

ekenligin tabıw múmkin. Eger korrelvacıva koeficienti absolyut ma'nisi boyınsha 1 ge teń bolsa, analiz qılınıp atırǵan shamalar arasında sıızıqlı bavlınıs bar ekenin ańlatadı. Eger 0 ga teń bolsa, bavlınısıw bolmavdı. Korrelvacıva koeficientiniń aralıq baxaları sıızıqlı korrelvacıva bar ekenin ańlatadı. Dispercıvalıq analizdı shıǵıw xarakteristikaların baxalarına hár qıvly faktorlardıń salıstırmalı tásirin anıqlaw ushın paydalanıw múmkin. Bunda avırım komponentalardıń analiz qılınıp atırǵan xarakteristikaǵa tásir etiw dárejesi tuwrısında iuwmaq shıǵarıw múmkin. Eger tájiriwbedegi hámme faktorlar belgili bolsa, ol jaǵdayda xarakteristikalar hám faktorlar arasındaǵı analitik bavlınısıwdı tabıw múmkin. Onıń ushın regrecıvalıq analiz usıllarınan paydalanamız. Tabılǵan bavlınıs empirik model dep ataladı. Regrecion analizde erikli hám eriksiz ózgeriwshiler arasındaǵı sávkesslik tańlap alınadı. tájiriwbe maǵlıwmatları tiykarında tańlap alınǵan parametrlar esaplanadı hám tájiriwbe maǵlıwmatların model menen approksimaciya

etiw sapası baxalanadı. Eger sapası qanıqtırmasa, basqa bavlınıs tańlap alınadı hám procedura tákirarlanadı. Modellestiriw nátiweleri analiz etiledi, bul modeldiń parametrlarin anıqlastırıwǵa járdem beredi. Nátiwiede conceptual modeldiń baslanǵısh kórinisi ózgeriwı múmkin. Bunnan xarakteristika hám parametrlar arasındaǵı funkcional bavlınısıwdı anıqlawǵa boladı hám sistemaniń analitik modeli iaratıladı.

Modellestiriw nátiwelerinen paydalanıw. Modellestiriw nátiweleri sistemaniń islew qábileti haqqında sheshim qabıllaw, eń jaqsı variantın tańlaw yamasa sistemani optimallastırıw ushın isletiledi. Biz bunnan aldındı usı problemaǵa bavlınısı [8] hám búgini maqalanı birgelikte qarasaq matematikalıq hám kompyuterli modellestiriw texnologiyası boyınsha derlik barlıq máselelerdi táriplegen bolamız. biraq qandav da bir ob'ekttiń haqıwıw modelin dúzgende basqa da modellestiriwshiniń ózi dúzete alatuǵın qosımsha kemshilikler payda bolıwı múmkin.

Адебиетлар

1. Цвиркун А.Д., Акинфиев В.К., Филиппов В.А. Имитационное моделирование в задачах структуры сложных систем. [Текст]: оптимизационно-имитационный подход. Отв. Ред. В.Н.Бурков – М.: «Наука», 1985. (Ин-т проблем управления).
2. Ивахненко А.Г. Моделирование сложных систем по экспериментальным данным. -М.: «Радио и связь». 1997.
3. Камилов М.М. Эргашев А.К. Математик моделлаштириш. ТАТУ. -Тошкент: 2007.
4. Математическое моделирование. Проблемы и результаты [Текст]: монография/ Отв. Ред. изд. О.М.Белоцерковский, В.А.Гушин. -М.: «Наука», 2003.
5. Методы Математического моделирования и вычислительной диагностики [Текст] : сб. трудов/Под ред. А.Н.Тихонова, А.А.Самарского. – М.: МГУ, 1990.
6. Максимей, И.В.Имитационное моделирование на ЭВМ [Текст] : Монография. /И.В.Максимей. –М.: Радио и связь, 1988.
7. Эксперимент. Модель. Теория. Москва-Берлин: «Наука» 1982. Под ред. Дж. Эндрюса и Р. Маклоуна.
8. Eshanov M.A., Ametov B., Muxiyatdinova A. Matematikalıq ha'm kompyuterli modellestiriw texnologiyası boyınsha ilimiy-metodikalıq pikirler. //“Ilm hám jámiyet” №1 2021.

