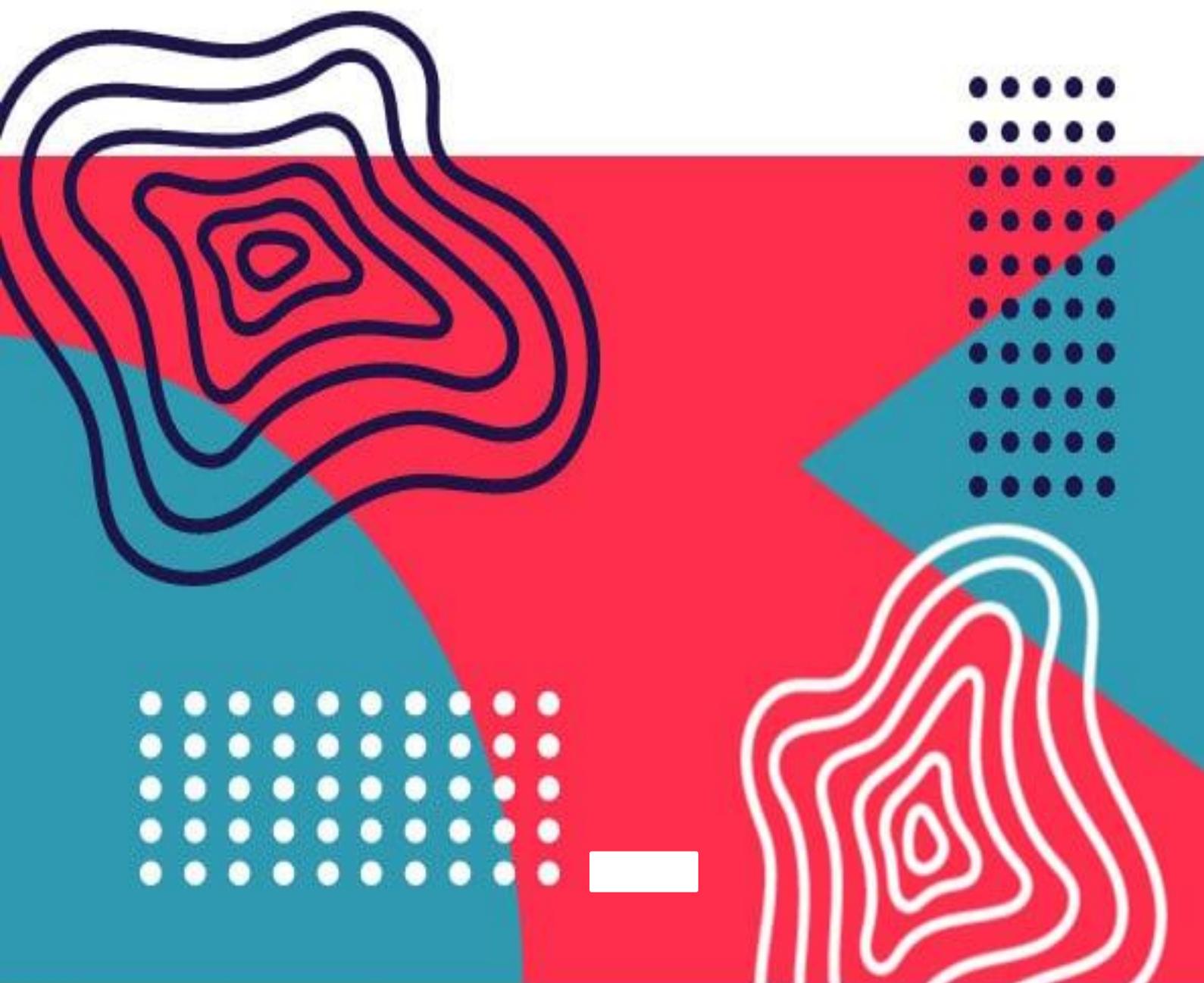


JOURNAL OF
NATURAL SCIENCE

№ 4(9)2022



<u>ТАҲРИР ҲАЙЪАТИ</u>	<u>ТАҲРИРИЯТ АЪЗОЛАРИ</u>
<p>Бош муҳаррир – У.О.Худанов т.ф.н., доц. Бош муҳаррир ёрдамчиси-Д.К.Мурадова, PhD, доц. Масъул котиб- Ш Урозов</p>	<ol style="list-style-type: none">1. Худанов У.О. – ЖДПИ Табиий фанлар факултети декани, т.ф.н., доц.2. Шилова О.А.-д.х.н., профессор Института химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук (ИХС РАН)3. Маркевич М.И.-ф.ф.д. проф Белорусия ФА4. Elbert de Josselin de Jong- профессор, Niderlandiya5. Кодиров Т- ТТЕСИ к.ф.д, профессор6. Абдурахмонов Э.А.–СамДУ к.ф.д., профессор7. Насимов А.М.–СамДУ к.ф.д., профессор
<p>Муассис-Жиззах давлат педагогика институти</p>	<ol style="list-style-type: none">8. Сманова З.А.-ЎзМУ к.ф.д., профессор9. Тошев А.Ю.- ТТЕСИ к.ф.д, доцент10. Султонов М-ЖДПИ к.ф.д, доц11. Яхшиева З- ЖДПИ к.ф.д, проф.в.б.12. Мавлонов Х- ЖДПИ б.ф.д., проф13. Муродов К-СамДУ к.ф.н., доц.14. Абдурахмонов Ғ- ЎзМУ фалсафа фанлари доктори (кимё бўйича) (PhD), доц
<p>Журнал 4 марта чиқарилади (хар чоракда)</p>	<ol style="list-style-type: none">15. Хакимов К – ЖДПИ г.ф.н., доц.16. Азимова Д- ЖДПИ фалсафа фанлари доктори (биология бўйича) (PhD), доц17. Юнусова Зебо – ЖДПИ к.ф.н., доц.
<p>Журналда чоп этилган маълумотлар аниқлиги ва тўғрилиги учун муаллифлар масъул</p>	<ol style="list-style-type: none">18. Гудалов М- ЖДПИ фалсафа фанлари доктори (география фанлари бўйича) (PhD)19. Мухаммедов О- ЖДПИ г.ф.н., доц
