

MUHAMMAD AL-XORAZMIY
NOMIDAGI TATU FARG'ONA FILIALI
FERGANA BRANCH OF TUIT
NAMED AFTER MUHAMMAD AL-KHORAZMI

“AL-FARG'ONiy AVLODLARI”

ELEKTRON ILMIY JURNALI | ELECTRONIC SCIENTIFIC JOURNAL

TA'LIMDAGI ILMIY, OMMABOP VA ILMIY TADQIQOT ISHLARI



4-SON 1(4)
2023-YIL

TATU, FARG'ONA
O'ZBEKISTON



O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI RAQAMLI TEXNOLOGIYALAR VAZIRLIGI

MUHAMMAD AL-XORAZMIY NOMIDAGI
TOSHKENT AXBOROT TEXNOLOGIYALARI UNIVERSITETI
FARG'ONA FILIALI



Muassis: Muhammad al-Xorazmiy nomidagi Toshkent axborot texnologiyalari universiteti Farg'ona filiali.

Chop etish tili: O'zbek, ingliz, rus. Jurnal texnika fanlariga ixtisoslashgan bo'lib, barcha shu sohadagi matematika, fizika, axborot texnologiyalari yo'nalishida maqolalar chop etib boradi.

Учредитель: Ферганский филиал Ташкентского университета информационных технологий имени Мухаммада ал-Хоразми.

Язык издания: узбекский, английский, русский. Журнал специализируется на технических науках и публикует статьи в области математики, физики и информационных технологий.

Founder: Fergana branch of the Tashkent University of Information Technologies named after Muhammad al-Khorazmi.

Language of publication: Uzbek, English, Russian. The magazine specializes in technical sciences and publishes articles in the field of mathematics, physics, and information technology.

2023 yil, Tom 1, №4
Vol.1, Iss.4, 2023 y

ELEKTRON ILMIY JURNALI

ELECTRONIC SCIENTIFIC JOURNAL

«Al-Farg'oniylar avlodlari» («The descendants of al-Fargani», «Potomki al-Fargani») O'zbekiston Respublikasi Prezidenti administratsiyasi huzuridagi Axborot va ommaviy kommunikatsiyalar agentligida 2022-yil 21 dekabrda 054493-son bilan ro'yxatdan o'tgan.

Jurnal OAK Rayosatining 2023-yil 30 sentabrdagi 343-sonli qarori bilan Texnika fanlari yo'nalishida milliy nashrlar ro'yxatiga kiritilgan.

Tahririyat manzili:
151100, Farg'ona sh.,
Aeroport ko'chasi 17-uy,
202A-xona
Tel: (+99899) 998-01-42
e-mail: info@al-fargoniy.uz

Qo'lyozmalar taqrizlanmaydi va qaytarilmaydi.

FARG'ONA - 2023 YIL

TAHRIR HAY'ATI

Maxkamov Baxtiyor Shuxratovich,

Muhammad al-Xorazmiy nomidagi Toshkent axborot texnologiyalari universiteti rektori, iqtisodiyot fanlari doktori, professor

Muxtarov Farrux Muhammadovich,

Muhammad al-Xorazmiy nomidagi Toshkent axborot texnologiyalari universiteti Farg'ona filiali direktori, texnika fanlari doktori

Arjannikov Andrey Vasilevich,

Rossiya Federatsiyasi Sibir davlat universiteti professori, fizika-matematika fanlari doktori

Satibayev Abdugani Djunosovich,

Qirg'iziston Respublikasi, Osh texnologiyalari universiteti, fizika-matematika fanlari doktori, professor

Rasulov Akbarali Maxamatovich,

Muhammad al-Xorazmiy nomidagi TATU Farg'ona filiali Axborot texnologiyalari kafedrasida professori, fizika-matematika fanlari doktori

Yakubov Maksadxon Sultaniyazovich,

Muhammad al-Xorazmiy nomidagi TATU «Axborot texnologiyalari» kafedrasida professori, t.f.d., professor, xalqaro axborotlashtirish fanlari Akademiyasi akademigi

G'ulomov Sherzod Rajaboyevich,

Muhammad al-Xorazmiy nomidagi TATU Kiberxavfsizlik fakulteti dekani, Ph.D., dotsent

G'aniyev Abduxalil Abduljalilovich,

Muhammad al-Xorazmiy nomidagi TATU Kiberxavfsizlik fakulteti, Axborot xavfsizligi kafedrasida t.f.n., dotsent

Zayniddinov Hakimjon Nasritdinovich,

Muhammad al-Xorazmiy nomidagi TATU Kompyuter injiniringi fakulteti, Sun'iy intellekt kafedrasida texnika fanlari doktori, professor

Bo'taboyev Muhammadjon To'ychiyevich,

Farg'ona politexnika instituti, Iqtisod fanlari doktori, professor

Abdullayev Abdujabbor,

Andijon mashinosozlik instituti, Iqtisod fanlari doktori, professor

Qo'ldashev Abbosjon Hakimovich,

O'zbekiston milliy universiteti huzuridagi Yarimo'tkazgichlar fizikasi va mikroelektronika ilmiy-tadqiqot instituti, texnika fanlari doktori, professor

