsil ma'lumot berilgan:

MOLEKULAR DINAMIK SIMULYATSIYALARI

Molekulyar dinamik simulyatsiyalari, moddalar molekulalarining vaqt davomida qanday harakatlanishini simulyatsiya qilishga imkon beruvchi hisoblash usulidir. Ushbu simulyatsiyalar yordamida, beta-oltingugurtning kristall tuzilishi, atomar o'zgarishlar, fazoviy o'tishlar va ularning harorat va bosim bilan qanday o'zgarishini batafsil o'rganish mumkin. Molekulyar dinamik simulyatsiyalari quyidagi jarayonlarda qo'llaniladi:

KRISTALLI TUZILISHNI MODELLASH:

Beta-oltingugurtning tetragonal kristalli tuzilishi, atomlararo bog'lanish va ular orasidagi o'zaro ta'sirlar MD simulyatsiyalari orqali modelashtiriladi. Bu jarayon orqali materialning strukturasi, simmetriya va atomlararo bog'lanishlar to'g'risida ma'lumotlar olinadi. Beta-oltingugurtning fazoviy o'tishlarini (masalan, alfa-oltingugurtga o'tish) tahlil qilishda MD simulyatsiyalari yordamida yuqori bosim va harorat sharoitida materialning strukturasi o'zgarishlar kuzatiladi. MD simulyatsiyalari orqali, ushbu o'tishlarning dinamikasi va tezligi haqida aniq prognozlar berish mumkin. MD simulyatsiyalari yordamida oltingugurtning issiqlik va mexanik xususiyatlari o'rganiladi. Bu, materialning termodinamik xususiyatlari (masalan, issiqlik o'tkazuvchanligi, qattiqligi) va uning fazoviy o'tishlariga ta'siri haqida aniq ma'lumotlar beradi.^[2]



1 - rasm. Beta - Oltingugurtning kristal tuzilish modeli.

FAZOVIIY DIAGRAMMA MODELLARI

Fazoviy diagrammalar, materialning turli fazalari va ularning bir-biriga o'tish sharoitlarini aks ettiradigan grafiklardir. Beta-oltingugurtning fazoviy diagrammasini yaratish uchun, bir nechta modelashtirish usullari qo'llaniladi:

Termodinamik modellash: Beta-oltingugurtning fazoviy diagrammasi odatda harorat va bosimning funksiyasi sifatida tasvirlanadi. Termodinamik modellash yordamida, harorat va bosim sharoitlariga bog'liq ravishda, beta-oltingugurtning alfa-oltingugurtga yoki boshqa allotroplarga o'tishini prognoz qilish mumkin.^[3]

Molekulyar simulyatsiyalar asosida fazoviy diagramma: Molekulyar dinamik simulyatsiyalari yordamida materialning energiya holatlari va fazoviy o'tishlarining harorat va bosimga bog'liqligi tahlil qilinadi. Bu modelashda materialning potensial energiyasini va uning fazoviy o'zgarishlarining o'zgarishini hisobga olish muhimdir.^[4]

Fazoviy o'tishlarni hisoblash: Molekulyar dinamik simulyatsiyalar yordamida, fazoviy o'tishlarni (masalan, beta → alfa fazoviy o'tishi) hisoblashingiz mumkin. Bu o'tishlar ko'pincha bir nechta fazalar orasidagi termodinamik barqarorlikni aniqlash uchun fazoviy diagrammalarda aks ettiriladi.