<p>Журналдан кўчириб босилганда манбаа аниқ кўрсатилиши шарт</p>	<ol style="list-style-type: none">20. Хамраева Н- ЖДПИ фалсафа фанлари доктори (биология фанлари бўйича) (PhD)21. Рашидова К- ЖДПИ фалсафа фанлари доктори (кимё бўйича) (PhD), доц22. Муминова Н- ЖДПИ к.ф.н., доц23. Мурадова Д- ЖДПИ фалсафа фанлари доктори (кимё фанлари бўйича) (PhD), доц24. Инатова М- ЖДПИ фалсафа фанлари доктори (кимё фанлари бўйича) (PhD)

Жиззах давлат педагогика институти Табиий фанлар факултети

Табиий фанлар-Journal of Natural Science-электрон журнали

[/http://www.natscience.jspi.uz](http://www.natscience.jspi.uz)

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО РАСЧЁТЫ В КРЕМНИИ

Исакулова Мукаддас Шукуровна

Ассистент Джизакский

Политехнический институт, г.Джизак

Курбанова Дилафруз Собировна

Ассистент Джизакский

Политехнический институт, г.Джизак

Anotatsiya: *Ushbu maqola kvant kimyoviy hisob-kitoblari natijalariga asoslangan simulyatsiya qilingan kremniy nanozarralarini taqdim etadi.*

Аннотация: *В данной статье представлены смоделированные наночастицы кремния на основе выводов квантово-химических расчетов.*

Ключевые слова: *Квантовая химия, полуэмпирический, неэмпирический, молекулярный орбиталь, молекулярно-динамического, кластер.*

Annotation: *This article presents simulated silicon nanoparticles based on the findings of quantum chemical calculations.*

Keywords: *Quantum chemistry, semi-empirical, nonempirik, molecular orbital, molecular dynamic, cluster.*

Квантовая химия –это направление химии, рассматривающее строение и свойства химических соединений, реакцию способность, кинетику и механизм химических реакций на основе квантовой механики. Благодаря быстрому развитию квантовой химии были разработаны достаточно эффективные полуэмпирические и неэмпирические варианты метода молекулярных орбиталей (МО).

