

7. Nazirov Sh.A., Kravchenko S.E., Babakulov I.H. The Automated System of Testing Solutions for the Organization of Competitions on Programming among Students and Schoolboys in Local Networks and the Internet. // International Conference on IT Promotion in Asia 2008 in conjunction with international Summit on Information and Communication Technologies. September 22-26, 2008. p. 128-131.

8. Назиров Ш.А. Об актуальности разработки автоматизированной системы тестирования программных решений для проведения очных, дистанционных и Интернет-соревнований. // Совместный выпуск по материалам

республиканской научной конференции «Современное состояние и пути развития информационных технологий». г.Ташкент, 11-13 октября 2006 г. С. 252-258.

9. Назиров Ш.А., Кравченко С.Е., Бабакулов И.Х. Автоматизированная система проверки решений для организации соревнований по программированию среди студентов и школьников в локальных сетях и сети Интернет // Узбекский журнал Проблемы информатики и энергетики. Ташкент, Фан. 2008, № 6.

УДК 681.3

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ АТОМОВ ВОДОРОДА НА ГРАФЕНЕ

Б.Н.Рахимов, Х.И.Жабборов

*В ходе компьютерного моделирования изучены процессы столкновения атомов водорода с кинетической энергией 100 эВ с моделированным графеном с использованием молекулярной динамики. Угол падения атома водорода, отсчитываемый от плоскости графена, задавался в 20°, направления скорости падающих атомов водорода выбиралось либо вдоль «zigzag»-направления, либо вдоль «armchair»-направления графена.*

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, графен, рассеяние, уголь, атом, водород, энергия, динамика

*Computer simulation of collision of hydrogen atoms with a kinetic energy of 100 eV with this simulated graphene using molecular dynamics was studied. The angle of incidence of the hydrogen atom measured from the graphene plane was set at 20 °, the direction of the velocity of the falling hydrogen atoms was chosen either along the "zigzag" direction or along the "armchair" direction of graphene.*

**Key words:** computer simulation, graphene, scattering, coal, atom, hydrogen, energy, dynamics.

*Молекуляр динамика усули асосида компьютерда моделлаштириш билан графен структураси кинетик энергияси 100 эВ бўлган водород атомларининг тўқнашиш жараёни ўрганилди. Графен сиртига водород атомларининг тушиш бурчаги 20° ни ташкил қилади. Тушаётган водород атомларининг тезлиги ва йўналиши графен сиртидаги «zigzag» ва «armchair» йўналишларига ўзгартириб турилган.*

**Калит сўзлар:** компьютерда моделлаштириш, графен, бурчак, атом, водород, энергия, динамика

Графен представляет собой двумерную гексагональную углеродную кристаллическую решётку (рис.1). Сначала компьютерным моделированием на основе метода Монте-Карло был смоделирован графен прямоугольной формы, состоящий из 112 атомов углерода, причём на граничные атомы накладывались периодические условия вдоль плоскости этой структуры. Для описания межатомного взаимодействия использовался потенциал Бреннера второго поколения (REBO), который хорошо описывает углеродные и водород-углеродные структуры [1]. Этот потенциал имеет вид суммы по всем связям:

$$E_b = \sum_i \sum_{j(>i)} [V^R(r_{ij}) - b_{ij}V^A(r_{ij})] \quad (1)$$

где  $E_b$  - средняя энергия связи в электронвольтах (эВ),  $r_{ij}$  - расстояние между атомами  $i$  и  $j$ . Функции  $V^R(r_{ij})$  и  $V^A(r_{ij})$  являются парно-аддитивными взаимодействиями, представ-

