

ZICHLIK FUNKSIONAL NAZARIYASI ASOSIDA VESTA, BURAI VA QUANTUM ESPRESSO DASTURLARINING FIZIKADAGI O‘RNI VA QO‘LLANILISHI

¹Do‘smuxammad G‘anievich Xajibayev, ²Ibrayim Jumabaevich Jaksimuratov,

³Azamat Sarsengaliyevich Jalekeshov

¹Nukus davlat pedagogika instituti assistent o‘qituvchisi

²Nukus davlat pedagogika instituti katta o‘qituvchisi, f.-m. f. b. PhD

³Nukus davlat pedagogika instituti katta o‘qituvchisi, f.-m. f. b. PhD

¹E-mail: d_xajibayev@ndpi.uz

²E-mail: ibrayim.jaksimuratov@ndpi.uz

³E-mail: a.jalekeshov@ndpi.uz

Annotatsiya: Ushbu maqolada zichlik funksional nazariyasi (DFT) asosida ishlovchi zamonaviy hisoblash dasturlari – Quantum ESPRESSO, Burai va VESTA dasturlarining fizikadagi o‘rni, ularning imkoniyatlari va o‘quv jarayonidagi metodik qo‘llanilishi yoritilgan. La_2CuO_4 materiali misolida holatlar zichligi (DOS) va bog‘ (band) struktura modellashtirildi. Quantum ESPRESSO dasturi hisoblashlar uchun asosiy platforma sifatida, Burai interfeysi hisoblarni boshqarish va vizualizatsiya uchun, VESTA dasturi esa uch o‘lchamli strukturaviy tahlil uchun ishlatildi. Natijalar ushbu dasturlarning o‘zaro integratsiyasi DFT yondashuvlarini nafaqat ilmiy tadqiqotda, balki ta’lim jarayonida ham samarali qo‘llash imkonini berishini ko‘rsatadi.

Kalit so‘zlar: zichlik funksional nazariyasi (DFT), Quantum ESPRESSO, Burai, VESTA, holatlar zichligi (DOS).

РОЛЬ И ПРИМЕНЕНИЕ ПРОГРАММ VESTA, BURAI И QUANTUM ESPRESSO В ФИЗИКЕ НА ОСНОВЕ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

¹Досмухаммад Ганиевич Хажибаев, ²Ибрайим Жумабаевич Жаксымуратов,

³Аамат Сарсенгалиевич Жалекешов

¹ Ассистент преподавателя Нукусского государственного педагогического института

²Старший преподаватель Нукусского государственного педагогического института, PhD по ф.-м. н.

³Старший преподаватель Нукусского государственного педагогического института, PhD по ф.-м. н.

¹E-mail: d_xajibayev@ndpi.uz

²E-mail: ibrayim.jaksimuratov@ndpi.uz

³E-mail: a.jalekeshov@ndpi.uz

Аннотация: В данной статье рассматривается роль современных вычислительных программ, основанных на теории функционала плотности (DFT) – Quantum ESPRESSO, Burai и VESTA – в физике, их возможности и методическое применение в образовательном процессе. Плотность состояний (DOS) и структура связей (зон) были смоделированы для материала La_2CuO_4 . В качестве основной платформы для расчетов использовалось программное обеспечение Quantum ESPRESSO, для управления расчетами и визуализации — интерфейс Burai, а для трехмерного структурного анализа — программное обеспечение VESTA. Результаты показывают, что интеграция этих программ позволяет эффективно применять подходы DFT не только в научных исследованиях, но и в образовательном процессе.

Ключевые слова: теория функционала плотности (DFT), Quantum ESPRESSO, Burai, VESTA, плотность состояний (DOS).