На практике обычно пользуются как полуэмпирическими, так и неэмпирическими методами. Для неспециалиста название "неэмпирический" является синонимом слова "точный", но в действительности это не так. Неэмпирические методы также являются приближенными, прежде всего из-за неполноты использованного базиса. Большинство неэмпирических расчетов проводят в базисах небольшого и среднего размеров. Это вносит существенную ошибку в результаты расчета, так как такие базисные наборы не могут передать некоторые особенности распределения электронной плотности в молекулах. В результате все без исключения параметры молекул вычисляются с некоторой ошибкой. Было бы желательно (хотя на практике это сделать очень трудно из-за больших затрат машинного времени) использовать достаточно большие базисы, которые обеспечивают выход на так называемый хартри-фоковский предел, когда дальнейшее увеличение числа базисных орбиталей не влияет на полученные результаты. Но даже в этом случае мы найдем не точное решение уравнения Шредингера, а лишь его

решение в приближении Хартри-Фока. Для получения точного решения уравнения Шредингера необходимо еще учесть электронную корреляцию.

Полуэмпирические расчеты в настоящее время чаще всего проводят в валентных приближениях ППДП, ЧПДП и ПДДП [1].

Известно, что эмпирические методы квантовой химии являются с вычислительной точки зрения наиболее эффективными, но они не содержат явную информацию об электронной структуре, что сильно ограничивает их применимость, например, к неизвестным структурам или структурам с различным типом химической связи.

Для того, чтобы уменьшить вычислительные затраты в данном случае, как уже отмечалось выше, предпочтительно использование полуэмпирических МСС. Существующие варианты МСС можно разделить на две группы по способу представления полной энергии системы. В методах первой группы [1,2,3,4], которые назовем стандартными МСС, полная энергии системы записывается в виде

$$E_{tot} = E_{rep} + \sum_i N_i \varepsilon_i + E_{at}, (1)$$

где ε_i и N_i – энергия i -го электронного состояния и число электронов в нем, первый член в (1) соответствует энергии отталкивания (энергия отталкивания ядер (или остовов атомов) минус энергия отталкивания электронов; последняя входит дважды во второй член), а последний - энергии изолированных атомов, используемой нередко в качестве подгоночного параметра. Сравнительное исследование [5] указанных вариантов МСС для исследования дефектов в кристаллическом кремнии показали, что увеличение сложности функциональных форм не обязательно приводят к улучшению получаемых результатов. Для большинства статических и динамических свойств ни один из этих форм оказались не лучшими остальных. Более того, самосогласованный вариант стандартного МСС [4] также не приводил к улучшению результатов, например, в случае исследования кластеров кремния.

Таким образом, эти МСС скорее исчерпали свои потенциальные возможности с точки зрения возможности дальнейшего их улучшения точности и надежности для применения для неизвестных структур, в особенности для богатого множества наноструктур, лежащих между небольшими молекулами и массивными материалами. МСС, предложенный в работе [6], который назовем нестандартным МСС (НМСС), в отличие от стандартных МСС, основан на другом выражении для функционала полной энергии и использует относительно небольшое количество параметров, имеющих определенную физическую смысл и связанных с показателями

экспоненты слейтеровских атомных орбиталей (АО) [7,8], которые характеризуют меру протяженности волновых функций электронов в атомах.

В настоящее время метод молекулярно-динамического (МД) моделирования [9] стал эффективным и достаточно надежным теоретическим инструментом для детального изучения динамики атомов и связанных с ней свойств многоатомных систем (твердых тел, поверхностей, дефектов, полимеров и т.д.).