РЕЗЮМЕ. Maqolada kompyuter modellastirish texnologiyalari va modellastirish jarayonida qo'llaniladigan ilmiy-uslubiy tushunchalarning dolzarbligi tahlil qilinadi.

РЕЗЮМЕ. В статье анализируется актуальность технологий компьютерного моделирования и научно-методические концепций, используемые в процессе моделирования.

SUMMARY. This article is analyzed the relevance of computer modeling technologies and scientific methodological concepts used in the modeling system.

МОДЕЛЬНЫЙ РАСЧЕТ ПАРАМЕТРА ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ Si_2ZnS ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

М.К.Хаккулов – старший преподаватель

Белорусско-Узбекский межотраслевой институт прикладных технических квалификаций

Tayanch so'zlar: молекуляр механика усули, ярим эмпирик квант кимёвий усул, кремнийнинг зарурий тавсифларини хисоблаш, тугун, заряд холати, кластер, кремний.

Ключевые слова: метод молекулярной механики, полуэмпирический квантово-химический метод, расчеты необходимых характеристик узла, зарядовое состояние, кластер, кремний.

Key words: molecular mechanics method, semiempirical quantum chemical method, calculation of bond parameters, charge condition, cluster, silicon.

Введение. Использование квант механических расчетов для предсказания геометрического строения, энергии, термодинамических характеристик и др. для известных и предполагаемых молекул является, в настоящее время, одним из важных и быстроразвивающихся методов химических исследований. Особую ценность этот метод приобретает в случае предсказания свойств неизвестных соединений, синтез которых может являться достаточно сложной процедурой, требующей больших затрат времени и материальных ресурсов исследователей. К тому же, на современном этапе развития компьютерной техники и создания высокопроизводительных и универсальных программ для квантовой химии, существует возможность расчета химических свойств соединений с очень высокой точностью и надежностью [1-2].

Квантовая механика позволяют получить достаточно точное математическое описание любых экспериментально наблюдаемых молекулярных взаимодействий. Однако для реализации этих возможностей необходимо располагать достаточно мощными ЭВМ и достаточно точными вычислительными методами. За последние годы в этих областях был достигнут значительный прогресс. Быстрое развитие вычислительной техники и программного обеспечения наряду с разра-

боткой эффективных и точных полуэмпирических и неэмпирических (ab initio) вариантов расчетов позволили, в настоящее время, сделать квантовую химию одним из наиболее важных инструментов физико-химических исследований [3-5].

В основе современной квантовой химии лежит уравнение Шредингера для стационарных состояний. Обычно используют адиабатическое приближение (приближение Борна-Оппенгеймера), согласно которому ядра неподвижны и можно решать уравнения только для движения электронов. Однако даже в этом случае точно решить уравнение Шредингера можно только для одноэлектронных систем. Поэтому в квантовомеханических расчетах используют различные приближенные методы, наиболее распространенным из которых является метод самосогласованного поля (ССП) или метод Хартри-Фока. Для систем, подобных водородному атому, возможно точное аналитическое решение уравнения Шредингера. Для систем с малым количеством электронов, типа гелия, “многоэлектронная” проблема может быть решена более или менее точно (в настоящее время нерелятивистская энергия стандартного состояния гелия известна с точностью до пятнадцатого знака). В общем случае - электронные системы нельзя

рассмотреть с такой точностью. Большинство элементов в периодической таблице - многоэлектронные системы, где движение каждого электрона зависит от движения всех других электронов, так же, как и ядер. Чтобы изучать такие системы, необходимы некоторые методы последовательных приближений.

Как известно, свойства квазиповерхностных полупроводниковых структур, по сути, должны отличаться от свойств базовой матрицы. Для их расчета необходимо использование формы и аппарата, носящих квантовый характер.

