

Міністерство освіти і науки України
Інститут соціального управління, економіки і права
Черкаський державний університет ім.Б.Хмельницького
Черкаський державний технологічний університет

● КОМП'ЮТЕРНЕ
● МОДЕЛЮВАННЯ
● ТА ІНФОРМАЦІЙНІ
● ТЕХНОЛОГІЇ
● В НАУЦІ, ЕКОНОМІЦІ
● ТА ОСВІТІ

ЧЕРКАСИ • БРАМА-ІСУЕП • 2003

Міністерство освіти і науки України
Інститут соціального управління, економіки і права
Черкаський державний університет ім.Б.Хмельницького
Черкаський державний технологічний університет

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В НАУЦІ, ЕКОНОМІЦІ ТА ОСВІТІ

Збірник наукових праць

ЧЕРКАСИ • БРАМА-ІСУЕП • 2003

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В НАУЦІ, ЕКОНОМІЦІ ТА ОСВІТІ:

Збірник наукових праць. —
Черкаси: Брама ІСУЕП, 2003. — 240 с.

*Збірник містить матеріали доповідей V Всеукраїнської науково-практичної конференції, що відбулася 21-23 квітня 2003 р.
Для студентів вищих навчальних закладів, аспірантів, наукових та педагогічних працівників.*

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ

Акіншпін В.Д., доктор фізико-математичних наук, професор
Глушко Є.Я., доктор фізико-математичних наук, професор
Вітлінський В.В., доктор економічних наук, професор
Жалдак М.І., доктор педагогічних наук, професор
Кукурудза І.І., доктор економічних наук, професор
Лега Ю.Г., доктор технічних наук, професор
Олейніков О.І., доктор фізико-математичних наук, професор
Русов В.Д., доктор фізико-математичних наук, професор
Середенко В.М., доктор технічних наук, професор
Ситник В.Ф., доктор економічних наук, професор
Соловійов В.М., доктор фізико-математичних наук, професор
Тесля Ю.М., доктор технічних наук, професор
Хомяков В.І., доктор технічних наук, професор
Хусаїнов Д.Я., доктор фізико-математичних наук, професор
Шаралов В.М., доктор технічних наук, професор

РЕЦЕНЗЕНТИ:

Нусінов В.Я., доктор економічних наук, професор
Міжнародний науково-технічний університет), м. Київ
Ків А.Ю., доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач
кафедри теоретичної фізики Південноукраїнського державного пе-
дагогічного університету, м.Одеса

*Редакційна колегія вважає за доцільне повідомити, що не всі положення і висновки окремих авторів є безперечними. Разом з тим, вважаємо можливим їх публікацію з метою обговорення.
Затверджено Вченою радою Інституту соціального управління, економіки і права (протокол № 2 від 24.02.2003 р.)*

ВЛИЯНИЕ РЕЖИМА ФОРМИРОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ Si (001) НА ЕЕ АТОМНУЮ РЕКОНСТРУКЦИЮ

А.Е.Кив¹, В.Н. Соловьев², Т.И. Максимова³

¹г. Беер-Шева, Университет Бен Гурион

²г. Черкассы, Институт социального управления,
экономики и права

³г. Кривой Рог, Криворожский государственный педагогический
университет

В рамках данного исследования нас интересовала реконструкция поверхности Si (001) и приповерхностных слоев, на глубине порядка нескольких постоянных решетки кремния. Моделирование поверхности кремния проведено методом молекулярной динамики с использованием полуэмпирических потенциалов. В работе исследовано влияние температурных условий в диапазоне от 100 К до 1500 К на динамику реконструкции.

Реальная поверхность Si сильно отличается от идеальной кристаллической структуры в объеме полупроводника. Данная поверхность не является естественной поверхностью скола. Обычно для приготовления чистых поверхностей (001) используются повторяющиеся циклы бомбардировки ионами, как правило, ионами Ar с первичной энергией 100 эВ, с последующим лазерным отжигом в сверхвысоком вакууме (при $T \approx 1200$ К) или кратковременным нагревом кристалла до 1500 К. При этом условия могут быть крайне неравновесными. Это приводит к возникновению множества дефектов структуры.