Одна из первых попыток в этом направлении предпринята авторами работы [10]. Они использовали хорошо известный метод CVD с небольшой модификацией, а именно PECVD. То есть обычный метод CVD с дополнительной плазменной стимуляцией. До опубликования работы [10] люминесценция на малоразмерных частицах кремния, полученных из SiH_4/H_2 в плазме или при магнетронном распылении, уже наблюдалась [11]. С другой стороны, также были описаны попытки создания нанокристаллических пленок кремния для целей фотоники. Однако в работе [10] представлены результаты первого наблюдения видимой ФЛ от нанокристаллических пленок кремния, сформированных методом PECVD. Во время нанесения пленки подложки нагревали до температуры 230°C . В реакторе газ SiH_4 разбавляли аргоном и одновременно добавляли водород. Скорость нанесения составляла $1,5 \text{ нм/мин}$. Обычно удавалось создавать пленки нанокристаллического кремния толщиной $0,2\text{-}0,5 \text{ мкм}$ на нанокристаллической кремниевой подложке. Одна из последних публикаций как раз и посвящена доказательству получения лазерного эффекта на материале, представляющем собой агрегаты из ультрамалых частиц кремния. Процесс формирования таких частиц и собственно создание материала состоит в электрохимическом травлении монокристаллического кремния в HF и H_2O_2 . При этом используют катализаторы, способствующие образованию наночастиц. В водном растворе образуются коллоидальные агрегаты, затем они переносятся в акриловую кислоту, из которой частицы уже извлекаются в оболочке из акрилового полимера. Ультразвуковая обработка дает возможность разделить частицы по размерам и таким образом получить материалы, люминесцирующие на определенных длинах волн в видимом диапазоне излучения. Показано, что сфероидальные частицы размером порядка $1,0$ (Si_{29}), $1,67$ (Si_{123}), $2,15$, $2,9$ и $3,7 \text{ нм}$ излучают в УФ-, голубом, зеленом желтом и красном диапазонах спектра для для четырех наименьших указанных частиц.

В данном разделе мы провели кластер с димеризованной поверхностью является наиболее выгодной структурой в рамках расчетов метода

функционала локальной плотности. В данной главе мы рассмотрим расчеты кластера Si_{29} , проведенные нами в рамках нетрадиционного метода сильной связи в комбинации с методом молекулярной динамики. В частности, первый параграф посвящен результатам расчетов кластера Si_{29} с димеризованной и недимеризованной поверхностью. Во втором параграфе будет рассмотрено влияние зарядового состояния кластеров на его конфигурацию и поверхностную реконструкцию.

На рис. показаны геометрии кластеров Si_{29} , с чистой алмазоподобной геометрией (рис.а) и поверхностной реконструкцией типа димеризации (рис.б).

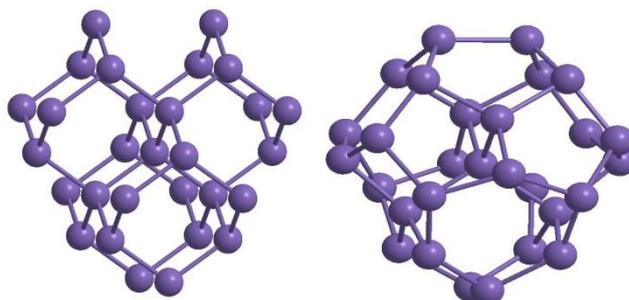


Рис.а.

Рис.б.

Мы провели расчеты кластера как с оптимизацией геометрии, так и без оптимизации. Оптимизация геометрии проводилась методами молекулярной динамики и Флетчера-Пауэлла. Все расчеты являются самосогласованными, т.е. с учетом перераспределения электронной плотности между атомами. При этом, метод оптимизации Флетчера-Пауэлла производится с сохранением начально выбранной симметрии кластера, тогда как молекулярно-динамические расчеты позволяют определить релаксированную конфигурацию кластера без учета какой-либо симметрии.