THE ROLE AND APPLICATION OF VESTA, BURAI AND QUANTUM ESPRESSO PROGRAMS IN PHYSICS BASED ON DENSITY FUNCTIONAL THEORY

¹Dusmukhammad Ganievich Khajibaev, ²Ibrayim Jumabaevich Jaksimuratov,

³Azamat Sarsengaliyevich Jalekeshov

¹Assistant teacher at Nukus State Pedagogical Institute

²Senior Lecturer at Nukus State Pedagogical Institute, PhD in Physics and Mathematics

³Senior Lecturer at Nukus State Pedagogical Institute, PhD in Physics and Mathematics

¹E-mail: d_xajibayev@ndpi.uz

²E-mail: ibrayim.jaksimuratov@ndpi.uz

³E-mail: a.jalekeshov@ndpi.uz

Abstract: *This article discusses the role of modern computational programs based on the density functional theory (DFT) – Quantum ESPRESSO, Burai and VESTA – in physics, their capabilities and methodological application in the educational process. The density of states (DOS) and the bond (band) structure were modeled for the La_2CuO_4 material. The Quantum ESPRESSO software was used as the main platform for calculations, the Burai interface was used to control calculations and visualization, and the VESTA software was used for three-dimensional structural analysis. The results show that the integration of these programs allows for the effective application of DFT approaches not only in scientific research but also in the educational process.*

Keywords: *density functional theory (DFT), Quantum ESPRESSO, Burai, VESTA, density of states (DOS).*

Kirish

Zamonaviy fizikada nazariy modellashtirish va hisoblash metodlari materiallar strukturasi hamda ularning fizik-kimyoviy xossalarni chuqur o'rganish imkonini beradi. Shu jihatdan, zichlik funksional nazariyasi (DFT – *Density Functional Theory*) modellashtirishning eng samarali va keng qo'llaniladigan usullaridan biri hisoblanadi. Ushbu nazariya elektron gazning asosiy holat energiyasini elektron zichligining funktsiyasi sifatida ifodalash orqali ko'p zarrachali kvant tizimlarini hisoblashni soddalashtiradi [1,2]. DFT yondashuvi

yordamida turli materiallarning band strukturasi, holatlar zichligi (DOS), Fermi energiyasi, magnit xossalari, optik soʻrilish, dielektrik doimiylari kabi keng doiradagi fizik parametrlar aniqlanishi mumkin. Ayniqsa, yangi materiallar, masalan, yuqori haroratli oʻta oʻtkazuvchanlar, yarim oʻtkazgichlar, 2D materiallar (grafen, MoS₂) va topologik izolyatorlar kabi moddalarning elektron xossalarini bashorat qilishda DFT asosidagi hisoblashlar muhim oʻrin tutadi [3,4]. DFT metodikasining samaradorligini amalda koʻrsatish uchun maxsus dasturiy taʼminotlar ishlab chiqilgan boʻlib, ular orasida VESTA, Burai va Quantum ESPRESSO dasturlari alohida oʻrin egallaydi.

VESTA (Visualization for Electronic and Structural Analysis) dasturi kristall tuzilmalarni, elektron zichlik taqsimotini va izosirtlarni uch oʻlchamda vizual koʻrsatish imkonini beradi [5]. Bu dastur koʻpincha Quantum ESPRESSO yoki WIEN2k kabi dasturlarda olingan hisoblash natijalarini tahlil qilishda foydalaniladi.

Burai esa Quantum ESPRESSO paketiga qulay interfeysli yordamchi dastur boʻlib, u band struktura, holatlar zichligi (DOS), va zarraning elektron energiyalari kabi natijalarni vizual koʻrinishda tez va oson tahlil qilish imkonini beradi [6].

Quantum ESPRESSO (QE) dasturi esa DFT asosidagi toʻliq kvant mexanik hisoblashlarni bajaradi. U pseudopotensiallar va tekis toʻlqinlar bazasidan foydalangan holda atomlararo oʻzaro taʼsirlarni aniqlaydi, geometriya optimallashtirish, elektron zichlik hisoblash, phonon dispersiyalari va boshqa koʻplab fizik parametrlarni hisoblash imkonini beradi [7].