Ergashev Sirojiddin Fayazovich,

Farg'ona politexnika instituti, elektronika va asbobsozlik kafedrasida professori, texnika fanlari doktori, professor

Qoraboyev Muhammadjon Qoraboevich,

Toshkent tibbiyot akademiyasi Farg'ona filiali fizika matematika fanlari doktori, professor, BMT ning maslahatchisi maqomidagi xalqaro axborotlashtirish akademiyasi akademigi

Polvonov Baxtiyor Zaylobiddinovich,

Muhammad al-Xorazmiy nomidagi TATU Farg'ona filiali Ilmiy ishlar va innovatsiyalar bo'yicha direktor o'rinbosari

Zulunov Ravshanbek Mamatovich,

Muhammad al-Xorazmiy nomidagi TATU Farg'ona filiali Dasturiy injiniring kafedrasida dotsenti, fizika-matematika fanlari nomzodi

Saliyev Nabijon,

O'zbekiston jismoniy tarbiya va sport universiteti Farg'ona filiali dotsenti

Abdullaev Temurbek Marufovich,

Muhammad al-Xorazmiy nomidagi TATU Axborot texnologiyalari kafedra mudiri, texnika fanlar bo'yicha falsafa doktori

Zokirov Sanjar Ikromjon o'g'li,

Muhammad al-Xorazmiy nomidagi TATU Farg'ona filiali Ilmiy tadqiqotlar, innovatsiyalar va ilmiy-pedagogik kadrlar tayyorlash bo'limi boshlig'i, fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori

Jurnal quyidagi bazalarda indekslanadi:



Eslatma! Jurnal materiallari to'plamiga kiritilgan ilmiy maqolalardagi raqamlar, ma'lumotlar haqqoniyligiga va keltirilgan iqtiboslar to'g'riligiga mualliflar shaxsan javobgardirlar.

