

ARZUMAN HƏSƏNOV

**NANOSİSTEMLƏRİN
RİYAZİ MODELLEŞDİRİLMƏSİ VƏ
KOMPÜTER HESABLANMASI**

Bakı - 2013

ELMİ REDAKTOR: Prof., f.e.d. M.Ə.Ramazanov

RƏYÇİLƏR: Dos., f.-r.e.n. F.H.Paşayev
Dos., b.e.n. I.S.Əhmədov
Dos., f.-r.e.n. M.S.Xəlilov

Həsənov Arzuman Qardaşxan oğlu. Nanosistemlərin riyazi modelləşdirilməsi və kompüter hesablanması. Bakı, “**Ləman nəşriyyat poliqrafiya**” MMC, 2013, 237 s., I nəşr.

Kitabdan ali məktəblərin nanotexnologiya sahəsi üzrə ixtisaslaşan bakalavr və magistr pillələrində təhsil alan tələbələr, doktorantlar və nanotexnologiya sahəsində çalışan elmi işçilər istifadə edə bilər. Kitabda nanosistemlərin modelləşdirilməsi metodları, kompüter proqramları, modelləri, kompüterdə hesablanması, tədqiqi və alınmış nəticələr şərh olunmuşdur.

H $\frac{1702000000-160}{2013}$

© A.Q.Həsənov, 2013

MÜNDƏRİCAT

ÖN SÖZ	6
GİRİŞ	8
I FƏSİL. NANOSİSTEMLƏRİN MODELLEŞDİRİLMƏSİ METODLARI	12
1. Nanosistemlərin əmələ gəlməsi və böyüəsinin modelləri ...	12
2. Kvant səviyyəsində nanosistemlərin modelləşdirilməsi	26
3. Sıxlıq funksionalı metoduna əsaslanan modelləşdirmə	31
4. Molekulyar dinamika metoduna əsaslanan modelləşdirmə	36
5. Yarımempirik metodlara əsaslanan modelləşdirmə	41
II FƏSİL. NANOSİSTEMLƏRİN KOMPÜTER PROQRAMLARI	47
6. Vizual proqramlaşdırma riyazi modelin kompüterdə realizasiyası üçün əsas vasitə kimi	47
7. Nanosistemlərin modelləşdirilməsinin əsas tipləri	57
8. Mathcad proqramı	66
9. HyperChem proqramı	73
10. NanoEngineer-1 proqramı	89
11. Yarım-empirik kvantmexaniki proqram	92
12. Bəzi nanohissəciklərin və nanosistemlərin vizual modelləri	101
III FƏSİL. NANOSİSTEMLƏRİN KOMPÜTERDƏ HESABLANMASI VƏ TƏDQIQI	113

13. Polietilen (PE), Polipropilen(PP) və Poliviniliden fluorid(PVDF) kompozitlərin modelləşdirilməsi və qeyriempirik metod ilə tədqiqi113
14. Qızıl nanohissəciyi və onun nanokopozisiyalarının modelləşdirilməsi və Genişləniş Hükkel metodu ilə tədqiqi118
15. Qızıl nanohissəciyinin yarım-empirik metodla tədqiqi ..124
16. Gümüş nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının kvantmexaniki tədqiqi131
17. Dəmir nanohissəciyi və onun nanokopozisiyalarının kvantmexaniki tədqiqi140
18. Həcmə mərkəzləşmiş dəmir nanohissəciyi və onun nanokopozisiyalarının kvantmexaniki tədqiqi146
19. Aliminum nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının modelləşdirilməsi və sixliq funksionali nəzəriyyəsi metodu ilə tədqiqi154
20. Silisium nanohissəciyinin modelləşdirilməsi və kompüter tədqiqi161
21. Füllərinin modelləşdirilməsi, qeyriempirik və molekulyar dinamika metodu tədqiqi164
22. Qrafenin modelləşdirilməsi, qeyriempirik və molekulyar dinamika metodları ilə tədqiqi168
23. DNT-nin modelləşdirilməsi və tədqiqi178
24. Fe₃O₄ nanohissəciyin modelləşdirilməsi, qeyriempirik və SFN metodları ilə tədqiqi182
25. ZnS nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının modelləşdirilməsi və tədqiqi194
26. Sirkonim dioksid nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının modelləşdirilməsi və tədqiqi ...199
27. Qızıl sulfid (Au₂S)₂₂ nanohissəciyi və onun (Au₂S)₂₂ +PP, (Au₂S)₂₂ +PVDF nanokompozisiyalarının modelləşdirilməsi və tədqiqi208

28. Plumbum sulfid $(\text{PbS})_8$ nanohissəciyi və onun $(\text{PbS})_8 + \text{PP}$, $(\text{PbS})_8 + \text{PVDF}$ nanokompozisiyalarının modelləşdirilməsi və tədqiqi	221
ƏDƏBİYYAT	230

ÖN SÖZ

Məlumdur ki, nanotexnologiya 0,1-100nm ölçülü hissəciklərdə və quruluşlarda baş verən fiziki, kimyəvi və bioloji hadisələrin yaratdığı təsirləri öyrənir. Bu elmi-texniki istiqamətin əsasını yeni nanoquruluşlu materialların alınması, tədqiqi və tətbiqi təşkil edir. Belə kiçikölçülü tədqiqat aləmi riyaziyyat və kompüter texnologiyası üçün maraqlı tətbiqi sahədir. Bu istiqamətdə tədqiqatlar nanometr, yəni metrin milyardda biri səviyyəsində aparılır və alimlər üçün yeni problemlər qarşıya qoyur.

Məlumdur ki, tədqiq olunan obyektlərin ölçüləri kiçildikcə onların fiziki və kimyəvi xassələri kəskin dəyişir. Fiziki və kimyəvi xassələrin nanoölçülü sistemlərdə kəskin olaraq dəyişməsi bu cür materialların texnikanın müxtəlif sahələrində tətbiqinə imkan yaradır. Unikal xassələrə malik nanoquruluşların formalaşması yeni metodların və vasitələrin istifadəsi tələblərini qarşıya qoyur. Alınacaq yeni nanoölçülü quruluşun dayanıqlı olmasını, fiziki və kimyəvi xassələrini əvvəlcədən müəyyən etmək üçün ilk növbədə obyektin riyazi - vizual modelinin qurulması, hazırkı mövcud metodların tətbiqi, inkişaf etdirilməsi və kompüter hesablamalarının aparılmasını və yeni kompüter proqramlarının hazırlanmasını zəruri edir.