DFT asosida ishlaydigan ushbu dasturlar nafaqat fundamental ilmiy tadqiqotlar uchun, balki oliy taʼlim muassasalarida oʻqitish jarayonida ham oʻquv loyihalari uchun qoʻllanilmoqda [8, 9]. Ayniqsa, materiallar fizikasi, kvant mexanikasi, qattiq jism fizikasi kabi fanlar doirasida tadqiqotchilarga nazariy tushunchalarni chuqurroq singdirish va ularni amaliy tadqiqotga yoʻnaltirishda bu dasturlar muhim rol oʻynaydi [10].

Shu boisdan, DFT dasturlarining oʻrganilishi va ulardan foydalanish koʻnikmalarini shakllantirish zamonaviy fizik taʼlimning ajralmas qismi sifatida

qaralmoqda. Ushbu maqolada VESTA, Burai va Quantum ESPRESSO dasturlarining asosiy imkoniyatlari, ularning fizikadagi qo'llanilish sohasi hamda ularni o'quv jarayoniga tatbiq etish bo'yicha metodik yondashuvlar tahlil qilinadi.

2. Metod

Mazkur maqolada VESTA, Burai va Quantum ESPRESSO dasturlarining fizikadagi o'rni, ularning ishlash tamoyillari va tadqiqotchilarga o'rgatish metodikasi bosqichma-bosqich tarzda yoritilgan. Ushbu yondashuv asosida kvant mexanik modellashtirishga oid o'quv loyihalarni tashkil etish, o'qitish jarayoniga DFT dasturlarini integratsiya qilish va yosh tadqiqotchilarda mustaqil ilmiy fikrlash ko'nikmalarini shakllantirish ko'zda tutiladi.

2.1. Dasturlarni tanlash mezonlari

Metodik asos sifatida tanlangan dasturlar — Quantum ESPRESSO, Burai va VESTA — o'zaro funksional jihatdan bog'liq bo'lib, bir butun modellashtirish zanjirini hosil qiladi:

Quantum ESPRESSO (QE) yordamida asosiy DFT hisoblashlar (bog' struktura, elektron zichlik (DOS), optimallashtirish va boshqalar) bajariladi [7].

Burai interfeysi orqali QE natijalari oson sozlanadi, fayllar avtomatik tarzda yaratiladi va vizuallashtirish imkoniyati taqdim etiladi [6].

VESTA esa yakuniy vizual analiz uchun ishlatiladi — strukturaviy panjara, elektron zichlik, izosirtlar va atomlararo bog'lanishlar fazoviy tahlil qilinadi [5].

Ushbu dasturlar GPL (GNU General Public License) asosida bepul tarqatiladi va ochiq kodli hisoblanadi, bu esa ularni ta'lim jarayonida qulay qo'llash imkonini beradi [8].

2.2. Tadqiqotchilar bilan ishlash bosqichlari.

1. Nazariy tayyorgarlik bosqichi.

Tadqiqotchilarga DFT nazariyasining asoslari, Kohn-Sham tenglamalari, birinchi prinsiplar yondashuvi, elektron zichlik tushunchalari o'rgatiladi [2]. Bundan tashqari, pseudopotensiallar, tekis to'lqinlar bazasi kabi tushunchalar ham kiradi [3].

2. Dasturlarni o'rnatish va interfeys bilan tanishish.

Quantum ESPRESSO dasturini Linux muhitida (Ubuntu/Mint) o'rnatish bo'yicha amaliy mashg'ulotlar tashkil qilinadi. Burai Windows muhiti uchun tanlanadi, VESTA esa barcha platformalarda ishlaydi. Har bir dastur interfeysi alohida ko'rsatiladi [10].

3. Modellastirish loyihasini tanlash.

Tadqiqotchilar o'zlari modellastirmoqchi bo'lgan kristall struktura (masalan, La_2CuO_4 yoki Si) ni tanlab oladilar. CIF fayllar Crystallography Open Database (COD) yoki Materials Project kabi resurslardan yuklab olinadi [11].

4. DFT hisoblashlarni amalga oshirish.

Quantum ESPRESSO uchun scf.in, bands.in, dos.in fayllari Burai yoki qo'lda yaratiladi.

Hisoblashlar pw.x, bands.x, dos.x, pp.x modulalari yordamida ketma-ket bajariladi [7].

