

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 (ҳар 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)

НЕЭМПИРИЧЕСКИЙ МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ КЛАСТЕРА
КРЕМНИЯ

Исакулова Мукаддас Шукуровна Ассистент Джизакский

Политехнический институт, г.Джизак i.mukaddas@mail.ru

Курбанова Дилафруз Собировна Ассистент Джизакский Политехнический институт, г.Джизак dilafuzsobirovna89@gmail.com

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.

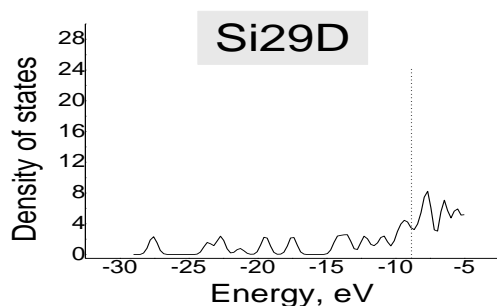
Keywords: Quantum chemistry, semi-empirical, nonempirik, molecular orbital, molecular dynamic, cluster.

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).

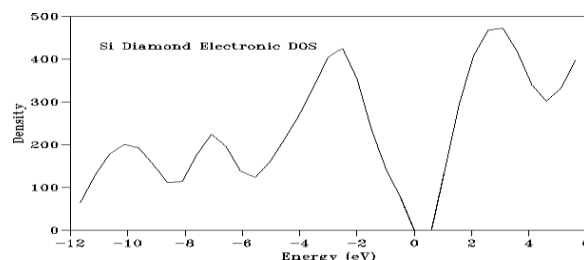
При рассмотрении плотности энергетических состояний димеризованного кластера и сравнении его с состояниями идеальной решетки кремния можно заметить, что большое количество состояний локализуется в верхней свободной области, которая соответствует разрыхляющим орбиталям. [1]. Также надо отметить, что занятые состояния расположены более глубоко в валентной зоне и плотность на ВЗМО (верхняя занятая молекулярная орбиталь) менее выражена по сравнению с массивным кремнием, что в свою очередь, объясняется конечностью размера кластера или т.н. эффектом квантового конфайнмента[2].

Ширина запрещенной зоны димеризованного кластера остается равной примерно 0.2 эВ. Именно ненасыщенные связи поверхностных атомов

кластера приводят к размыванию границ ВЗМО и НСМО и узкой щели между ними.



(a)



(б)

Рисунок – Сравнение плотностей электронных состояний кластера Si29D (a) и массивного кристаллического кремния (б).

Далее в таблице приводятся сравнение полной энергии атомизации и его компонентов кластера Si₂₉ с учетом и без релаксации атомных позиций. Отсюда видно, что несмотря на увеличение значения энергии отталкивания между атомами и уменьшения энергии ковалентного связывания в результате учета релаксации атомов, полная энергия атомизации кластера повышается из-за выгодного изменения одноцентровой энергии отдельных атомов, что возможно происходит благодаря изменению состояний sp³-гибридизованных орбиталей поверхностных атомов кремния, [3] участвующих в димеризации. В результате димеризации поверхностных атомов кремния выигрыш энергии составляет 8,957 эВ.

Si ₂₉	Энергия атомизации и	Энергия отталкивания атомов	Энергия связывания	Энергия ион-ионного взаимодействия	Изменение одноцентровой энергии
С учетом релаксации	-121,4880	38,0775	-213,6644	0,2379	53,8611
Без учета релаксации	-112,5309	33,9423	-216,1007	0,8020	68,8254

Кластер Si_{29} нами рассмотрен в различных зарядовых состояниях. Это связано с тем, что кластер Si_{29} , возможно, в реакционной среде в процессе образования, находится в различных зарядовых состояниях, особенно при рассмотрении образования кластера плазмохимическими методами. Как видно из нижеследующей таблицы, ширина запрещенной зоны заряженных кластеров меняется в пределах от 0.09 до 0.21 эВ[4]. При этом, уменьшение общего количества электронов в кластере приводит к расширению щели. Размеры кластера, также, несколько сжимаются в заряженных состояниях. Однако зарядовое состояние кластера не влияет на энергию атомизации кластеров[5].

Si_{29}	Энергия атомизации на атом, эВ	Диаметр кластера, А	Ширина запрещенной зоны, эВ
--	4.178	8.70	0.09
-	4.215	8.65	0.03
0	4.189	9.01	0.21
+	3.958	9.03	0.22
++	4.064	8.53	0

Из нижеследующей таблицы, где приведены компоненты полной энергии атомизации кластера в различных зарядовых состояниях, видно, что энергия отталкивания атомов заметно повышается в двукратно положительном состоянии, тогда как двукратно отрицательное состояние не приводит к каким-либо заметным изменениям[6]. Однако энергия ковалентного связывания также резко повышается в состоянии (+2). Это, а также, повышение маделунговской энергии ион-ионного взаимодействия между атома возможно связано с увеличением эффективного заряда ядер. В конечном счете двукратно положительное зарядовое состояние в кластере становится невыгодным из-за резкого увеличения энергетических затрат на изменение внутренней конфигурации электронных оболочек атомов кремния, т.е. одноцентровой энергии[7].

Si ₂₉	Энергия атомизации	Энергия отталкивания атомов	Энергия связывания	Энергия ион-ионного взаимодействия	Изменение одноцентровой энергии
--	- 123.945710	39.132738	- 217.30156 0	2.937211	51.285901
-	- 123.626057	39.849864	- 218.38396 9	0.725271	54.182777
0	- 121.487962	38.077492	- 213.664428	0.237896	53.861078
+	- 114.744910	37.622569	- 212.53898 9	2.365129	57.806381
++	- 101.572396	41.982696	- 220.88029 4	4.716168	72.609064

Нами рассмотрены стабильные конфигурации кластера Si₂₉ и влияние его зарядового состояния на пространственную конфигурацию и поверхностную реконструкцию[8,9].

Показано, что в результате учета релаксации атомов кластера его поверхностные атомы подвергаются попарной димеризации и при этом выигрыш энергии составляет 8,957 эВ.

Найдено, что конечность размера кластера и эффект квантового конфайнмента находят свое выражение в более глубоком расположении занятых электронных состояний кластера в валентной зоне и относительно меньшей плотности состояний на ВЗМО по сравнению с массивном кристаллическом кремнии[10-11].

Показано, что зарядовое состояние кластера не влияет существенно на энергию атомизации кластеров. Однако при этом размеры кластеров сжимаются в заряженных состояниях.

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., Xojjiyeva, 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., Baxodirovna J. U. ELECTROCHEMICAL METHODS FOR THE DETERMINATION OF MERCURY IONS //E Conference Zone. – 2022. – С. 41-43.
11. Dilafuz K. OQAVA SUVLARNI ZAHARLI OG'IR METALLARDAN TOZALASH //Журнал естественных наук. – 2022. – Т. 1. – №. 2 (7). – С. 282-287.