Hal hazırda nanotexnologiyada riyazi modelləşdirmənin vizual, hesablama və mühəndis kompüter modelləşdirməsi istifadə olunur. Bu dərslük təhsilin bakalavr və magistr pilləsində təhsil alan tələbələr tərəfindən nanoölçülü quruluşların öyrənilməsi, nanoölçülü sistemlər haqqında ilkin təsəvvürün formalaşmasına və nanomaterialların tədqiqi istiqamətində ilkin nəzəri təsəvvürlərin yaranmasına kömək edən əvəzsiz vasitədir. Dərslinin hazırlanmasında tələbələrə oxuduğum mühazirə, apardığım məşğələ dərslər, çoxillik elmi-tədqiqat işlərimin bəzi nəticələrindən istifadə olunmuşdur.

“Nanosistemlərin riyazi modelləşdirilməsi və kompüter hesablanması” kitabı ana dilində yazılmış ilk kitab olduğu üçün

qüsurların olacağına şübhə etmirəm. Buna görə də irad və təkliflərini göndərənlərə öz minnətdarlığımı əvvəlcədən bildirirəm. Mənə mənəvi kömək etmiş iş yoldaşlarıma təşəkkür edir, yüksək səviyyədə yaradılmış iş şəratinə görə fizika fakültəsi və BDU - nun rəhbərliyinə dərin minnətdarlığımı bildirirəm.

MÜƏLLİFLƏ ƏLAQƏ

Tel.: (99412) 5387217(iş), Mobil: (99470) 7157236

Veb səhifə: <http://nanomaterials.bsu.edu.az>

E-mail: hasanovarzuman@hotmail.com, arzuman@bsu.az

Skype: hasanovarzuman

GİRİŞ

Müasir dövrdə riyazi modelləşdirmə təhsil və elmin müxtəlif sahələrində geniş tətbiq olunur. Bu metodun ideyası ondan ibarətdir ki, ilkin obyekt obrazı ilə riyazi modellə əvəz olunur və bu modelin öyrənilməsi kompüterlərdə reallaşmış hesablama - məntiq alqoritmlər əsasında hazırlanmış proqram vasitəsilə aparılır. Riyazi model həm nəzəri, həm də təcrübi faktların əsas cəhətlərini özündə birləşdirir. Obyektin modeli ilə işləməklə, onun xassələrini və özünü necə aparmasını nəzəri cəhətdən öyrənmək olar. Bununla bərabər müasir hesablama və informasiya texnologiyalarının imkanları əsasında model vasitəsilə obyektin dərinədən öyrənmək olar. Riyazi modelləşdirmənin elementlərindən dəqiq elmlər yarandığı vaxtdan istifadə olunmağa başlanılmışdır. Təsadüfi deyil ki, “alqoritm” sözü məşhur orta əsr türk mənşəli alim Əl-Xorezmin adından yaranmışdır. Riyazi modelləşdirmənin əsas inkişafı XX əsrin 40-cı illərin sonu 50-ci illərin əvvəllərinə təsadüf edir. Bu birinci növbədə kompüterlərin yaranması, keçmiş SSRİ və ABŞ dövlətlərin raket-nüvə milli proqramlarının yerinə yetirilməsinin ənənəvi üsullarla mümkün olmadığı ilə əlaqədar idi. Həmin illərdə riyazi modelləşdirmə bu məsələlərin yerinə yetirilməsində əvəzsiz rol oynamışdır.

Hal - hazırda elmin bütün sahələrinə riyazi modelləşdirmə tətbiq olunur. Buna görə də riyazi modelləşdirmə elmi - texniki tərəqqinin əsas zəruri tərkib hissəsi hesab olunur. Hər hansı obyektin riyazi modelləşdirilməsi məsələsinin qoyuluşu dəqiq hərəkət planının yaranmasına səbəb olur. Bunu şərti olaraq üç mərhələyə ayırmaq olar:

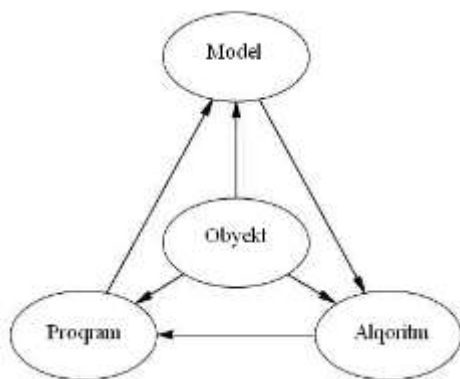
Model - alqoritm - proqram (Səkil 1). Birinci mərhələdə obyektin əsas xassə və qanunlarını özündə əks etdirən riyazi model - obyektin ekvivalenti seçilir. Bu zaman ilk növbədə nanoölçülü obyektin tədqiqi etmək üçün onun nəzəri modelinin

qurulması vacibdir. Nəzəri modelin qurulması isə il növbədə nano obyektin ölçüsünün və ona daxil olan atomların sayının təyin etmək lazımdır. Beləliklə nano obyektin ölçüsü və ona daxil olan atomların sayı bilərək təqribi nəzəri modelini qurmaq olar. Riyazi model nəzəri metodlarla tədqiq olunaraq obyekt haqqında əvvəlcədən mühüm biliklər əldə etməyə imkan verir.

İkinci mərhələdə riyazi modelin kompüterdə reallaşması üçün alqoritm işlənib hazırlanır. Riyazi model elə formada təqdim olunmalıdır ki, ədədi üsulları tətbiq etmək mümkün olsun.

Hesablama və məntiqi əməllərin yerinə yetirilmə ardıcılığı elə müəyyənləşdirilir ki, kəmiyyətlərin qiymətlərini verilmiş dəqiqliklə hesablamaq mümkün olsun. Bu zaman hesablama alqoritm modelin əsas xassələrini təhrif etməyib və deməli obyektin kompüter vasitəsilə tədqiq olunması iqtisadi cəhətdən səmərəli və adaptasiyası olunmasına imkan verməlidir.

Üçüncü mərhələdə hazırlanmış model əsasında yaradılmış alqoritm kompüter dilinə çevirərək kompüter proqramı hazırlanır. Proqramın hazırlanmasına iqtisadi cəhətdən səmərəli və adaptasiyası olunması tələbləri qoyulur. Kompüter proqramı öyrənilən obyektin elektron variantı olub kompüterdə bilavasitə təcrübə aparmaq üçündür.