Из-за сильной угловой зависимости ковалентной связи, на поверхности кремния наблюдаются относительно большие смещения приповерхностных атомов и деформации электронных энергетических спектров, что осложняет трактовку экспериментальных данных и *ab initio* моделирование.

Проведенный анализ используемых аналитических методов свидетельствует о том, что в большинстве аналитических моделей из первых принципов не проводится свободная релаксация всей системы атомов. Также часто вводится искусственное демпфирование, которое предполагает обнуление всех скоростей для достижения системой равновесия, что ведет к

отходу моделируемой системы от реальных температур.

В данной работе поверхность кремния моделировалась методом молекулярной динамики, что позволило моделировать свободную релаксацию атомов в разных температурных условиях. Расчетная ячейка содержала 1152 атома, расчетная ячейка кубической формы, линейные размеры которой в плоскости (001) составили $32.5 \times 32.5 \text{ \AA}$. В двух направлениях были введены периодические граничные условия.

В модели был использован потенциал Стиллинджера-Вебера. Его функциональная форма достаточно точно отражает зависимость химического связывания от локального координационного числа, что позволяет корректно описывать поведение структурных дефектов, вызывающих искажения sp^2 и sp^3 гибридизации. Релаксация системы проводилась по алгоритму Верле. Шаг интегрирования составил 10^{-14} с. Эволюция поверхностной реконструкции наблюдалась на временах порядка 5000 шагов.

В работе варьировались начальные температурные условия в диапазоне от 100 К до 1500 К и условия охлаждения/нагрева поверхности. Результаты моделирования показывают, что игнорирование в модели начального температурного режима может приводить к искажению результатов. Нагрев кристалла Si, (001) поверхность которого уже отрелаксирована при низких температурах, дает значительно более высокую степень симметрии, чем реконструкция, наблюдаемая экспериментальными методами. Алгоритмы минимизации энергии, где температура не является регулируемым фактором, и фактически приводится к нулю, ведут к моделированию поверхности, далекой от реальной Si (001) поверхности и, как следствие, искажению получаемых структурных и электронных поверхностных параметров.

Выявленные особенности реконструкции поверхности Si (001) позволяют сделать вывод о том, что степень симметрии и глубины перестройки атомов являются чувствительными к режиму создания поверхности.

Полученные данные можно использовать для целенаправленной модификации поверхностей и прогнозирования их структурно-зависимых физических свойств.

ЗМІСТ

В.О.Адоньєв. Системний аналіз використання паливно-енергетичних ресурсів в регіонах півдня країни.....	3
Є.О.Адоньєв. Основні підходи до вирішення проблеми забезпечення енергоносіями вітчизняної економіки.....	5
В.В.Атамась, А.М.Базько, К.В.Попляєва, А.С.Уткіна. Комп'ютерне моделювання фрактальних об'єктів.....	7
Б.М.Бордюг. Створення підсистеми моделювання СППР на основі структурного моделювання.....	9
М.Л.Вдовин. Визначення оптимального обсягу імпорту.....	12
В.М.Галів, С.М.Іщеряков, Т.П.Каюк. Структурні та автокореляційні властивості багаторівневих M-послідовностей.....	14
Б.П.Головня. Новая разностная схема для решения уравнений Навье-Стокса.....	15
Л.І.Гончар, Т.В.Лендюк. Використання сучасних методів і технологій в процесі бізнесової діяльності суб'єктів господарювання.....	15
Ю.А.Гончаров, Л.А.Масич. Компьютерное тестирование – перспективный метод контроля знаний студентов.....	25
Л.В.Гришко, Н.В.Чернявский. Пути индивидуализации процесса обучения основам программирования.....	27
Р.М.Гуменюк, С.М.Іщеряков, А.Я.Полянчич, Ю.С.Федорович. Застосування подвійної згортки для визначення спектральної характеристики глибинного тиску автономними пристроями.....	29
В.Н.Данич. Модели массовых паник с формированием и потерей иммунитета.....	31
В.Д.Данчук, А.П.Кравчук. Комп'ютерне моделювання температурної трансформації контурів смуг ізотропного раманівського розсіювання світла коливаннями рідкого метилйодиду.....	35
М.В.Дацко. Internet - як інструмент маркетингу.....	37
Р.М.Дідковський. Використання формуючих поліноміальних фільтрів при моделюванні випадкових процесів.....	38
Р.М.Дідковський, О.М.Кондратьєва. Здійснення корекції знань студентів за допомогою інформаційних технологій при вивченні вищої математики в технічних ВНЗ.....	40
О.Н.Донец. Подходы к финансированию и бюджетированию энергетических проектов в условиях Украины.....	42
Є.В.Єнченко. Оптимізація системного ризику в логістиці	