Численное моделирование электронной и атомных структур комплексных систем молекулярных, кристаллических и переходных нано и микро-размеров методами квантовой физики и молекулярной динамики на сегодняшний день получают широкое распространение. Это связано с мощным развитием соответствующего математического аппарата и обеспечения. Свойства полупроводниковых нано размерных материалов заметно отличаются от свойств объемного базового материала, имеют в основном квантовый характер и могут быть адекватно описаны лишь с применением современных методов исследования, основанием которых выступает метод функционала электронной плотности (DFT), *ab initio* квантово-механические методы и полужемпирические методы [6-7]. На основе этих методов были разработаны программы, которые позволяют определять свойства кристаллов с различным химическим составом и строением.

Статья посвящена численному расчету параметров кластерной структуры с ячейками Si_2ZnS в кубической решетке кристаллического кремния со структурой алмаза. Для численного расчета и изучения электронных свойств атомных кластеров были применены *ab initio* квантово-механические методы, в частности ограниченный или неограниченный метод Хартри-Фока (RHF/UHF) и полужемпирические методы, в частности MNDO.

В качестве объектов исследования были выбраны решетка Si со структурой алмаза с атомами Si в узлах, а также с помещенными в узлах примесными атомами Zn, S, с гипотетическим расположением примесных атомов в узлах решетки кремния с образованием соответствующих ячеек типа $\text{Si}_2\text{A}^{\text{IV}}\text{B}^{\text{VI}}$ (случай идеального раствора). Для Si были выставлены соответствующие параметры решетки $a = 5,43095 \text{ \AA}$, $d(\text{A-B}) = 2,35167 \text{ \AA}$ и $d(\text{A-A}) = 33,84026 \text{ \AA}$ [3].

При исследовании ячеек кремния с примесными атомами были учтены литературные данные по постоянным решетки для соединений $\text{A}^{\text{IV}}\text{-B}^{\text{VI}}$.

Квантово-химическими и молекулярно-динамическими методами были проведены расчеты необходимых характеристик узла (зарядовое состояние) для базовой решетки Si как показано на рис.1.1 и кремния с примесным кластером, состоящим из 3-х тетраэдрических узлов Si_2ZnS в базовой решетке Si как показано на рис 1.2.

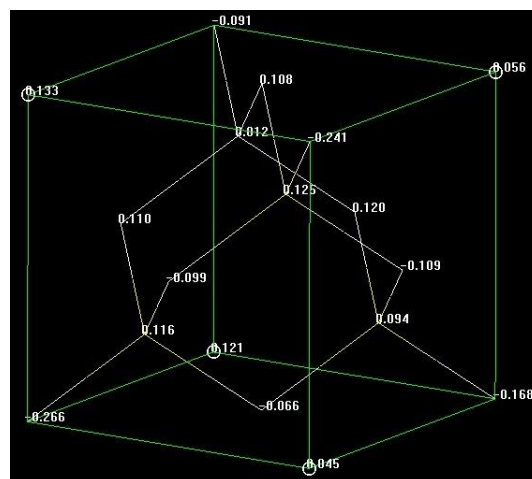
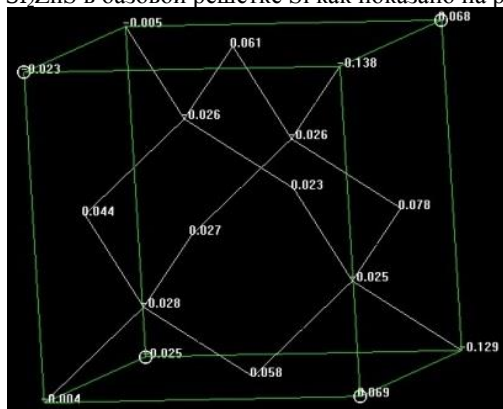


Рис.1.1. Зарядовое состояние в базовой решетке Si

Следует отметить, что эти заряды представляют разницу между положительным зарядом ядра и зарядом электронов. Заряд является 0 для нейтральной системы, положительным вещественным числом для катиона и отрицательным вещественным числом для аниона.

Нековалентные электростатические взаимодействия рассчитывались с использованием взаимодействий дипольного типа или частичных атомных зарядов. При расчете учитывался фактор диэлектрической постоянной эпсилон, которая модифицирует взаимодействие зарядов (и электростатического потенциала). Расчет электростатического потенциала базовой решетки Si, как показано на рис.2.1, и кремния с примесным кластером, состоящим из 3-х тетраэдрических узлов Si_2ZnS в базовой решетке Si, как показано на рис 2.2 выявил заметное изменение интенсивности потенциала на узлах ячейки.