Molekulyar dinamik simulyatsiyalari va fazoviy diagramma modellarining integratsiyasi

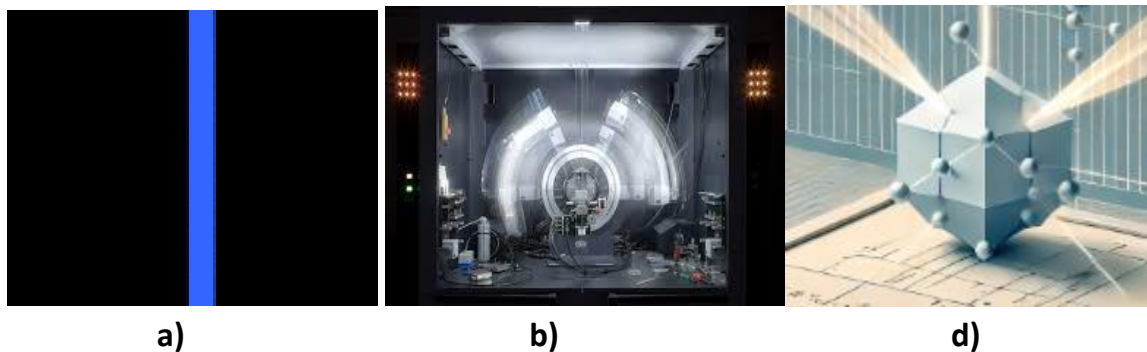
Molekulyar dinamik simulyatsiyalari va fazoviy diagramma modellari birgalikda beta-oltingugurtning fazoviy o'tishlarini, shuningdek, uning harorat va bosim bilan bog'liq xususiyatlarini yanada chuqurroq tushunishga imkon beradi. MD simulyatsiyalari yordamida olingan natijalar fazoviy diagrammalarni yanada aniqroq va ishonchli qilish uchun ishlatiladi. Shu tarzda, ushbu usullar beta-oltingugurtning fizik va kimyoviy xususiyatlarini kompleks tarzda modellashtirish imkonini beradi.^[5]

Molekulyar dinamik simulyatsiyalari va fazoviy diagramma modellari beta-oltingugurtning tuzilishi, fazoviy o'tishlari va harorat-bosim sharoitlaridagi xususiyatlarini o'rganishda muhim rol o'ynaydi. Ushbu yondashuvlar yordamida oltingugurtning yangi allotroplarini yaratish, materiallar texnologiyasi va sanoat dasturlarida qo'llaniladigan yangi materiallarni ishlab chiqishda katta ahamiyat kasb etadi. Bu metodlar, oltingugurtning fazoviy xususiyatlari va uning turli sharoitlardagi xatti-harakatlarini yanada chuqurroq tushunishga yordam beradi.^[6]

NATIJALAR VA MUHOKAMA

Tuzilma va kristalli fazalar

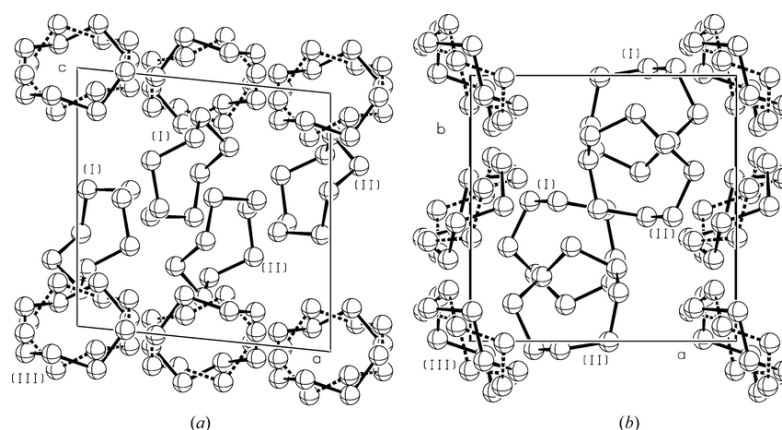
Beta-oltingugurtning kristalli tuzilishi, yuqori bosim ostida yoki sovutish jarayonlarida o'zgarib boradi. Beta-oltingugurt, o'zining tetragonal kristalli tuzilishi bilan ajralib turadi. Rentgen diffraksiyasi (XRD) ma'lumotlariga ko'ra, beta-oltingugurtning kristalli tuzilishi o'zining simmetrik fazasidan farq qiladi va bu uning o'ziga xos fazoviy o'tishlarini keltirib chiqaradi. Bunda, oltingugurtning beta fazasi, odatda past haroratlarda barqaror bo'lib, yuqori harorat va bosim sharoitlarida alfa-oltingugurtga o'tadi.