MUNDARIJA | ОГЛАВЛЕНИЕ | TABLE OF CONTENTS

Muxtarov Farrux Muhammadovich, TARMOQ TRAFIGI ANOMALIYALARINI IDENTIFIKATSIYA QILISHNING STATIK USULI	4-7
Daliyev Baxtiyor Sirojiddinovich, Abelning umumlashgan integral tenglamasini yechish uchun Sobolev fazosida optimal kvadratur formulalar	8-14
Umarov Shuxratjon Azizjonovich, KRIPTOBARDOSHLI KRIPTOGRAFIK TIZIMLAR VA ULARNING KLASSIFIKATSIYASI	15-21
Zulunov Ravshanbek Mamatovich, PYTHONDA NEYRON TARMOQNI QURISH VA BASHORAT QILISH	22-26
Djalilov Mamatisa Latibdjanovich, IKKI QATLAMLI NOELASTIK PLASTINKANING KO'NDALANG TEBRANISHI UMUMIY TENGLAMASINI TAHLIL QILISH	27-30
Erkin Uljaev, Azizjon Abdulkhamidov, Utkirjon Ubaydullayev, A Convolutional Neural Network For Classification Cotton Boll Opening Degree	31-36
Seytov Aybek Jumabayevich, Xusanov Azimjon Mamadaliyevich, Magistral kanallarda suv resurslarini boshqarish jarayonlarini modellashtirish algoritmini ishlab chiqish	37-43
Abdullayev Temurbek Marufjonovich, Algorithm of functioning of intellectual information-measuring system	44-49
Odinakhon Sadikovna Rayimjanova, Usmonali Umarovich Iskandarov, Reaserch of highly sensitive deformation semiconductor sensors based on AFV	50-53
S.S.Radjabov, G.R.Mirzayeva, A.O.Tillavoldiyev, J.A.Allayorov, BARG TASVIRI BO'YICHA MADANIY O'SIMLIK LARNING FITOSANITAR HOLATINI ANIQLASH ALGORITMLARI	54-59
Эргашев Отабек Мирзапулатович, Интеллектуальный оптоэлектронный прибор для учета и контроля расходом воды в открытых каналах	60-65
Xomidov Xushnudbek Rapiqjon o'g'li, Nurmatov Sardorbek Xasanboy o'g'li, Yo'ldashev Bilol Iqboljon o'g'li, O'lmasov Farrux Yorqinjon o'g'li, Konus setkali chang tozalovchi qurilma uchun chang namunalarning dispers tarkibi tahlili	66-69
Akhundjanov Umidjon Yunus ugli, VERIFICATION OF STATIC SIGNATURE USING CONVOLUTIONAL NEURAL NETWORK	70-74
Лазарева Марина Викторовна, Горовик Александр Альфредович, Цифровизация и цифровой менеджмент в современном управлении	75-81
D.X.Tojimatov, KIBERTAHIDIDLARNI OLDINI OLIHDA KIBERRAZVEDKA AMALIYOTI VA UNING USTUVOR VAZIFALARI	82-85
Muxtarov Farrux Muhammadovich, Rasulov Akbarali Maxamatovich, Ibroximov Nodirbek Ikromjonovich, Kompyuter eksperimenti orqali kam atomli mis klasterlarining geometrik tuzilishini o'rganish	86-89
Umurzakova Dilnoza Maxamadjanovna, BOSHQARISH QONUNLARINI ADAPTATSIYALASH ALGORITMLARINI ISHLAB CHIQISH	90-94
Muxamedieva Dildora Kabilovna, Muxtarov Farrux Muhammadovich, Sotvoldiev Dilshodbek Marifjonovich, JAMOAT TRANSPORTI MARSHRUTLARINI QURISH INTELLEKTUAL ALGORITMLARI	95-103
Нурдинова Разияхон Абдихаликовна, Перспективы применения элементов с аномальными фотовольтаическими напряжениями	104-108
Bozarov Baxromjon Ixomovich, UCH O'LCHOVLI FAZODAGI SFERADAANIQLANGAN FUNKSIYALARNI TAQRIBIY INTEGRALLASH UCHUN OPTIMAL KUBATUR FORMULALAR	109-113
Улжаев Эркин, Худойбердиев Элёр Фахриддин угли, Нарзуллаев Шохрух Нурали угли, РАЗРАБОТКА КОНСТРУКЦИИ И ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ СХЕМЫ ПОЛУЦИЛИНДРИЧЕСКОГО ЁМКОСТНОГО ПОТОЧНОГО ВЛАГОМЕРА	114-122
Mamirov Uktam Farkhodovich, Buronov Bunyod Mamurjon ugli, ALGORITHMS FOR FORMATION OF CONTROL EFFECTS IN CONDITIONS OF UNOBSERVABLE DISTURBANCES	123-127
Sharibayev Nosirjon Yusubjanovich, Jabborov Anvar Mansurjonovich, YURAK-QON TOMIR KASALLIKLARI DIAGNOSTIKASI UCHUN TEXNOLOGIYALAR, ALGORITMLAR VA VOSITALAR	128-136
Marina Lazareva, Estimating development time and complexity of programs	137-141
Asrayev Muhammadmullo, ONLINE HANDWRITING RECOGNITION	142-146
Norinov Muhammadyunus Usibjonovich, SPEKTR ZONALI TASVIRLARGA INTELLEKTUAL ISHLOV BERISH USULLARI TAHLILI	147-152
Xudoynazarov Umidjon Umarjon o'g'li, PARAMETRLI ALGEBRAGA ASOSLANGAN EL-GAMAL SHIFRLASH ALGORITMLARINI GOMOMORFIK XUSUSIYATINI TADQIQ ETISH	153-157
D.M.Okhunov, M.Okhunov, THE ERA OF THE DIGITAL ECONOMY IS AN ERA OF NEW OPPORTUNITIES AND PROSPECTS FOR BUSINESS DEVELOPMENT BASED ON CROWDSOURCING TECHNOLOGIES	158-165