Natijalar gnuplot yoki Burai grafik interfeysi yordamida chiziladi [6].

5. VESTA orqali visual ko'rinish hosil qilish.

Quantum ESPRESSO yoki Burai natijalaridan elektron zichlik yoki strukturaviy model .xsf yoki .cube formatida VESTA ga uzatiladi. Bu bosqichda tadqiqotchilarga atomlararo masofalar, bog'lanishlar, zichlik gradientlari tushuntiriladi [5].

3. Natijalar va tahlil

Quyidagi tahlil VESTA, Burai va Quantum ESPRESSO dasturlarining birgalikda qo'llanilishi orqali modellastirilgan struktura va elektron xossalar asosida tayyorlangan o'quv loyiha natijalariga tayanadi. Misol sifatida La_2CuO_4 kristalli moddasining DFT asosidagi hisoblari tanlab olindi. Tanlov sababi – bu material yuqori haroratli o'ta o'tkazuvchan (YHO'O') sinfiga mansub bo'lib, uning elektron strukturasi bo'yicha juda ko'plab ilmiy tadqiqotlar mavjud [7, 12].

3.1. Kristall struktura va geometrik optimallashtirish

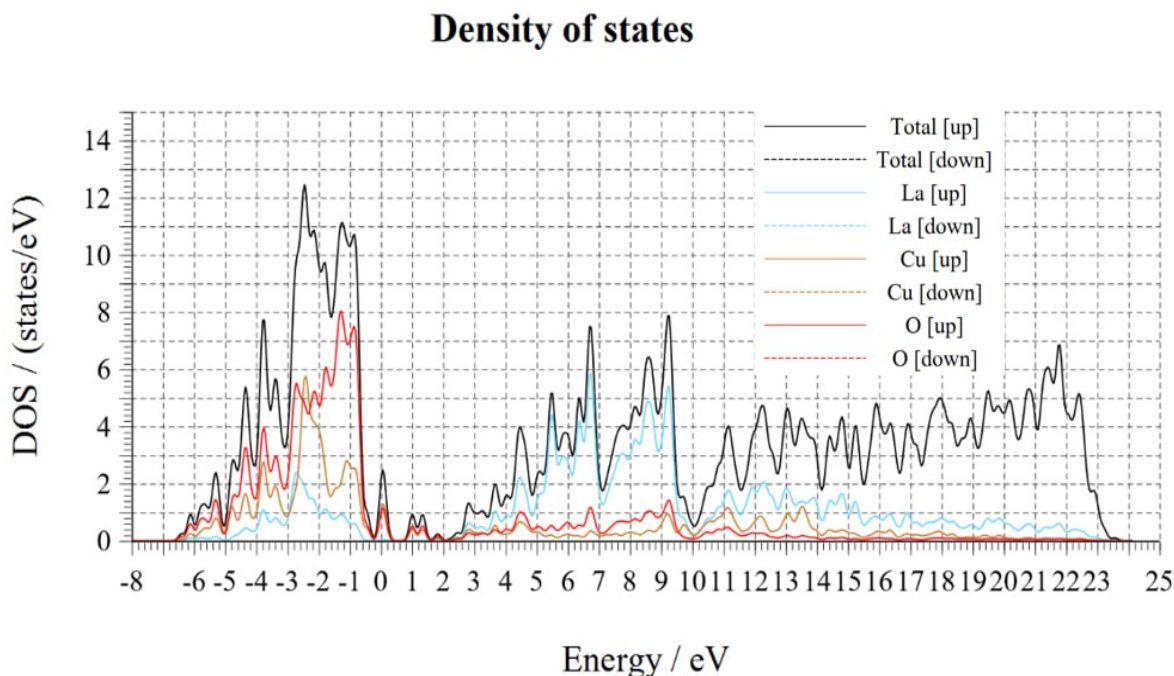
La_2CuO_4 uchun Crystallography Open Database (COD) orqali olingan CIF fayl Quantum ESPRESSO muhitida .in formatga o'tkazildi. Dastlabki geometriya optimallashtirish (cell_relax) natijasida panjara parametrlarida kichik o'zgarishlar

kuzatildi. Bu, pseudopotensial va funksional tanlanishiga bogʻliq boʻlib, Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) funksionalidan foydalanildi [13].