2– rasm. a) Difraksiya b) rentgen nurlarining difraksiyasi d) (β) oltingugurtning difraksiyasi

FAZOVIIY DIAGRAMMA

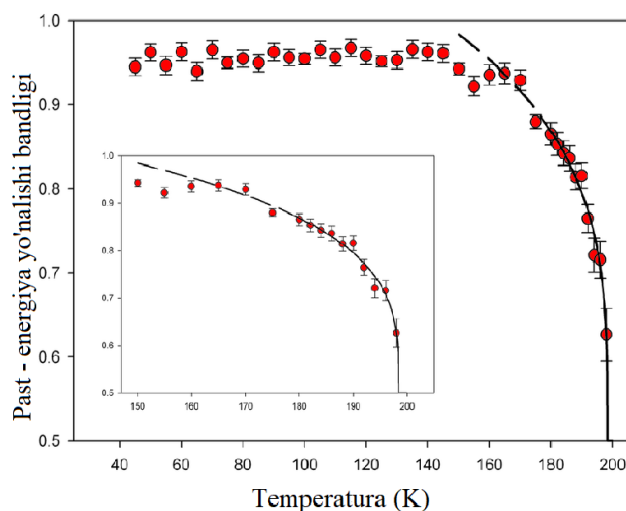
Beta-oltingugurtning fazoviy diagrammasi, uning harorat va bosimga bog'liq bo'lgan fazaviy o'tishlarini aks ettiradi. Tadqiqotlar shuni ko'rsatadiki, beta-oltingugurt o'zining fazoviy o'tishlarini yuqori bosim va haroratda amalga oshiradi. Beta fazasi, past haroratda barqaror bo'lib, uning struktura o'zgarishlari yuqori bosimlarda va haroratda sezilarli bo'ladi. Bu fazoviy o'tishlar, oltingugurtning qattiqlik, erish nuqtasi va boshqa fazoviy xususiyatlariga ta'sir qiladi.



3 – rasm. (a) b o'qi bo'ylab va (b) c o'qi bo'ylab ko'rilgan monoklinik oltingugurtning kristall tuzilishining tasviri. Asimmetrik birlikdagi uchta S_8 molekulasini (I) (atomlar S_1-S_8), (II) (atomlar S_9-S_{16}) va tartibsiz molekula (III) ($S_{17}-S_{24}$, $S_{17}'-S_{24}'$ atomlari) sifatida belgilanadi.^[1]

FAZOVIIY XUSUSIYATLAR

Beta-oltingugurtning fazoviy xususiyatlari, uning kimyoviy reaksiyalari va fizikaviy xususiyatlarini o'rganishda muhim ahamiyatga ega. Past haroratlarda beta-oltingugurtning qattiqligi va issiqlik o'tkazuvchanligi o'zgaradi, bu esa uning material sifatidagi imkoniyatlarini kashf etishda muhimdir. Beta fazasining yuqori bosim va harorat sharoitida barqarorligi, bu materialning yuqori bosimli muhitlarda ishlashini ta'minlaydi.^[7]



4 – rasm. Quvvat qonuniga ko'ra, past energiya yo'nalishidagi joy bandligining aniqlangan qiymatlari: qo'shimcha $150 < T < 200$ K oralig'ini ko'rsatadi. Qattiq chiziq 180 K dan yuqori nuqtalarga mos keladigan eng kichik kvadratlardir. 150 dan past to'yinganlik effektlari K aniq ko'rinadi.^[1]