MUNDARIJA | ОГЛАВЛЕНИЕ | TABLE OF CONTENTS

Солиев Бахромжон Набиджонович, Путеводитель по построению веб-API на Django - Шаг за шагом с Django REST framework — от моделей до проверки работоспособности	166-171
Sevinov Jasur Usmonovich, Boborayimov Okhunjon Khushmurod ogli, ALGORITHMS FOR SYNTHESIS OF ADAPTIVE CONTROL SYSTEMS WITH IMPLICIT REFERENCE MODELS BASED ON THE SPEED GRADIENT METHOD	172-176
Mamatov Narzullo Solidjonovich, Jalelova Malika Moyatdin qizi, Tojiboyeva Shaxzoda Xoldorjon qizi, Samijonov Boymirzo Narzullo o'g'li, SUN'IY YO'LDOSHDAN OLINGAN TASVIRDAGI DALA MAYDONI CHEGARALARINI ANIQLASH USULLARI	177-181
Обухов Вадим Анатольевич, Криптография на основе эллиптических кривых (ECC)	182-188
Turdimatov Mamirjon Mirzayevich, Sadirova Xursanoy Xusanboy qizi, AXBOROTNI HIMOYALASHDA CHETLAB O'TISHNING MUMKIN BO'LGAN EHTIMOLLIK XOLATINI BAHOLASH USULLARI	189-193
Musayev Xurshid Sharifjonovich, TRIKOTAJ MAHSULOTLARIDA NUQSONLI TO'QIMALARNING ANIQLASHNING MATEMATIK MODELI VA UNING ALGORITMLARI	194-196
Kodirov Ahkhmadkhon, Umarov Abdumukhtar, Rozaliyev Abdumalikjon, ANALYSIS OF FACIAL RECOGNITION ALGORITHMS IN THE PYTHON PROGRAMMING LANGUAGE	197-205
Suyumov Jorabek Yunusalievich, METHODOLOGICAL PROBLEMS OF QUALIMETRY IN CONDUCT OF PEDAGOGICAL EXPERIMENT-EXAMINATION	206-211
Хаджаев Саидакбар Исмоил угли, АКТУАЛЬНОСТЬ ПРОБЛЕМЫ ЗАЩИТЫ ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ МАЛОГО И СРЕДНЕГО БИЗНЕСА ОТ КИБЕРАТАК	212-217
M.M.Khalilov, Effect of Heat Treatment on the Photosensitivity of Polycrystalline PbTe Films AND PbS	218-221
Тажибаев Илхом Бахтиёрович, ПОЛНОСТЬЮ ВОЛОКОННЫЙ СЕНСОР, ОСНОВАННЫЙ НА КОНСТРУКЦИИ ИЗ МАЛОМОДОВОГО ВОЛОКОННОГО СМЕЩЕНИЯ С КАСКАДНЫМ СОЕДИНЕНИЕМ ВОЛОКОННОЙ РЕШЕТКИ С БОЛЬШИМ ИНТЕРВАЛОМ, ИСПОЛЬЗУЕТСЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИСКРИВЛЕНИЯ И ПРОВЕДЕНИЯ АКУСТИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ	222-225
Sharibaev Nosir Yusubjanovich, Djuraev Sherzod Sobirjanovich, To'xtasinov Davronbek Xoshimjon o'g'li, PRIORITIES IN DETERMINING ELECTRIC MOTOR VIBRATION WITH ADXL345 ACCELEROMETER SENSOR	226-230
Mukhammadjonov A.G., ANALYSIS OF AUTOMATION THROUGH SENSORS OF HEAT AND HUMIDITY OF DIFFERENT DIRECTIONS	231-236
Эрматова Зарина Кахрамоновна, АКТУАЛЬНОСТЬ ПРЕПОДАВАНИЯ ЯЗЫКА ПРОГРАММИРОВАНИЯ C++ В ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЯХ	237-241
Saparbaev Rakhmon, ANALOG TO DIGITAL CONVERSION PROCESS BY MATLAB SIMULINK	242-245
Садикова М.А., Авазова Н.К., САМООБУЧЕНИЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА, БАЗОВЫЕ ПРИНЦИПЫ РАБОТЫ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА НА ПРОСТОМ ПРИМЕРЕ	246-250
Abduhafizov Tohirjon Ubaydullo o'g'li, Abdurasulova Dilnoza Botirali kizi, DEVELOPMENT OF ALGORITHMS IN THE ANALYSIS OF DEMAND AND SUPPLY PROCESSES IN ECONOMIC SYSTEMS	251-256
Kayumov Ahror Muminjonovich, CREATING MATHEMATICAL MODELS TO IDENTIFY DEFECTS IN TEXTILE MACHINERY FABRIC	257-261
Mirzakarimov Baxtiyor Abdusalomovich, Xayitov Azizjon Mo'minjon o'g'li, BIOMETRIC METHODS SECURE COMPUTER DATA FROM UNAUTHORIZED ACCESS	262-266
Soliyev B., Odilov A., Abdurasulova Sh., Leveraging Python for Enhanced Excel Functionality: A Practical Exploration	267-271
Жураев Нурмахамад Маматович, Системы Электроснабжения Оборудования Предприятий Связи: Надежность и Эффективность	272-276
Rasulova Feruzaxon Xoshimjon qizi, Isroilov Sharobiddin Mahammadyusufovich, OLIY TA'LIM MUASSASALARIDA MUTAXASSISILIK FANLARINI O'QITISHDA MULTIMEDIALI MOBIL ILOVADANDAN FOYDALANISHNING STATISTIK TAHLILI	277-280
Muxtarov Farrux Muxammadovich, Toshpulatov Sherali Muxamadaliyevich, SUN'IY INTELLEKT YORDAMIDA IJTIMOYIY TARMOQ MONITORINGI TIZIMINI YARATISH, AFZALLIKLARI VA MUHIM JIXATLARI	281-285
Sadikova Munira Alisherovna, APPLICATION OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE DEVICES IN MANUFACTURING	286-290
Mamatov Narzullo Solidjonovich, Ibroximov Sanjar Rustam o'g'li, Fayziyev Voxid Orzumurod o'g'li, Samijonov Abdurashid Narzullo o'g'li, SUN'IY INTELLEKT VOSITALARINI TA'LIMNI NAZORAT QILISH VA BAHOLASHDA QO'LLASH	291-297

Kompyuter eksperimenti orqali kam atomli mis klasterlarining geometrik tuzilishini o'rganish

Muxtarov Farrux Muhammadovich,

Texnika fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD), dotsent, TATU
Farg'ona filiali "Axborot xavfsizligi" kafedrası dotsenti