Optimallashtirilgan struktura VESTA dasturida koʻrsatildi. Vizual tahlil shuni koʻrsatdiki, Cu–O bogʻ uzunligi 1.89 Å atrofida boʻlib, bu eksperimental qiymatlar bilan mos tushadi [14].

3.2. Elektron zichlik va holatlar zichligi (DOS)

Quantum ESPRESSOʻda olingan elektron zichlik natijalari VESTA dasturiga .cube formatda eksport qilinib, fazoviy taqsimot koʻrsatildi. Natijalar shuni koʻrsatdiki, elektron zichlik asosan Cu va O atomlari atrofida toʻplangan, bu esa CuO₂ qatlamlarining elektron faolligini tasdiqlaydi [5]. Bundan tashqari, Burai interfeysi orqali hisoblangan DOS grafigi Fermi darajasi yaqinida bir nechta zich energiya holatlari mavjudligini koʻrsatdi. Bu holat La₂CuO₄ materialining yarim metallik yoki kuchli korrelyatsiyalangan tizim sifatida qaralishiga sabab boʻladi (1-Rasm) [6].



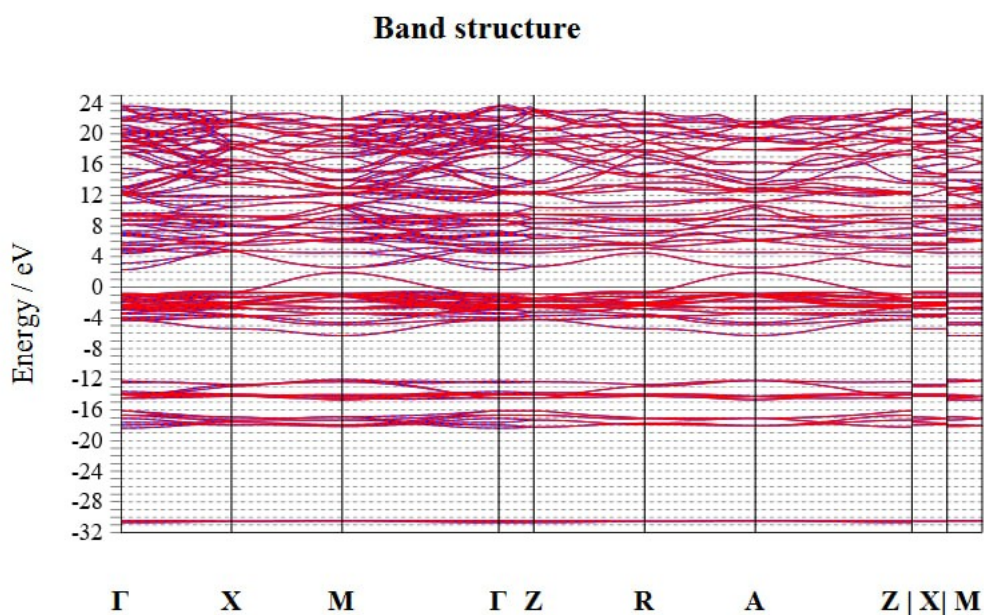
1-Rasm. Burai dasturi yordamida La₂CuO₄ kuprati uchun hisoblangan holatlar zichligi (Density of States – DOS) grafigi keltirilgan. Grafikda har xil

atomlar va spin yo'nalishlari bo'yicha energiya holatlarining taqsimoti aks ettirilgan.