ляющими все межатомные отталкивания (между ионными остовами и т.д.) и притяжения между валентными электронами соответственно. Эти функции задаются следующим образом:

$$V^R(r) = f^C(r)(1+Q/r)A \cdot \exp(-\alpha \cdot r), \quad (2)$$

$$V^A(r) = f^C(r) \sum_{n=1,3} B_n \cdot \exp(-\beta_n \cdot r), \quad (3)$$

где функция обрезания  $f^C(r)$  имеет вид:

$$f^C(r) = \begin{cases} 1 & r < D_{ij}^{\min} \\ \left\{ 1 + \cos \left[ \frac{(r - D_{ij}^{\min})}{(D_{ij}^{\max} - D_{ij}^{\min})} \right] \right\} / 2 & D_{ij}^{\min} < r < D_{ij}^{\max} \\ 0 & r > D_{ij}^{\max} \end{cases}, \quad (4)$$

а величины  $A$ ,  $Q$ ,  $\alpha$ ,  $B_n$  и  $\beta_n$  ( $1 \leq n \leq 3$ ) - это параметры для связей между двумя атомами углерода. Здесь  $n$  тип химической связи (т.е. одинарная, двойная или тройная связи).

Эмпирическая функция кратности связи, отражающая тип химической связи между атомами  $i$  и  $j$ , записывается как

$$b_{ij} = \frac{1}{2} [b_{ij}^{\sigma-\pi} - b_{ji}^{\sigma-\pi}] + b_{ij}^{\pi} \quad (5)$$

где функции  $b_{ij}^{\sigma-\pi}$  и  $b_{ji}^{\sigma-\pi}$  зависят от места и углов связи, определяемых взаиморасположением каждого атома ( $i$ -го и  $j$ -го, соответственно), и регулируют гибридизацию орбиталей атомов углерода. В нашей работе рассматриваются плоскостные структуры, поэтому, согласно [2],

$$Q(N_i^C) = \begin{cases} 1 & N_i^C < 3.2 \\ \left\{ 1 + \cos [2\pi(N_i^C - 3.2)] / 2 \right\} & 3.2 < N_i^C < 3.7 \\ 0 & N_i^C > 3.7 \end{cases} \quad (8)$$

где  $N_i^C$  число соседей атома углерода  $i$ . О функции  $\gamma_C[\cos(\theta)]$  подробнее говорится в статье [3].

$$b_{ij}^{\sigma-\pi} = \left\{ 1 + \sum_{k(\neq i,j)} f_{ij}^C(r_{ij}) G[\cos(\theta_{ijk})] \right\}^{-1/2}. \quad (6)$$

Здесь угловая функция  $G[\cos(\theta_{ijk})]$  модулирует распределение всех ближайших соседей и определяет косинус угла связи между атомами  $i - j - k$ . Эта функция была получена в [1].

Для углов  $0^\circ \leq \theta \leq 109.47^\circ$  вместо вышеупомянутой угловой функции использовалось другое выражение, которое даёт более точные результаты:

$$g_C = G_C(\cos(\theta)) + Q(N_i^C) \{ \gamma_C[\cos(\theta)] - G_C[\cos(\theta)] \} \quad (7)$$

где

Функция  $b_{ij}^{\sigma-\pi}$  описана в [1], в которой также приведены величины для всех параметров, используемых в наших расчётах.

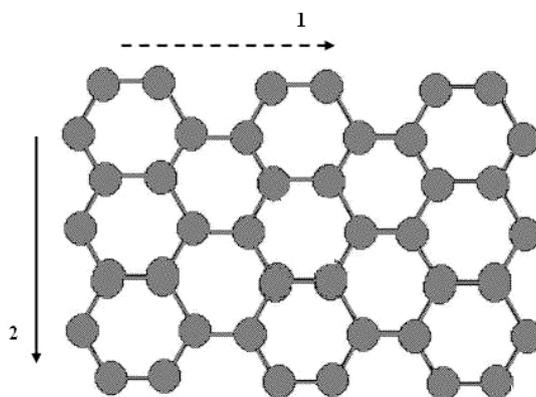


Рис.1. Участок графена, показанный в плане. Пунктирная стрелка 1 указывает «armchair»-направление графена, сплошная стрелка 2 - «zigzag»-направление

После того как были получены компьютерные модели графена, изучались процессы

столкновения атомов водорода с кинетической энергией 100 эВ с этим моделированным графе-

ном с использованием молекулярной динамики. Угол падения атома водорода, отсчитываемый от плоскости графена, задавался в  $20^\circ$ , направления скорости падающих атомов водорода выбиралось либо вдоль «zigzag»-направления, либо вдоль «armchair»-направления графена (см. рис.1).