Rasulov Akbarali Maxamatovich,

Fizika-matematika fanlari doktori, professor, TATU Farg'ona
filiali "Axborot texnologiyalari" kafedrası professori

Ibroximov Nodirbek Ikromjonovich,

Fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD),
TATU Farg'ona filiali "Axborot xavfsizligi" kafedrası mudiri

Annotatsiya: Ushbu ishda biz kompyuter eksperimenti orqali MD (molekulyar dinamika) usuli yordamida past energiyaga ega kichik neytral mis klasterlarining geometrik tuzilishini o'rgandik. Klasterlardagi atomlararo o'zaro ta'sir jarayonlarini hisoblashda EAM (Embedded-atom method) potensialidan foydalandik. Cu_n ($n = 2-13$) klasterlarining kompyuter modeli yaratildi. Cu_2 , Cu_3 , Cu_4 , Cu_5 , Cu_6 , Cu_7 , Cu_8 , Cu_9 , Cu_{10} , Cu_{11} , Cu_{12} va Cu_{13} klasterlarining geometrik shakllari o'rganilib, strukturaviy parametrlari (Cu-Cu bog'lanish masofasi ya'ni klasterlardagi bog' uzunliklari) hisoblab chiqilgan. Kompyuter eksperimentida olingan natijalar eksperimental tadqiqot natijalari bilan solishtirildi.

Kalit so'zlar: Mis klasterlar, Molekulyar Dynamika, Embedded-atom method, Kam atomli, past energiya.

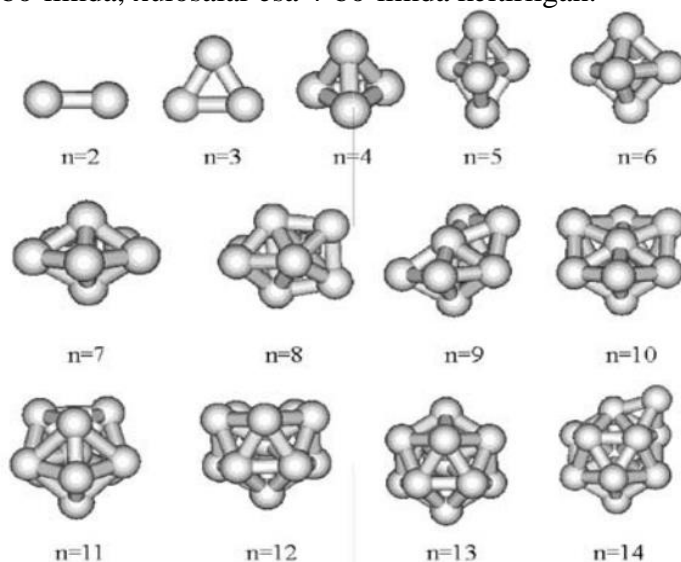
Kirish. Zamonaviy ilm-fanni kompyuterli modellashtirishdan foydalanmasdan tasavvur qilish qiyin. Kompyuter simulyatsiyasidan foydalangan holda ob'ektlarni o'rganish, nazariy yondashuvdan farqli o'laroq, ularni xarakterli holatda ham o'rganish imkonini beradi. Hozirgi vaqtda qattiq jismlar fizikasi bo'yicha amaliy tajribalar, ham moddiy ham vaqt nuqtai nazaridan qimmatga tushmoqda, ammo zamonaviy superkompyuterlar yordamida ilmiy tadqiqotlarni simulyatsiya qilish orqali haqiqiy ob'ekt o'rnini bosadigan modelni sinab ko'rish so'ngi payitlarda ommalashib bormoqda [1].

Hozirgi vaqtda metall klasterlarning nanotexnologiya sohasida keng qo'llanilishi ularni eksperimental va nazariy tadqiq etish ishlarini sezilarli darajada rivojlanishiga olib kelmoqda. Natijada kam atomli klasterlarning morfologiyasini belgilovchi omillarni yaratish va o'rganishda eksperimental usullar bilan bir qatorda kompyuter modellashtirishdan foydalanishga qiziqish ortib bormoqda. Klasterlar nano o'lchamdagi agregatlar bo'lib, ular qattiq materiallardan ancha farq qiladi [2].

Ushbu maqolada biz kam atomli mis-metall klasterlarini modellashtirishni, shuningdek, ushbu

klasterlardagi atomlarning geometrik joylashishini ko'rib chiqamiz.

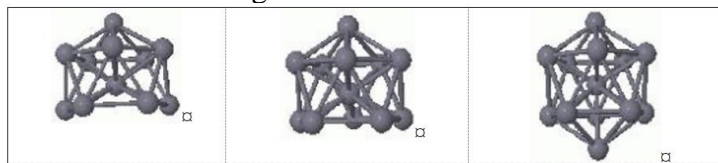
Hozirgi vaqtda nanoklasterlarning modellashtirish jarayonini o'rganish uchun ko'plab usullar ishlab chiqilgan. Ular maqolaning 2-bo'limida muhokama qilinadi. Natijalar va muhokamalar 3-bo'limda, xulosalar esa 4-bo'limda keltirilgan.