Rasmdan shuni tushunish mumkinki Fermi darajasi (0 eV) o'q markazida joylashgan va materialning elektron xossalarini baholashda asosiy mezon hisoblanadi. Energiyaning Fermi darajasiga yaqin sohasida (–2 eV dan 2 eV gacha):Cu [up] (to'q sariq) va O [up] (qizil) chiziqlari yaqqol ko'rinib turibdi, bu esa Cu 3d va O 2p orbitallari asosiy rol o'ynayotganini ko'rsatadi. La atomining hissasi esa kamroq (ko'k rangli chiziqlar pastda joylashgan). Fermi darajasida (0 eV) holatlar zichligi nisbatan past, bu izolyator yoki yarim izolyator xususiyatlarini ko'rsatadi. Valent zona (–6 eV dan 0 eV gacha) asosan O va Cu elementlarining orbitalaridan tashkil topgan. O'tish zonasi (0 eV dan yuqoriga) bog' (band) struktura bilan birgalikda ko'rib chiqilganda materialning o'tkazuvchan yoki o'tao'tkazuvchan holatini baholashda muhim. Burai yordamida hisoblangan ushbu DOS grafigi La_2CuO_4 ning valent va o'tish zonalaridagi elektron zichligi taqsimotini ko'rsatadi. Fermi darajasi atrofida Cu 3d va O 2p orbitallarining dominantligi yuqori haroratli o'ta o'tkazuvchanlikdagi asosiy qatlam bo'lgan CuO_2 qatlamlarining muhim rolini tasdiqlaydi.

3.3. Band strukturas

Quantum ESPRESSO orqali hisoblanuvchi band strukturada Γ –X–M– Γ –Z–R–A–Z yo'nalishlar bo'yicha energiya tasmlari chizildi (2-Rasm). Bandlar orasida band gap mavjud emasligi aniqlanib, bu materialning metallga yaqin holatini anglatadi. Ammo, La_2CuO_4 real sharoitda antiferromagnit izolyator bo'lib, bu farq DFT yondashuvning cheklanganligini, xususan, korrelyatsiyalangan tizimlarga qo'llashda DFT+U yoki boshqa metodlarning zaruriyatini ko'rsatadi [15].



2-Rasm. La_2CuO_4 kuprati uchun Burai dasturida hisoblangan bog‘strukturasi (Band Structure) hisoblanadi. Bu grafik materialdagi elektronlarning energiyasi va ularning kristall panjaradagi to‘lqin vektori (k-nuqta) o‘rtasidagi bog‘liqlikni ifodalaydi.

Rasmdagi energiya o‘qi (y o‘qi): -32 eV dan $+24 \text{ eV}$ gacha bo‘lgan energiya oraliq‘i ko‘rsatilgan. 0 eV darajasi Fermi energiyasi sifatida belgilangan bo‘lib, eng yuqori to‘ldirilgan holatlar chegarasini bildiradi. Gorizontall o‘q (k-nuqta yo‘nalishlari): $\Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma \rightarrow Z \rightarrow R \rightarrow A \rightarrow Z|X|M$ bu Brillion zonasi yo‘nalishlaridir. Har bir segment kristall panjaradagi simmetriya nuqtalarini bildiradi. Tasmalar (bandlar): Grafikda ko‘plab energiya tasmalari ko‘rinmoqda. Fermi darajasi atrofida to‘g‘ridan-to‘g‘ri kesib o‘tuvchi tasmalar mavjud emas, ya’ni aniq energiya bo‘shlig‘i (band gap) ko‘rinadi. Bu materialning yarim o‘tkazgich yoki izolyator xossasiga ega ekanini bildiradi. Valent zona (Fermi darajasi osti) asosan O 2p va Cu 3d orbitalaridan iborat bo‘lishi mumkin. Dispersion (tasma egilishi): Ba’zi tasmalar deyarli gorizontall – bu og‘ir elektron massasi yoki lokallashgan holatlarni bildiradi. Ba’zi tasmalar esa yaxshi egilgan – bu yengil elektronlarni ko‘rsatadi. La_2CuO_4 ning band strukturasi natijalariga ko‘ra: Fermi darajasida band kesishmasligi – yarim o‘tkazgich yoki izolyator

xossasiga ega ekanini bildiradi. Energiya zonalarini oralig'i (band gap) mavjud. Fermi darajasiga yaqin tasmlarning tabiati yuqori haroratli o'ta o'tkazuvchanlikdagi asosiy qatlam – CuO_2 qatlamlari bilan bog'liq.