Для каждого из направления падения атомов водорода было смоделировано 100 случаев падения, причем точка падения каждый раз задавалась случайным образом. На рис. 2 показаны энергетические спектры рассеянных графеном атомов водорода.

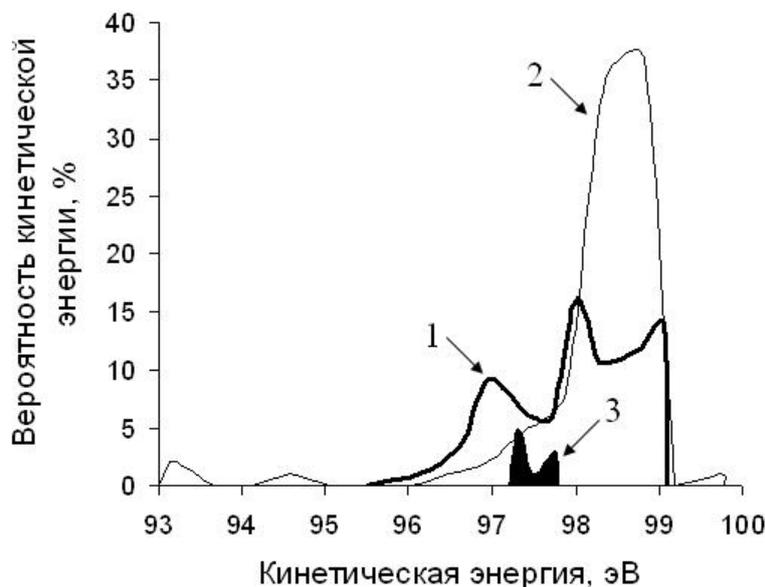


Рис.2. Энергетические спектры рассеянных графеном атомов водорода

Энергетические спектры рассеянных графеном атомов водорода, падавших под углом  $20^\circ$  с энергией 100 эВ: толстая линия 1 соответствует случаю, когда скорость налетающего атома водорода направлена вдоль «armchair»-направления графена, тонкая линия 2 соответствует случаю, когда эта скорость направлена

вдоль «zigzag»-направления, причем атомы отскакивают от поверхности графена, тогда как закрашенный черным цветом спектр, указанный цифрой 3, соответствует прохождению сквозь графен атома водорода при его падении вдоль «zigzag»-направления.

Таблица 1

Сравнительные анализ «armchair» и «zigzag»

Величины, характеризующие энергетический спектр рассеянных атомов водорода	«armchair»-направление	«zigzag»-направление		«идеальный» случай
		атом водорода отскакивает от графена	атом водорода проходит сквозь графен	
Количество пиков	3	4	2	1
Средняя кинетическая энергия, эВ	98.07	94.43	97.51	100
Во сколько раз значение максимального пика больше значения минимального пика	1.7	37	1.6	-
Ширина спектра, эВ	3.6	6.8	0.6	0

Результаты анализа энергетических спектров рассеянных атомов водорода приведены в таблице 1, в сравнении с «идеальным» случаем, когда атомы водорода считаются идеально твер-

дыми шарами, абсолютно упруго взаимодействующими с абсолютно ровной плоскостью — графеном.