сервісного обслуговування РРО.....	44
А.А.Засядько, А.В.Олецкий. Многокритериальный метод решения некорректных систем линейных алгебраических уравнений.....	47
Д.А.Иванин, А.А.Лигун. Восстановление кривых и изображений.....	49
Є.Ю.Катаєва, Т.Ю. Олейнікова, Т.В. Савельєва, І.В. Степанушко. Використання типової системи тестування для проведення самостійної роботи студентів.....	51
А.Е.Кив, В.Н. Соловьев, Т.И. Максимова. Влияние режима формирования поверхности Si (001) на ее атомную реконструкцию.....	53
С.І.Кліндухов. Моделювання розподілу речовини в потоці в каналах з прямокутним перерізом.....	55
О.Л.Кононенко, С.В.Коваль. 1С: Бухгалтерия, як напрямок удосконалення інформаційних технологій облікового процесу.....	57
Л.І.Костельна Актуальність запровадження дистанційної освіти у вищих навчальних закладах.....	59
А.П.Костенко. Информационные технологии в маркетинге.....	62
О.В.Кравченко. Математична модель міжфазової взаємодії компонентів та уточнення моделі методами обчислювальної математики.....	64
О.М.Красновид. Фактори та умови впровадження інвестиційних та інноваційних процесів у паливно-енергетичному комплексі областей півдня України.....	65
Т.Л.Крушельницька Інтегруюча функція інформатики у системі навчання.....	67
О.П.Кундря-Висоцька. Комп'ютерні програми в бухгалтерському обліку.....	69
С.А.Кучеренко. Прогнозування динаміки фінансових ринків методами нейронних мереж в пакеті "Statistica".....	71
Ю.Г.Лега, О.Ф.Клименко, В.Д.Дербенцев. Кібернетичні та синергетичні методи управління економічними системами.....	73
Ю.Г.Лега, А.А.Тимченко, Д.О.Дербенцев. Застосування фрактального аналізу до моделювання складних систем.....	75
Н.А.Леонова. Применение пакета символьной математики Mathita в научных исследованиях.....	77
Е.В.Лєпа. Оценка влияния схемы финансирования на эффективность проекта.....	80