1-rasm. Kam atomli va past energiyali mis klasterlari (Cu_n , $n = 2-14$) [2].

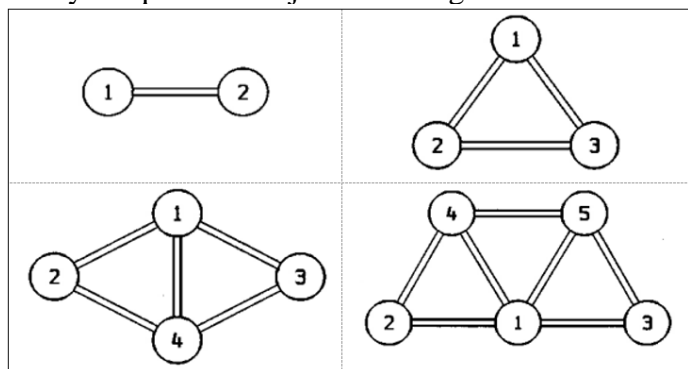


Biz xorijiy adabiyotlarni tahlil qilganimizda turli kattalikdagi va past energiyali mis klasterlarining tuzilmalarini o'rgandik [2]. Ulardan ba'zilar 1-, 2- va 3-rasmlarda keltirilgan.



2-rasm. Cu₁₁, Cu₁₂ va Cu₁₃ klasterlarining asosiy tuzilishlari. [9]

[9] da Cu_n klasterlarini (n ≤ 24) o'rganish uchun turli xil simmetriyalar, bog'lanish energiyalari va nisbiy barqarorlik natijalari keltirilgan.



3-rasm. Neytral mis klasterlari (Cu_n, n = 2-5) [8].

[8] da o'n atomgacha bo'lgan neytral kam atomli mis klasterlarining geometrik tuzilishlari haqida natijalar keltirilgan.

[10] kam atomli (10 atomgacha) mis klasterlarining geometriyasi bilan bog'liq bir qator xususiyatlarni muhokama qildi va ularni boshqa adabiyotlarda keltirilgan natijalar bilan solishtirdi.

Nazariy tadqiqot metodologiyasi. Hozirgi vaqtda atom darajasida modellashtirish uchun MD (Molekulyar dinamika) usuli va uning analoglaridan tobora ko'proq foydalanilmoqda. Buning asosiy sababi shundaki, bu usul real vaqtga mos keladigan simulyatsiyalashga javob bera oladi. Shuning uchun biz MD usuli atomistik modellashtirish uchun etarli natijalar beradi deb hisoblaymiz.

MD usuli modellashtirilayotgan sistemani tashkil etuvchi barcha atomlar uchun Nyutonning ikkinchi qonuni tenglamalar tizimini echishga asoslangan. Davriy chegara shartlaridan foydalanganda modellashtirilgan ob'ektga yoki simulyatsiya katakchasiga kiritilgan atomlar sonining

yuqori chegarasi kompyuter texnikasi imkoniyatlarining kengayishi bilan ortadi.

MD ning ikkita asosiy turi mavjud (adiabatik va izotermik). Adiabatik tip klassik mexanikaga ko'proq mos keladi va natijada simulyatsiya qilingan tizimning umumiy energiyasi o'zgarmaydi. Biroq, bu versiya kamdan-kam qo'llaniladi, chunki u energiya sarfini hisobga olmaydi, bu odatda haqiqiy tizimlarning rivojlanishiga mos kelmaydi. Izotermik MDlarda mexanik algoritm maxsus algoritm (ma'lum haroratni saqlaydigan termostat) bilan to'ldiriladi. Birinchidan, bunday algoritm o'zining asosiy vazifasini bajarishi kerak. Ikkinchidan, u Nyutonning ikkinchi qonunining tenglamalar tizimi tomonidan belgilangan evolyutsiya stsenariysini buzmaslik uchun tizimning fazaviy traektoriyasiga sezilarli aralashuvga ta'sir qilmasligi kerak, ya'ni:

$$\begin{aligned} a_{xi} &= \frac{dv_{xi}}{dt} = m^{-1}(\sum_{i \neq j} F_{xij} + \sum_i f_{xi}) \\ a_{yi} &= \frac{dv_{yi}}{dt} = m^{-1}(\sum_{i \neq j} F_{yij} + \sum_i f_{yi}) \\ a_{zi} &= \frac{dv_{zi}}{dt} = m^{-1}(\sum_{i \neq j} F_{zij} + \sum_i f_{zi}) \end{aligned} \quad (3)$$

bu yerda a_{xi} , a_{yi} , a_{zi} "i-chi" atomning tezlanish vektorining komponentlari, v_{xi} , v_{yi} va v_{zi} – tezlik vektor komponentlari, t – vaqt, m – atom massasi, F_{xij} , F_{yij} va F_{zij} – ichki kuchlarning tarkibiy qismlari, atomga ta'sir qiluvchi i , f_{xi} , f_{yi} va f_{zi} – tashqi kuchlarning tarkibiy qismlari, erkin nanozarracha uchun nolga teng [3].