Şəkil 1. Riyazi modelləşdirmənin mərhələləri

Model - alqoritm - proqram üçlüyü yaratdıqdan sonra tədqiqatçı universal, yığcam alət əldə edərək sınaq yoxlamalarını aparır. Bundan sonra model - alqoritm - proqram üçlüyünün ilkin obyektə uyğunluğuna əmin olunduqdan sonra, model vasitəsilə müxtəlif və çoxsaylı hesablamalar apararaq obyektin quruluş və xassələrini xarakterizə edən kəmiyyət və keyfiyyət parametrləri tapılır. Model - alqoritm - proqram üçlüyünün təkmilləşdirilməsi və dəqiqləşdirilməsi bütün modelləşdirmə prosesi zamanı müşayiət olunur. Riyazi modelləşdirmə riyaziyyat, fizika, kimya və biologiya elmləri arasında sintez rolunu oynayır və bunun səmərəliliyi aşağıdakı amillərlə bağlıdır:

Əsas anlayışların və tələblərin dəqiq formula edilməsi;
İstifadə olunan modellərin təcrübəyə əsaslanan adekvatlığı;
Hesablama alqoritmlərinin dəqiqliyi və s.

Məlumdur ki, məhsulun istehsalı prosesində həyata keçirilən material və ya yarım fabrikatın forma və xüsusiyyətlərini dəyişməsi, hazırlanması və işlənməsi üçün istifadə olunan metodlar yığımına texnologiya adlanır. Nanotexnologiyada riyazi modelləşdirmənin tətbiq olunmasının əsas xüsusiyyət ondan ibarətdir ki, baxılan proseslər nanometr, 1nm - 100nm fəza diapozon masştabında həyata keçirilir. Molekul və atomun ölçüləri 10 nanometr tərtibindədir. Nanometr diapozonda material hazırlamaq üçün istifadə olunan material ayrıca atom, molekul və molekulyar sistemlərdir. Nanotexnologiya üçün fərdi yanaşma xarakterik olub, atom və molekulları idarə edərək prinsipial yeni defektsiz fiziki-kimyəvi və bioloji xassələrə malik yeni material və nanometr ölçülərə malik yeni qurğular yaratmaq olar.

Nanotexnologiya müxtəlif elmlər arası fənn olub yeni molekullar, nanoquruluşlar, nanoqurğular və xüsusi fiziki, kimyəvi və bioloji xassələrə malik materialların yaradarkən ayrıca atom, molekul, molekulyar sistemlərin nanometr fəza ölçülərində fiziki, kimyəvi və bioloji proseslərin

qanunauyğunluqlarını öyrənən elmdir. Nanotexnologiya mühüm istiqamətləri aşağıdakılardır:

Yeni molekulların sintezi. Yüksək keçiriciliyə malik möhkəm, defektsiz materialların yaradılması.

Tunel və atom-qüvvə, maqnit-qüvvə mikroskoplarının, molekulyar dizayn üçün çoxiyənli zond sistemlərin, minatur yüksək həssaslığa malik vericilərin, nanorobotların hazırlanması.

Yeni nəsil kompüterlərin nanoölçülü element bazasının, nanonaqillərin, nanotranzistorların, nanoakustik sistemlərin yaradılması.

Nanolazerlərin, çoxiyənli nanolazer sistemlərin yaradılması, tibb sahəsində virusların məhv edilməsi üçün nanoalətlərin proyektləşdirilməsi, insan orqanların lokal təmiri, canlı orqanizmlərin təyin olunmuş yerlərinə yüksək dəqiqliklə dərman preparatların çatdırılması. Uzun ömürlülyün həyata keçirilməsi və s. problemləri.

Kosmik fəzanın öyrənilməsi üçün kosmik liftin yaradılmasında qarşıya çıxan problemlər.

Zərrəciklərin nano sürətləndiricilərinin yaradılması və nüvə reaksiyaların idarə olunması.

Beləliklə yuxarıda qeyd olunmuş əsas istiqamətlərin reallaşdırılması proseslərində riyazi və kompüter modelləşdirmənin tətbiqi zəruri olduğu aydındır.

I FƏSİL. NANOSİSTEMLƏRİN MODELLEŞDİRİLMƏSİ METODLARI

1. Nanosistemlərin əmələ gəlməsi və böyüəsinin modelləri

Dayanıqlı hal

Termodinamikadan məlumdur ki, T temperatura və P təzyiqə malik sistem Qips enerjisinin minimal qiymətinə uyğun vəziyyətə keçməyə cəhd edir:

$$G=H-TS=U+PV-TS \quad (1.1)$$

burada H - entalpiya, U - sistemin daxili enerjisi, V - həcm, S - entropiyadır. Bu o deməkdir ki, sistemdə verilmiş vəziyyətdən G - Qips enerjisinin minimal qiymətinə uyğun vəziyyətə keçməyə yönəlmiş proseslər üstünlük təşkil edir. Sərbəst Gips enerjisinin minimal qiymətinə uyğun vəziyyət sistemin dayanaqlı tarazlıq vəziyyəti adlanır(Şəkil 1.1).

N atomda ibarət sistemə baxaq. Fərz edək ki, g^L adi halda, g^S isə nanoquruluşda(məsələn klasterdə) atomun malik olduğu Gips enerjisi olsun. Onda sistemin termodinamik potensialı ilkin vəziyyətdə Ng^L , nanoquruluş halında isə Ng^S olar. Tutaq ki, T_m kritik keçid temperatur olsun. Temperaturun $T>T_m$ qiymətlərində $Ng^L<Ng^S$ olarsa deməli ilkin vəziyyət sistemin dayanaqlı vəziyyətidir. Temperaturun $T<T_m$ qiymətlərində $Ng^L>Ng^S$ olarsa deməli nanoquruluş (klaster) halı sistemin dayanaqlı vəziyyəti olacaqdır. Əgər $T=T_m$ qiymətində $Ng^L = Ng^S$ olarsa sistem həm ilkin, həm də nanoquruluş(klaster) halında ola bilər.

N atomdan ibarət nanoquruluşun (klasterin) əmələgəlməsi hala baxaq. Bu zaman sistemin Gips enerjisi

$$G^{L+S} = (N-n)g^L + ng^S + A_n\sigma \quad (1.2)$$

düsturu ilə hesablanır. Burada A_n – n atomdan ibarət nanoobyektin səthinin sahəsi, σ - vahid səth sahəsinə düşən fazalararası səth enerjisidir. Bu halda Gips enerjisinin ilkin

vəziyyətə nəzərən dəyişməsi $\Delta G = (N-n)g^L + ng^S + A_n\sigma - Ng^L = n(g^S - g^L) + A_n\sigma$. Beləliklə

$$\Delta G = n(g^S - g^L) + A_n\sigma \quad (1.3)$$

$A_n\sigma$ - kəmiyyəti fazalararası səthin əmələgələsinə sərf olunan iş olub həmişə müsbətdir. A_n əmələgəlmiş nanoobyektin forma və ölçüsündən asılıdır. Səth sferik formadaırsa onda A_n üçün aşağıdakı ifadəni alırıq:

$$\begin{aligned} A_n &= 4 \cdot \pi R^2 = \sqrt[3]{36\pi} \cdot \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \right)^{\frac{2}{3}} = \sqrt[3]{36\pi} \cdot V^{\frac{2}{3}} = \sqrt[3]{36\pi} \cdot \left(\frac{m}{\rho_s} \right)^{\frac{2}{3}} = \\ &= \sqrt[3]{36\pi} \cdot \left(\frac{vM}{\rho_s} \right)^{\frac{2}{3}} = \sqrt[3]{36\pi} \cdot \left(\frac{M}{\rho_s} \cdot \frac{n}{N_A} \right)^{\frac{2}{3}} = \\ &= \sqrt[3]{36\pi} \sqrt[3]{\left(M / (\rho_s N_A) \right)^2} \sqrt[3]{n^2} \end{aligned}$$