С.О.Лещук. Організація навчального процесу за допомогою навчально-інформаційних середовищ.....	82
Г.В.Макаркіна. Оптимізація технологічної структури галузей Донецького регіону на основі матриці еталонних технологій.....	84
О.Ю.Мельников. Компьютерное моделирование процессов горячего изостатического прессования.....	86
О.С.Меняйленко. Комп'ютерне моделювання алгоритмів класифікації учнів на рівні.....	88
В.И.Мещеряков. Компьютерная медицинская диагностика.....	90
З.Є.Міненкова. Принципи побудови механізму логічного висновку діагностичних експертних систем. Комбінований МЛВ.....	92
М.В.Моисеенко, Н.А.Слюсаренко. Электронный перенос через нанокarbonные молекулы.....	94
Н.В.Моисеенко. Микроскопические механизмы зародышеобразования и роста Si преципитатов.....	96
С.И.Мордвинов, М.В.Чичужко. Методика разработки чертежей с помощью специального программного пакета «ГРАФИК-КОМПАС».....	98
В.Г.Мураховський, Д.В. Мураховський, А.І. Погорелов. Використання мультимедійних технологій при організації самостійної роботи студентів з курсу фізики.....	99
В.І.Мусурівський. Про створення системи прийняття рішень для задачі оптимального управління траулером.....	101
Ю.К.Набочук, І.Л.Семещук. Особливості використання навчальної програми "GranI" при вивченні механіки в курсі фізики середньої школи.....	104
Ю.О.Ніколаєв, Л.Д.Грінько. Модель управління на регіональному рівні з урахуванням екологічної складової.....	106
А.И.Олейников, Д.Е.Бобылев. Численное моделирование распределения напряжений около выработок в удароопасных районах.....	108
Т.М.Олійник, Г.Г.Цегелик. Фінансове планування діяльності підприємства.....	110
Л.А.Останкова. Оптимизация стратегического управления.....	112
О.П.Поліщук, С.О.Семеріков. Побудова інтерфейсу користувача в системі X Window.....	114
А.М.Приз. Математична модель рухомої межі поділу компонентів в композитах.....	116
Т.О.Прокопенко, О.Б.Данченко. Деякі аспекти розробки	

Математичної моделі оцінки ефективності цукрових підприємств.....	117
О.И.Пурский, Н.Н.Жолонко. Использование метода функции Япунова для описания динамики нейронных сетей Хопфилда.....	119
А.А.Редкокаша, К.К.Голдер. Математическая модель сортировки.....	121
О.Ф.Семерак. Макроекономічні показники ефективності податкової системи.....	123
А.Е.Семьонов, Д.О.Рзаев. Використання спеціалізованих математичних комплексів при дослідженні соціально-економічних систем.....	125
В.М.Середенко, С.С.Гузнін, С.О.Заїка, Д.П.Тупицький. Метод релаксації з чебишовським прискоренням.....	127
В.Ф.Ситник, А.В.Дубровіна. Визначення та оперування рівнем суб'єктивності групового рішення.....	128
С.А.Смолянская. Математическое моделирование процесса взаимодействия гамма-излучения со средой.....	135
В.М.Соловйов, О.А.Сердюк, Ю.В.Триус. Технічні та програмні особливості створення регіонального освітнього порталу.....	137
В.І.Спиридонов. Мультимедійні технології при викладанні інформатики.....	139
О.Д.Сучкова, О.П.Купчик. Реформа системи оподаткування як важливий крок у III-є тисячоліття.....	141
О.Д.Сучкова, Н.М.Сінкіна. Моніторинг банківських ризиків: моделювання та методи їх подолання.....	142
І.О.Теплицький, Ю.В.Єчкало. Удосконалення методики викладання фізики засобами комп'ютерного моделювання.....	144
Ю.Н.Тесля. Особенности национального управления проектами.....	146
Ю.М.Тесля, Аль-Шукрі Фатхі Мохаммед Ахмед. Структура бізнес процесу управління змінами в енергетичних проектах.....	148
Р.О.Тичковський, Г.Г.Цегелик. Математичне моделювання оптимального доступу до інформації серверів зі сторони користувачів.....	150
У.Л.Ткачик. Актуальные вопросы роли образования и науки в обеспечении конкурентоспособности Украины.....	152
М.Є.Толпеко. Податкове регулювання інвестиційної діяльності.....	154
О.М.Тракало. Автоматизація облікових процесів.....	155