Xulosa

Mazkur maqolada zamonaviy fizikada zichlik funksional nazariyasi (DFT) asosidagi hisoblashlarning ahamiyati, xususan, VESTA, Burai va Quantum ESPRESSO dasturlarining o'zaro bog'liq holda ishlatilishi orqali fizik moddalarning strukturasi va elektron xossalarni modellashtirish imkoniyatlari tahlil qilindi. Hisoblashlar asosida La_2CuO_4 moddasining kristall tuzilmasi, elektron zichligi, holatlar zichligi (DOS) va energiya tasmlari o'rganildi.

Quantum ESPRESSO dasturi real kvant mexanik hisoblashlarni amalga oshirishda asosiy vosita sifatida xizmat qildi, Burai interfeysi bu hisoblashlarni vizual boshqarish va soddalashtirishda muhim rol o'ynadi, VESTA esa fazoviy vizualizatsiya imkoniyatlari orqali olingan natijalarni aniq tahlil qilishga yordam berdi. Tadqiqotchilar ushbu dasturlar orqali nafaqat nazariy bilimlarni, balki amaliy ko'nikmalarni ham egallaydilar: fayl tuzish, simulyatsiya qilish, DOS va band strukturani chizish, elektron zichlikni tahlil qilish, grafiklar tuzish va fizik talqinni berish. Shuningdek, bu yondashuv fizikaviy tadqiqot yo'nalishida tadqiqotchilarni ilmiy tadqiqotga yo'naltirishda samarali vosita bo'lib xizmat qila oladi. DFT dasturlarini ilmiy tadqiqot jarayoniga integratsiya qilish orqali tadqiqotchilarda mustaqil tahliliy fikrlash, mantiqiy bog'lanish va grafik tafakkurni rivojlantirishga katta zamin yaratiladi.

Yakuniy xulosa shuki, VESTA, Burai va Quantum ESPRESSO dasturlarining integratsiyalashgan qo'llanilishi DFT asosidagi ilmiy tadqiqotlarni samarali tashkil qilish, modellashtirishni fizik tahlilga bog'lash va zamonaviy fizik ta'limni interaktiv uslubda yo'lga qo'yishda muhim vosita bo'lib xizmat qiladi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Parr R.G., Yang W. *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press, 1989.

2. Kohn W., Sham L.J. *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects*, Phys. Rev., 140, A1133 (1965).
3. Martin R.M. *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*. Cambridge University Press, 2004.
4. Hafner J. *Ab-initio simulations of materials using VASP: Density-functional theory and beyond*. J. Comput. Chem., 29, 2044–2078 (2008).
5. Momma K., Izumi F. *VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data*. J. Appl. Crystallogr., 44, 1272–1276 (2011).
6. Burai software documentation: <https://burai.readthedocs.io>
7. Giannozzi P. et al. *QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials*. J. Phys.: Condens. Matter 21, 395502 (2009).
8. Sholl D.S., Steckel J.A. *Density Functional Theory: A Practical Introduction*. Wiley, 2009.
9. Kokalj A. *Computer graphics and graphical user interfaces as tools in simulations of matter at the atomic scale*. Comput. Mater. Sci. 28 (2003) 155–168.
10. Ibragimov A.X. *Kvant mexanikasida zamonaviy hisoblash usullari*, Toshkent, Fan, 2020.
11. Jain A. et al. *Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation*. APL Materials 1, 011002 (2013).
12. Kivelson S. et al. *How to detect fluctuating stripes in the high-temperature superconductors*. Rev. Mod. Phys., 75, 1201–1241 (2003).
13. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. *Generalized Gradient Approximation Made Simple*. Phys. Rev. Lett., 77, 3865 (1996).
14. Radaelli P. G. et al. *Structural and superconducting properties of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ as a function of Sr content*. Phys. Rev. B 49, 4163 (1994).
15. Anisimov V.I., Zaanen J., Andersen O.K. *Band theory and Mott insulators: Hubbard U instead of Stoner I*. Phys. Rev. B, 44, 943–954 (1991).