Beləliklə

$$A_n = \sqrt[3]{36\pi} \sqrt[3]{\left(M / (\rho_s N_A) \right)^2} \sqrt[3]{n^2} \quad (1.4)$$

burada M - molyar kütlə, ρ_s - sıxlıq, N_A - Avogadro ədədidir.

Əmələgəlmiş nanoquruluşun səthindəki atomların n_k – kritik sayını tapmaq üçün $\frac{dG^{L+S}}{dn} = 0$ tənliyini həll etmək lazımdır.

$$\frac{d\left((N-n)g^L + ng^S + A_n\sigma \right)}{dn} = 0, \quad -g^L + g^S + \sigma \frac{dA_n}{dn} = 0$$

$$\frac{dA_n}{dn} = \frac{d\left((36\pi)^{\frac{1}{3}} \cdot \left(\frac{M}{\rho_s N_A} \right)^{\frac{2}{3}} \cdot n^{\frac{2}{3}} \right)}{dn} = \frac{2}{3} \cdot (36\pi)^{\frac{1}{3}} \cdot \left(\frac{M}{\rho_s N_A} \right)^{\frac{2}{3}} \cdot n^{-\frac{1}{3}}$$

$$\text{Onda } -g^L + g^S + \frac{2}{3} \cdot \sigma \cdot (36\pi)^{\frac{1}{3}} \cdot \left(\frac{M}{\rho_s N_A} \right)^{\frac{2}{3}} \cdot n^{-\frac{1}{3}} = 0$$

$$-g^L + g^S + \frac{2}{3} \cdot \sigma \cdot (36\pi)^{\frac{1}{3}} \cdot \left(\frac{M}{\rho_s N_A} \right)^{\frac{2}{3}} \cdot n^{-\frac{1}{3}} = 0$$

$$n = \frac{\left(\frac{2}{3} \cdot \sigma \cdot (36\pi)^{\frac{1}{3}} \cdot \left(\frac{M}{\rho_s N_A} \right)^{\frac{2}{3}} \right)^3}{(g^L - g^S)^3} = \frac{8}{27} \cdot \sigma^3 \cdot (36\pi) \cdot \left(\frac{M}{\rho_s N_A} \right)^{\frac{2}{3}} =$$

$$= \frac{32\pi}{3} \cdot \left(\frac{M}{\rho_s N_A} \right)^2 \cdot \frac{\sigma^3}{(g^L - g^S)^3}$$

Nəticədə

$$n_k = \frac{32\pi}{3} (M / (\rho_s N_A))^2 \frac{\sigma^3}{(g^L - g^S)^3} \quad (1.5)$$

alarıq. Gips enerjisininin dəyişməsinə hesablaməq üçün n_k hesablanmış qiymətini (1.3) düsturunda nəzərə alsaq, onda alarıq:

$$\Delta G = -\frac{32\pi}{3} (M / (\rho_s N_A))^2 \frac{\sigma^3}{(g^L - g^S)^2} +$$

$$+ 16\pi \cdot (M / (\rho_s N_A))^2 \frac{\sigma^3}{(g^L - g^S)^2}$$

Nəticədə

$$\Delta G_k = \frac{16\pi}{3} (M / (\rho_s N_A))^2 \frac{\sigma^3}{(g^L - g^S)^2} \quad (1.6)$$

(1.5) və (1.6) düsturlarında Gips enerjisi bir atom üçün hesablanmışdır. Gips enerjisinin 1 mol qiymətləri üçün isə (1.5) və (1.6) düsturları aşağıdakı kimidir:

$$n_k = \frac{32\pi}{3} (M / (\rho_s N_A))^2 \frac{\sigma^3 N_A}{(G^L - G^S)^3} \quad (1.7)$$

$$\Delta G_k = \frac{16\pi}{3} (M / \rho_s)^2 \frac{\sigma^3}{(G^L - G^S)^2} \quad (1.8)$$

burada G^L və G^S - sistemin ilkin və klaster vəziyyətlərinə uyğun Gips enerjisinin molyar qiymətləridir.

Adətən əmələgəlmiş nanoölçülü obyektin əsas parametri kimi atomların sayı ilə deyil, onun ölçüləri ilə xarakterizə olunur. Bu zaman əmələgəlmiş nanoölçülü obyekt sfera formasında fərz olunur. Bu halda Gips enerjisinin dəyişməsi ΔG aşağıdakı kimidir:

$$\Delta G = \frac{4}{3}\pi r^3(G_V^S - G_V^L) + 4\pi r^2\sigma \quad (1.9)$$

burada G_V^L və G_V^S -sistemin vahid həcmdə adi və klaster vəziyyətlərinə uyğun Gips enerjisinin qiymətləridir. Molyar qiymətlərlə əlaqə aşağıdakı kimidir:

$$G_V^L = G^L \frac{\rho_L}{M}, \quad G_V^S = G^S \frac{\rho_S}{M}$$

burada ρ_L və ρ_S maddənin adi və klaster vəziyyətlərinə uyğun sıxlığı, M - molyar kütlədir. Əmələgəlmiş nanoölçülü obyektin kritik r_k ölçüsünü tapmaq üçün (1.9) düsturuna əsasən

$$\frac{d\Delta G}{dr} = 0 \text{ tənliyini həll etmək lazımdır.}$$

$$\frac{d\Delta G}{dr} = \frac{d\left(\frac{4}{3}\pi r^3(G_V^S - G_V^L) + 4\pi r^2\sigma\right)}{dr} =$$

$$= 4\pi r^2(G_V^S - G_V^L) + 8\pi r\sigma$$

$$4\pi r^2(G_V^S - G_V^L) + 8\pi r\sigma = 0, \quad r \cdot (4\pi r(G_V^S - G_V^L) + 8\pi\sigma) = 0,$$

$$4\pi r(G_V^S - G_V^L) + 8\pi\sigma = 0. \quad \text{Buradan } r = \frac{2\sigma}{G_V^L - G_V^S} \text{ alarıq.}$$