Следует отметить, что электростатический потенциал рассчитывается как потенциальная энергия взаимодействия единицы положительного заряда с молекулярной энергией.

Уравнение Шредингера в подходе полужемпирического метода решаются для атомов и структур с использованием известных приближений и упрощений. Во всех методах этой группы в расчет вводятся только для валентных электрона (валентное приближение), причем экспериментальные значения делают необходимость расчетов ряда величин и коррекции ошибочных результатов приближений ненужными или минимальными.

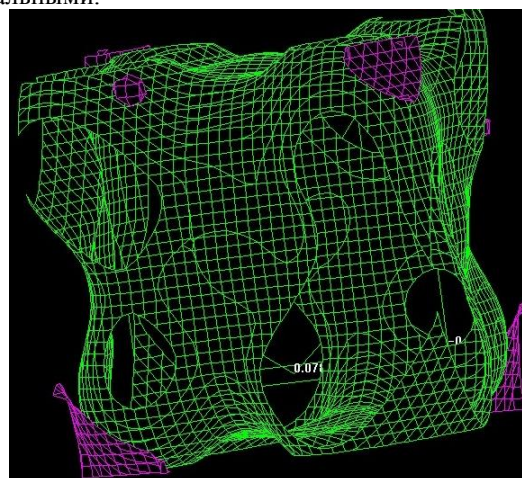


Рис.2.1. 3d-изображение электростатического потенциала в решетке Si

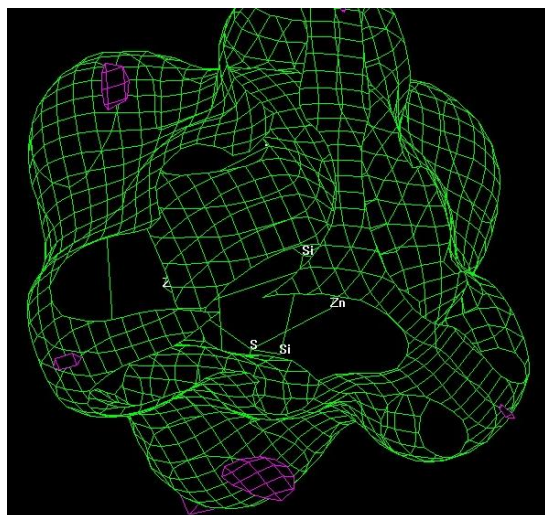


Рис. 2.2. 3d-изображение электростатического потенциала в решетке Si с ячейкой Si_2ZnS

Следует отметить, что электростатический потенциал рассчитывается как потенциальная энергия взаимодействия единицы положительного заряда с молекулярной энергией.

Уравнение Шредингера в подходе полуэмпирического метода решаются для атомов и структур с использованием известных приближений и упрощений. Во всех методах этой группы в расчет вводятся только для валентных электрона (валентное приближение), причем экспериментальные значения делают необходимость расчетов ряда величин и коррекции ошибочных результатов приближений ненужными или минимальными.

Проведенный модельный расчет параметров решетки, зарядового состояния, электростатического потенциала и электронных спектров в элементарной ячейке и в решетке кремния структуры алмаза позволяет в дальнейшем прогнозировать новые свойства кристаллического кремния с различной концентрацией, структурным расположением в узлах решетки и типом кластеров примесных атомов.

Литература

1. Блатов В.А., Шевченко А.П., Пересыпкина Е.В. Полуэмпирические методы квантовой химии. Самара: Изд-во «Универс-групп», 2005. -32 с.
2. Бутырская Е.В. Компьютерная химия: Основы теории и работа с программами GAUSSIAN и GAUSSVIEW. Солон-пресс, 2011. -224 с.
3. Квантовохимические расчеты в органической химии и молекулярной спектроскопии/ К. Я. Бурштейн, П.П. Шорыгин. - М.: Наука, 1989. -104с.
4. Кларк Т. Компьютерная химия. М.: Мир, 1990. - 383 с.
5. Коулсон Ч. Валентность. М.: Мир 1965. - 426с.
6. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: «Феникс», 1997 – 560 с.
7. Хурсан С.Л. Квантовая механика и квантовая химия. Конспекты лекций. Уфа: ЧП Раянов, 2005. -164 с.