Ю.В.Триус. Нові інформаційні технології у навчальному процесі вищої школи.....	159
Ю.В.Триус, А.П.Мешеряков, Н.О.Коваль. Віртуальне середовище для дистанційного навчання в Internet.....	161
Ю.С.Федорович, С.М.Іщеряков, Ю.П.Бурак. Формування фазоманіпульованих гармонійних сигналів для завадостійких систем передавання даних по комутованих телефонних лініях.....	166
О.В.Харченко, В.Г.Гриценко. Моделювання фізичних задач у середовищі Excel.....	167
О.Д.Шарапов, Г.П.Македон. Синергетичні методи дослідження соціально-економічних систем.....	174
В.І.Шинкаренко, О.М.Пюра, С.Ю.Разумов. Дослідження залежності “якість об’єктно-орієнтованого проекту – якість програмного засобу” методом імітаційного моделювання.....	176
О.І.Шувалова, В.М.Озійчук. Курс “Інтернет технології” для майбутніх викладачів інформатики.....	178
О.С.Шульга. Дослідження варіантів поведінки підприємства на олігопольному ринку.....	180
Р.К.Шурпенкова. Технічне забезпечення опрацювання обліково-аналітичної інформації.....	182
Т.В.Щелокова. Локальные законы равновесия в экономике.....	185
Ю.Г.Якусевич. Особливості моделі дистанційного навчання в освітньому порталі.....	187
СТУДЕНТСЬКІ ДОПОВІДІ	
І.С.Батаровська, В.М.Соловійов, Л.М.Строкач. Мережева структура вільного масштабу фондових ринків.....	190
С.В.Безсмертна. Індивідуалізація навчання засобами нових інформаційних технологій.....	192
Н.А. Бойко, О.Б.Данченко. Особливості розповсюдження вірусів в складних мережах.....	194
А.А.Ганчук, В.В.Соловьева. Сложные системы и проблемы прогноза.....	195
В.В.Гаркин. Компьютер и обучение.....	197
П.Б.Головня, Г.Б.Данильчук, Т.П.Рудник. Технології інтелектуального аналізу даних.....	199
О.М.Горюнова. Використання нових інформаційних технологій як засобу наочності у навчанні математиці.....	201
В.Ю.Давиденко. Использование программных комплексов на основе FUZZY-технологий для проведения прогнозных расчетов.....	203
М.М.Жолонко, А.О.Царюк. Модель динаміки інвестиційно-	

орієнтованого малого підприємства.....	205
А.Б.Захарова. Использование компьютера при изучении астрономии.....	207
С.М.Іщеряков, А.Я.Полянчич, С.Самуляк, О.Нестерук. Засоби лабораторного дослідження мікроконтролерів та елементів цифрової обробки сигналів.....	209
М.Р.Кузьмяк, Н.В. Рашевська. Курс математичного моделювання у педагогічному ВЗО.....	210
С.В.Куклина, Н.В.Моисеенко. Программно-методическая поддержка курса «Основы защиты информации».....	212
В.Л.Малорян, В.П.Родославов. Концепция сайта дистанционного обучения основам алгоритмической культуры.....	214
Е.В.Макаренко. Метакомп'ютинг и его использование для решения теоретико-числовых проблем.....	215
І.А.Мороз. Використання GRAN-3D на уроках стереометрії.....	217
С.М.Пашенко. Застосування нових інформаційних технологій на уроках математики.....	219
Д.А.Попов. О повышении компьютерной грамотности в школе.....	221
Є.М.Ракова. Використання компілятора FREEPASCAL для навчання програмування в X Window.....	223
Н.О.Сирота. Методика використання пакета Gran1.....	225
Л.О. Флегантов, Ю.С.Матвієнко. Діяльнісний підхід у побудові комп'ютерних навчальних систем.....	227
І.А.Яблокова. Математичне моделювання регулярних фракталів.....	229

**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ
ТЕХНОЛОГІЇ В НАУЦІ, ЕКОНОМІЦІ ТА ОСВІТІ:**

Збірник наукових праць. —
Черкаси: Брама ІСУЕП, 2003. — 240 с.

ISBN 966-8021-35-5

**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ
ТЕХНОЛОГІЇ В НАУЦІ, ЕКОНОМІЦІ ТА ОСВІТІ:**

Наукове видання

Науковий редактор
Коректор

В.М.Соловійов
Г.Б.Данильчук

Технічний редактор, обкладинка О.М.Третьяков.

Здано до набору 03.04.2003. Підп. до друку 23.04.2003.
Формат 60x84/16. Папір офсетний. Гарнітура Ньютон.
Умовн. друк арк. 8,33. Обл.-вид арк. 8,56.
Вид. № 49. Тираж 150 прим.