Литературы:

1. Ziyatovna Y. Z., Akobirovich B. A., Sobirovna K. D. Optimization of amperometric conditions for the determination of molybdenum ions in anthropogenic objects //Austrian Journal of Technical and Natural Sciences. – 2019. – №. 11-12. – С. 48-51.
2. Gulbayev, Y. I., Abdullayev, A. A., Qurbonova, D. S., & Raxmatillayev, X. O. O. G. L. (2022). Mikroorganizmlarning suvlarda tarqalishi va suvlarni turli yo'llar bilan tozalash. Science and Education, 3(4), 330-337.
3. Sobirovna K. D., Ziyatovna Y. Z. Amperometrik usulda Cu (II) VA Au (III) ionlarini aniqlash //Журнал естественных наук. – 2021. – Т. 3. – №. 5. – С. 36-40..

4. Kurbanova D. S., Yaxshiyeva Z. Z. Difeniltiokarbazon reagentlarining elektrokimyoviy tabiati //Science and Education. – 2021. – Т. 2. – №. 12. – С. 62-67.
5. Исакулова М. Ш., Суяркулов О. С. Ў. Квантохимические методы исследования наноразмерных кластеров //Science and Education. – 2021. – Т. 2. – №. 1. – С. 74-79.
6. Shukurovna I. M. FRACTION OF NARROW PRODUCTS PRODUCED IN THE PROCESS OF OIL PROCESSING //Web of Scientist: International Scientific Research Journal. – 2022. – Т. 3. – №. 3. – С. 822-825
7. Isakulova M. S., Mamatqulov J. R. O., Zikriyev A. A. O. MODELING OF CARBON NANOTUBES BY MOLECULAR DYNAMICS METHODS //Scientific progress. – 2021. – Т. 1. – №. 6. – С. 1046-1050.
8. Yaxshiyeva, Z. Z., Xojiyeva, S. S., & Qurbonova, D. S. (2021). Analitik kimyodagi amperometrik titrlash usulining afzalliklari. Science and Education, 2(5), 18-23.
9. Kurbanova D. S. et al. Titration of Cu (II) IONS WITH SOLUTIONS of ORGANIC REAGENTS //Eurasian Journal of Engineering and Technology. – 2022. – Т. 7. – С. 47-50.
10. Sobirovna K. D., Sattarovna K. F., Vaxodirovna J. U. ELECTROCHEMICAL METHODS FOR THE DETERMINATION OF MERCURY IONS //E Conference Zone. – 2022. – С. 41-43.
11. Dilafruz K. OQAVA SUVLARNI ZAHARLI OG'IR METALLARDAN TOZALASH //Журнал естественных наук. – 2022. – Т. 1. – №. 2 (7). – С. 282-287.
12. Ziyatovna, Y. Z., Akobirovich, B. A., & Sobirovna, K. D. (2019). Optimization of amperometric conditions for the determination of molybdenum ions in anthropogenic objects. Austrian Journal of Technical and Natural Sciences, (11-12), 48-51.
13. Исакулова, М., & Курбанова, Д. С. (2022). НЕЭМПЕРИЧЕСКИЙ МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ КЛАСТЕРА КРЕМНИЯ. Журнал естественных наук, 1(4 (9)), 3-7.
14. Курбанова, Д. Ш. (2018). Новая миссия вузовского образования с учетом требований времени. Наука и образование сегодня, (1 (24)), 49-50.
15. Исакулова, М., & Курбанова, Д. С. (2022). НЕЭМПЕРИЧЕСКИЙ МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ КЛАСТЕРА КРЕМНИЯ. Журнал естественных наук, 1(4 (9)), 3-7.

16.Курбанова, Д. Ш. (2019). Переводческая деятельность педагога в качественном обучении студентов. Наука и образование сегодня, (1 (36)), 51-52.

17.Курбанова, Д. А., Иргашева, С. У., & Курбанов, Д. Д. (2012). Особенности костного метаболизма у девочек-подростков с гипогонадизмом. Репродуктивное здоровье детей и подростков, (2), 37-37.