Nəticədə

$$r_k = \frac{2\sigma}{G_V^L - G_V^S} \quad (1.10)$$

və $\Delta G(r_k)$ qiymətini hesablamaq üçün r_k nın qiymətini (1.9) düsturunda nəzərə alaq. Onda alarıq

$$\begin{aligned} \Delta G &= \frac{4}{3}\pi r^3 (G_V^S - G_V^L) + 4\pi r^2 \sigma = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{2\sigma}{G_V^L - G_V^S} \right)^3 \cdot \\ &\cdot (G_V^S - G_V^L) + 4\pi \frac{2\sigma}{G_V^L - G_V^S} \sigma = -\frac{32}{3}\pi \frac{\sigma^3}{(G_V^L - G_V^S)^2} + \\ &+ 16\pi \frac{\sigma^3}{(G_V^L - G_V^S)^2} = \frac{16\pi}{3} \frac{\sigma^3}{(G_V^L - G_V^S)^2} \end{aligned}$$

Beləliklə

$$\Delta G(r_k) = \frac{16\pi}{3} \frac{\sigma^3}{(G_V^L - G_V^S)^2} \quad (1.11)$$

alarıq. Bundan əlavə əmələgəlmiş nanoölçülü obyektlərin tezliyini J , yəni vahid zaman ərzində vahid həcmdə əmələgəlmiş nanoölçülü obyektlərin sayını və onların əmələgəlməsi üçün lazım olan enerjiyə uyğun olaraq ölçülərə görə paylanmasını $N(n)$ hesablamaq olar:

$$J = (N_V D_L / a^2) \text{EXP}(-\Delta G_k / k_b T) \quad (1.12)$$

$$N(n) = N_1 \text{EXP}(-\Delta G(n) / k_b T) \quad (1.13)$$

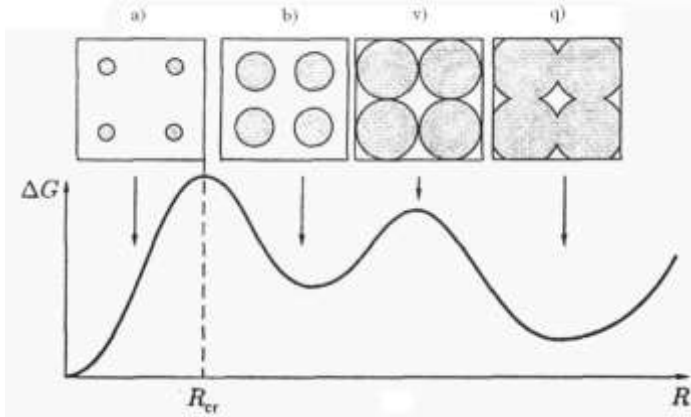
burada N_V - ilkin fazada vahid həcmdəki atomların sayını, D_L - öz-özünə diffuziya əmsalı, a - atomlararası orta məsafə, N_1 - vahid həcmdə tək, $N(n)$ - isə vahid həcmdə n atomdan təşkil olunmuş nanoölçülü obyektlərin sayını göstərir.

Əmələ gəlmiş quruluşların sfera forması halında J hesablanması üçün aşağıdakı düstur istifadə olunur:

$$\Delta G_k = \frac{4}{3}\pi \sigma r_k^2$$

$$J = zNv k_B T \Delta G_k / (\pi \sigma a^5 \eta) \exp(-\Delta G_k / k_B T) \quad (1.14)$$

burada $z < 1$ empirik vuruq, η - dinamik özlülük əmsəlidir. Nanosistemlərin əmələgəlməsi prosesinə uyğun sərbəst Gips enerjisinin dəyişməsi qrafiki Şəkil 1.1-də verilmişdir.



Şəkil 1.1. Klasterlərin əmələgəlməsi, böyüməsi və birləşməsi.
a) rüşeym halında b) stabil klasterlərin əmələgəlməsi
v) klasterlərin birləşməsi q) nanosistemlərin əmələgəlməsi

Tarazlıqda olmayan şəraitində nanoquruluşların əmələgəlməsi və böyüməsinin modelləşdirilməsi

Nano obyektlərin əmələgəlməsi tezliyi və ölçülərə görə paylanması funksiyası üçün daha dəqiq ifadələr almaq olar. Bunun üçün tarazlıqda olmayan şəraitində prosesə baxaq. İlkin mühit müəyyən təsirlərə məruz qala bilər. Bu zaman nəzərə almaq lazımdır ki, yeni atomun qoşulması, sistemi yüksək enerjili vəziyyətdən yeni vəziyyətə keçirir. Eyni zamanda yeni yaranacaq nano obyektədən atomların ayrılması halı da mümkündür.

Əgər E_n ilə n atomdan təşkil olunmuş, E_1 ilə 1 atomdan təşkil olunmuş obyektləri işarə etsək. Onda nano quruluşların əmələgəlməsi və böyüməsi prosesini aşağıdakı kimi təsəvvür etmək olar:

$$E_n + E_1 \leftrightarrow E_{n+1}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.15)$$

Burda k_n^+ və k_{n+1}^- uyğun olaraq 1 atomun E_n qoşulması və ondan ayrılması reaksiyaların sürətləridir. Zamandan t asılı olaraq E_n - dən əmələgəlmiş obyektlərin dəyişməsi kəmiyyəti

$$\frac{dZ(t)}{dt} = k_{n-1}^+ Z_{n-1}(t) - (k_n^- Z_n(t) + k_n^+ Z_n(t)) + k_{n+1}^- Z_{n+1}(t), \quad (1.16)$$