REZYUME. Квант-механик ва молекуляр динамик усулларни қўллаган ҳолда, Si нинг асосий панжараси ва Si нинг асосий пфнжарасидаги Si_2ZnS нинг 3 та тетраэдрал боғдан иборат киришма атомлари кластери бўлган кремний учун зарур бўлган боғланиш параметрларини (заряд ҳолати) ҳисоблашлар амалга оширилди.

РЕЗЮМЕ. Квантово-химическими и молекулярно-динамическими методами были проведены расчеты необходимых характеристик узла (зарядовое состояние) для базовой решетки Si и кремния с примесным кластером, состоящим из 3-х тетраэдрических узлов $\text{Si}_2\text{Zn}_2\text{S}$ в базовой решетке Si

SUMMARY. By applying quantum mechanical and molecular dynamic techniques, the author has performed calculation of required parameters of bonds (charge state) for base matrix of Si and for silicon with impurity cluster consisting of 3 tetrahedral bonds of $\text{Si}_2\text{Zn}_2\text{S}$ in the base matrix of Si.

BIR O‘QLI DEFORMATSIYANING $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ KUPRATI O‘TAO‘TKAZUVCHANLIK KRITIK HARORATIGA TA’SIRI

A.S.Jalekeshov – assistent o‘qituvchi

B.Ya.Yavidov – fizika-matematika fanlari doktori, dotsent

Ajiniyoz nomidagi Nukus davlat pedagogika instituti

Tayanch so‘zlar: kupratlar, massa, (bi)polaron, o‘tao‘tkazuvchanlik.

Ключевые слова: купраты, масса, (би)полярон, сверхпроводимость.

Key words: cuprates, mass, bi(polaron), superconductivity.

Kirish. 1911-yilda H.K. Onnes tomonidan o‘tao‘tkazuvchanlik (O‘O‘) hodisasi kashf etilgandan keyin bu sohada juda ko‘plab tadqiqotlar olib borildi. G.Bednorz va K.A.Muller [1] ishlaridan ilhomlangan P.Chu va uning universitetdagi jamoasi 1987-yilda 90 K dan yuqori o‘tao‘tkazuvchanlik kritik harorati (T_c) ga ega Y-asoli kuprat sintez qildilar [2]. Bugungi kungacha kupratlardagi O‘O‘ ning kelib chiqish mexanzimini tushuntirish uchun bir qancha nazaryalar taklif etilgan. Shunga qaramasdan haligacha umumiy kelishuvga kelinmagan. $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (YBCO) birikmasida qatlamlashgan va zanjirsimon tartibda joylashgan strukturaviy elementlar mavjudligi aniqlangan. Shuning uchun uning kristall strukturasi boshqa kupratlarnikiga qaraganda biroz murakkabligi bilan ajralib turadi.

Bu murakkablik sababli uning O‘O‘ ga o‘tish kritik

harorati- T_c ni, ularning deformatsiya hosilalari ($\partial T_c / \partial \epsilon_i$) va bosim hosilalari ($\partial T_c / \partial p_i$) ni o‘rganish ham boshqa kupratlarga nisbatan murakkabroq va qiziqarli hisoblanadi. YBCO kuprati uchun bunday o‘rganishlar [3-6] adabiyotlarda keltirilgan. Ularning ishlarida keltirilgan qiymatlar bir birlaridan miqdor jihatdan ham ishoralari jihatidan ham keskin farqlarga ega. Shundan ko‘rinib turibdiki bu masala bo‘yicha hali ko‘p izlanishlar olib borish kerak. Kupratlardagi anizotropiya sababli ulardagi bir o‘qli deformatsiyaning T_c ga ta’siri biroz murakkab hisoblanadi. Shuning bilan birga deformatsiya natijasining polaron massasining o‘zgarishini ham inobatga olish zarur hisoblanadi.

Nazariy qism. Kupratlar kuchli bog‘langan elektron va kuchli elektron-fonon tizimi sifatida tavsiflanadi. Bunday