Bunday algoritmlar yordamida olingan natijalarning aniqlik darajasi juda yuqori. Boshqa tomondan, dasturiy ta'minot ancha murakkab va ko'p sonli qiymatlarni saqlash uchun juda ko'p xotirani talab qiladi.

Yuqoridagi munosabatlarga asoslanib, amalda qulayroq "Verlet" algoritmi keng qo'llaniladi [4]:

$$\begin{aligned} \vec{r}(t + \Delta t) &= 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)(\Delta t)^2, \\ \vec{v}(t) &= \frac{\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t)}{2\Delta t} \end{aligned}$$

Simulyatsiya jarayoni. Metall tizimlarni modellashtirishda EAM (Embedded atom method) potentsialidan foydalaniladi.

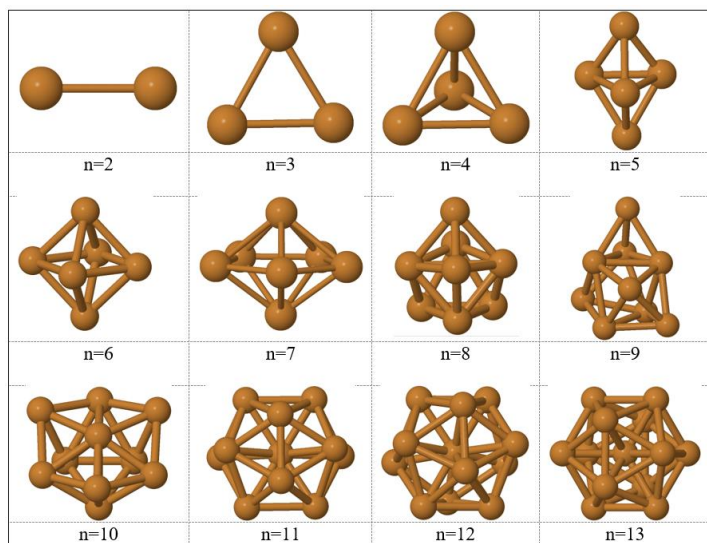
Yuqoridagilardan kelib chiqib, biz kumush klasterlarining geometrik tuzilishini MD (Molekulyar dinamika) usulida modellashtirish uchun "Sandia National Laboratories" tomonidan ishlab chiqilgan LAMMPS dasturiy paketidan foydalandik [11]. Atomlararo o'zaro ta'sir jarayonlarini hisoblashda



EAM (Embedded atom method) potentsialidan foydalandik [6,7]. Natijalarni ya'ni kam atomli mis klasterlarining geometrik tuzilmalarini vizualashtirish uchun Jmol dasturidan foydalandik [12].

Har bir simulyatsiyada dastlabki konfiguratsiyani yaratgandan so'ng, har 10000 qadamda klaster energiyasi minimallashtirildi. Verlet algoritmi Nyutonning harakat tenglamalarini 0,0001 ps vaqt qadami bilan integrallash uchun ishlatilgan. Har bir bajarilgan simulyatsiya jarayonining uzunligi 1000 pikosekundni (1 nanosekund) tashkil etadi.

Natijalar va muhokamalar. 4-rasmda kam atomli mis klasterlarining geometrik tuzilishlari keltirilgan. Ushbu rasmlarda dumaloq sharlar mis atomlarini ifodalaydi, sharlar orasidagi chiziqlar atomlar orasidagi o'zaro ta'sirni ya'ni bog' uzunligini bildiradi.



4-rasm. n=2-13 uchun neytral mis klasterlarining geometrik tuzilmalari.

Cu₂ klasteri ikki nuqtani tutashtiruvchi kesma shakliga ega. Cu₃ klasteri teng tomonli uchburchak shakliga ega. Cu₄ muntazam uchburchak piramida shakliga ega. Cu₅ klasteri beshta atomdan iborat bo'lib, ulardan uchta bitta tekislikda, qolgan ikkita atom esa simmetrik ravishda ushbu uchburchakning markazidan yuqorida va pastda joylashgan. Cu₆ klasteri oltita atomdan iborat bo'lib, ulardan 4 tasi bir tekislikda, qolgan ikkita atom esa ushbu to'rtburchakning markazidan yuqorida va pastda simmetrik tarzda joylashgan. Cu₇ klasteri yetita atomdan iborat bo'lib, ulardan beshtasi bir xil tekislikda, qolgan ikkita atom esa ushbu beshburchak markazidan yuqorida va pastda simmetrik tarzda joylashgan. Cu₈ klasteri bir tekislikda 4 ta atom va oddiy parallelogramma hosil qiladi, qolgan bitta atom parallelogramm markazidan

yuqorida va yana uchta atom esa parallelogramm markazidan pastda joylashgan. 4-rasmdan ko'rinib turibdiki, Cu₉ dan Cu₁₂ gacha bo'lgan klasterlarning shakli shar shakliga yaqin g'ayrioddiy geometrik shaklga ega. Cu₁₃ klasteri esa sharsimon shaklga ega.