$n = 1, 2, \dots, \infty$

tənlili ilə təyin oluna bilər. Vahid zaman ərzində E_n dən E_{n+1} əmələgəlmiş obyektlərin sayı ilə, əksinə E_{n+1} - dən E_n əmələgəlmiş obyektlərin sayı fərqi $J_n(t)$ ilə işarə edək. $J_n(t)$ - hesablanması üçün ədəbiyyatdan məlum aşağıdakı düstur istifadə olunur

$$J_n(t) = k_n^- Z_n(t) - k_{n+1}^+ Z_{n+1}(t) \quad (1.17)$$

(1.16) tənliklər sistemi ixtiyari zaman anında əmələgəlmiş obyektlərin ölçülərə görə paylanmasını tapmağa imkan verir. Bunun üçün $Z_n(0)$ - əmələgəlmiş obyektlərin ölçülərə görə ilkin paylanması, sərhəd şərtləri, (1.16) - tənliyinin əmsalları və səthdə yerləşməsi mümkün olan atomların sayı O_n verilməlidir. (1.16) tənliyinin əmsallarını, yəni atomların düzünə və əksinə keçmə reaksiya sürətlərini təyin etmək üçün elmi ədəbiyyatdan məlum olan aşağıdakı düsturlardan istifadə olunur:

$$k_n^+ = O_n \nu_L \exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{\delta g_n}{2k_B T}\right) \quad (1.18)$$

$$k_{n+1}^- = O_n \nu_S \exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{\delta g_n}{2k_B T}\right) \quad (1.19)$$

burada $\Delta_a g_n = \Delta_a g + \frac{1}{2} \frac{\partial \Delta G(n)}{\partial n}$, $\Delta_a g_{n+1} = \Delta_a g - \frac{1}{2} \frac{\partial \Delta G(n)}{\partial n}$, $\Delta_a g$ - atomların keçid aktivləşmə enerjisi, $\delta g_n = \frac{\partial \Delta G(n)}{\partial n}$,

$O_n = 4\sqrt[3]{n^2}$, ν_L və ν_S adi və nano obyekt halında atomların istilik rəqs tezlikləridir.

k_n^+ və k_n^- məlum olduğunu, $\nu_L = \nu_L = \nu$ qəbul etsək onda $J_n(t)$ üçün alırıq:

$$J_n(t) = \nu \exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) \left(O_n Z_n(t) \exp\left(-\frac{\delta g_n}{k_B T}\right) - O_n Z_{n+1}(t) \exp\left(\frac{\delta g_n}{k_B T}\right) \right) \quad (1.20)$$

k_n^+ və k_n^- qiymətləri məlum olarsa belə, sərhəd şərtləri verilmədiyinə görə (1.16) tənliklər sistemini həll etmək mümkün deyildir. Sərhəd şərtlərinin verilməsi hal-hazırda nəzəri problem olaraq qalır. Buna görə də (1.16) tənliyini həll etmədən $J_n(t)$ qiymətləndirmək lazımdır.

Birinci yaxınlaşma olaraq fərz edirik ki, $J_n(t)$ zamandan asılı deyildir, yəni $J = \text{const} = J(n^*)$. Bundan əlavə dayanaqlı hala uyğun olaraq

$$k_n^+ N_n - k_{n+1}^- N_{n+1} = 0 \quad \text{və} \quad O_n N_n - O_{n+1} N_{n+1} = 0,$$

$n = n_k$ qiyməti üçün $\frac{\partial \Delta G(n)}{\partial n} = 0$, $\delta g_n = \frac{\partial \Delta G(n)}{\partial n} = 0$, $\delta g_n = 0$ olur.

$$\begin{aligned} J_n(t) &= \nu \exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) \left(O_n Z_n(t) \exp\left(-\frac{0}{k_B T}\right) - O_n Z_{n+1}(t) \exp\left(\frac{0}{k_B T}\right) \right) = \\ &= \nu \exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) \left(O_n Z_n(t) \exp\left(-\frac{0}{k_B T}\right) - O_n Z_{n+1}(t) \exp\left(\frac{0}{k_B T}\right) \right) = \\ &= \nu \exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) (O_n Z_n(t) - O_n Z_{n+1}(t)) = \nu O_n \exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) (Z_n(t) - Z_{n+1}(t)) = \\ &= \nu O_n N_n \exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) \left(\frac{Z_n(t)}{N_n} - \frac{Z_{n+1}(t)}{N_{n+1}} \right) \end{aligned}$$

Nəticədə

$$J(n_k) = \nu O_n N_n \exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) \left(\frac{Z_n}{N_n} - \frac{Z_{n+1}}{N_{n+1}}\right) \quad (1.21)$$

alarıq. Burada $O_n = 4n^{2/3}$ - səthdəki yerləşməsi mümkün olan atomların sayı, ν – atomların istilik rəqs tezliyi, N_n – paylanma funksiyasıdır. Səthin sfera formasında olduğunu nəzərə alaraq J - üçün daha münasib aşağıdakı düsturu almaq olar:

$$J = \frac{k_b T}{3\pi a^3 \eta} 4n_k^{2/3} N_{\nu} \Gamma \exp\left(-\frac{\Delta G_k}{k_b T}\right) \quad (1.22)$$

burda $N_1 = N_{\nu} = \frac{N_A \rho_L}{M}$, $\Gamma = \frac{2}{n_k} \sqrt{\frac{\Delta G_k}{3\pi k_b T}}$ - Zeldoviç faktorudur.

Nano obyektlərin əmələ gəlməsinin qeyri stasionar halına baxaq. Bu zaman $J \neq \text{const} = J_n(t)$ və (1.16) tənliklər sistemini əvəzinə, təqribi olaraq bir diffuziya tənliyinə keçmək lazımdır. Tam qiymətli n dəyişəni əvəzinə, tam qiymətlərdə n -ə bərabər olan x kəsilməz dəyişənini daxil edək. Onda (1.16) tənliyi aşağıdakı şəkllə düşər:

$$\frac{\partial Z(x)}{\partial t} = k^-(n-1)Z(n-1) - k^+(n-1)Z(n-1) - k^+(n)Z(n) + k^+(n+1)Z(n+1) \quad (1.23)$$

Sistemin dayanıqlı vəziyyəti üçün şərtlər aşağıdakı kimidir:

$$k^+(n-1)N(n-1) - k^-(n)N(n) = 0,$$

$$k^+(n)N(n) - k^-(n+1)N(n+1) = 0$$

buradan k^- - ni k^+ vasitəsilə əvəz etsək alarıq:

$$k^-(n) = k^+(n-1)N(n-1)/N(n), \quad k^-(n+1) = k^+(n)N(n)/N(n+1)$$

k^- - ni k^+ - üçün tapılmış düsturları (1.23) – da yerinə yazsaq. Onda alarıq:

$$\frac{\partial Z(x)}{\partial t} = k^+(n-1)N(n-1) \left[\frac{Z(n-1)}{N(n-1)} - \frac{Z(n)}{N(n)} \right] + k^+(n)N(n) \left[\frac{Z(n+1)}{N(n+1)} - \frac{Z(n)}{N(n)} \right]$$