Beta-oltingugurtning fazoviy xususiyatlari va strukturasi tadqiq qilishda bir nechta fizik tenglamalar va nazariy hisoblash usullari qo'llaniladi. Quyida beta-oltingugurt va uning fazoviy o'tishlarini o'rganishda foydali bo'lishi mumkin bo'lgan ba'zi fizik tenglamalar keltirilgan:

1. Energiya va fazoviy o'tishlarni modellash:

Beta-oltingugurtning fazoviy o'tishlari, energiya holatlari bilan bog'liq bo'lib, bu jarayonlar uchun **Gibbs erkin energiya** (G) tenglamasi ishlatiladi. Odatda, fazoviy o'tishlar faqatgina erkin energiya minimallashtirilganida sodir bo'ladi:

$$G=H-TS$$

Bu yerda:

G — erkin energiya,

H— entalpiya,

T— harorat,

S — entropiya.

Beta-oltingugurtning alfa-oltingugurtga o'tishi, shuningdek, boshqa allotroplarga o'tishlar, erkin energiyaning farqi asosida prognoz qilinadi.

3. Termodinamik hisoblashlar va fazoviy diagramma:

Beta-oltingugurtning fazoviy diagrammasini tuzishda, uning turli fazalari orasidagi bog'lanish va o'tish nuqtalari **Van der Waals** potensialini hisoblash orqali aniqlanishi mumkin:

$$V_{vdW} = -\frac{C}{r^6}$$

Bu yerda:

C — Van der Waals koeffitsienti,

r — atomlar orasidagi masofa.

Ushbu potensial, atomlararo o'zaro ta'sirning asosiy mexanikasini tasvirlashda qo'llaniladi va materialning fazoviy o'tishlarini, masalan, yuqori bosim ostida beta-oltingugurtning alfa-oltingugurtga o'tishlarini tahlil qilishda ishlatiladi.

4. Termodinamik barqarorlik va fazaviy o'tishlar:

Beta-oltingugurtning barqarorligi va fazoviy o'tishlarining sharoitlari **Maxvellning tenglamalari** yordamida ifodalanishi mumkin:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V = \frac{\Delta S}{\Delta V}$$

Bu yerda:

P— bosim,

T — harorat,

S — entropiya,

V — hajm.

Mazkur tenglama, beta-oltingugurtning fazaviy o'tishlari va harorat/bosim sharoitlariga qarab materialning barqarorligini aniqlashda qo'llaniladi.

5. Termodinamik fazaviy diagramma modellari:

Fazaviy diagrammalarni tuzishda **Klausius-Klapeyron tenglamasi** ham muhim rol o'ynaydi. Bu tenglama materialning fazaviy o'tish nuqtalarini, masalan, erish nuqtasi va o'tish bosimini hisoblash uchun ishlatiladi:

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta S}{\Delta V}$$

Bu yerda:

dP/dT — bosimning haroratga nisbatan o'zgarish tezligi,

ΔS — fazaviy o'zgarish entropiyasidagi farq,

ΔV — fazaviy o'zgarish hajmidagi farq.

Beta-oltingugurtning fazoviy xususiyatlarini o'rganish, yuqoridagi fizik tenglamalar yordamida amalga oshiriladi. Bu tenglamalar, materialning fazaviy o'tishlarini, kristalli strukturasini, atomlararo o'zaro ta'sirlarni va termodinamik barqarorligini hisoblashda muhim ahamiyatga ega. Shu orqali beta-oltingugurtning yuqori bosim va harorat sharoitidagi xatti-harakatlarini tahlil qilish, yangi materiallar yaratish va mavjud materiallarning fazoviy xususiyatlarini optimallashtirish imkoniyatlari kengayadi.