1-Jadval. O'n atomgacha bo'lgan neytral mis klasterlarining strukturaviy parametrlarining (Cu-Cu bog' uzunliklarining) qiyosiy jadvali (qiymatlar Å da).

Klaster	Struktura parametrlari				
	Adabiyot [8]		Adabiyot [9]	Ushbu ishda	
Cu ₂	2.21			2.16	
Cu ₃	2.30		2.25	2.28	
			2.24	2.28	
			2.24	2.28	
Cu ₄	2.35		2.23	2.35	
	2.32		2.22	2.35	
			2.24	2.35	
Cu ₅	2.30		2.23	2.36	
	2.42		2.38	2.42	
Cu ₆	2.36		2.4	2.36	
	2.47		2.39	2.38	
	2.42		2.41	2.41	
	2.28			2.57	
Cu ₇	2.39		2.41	2.39	
	2.39		2.63	2.42	
			2.45	2.39	
Cu ₈	2.35	2.47	2.41	2.41	2.42
	2.38	3.07	2.61	2.41	3.12
	2.39	2.38	2.59	2.42	2.39
	2.35	2.47	2.39	2.39	2.42
Cu ₉	2.44	2.40	2.44	2.42	2.41
	2.41	2.37	2.59	2.42	2.41
	2.44	2.37	2.41	2.42	2.41
	2.43	2.38		2.42	2.41
Cu ₁₀	2.33			2.39	
	2.42			2.44	
	2.45			2.46	

Xulosa. Biz MD (Molekulyar dinamika) usulida EAM (Embedded atom method) potentsialidan foydalangan holda kichik neytral mis klasterlarining geometrik tuzilishlarini o'rgandik. Kompyuter eksperimenti orqali olingan geometrik natijalarimiz eksperimental va boshqa nazariy tadqiqotlar natijalari bilan yuqori darajada mos ekanligini ko'rsatdi. Biz aniqlagan umumiy tendentsiya shundan iboratki, bir xil miqdordagi (juft sondagi) atomlarga ega bo'lgan mis



klasterlari toq sondagi atomlarga ega bo'lgan mis klasterlariga qaraganda barqarorroq ekani aniqlandi.

Bu ish bajarilishida Muhammad al-Xorazmiy nomidagi Toshkent axborot texnologiyalari universiteti Farg'ona filiali negizida tashkil etilgan "Murakkab jarayonlarni modellash" ilmiy-tadqiqot laboratoriyasi tomonidan to'liq qo'llab-quvvatlandi.

Adabiyotlar ro'yhati

1. Rasulov A.M., Ibroximov N.I. (2019). Clusters Deposition on Surface an Atomic Scale Study by Computer Simulation Method. Journal of App. Math. And Phys., 7, 2303-2314.
2. Böyükata M., Belchior J.C. (2008). Structural and energetic analysis of copper clusters: MD study of Cu_n ($n = 2-45$). J. Braz. Chem. Soc., Vol. 19, No. 5, 884-893.
3. Talizin I.V. (2019). Molekulyarno-dinamicheskoe issledovanie termodinamicheskix i kineticheskix aspektov plavleniya i kristallizatsii metallicheskix nanochastits. S.36-39.
4. Allen M.P., Tildesley D.J. (2017). Computer Simulation of Liquids. Published to Oxford Scholarship, S. 78-82.
5. Murray S. Daw., Baskes M.I. (1984). Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. J. Phy. Rev., Vol 29, No 12, 6443-6453.
6. Bogatkov E.V., Bityutskaya L.A., Shebanov A.N. (2013). Modelirovanie nanoklasterov metodom molekulyarnoy dinamiki. Izdatelsko-poligraficheskiy tsentr Voronejskogo gosudarstvennogo universiteta, S.10-24.
7. Michael P. Allen. (2004). Introduction to Molecular Dynamics Simulation. Computational Soft Matter, John von Neumann Institute for Computing, NIC series Vol. 23, pp. 1-28.
8. Jug K., Zimmermann B. (2002). Structure and stability of small copper clusters. J. Chem. Phys., Vol 116, No 11.
9. Kabir M., Mookerjee A., Bhattacharya A.K. (2004). Copper clusters: electronic effect dominates over geometric effect. Eur. Phys. J. D 31, 477-485.
10. Li Ch.G., Shen Zi.G., Hu Y.F., Tang Ya.N., Chen W.G., Ren B.Z. (2017). Insights into the

structures and electronic properties of Cu_{n+1}^{μ} and $Cu_n S^{\mu}$ ($n=1-12$; $\mu=0, \pm 1$) clusters. Scientific Reports 7 (1).

11. <https://docs.lammps.org/Manual.html>
12. <https://chemapps.stolaf.edu/jmol/docs/>