Alınan quruluşların sfera şəklində halı üçün aşağıdakı kimidir:

$$\frac{\partial Z(x)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k^+ \frac{\partial Z}{\partial x} \right) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial}{\partial x} \left(k^+ Z \frac{\partial \Delta G(x)}{\partial x} \right) \quad (1.24)$$

burada $\frac{\partial \Delta G(x)}{\partial x}$ və k_n^+ üçün elmi ədəbiyyatdan məlum analitik

ifadələri belədir:

$$\frac{\partial \Delta G(x)}{\partial x} = (g^l - g^s) \left(\sqrt[3]{\frac{n_k}{n}} - 1 \right)$$

$$k_n^+ = \frac{4\sqrt[3]{n^2} k_B T}{3\pi a^3 \eta} \exp \left(\frac{G^L - G^S}{2RT} \left(1 - \sqrt[3]{\frac{n_k}{n}} \right) \right) \quad (1.25)$$

tənliyini yəni

$$\frac{\partial Z(x)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k^+ \frac{\partial Z}{\partial x} \right) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial}{\partial x} \left(k^+ Z \frac{\partial \Delta G(x)}{\partial x} \right)$$

$Z(x) = 0$ $t=0$, $x > 0$ başlanğıc və

$Z|_{x=1} = N$, $Z|_{x \rightarrow \infty} = 0$ sərhəd şərtləri üçün həll edərək

əmələgəlmiş obyektlərin tezliyini

$J(n) = k^+(n)Z(n) - k^-(n+1)Z(n+1)$ düsturu əsasında

$$J(n_k) = \left(-k^+(x)N(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Z(x)}{N(x)} \right) \right) \Big|_{x=n_k} \quad (1.26)$$

kimi hesablamaq olar. Burada $N(x) = N_1 \exp(-\Delta G(x)/k_B T)$.

Səthdə nanoquruluşların əmələ gəlməsi və böyüməsinin modelləşdirilməsi

Bu halda nazik təbəqələrin əmələ gəlməsi və böyüməsində iştirak edən və onların təbəqələrin böyümə prosesinə, quruluşuna və morfologiyasına təsir edən proseslərə baxılır.

Məlumdur ki, təbəqələrin böyüməsinin üç əsas mexanizm vardır:

Birincisi laylar üzrə olan böyümədir (Frank van der Merve mexanizmi). Bu zaman təbəqənin atomları bir-biri ilə deyil, altlıqla daha güclü əlaqədə olur. Bir təbəqənin formalaşması qurtardıqdan sonra, növbəti təbəqənin formalaşması başlayır.

İkincisi adalar üzrə olan böyümdür (Vollmer-Weber mexanizmi). Bu zaman təbəqənin atomları altılıqla deyil bir-biri ilə güclü əlaqədə olur. Bu halda üç ölçülü adlar altılığın səthi üzərində əmələ gəlir və böyüürlər.

Üçüncüsü laylar və adalar üzrə olan birgə böyümdür (Stranski-Krastanov mexanizmi). Bu laylar və adalar üzrə aralıq böyümə mexanizmdir. Bu zaman iki ölçülü təbəqə formalaşandan sonra üç ölçülü adalar böyüyür. Səthdə adaların əmələ gəlməsi və böyüməsini aşağıdakı kimi təsvir etmək olar:

Atomlar qaz fazasından R sürəti ilə hərəkət edərək E_{ads} rabitə enerjisinə malik olaraq səthdə adatom kimi yerləşirlər. Vahid səth sahəsində n_0 sayda yerləşməsi mümkün olan nümunə səthində tək n_1 sayda adatomların sıxlığı yaranır. Adatomların

$$D = \frac{v}{4n_0} \text{Exp} \left(-\frac{E_{diff}}{k_b T} \right)$$

diffuziya əmsalına malik səthdə miqrasiyası aşağıdakı proseslərdən biri baş verənə qədər davam edir. Birincisi altılığın temperaturu kifayət qədər yüksəkdir. Buxarlanma nəticəsində Adatom yenidən qaz fazasına qayıtması. Bu proses adatomun yaşama

$$\tau_{ads} = v^{-1} \text{Exp} \left(\frac{E_{ads}}{k_B T} \right)$$

müddətini xarakterizə edir. İkincisi adatom yaranmış adalara və ya defektlərə qoşula bilər. Üçüncüsü adatomlar özləri birləşib adalar yarada bilər.

Bəzi hallarda kiçik adalar stabil olmayıb və onlar ayrıca atomlara dağılır. Buna baxmayaraq adaların böyüməsi davam etdikcə onlar daha stabilləşir və onların böyüməsi ehtimalı, dağılması ehtimalından daha çoxdur. Kritik adanın ölçüsü i - adanın elə minimal ölçüsüdür ki, yalnız bir atomun ona qoşulması onu stabil edir.

Adaların əmələ gəlməsi və dağılmasını sürətini qiymətləndirilməsinə baxaq. Ölçüləri j , $j < i$ olan n_j

konsentrasiyası ilə təyin olunan stabil adalara baxaq. n_j adalarının formalaşmasına dörd proses təsir edir.

İki proses n_j - nin artmasına təsir edir. Birincisi əlavə j ölçülü adanın əmələ gəlməsi yeni atomun $j-1$ ölçülü adaya qoşulması ilə baş verir. Bu prosesdə əmələ gəlmiş adaların konsentrasiyası $\sigma_j D n_j n_1$ olar. İkincisi $j+1$ ölçülü adadan bir atomun ayrılması, yeni j ölçülü adanın əmələ gəlməsinə səbəb olur. Bu zaman dağılmaların konsentrasiyası $\sigma_{j+1} n_{j+1}$ kimi hesablanır.

İki proses isə n_j - nin azalmasına səbəb olur. Yeni atomun j - ölçülü adaya qoşulması nəticəsində $j+1$ ölçülü adanın əmələ gəlməsi və j - ölçülü adanın dağılması nəticəsində $j-1$ ölçülü adanın əmələ gəlməsi prosesi baş verir. Adatomların və n_x stabil nanoquruluşları $j > i$ konsentrasiyasını qiymətləndirmək üçün ədəbiyyatdan məlum olan tənliklər sisteminə baxaq:

$$\frac{dn_1}{dt} = R - \frac{n_1}{\tau_{ads}} + (2\delta_2 n_2 + \sum_{j=3}^i \delta_j n_j - 2\sigma_1 D n_1^2 - n_1 \sum_{j=2}^i \sigma_j D n_j) - n_1 \sigma_x D n_x \quad (1.27)$$

$$\frac{dn_j}{dt} = n_1 \sigma_{j-1} D n_{j-1} - \delta_j n_j + \delta_{j+1} n_{j+1} - n_1 \sigma_j D n_j \quad (1.28)$$

$$\frac{dn_i}{dt} = n_1 \sigma_i D n_i \quad (1.29)$$

burada D - diffuziya əmsalı, R - atomların qaz halından prosesə qoşulma sürətidir.