#### Литература

1. D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott, J. Phys: Condens. Matter. № 14. C. 783-802; 2002

2. C. Zhang, X. Xu, H. Wu, and Q. Zhang, Chem. Phys. Lett. 364, 213; 2002.

3. D. P. Kosimov, A. A. Dzhurakhlov and F. M. Peeters Phys. Rev. B 81, 195414; 2010

УДК 532.031

## КРИТЕРИИ ДИНАМИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ СТРАТИФИЦИРОВАННЫХ ПОТОКОВ

Яхшибоев Д.С.

В статье рассматривается динамическая устойчивость стратификационных течений методом взаимопроникающих жидкостей. Достоверность результатов проверяется уточнением с данными других авторов, полученных для однофазной двухслойной жидкости. Зная естественную температуру сбрасываемой воды, пользуясь полученными зависимостями, можно определить стадию перемешивания и приближенно толщину переходного слоя в случае его образования, а также эпюру плотности при изменении температурной скорости движения верхнего слоя.

**Ключевые слова:** стратифицированные потоки, слоистые потоки, динамическая устойчивость, модель многофазных взаимопроникающей жидкостей, воздействия импульса давлений, интеграл Коши-Лагранжа, потенциальные волны, дисперсная смесь.

Мақолада қатламлашган оқимларнинг ҳаракати давомидаги динамик турғунлиги суюқликларни кўп фазали ўзаро киришувчанлиги ва таъсирланувчанлиги усули ва эришилган натижаларнинг ишончлилиги бошқа авторларнинг бир фазали суюқликлар қатлами учун олинган маълумотлар билан солиштирилиши билан текширилади. Табиий ҳароратда чиқувчи сувларни билган холда аниқланган боғланишлар орқали силжishi холатларини ва юзага келган холатларда ўтиши қатламларининг яқинлашган қалинлигини, шунингдек юқори қатлам ҳаракатида ҳарорат тезлигини ўзгаришида зичлик эпюрасини аниқлаш мумкин.

**Таянч иборалар:** қатламлашган оқим, қатламли оқим, динамик турғунлиги, кўп фазали ўзаро киришувчан ва таъсирланувчан суюқликлар усули, босим импульси таъсири, интеграл - Коши - Лагранжа, тўлқин таъсири, қовушма ўзгариши.

The dynamic stability of stratification flows is considered in the article by the method of interpenetrating liquids, and the reliability of the

results. Theoretical research of dynamic stability is usually based on methods of perturbation theory. With respect to the study of the dynamic stability of stratified flows, these methods are reduced to two basic methods: the method of small oscillations and the energy method. In this paper, we study the dynamic stability of stratified flows in a model of multiphase interpenetrating liquids. Knowing the natural temperature of the discharged water, using the obtained dependences, it is possible to determine the mixing stage and approximately the thickness of the transition layer in the case of its formation, as well as the density plot when the temperature velocity of the upper layer changes.

**Keywords:** Stratified flows, layered flows, dynamic stability, the model of multiphase interpenetrating liquids, the effects of the pressure pulse, the integral-Cocks-Lagrange, potential waves, dispersed mixture.

#### Введение

Изучению динамической устойчивости стратифицированных потоков посвящены работы Тейлора, Гольдштейна, Келлегана, Харлемана, Ун, Лофквиста, Макагно и Рауза, Нетюхайло и других.

Теоретическое исследование динамической устойчивости обычно основывается на методах теории возмущений. Применительно к изучению динамической устойчивости стратифицированных потоков эти методы сводятся к двум основным: методу малых колебаний и энергетическому методу.

В данной работе проводится изучение динамической устойчивости стратифицированных потоков в модели многофазных взаимопроникающих жидкостей.

#### Основная часть

Воздействие двух слоев стратификационных течений напишем в форме уравнения движения  $n$ -ой фазы смеси

$$\frac{\partial \vec{v}_n}{\partial t} = \vec{F}_n - \frac{1}{\rho_{ni}} \text{grad}P + K (\vec{V}_p - \vec{V}_n)_{(p \neq n)} \quad (1)$$