XULOSA

Beta-oltingugurtning tuzilishi va fazoviy xususiyatlarini o'rganish, uning ilmiy va sanoat dasturlarida qo'llanilishiga katta hissa qo'shadi. Beta fazasining o'ziga xos kristalli tuzilishi, fazoviy diagrammalari va fazoviy o'tishlari uning yuqori bosim va harorat sharoitida ishlash imkoniyatlarini kengaytiradi. Kelajakdagi tadqiqotlar, beta-oltingugurtning boshqa fazaviy o'tishlari va uning xususiyatlarini yanada chuqurroq o'rganishga imkon yaratadi. Beta-oltingugurtning tuzilishi va fazoviy xususiyatlarini o'rganish, materialshunoslik va kimyo sohalarida muhim ahamiyatga ega. Ushbu tadqiqotlar orqali oltingugurtning turli allotroplari, jumladan, beta-oltingugurtning kristalli tuzilishi va uning fazoviy o'tishlari aniqlanishi mumkin. Beta-oltingugurt o'zining tetragonal kristalli tuzilishi bilan boshqa oltingugurt fazalaridan farq qiladi va yuqori bosim va harorat sharoitida alfa-oltingugurtga o'tishi mumkin. Ushbu fazaviy o'tishlar materialning fizikaviy xususiyatlariga, masalan, qattiqligi, erish nuqtasi va issiqlik o'tkazuvchanligiga ta'sir qiladi. Molekulyar dinamik simulyatsiyalari va fazoviy diagramma modellari yordamida beta-oltingugurtning fazoviy xususiyatlari chuqurroq o'rganildi. Bu metodlar beta-oltingugurtning struktura o'zgarishlarini va uning turli sharoitlarda qanday xatti-harakat ko'rsatishini aniq prognoz qilish imkonini beradi. Shuningdek, ushbu yondashuvlar yordamida beta-oltingugurtning yuqori bosimli va haroratli muhitlarda qanday ishlash imkoniyatlari o'rganildi va bu materiallarning ilmiy va sanoat dasturlarida qanday foydalanilishi mumkinligi ko'rib chiqildi.

Kelajakdagi tadqiqotlar, beta-oltingugurtning boshqa fazaviy o'tishlarini, uning xususiyatlarini yanada chuqurroq o'rganishga imkon yaratadi. Bu esa oltingugurtning yangi allotroplarini yaratish va materiallar texnologiyasida foydalanish imkoniyatlarini kengaytiradi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR:

1. R. M. Ibberson, Bill David Order–disorder transition in monoclinic sulfur: a precise structural study by high-resolution neutron powder diffraction
2. Jasur o'g'li X. H. et al. The importance of sulfur and oxygen for living organisms and plants //FAN VA TA'LIM INTEGRATSIYASI (INTEGRATION OF SCIENCE AND EDUCATION). – 2024. – T. 1. – №. 3. – C. 86-91.

3. Singh M., Srivastava R., Verma K. K. Biological sulfur acquisition: An update //Elixir Appl. Bot. – 2013. – Т. 62. – С. 17740-17747.
4. Utashova S., Xoliqulov H., Tilyabov M. CONDUCTING LABORATORY CLASSES IN CHEMISTRY ON THE BASIS OF THE STEAM EDUCATION PROGRAM //Medicine, pedagogy and technology: theory and practice. – 2024. – Т. 2. – №. 4. – С. 801-808.
5. Azim o'g'li O. R. et al. Importance of integrating virtual laboratory software into analytical chemistry and learning processes //FAN VA TA'LIM INTEGRATSIYASI (INTEGRATION OF SCIENCE AND EDUCATION). – 2024. – Т. 1. – №. 3. – С. 38-43.
6. Xayrullo o'g P. U. et al. Using natural plant extracts as acid-base indicators and pKa value calculation method //FAN VA TA'LIM INTEGRATSIYASI (INTEGRATION OF SCIENCE AND EDUCATION). – 2024. – Т. 1. – №. 3. – С. 80-85.
7. Pardayev U. et al. THE EFFECTS OF ORGANIZING CHEMISTRY LESSONS BASED ON THE FINNISH EDUCATIONAL SYSTEM IN GENERAL SCHOOLS OF UZBEKISTAN //Journal of universal science research. – 2024. – Т. 2. – №. 4. – С. 70-74.