(1.27) tənliyi adatomların zamana görə dəyişməsinini və R görə artmasını, n_1 / τ_{ads} azalmasını təsvir edir. Mötərizədəki hədlər isə adalalan əmələ gəlməsi və dağılmasına görə adatomların qoşulması və dağılması sürətlərini ifadə edir. $2\delta_2 n_2$ və $2\sigma_1 D n_1^2$ hədləri cüt-cüt adatomların ayrılması və əmələ gəlməsi göstərir. δ_j -ölçüləri 3-dən i kimi adaların dağılmasını və əmələgəlməsini göstərir. Sonuncu həd stabil adaların adatomları özünə qoşması sürətidir. (1.28) tənliyi j ölçülü stabil adaların konsentrasiyasını göstərir. (1.29) tənliyi

yeni adatomların qoşulması hesabına n_x stabil adaların konsentrasiyasının böyüməsini təsvir edir. (1.27)-(1.29) tənliklərini həll edərək adaların konsentrasiyasını və adatomların zamana görə funsiyalarını tapılmış olar.

Sərbəst həcmdə nanoquruluşların əmələ gəlməsi və böyüməsinin modelləşdirilməsi

Normal şəraitdə nanoobyektlərin böyüməsi zamanı yeni atomların qoşulması səthdən asılı olmadan baş verir. Bu şəraitdə vahid zamanda rüşeym mütündən klaster vəziyyətinə keçmiş atomların sayı $n_L v_L \exp(-\Delta_a g_n)$ ilə, əksinə keçmiş atomların sayı $n_S v_S \exp(-\Delta_a g_{n+1})$ düsturu ilə təyin olunur. Burada n_L, n_S - yaxın səth ayrıcındakı təbəqədə uyğun olaraq ilkin və klaster vəziyyətində atomların sayı, v_L, v_S - uyğun olaraq ilkin və klaster vəziyyətində atomların istilik rəqs tezlikləridir. Buna görə də böyüyən obyektə atomların sayının dəyişmə sürəti

$$\frac{dn}{dt} = n_L v_L \exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) - n_S v_S \exp\left(-\frac{\Delta_a g_{n+1}}{k_B T}\right) \quad (1.30)$$

düsturu ilə hesablanır.

Əgər $n_L = n_S = n_A$, $v_L = v_S = v$ qəbul etsək onda (1.30)düsturu aşağıdakı kimi yazmaq olar:

$$\begin{aligned} \frac{dn}{dt} &= n_A v \left(\exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) - \exp\left(-\frac{\Delta_a g_{n+1}}{k_B T}\right) \right) = \\ &= n_A v \exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{\Delta_a g_{n+1} - \Delta_a g_n}{k_B T}\right) \right) = \\ &= n_A v \exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{\Delta G_{n+1} - \Delta G_n}{k_B T}\right) \right) \end{aligned}$$

Nəticədə atomların sayının dəyişməsi sürətinin hesablanması üçün

$$\frac{dn}{dt} = n_A \nu \exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{\Delta G_{n+1} - \Delta G_n}{k_B T}\right)\right)$$

düsturunu almış olarıq. n əvəzinə x dəyişənini daxil edərək

$$\Delta G_n - \Delta G_{n+1} = \left(\frac{\partial \Delta G}{\partial x}\right) \Big|_{x=n}, \text{ alarıq.}$$

$$\text{Aydındır ki, } \left(\frac{\partial \Delta G}{\partial x}\right) \Big|_{x=n} = (g^S - g^L) + \frac{2}{3} A n^{-1/3} \sigma.$$

Əmələ gəlmiş obyektin sfera forması halında

$$n = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{\pi a^3}{6}} q = 8 \left(\frac{r}{a}\right)^3 q, \text{ burada } a - \text{obyektə daxil olan atomların}$$

ortalanmış diametrinin uzunluğu, q - sıxlıq əmsəlidir.

$$\text{Onda } \frac{\partial \Delta G}{\partial n} = (g^S - g^L) + \frac{A}{3} q^{-1/3} \frac{a}{r} \sigma \text{ və } \frac{\partial \Delta G}{\partial n} = 0$$

tənliyini həll edərək $n_k = \frac{8A\sigma^3}{27(g^L - g^S)^3}$ taparıq. Buna görə də

$$\frac{A}{3} q^{-1/3} a \sigma = r_k (g^L - g^S).$$

$$\text{Nəticədə } \frac{\partial \Delta G}{\partial n} = -(g^L - g^S) \left(1 - \frac{r_k}{r}\right)$$

alarıq. Beləliklə böyüyən obyektə atomların sayının dəyişmə sürəti üçün aşağıdakı ifadəni almış olarıq:

$$\frac{dn}{dt} = n_A \nu \exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{(g^L - g^S)}{k_B T} \left(1 - \frac{r_k}{r}\right)\right)\right] \quad (1.31)$$

Əgər $\nu \exp\left(-\frac{\Delta_a g_n}{k_B T}\right) = \frac{kT}{3\pi a^3 \eta}$ qəbul etsək və $n_A = 4^3 \sqrt{n^2}$ onda

ölçülərin dəyişmə sürətini

$$\frac{dr}{dt} = \frac{2kT}{9\sqrt[3]{q}\pi a^2 \eta} \left[1 - \exp\left(-\frac{(G^L - G^S)}{RT} \left(1 - \frac{r_k}{r}\right)\right) \right] \quad (1.32)$$

Əksər hallarda (6.3) düsturunu

$$\frac{dr}{dt} = \frac{fkT}{9\pi a^2 \eta} \left[1 - \exp\left(-\frac{(G^L - G^S)}{RT} \left(1 - \frac{r_k}{r}\right)\right) \right] \quad (1.33)$$

kimi istifadə olunur. Burada $f \approx 1$ - səthdəki atomların payı olub, yeni atomların qoşulması imkanını göstərir və $f = \frac{2}{3\sqrt[3]{q}}$

ifadə olunur. Bəzən

$$\frac{dr}{dt} = \frac{fkT}{9\pi a^2 \eta} \left[1 - \exp\left(-\frac{(G^L - G^S)}{RT}\right) \right] \quad (1.34)$$

düsturundan istifadə olunur. Bəzi hallarda isə ölçülərin dəyişmə sürətini

$$\frac{dr}{dt} = \sqrt[3]{\frac{3U_a}{4\pi}} \frac{k_n^+}{3\sqrt[3]{n^2}} \left[1 - \exp\left(-\frac{(G^L - G^S)}{RT} \left(1 - \frac{r_k}{r}\right)\right) \right] \quad (1.35)$$

düsturu ilə hesablanır. Burada U_a - nanoquruluşdakı atomun həcmi, k_n^+ - bir atomun sistemə qoşulması reaksiyasının sürətidir.

Nanohissəcikdəki atomların sayının təyini üsulları

Məlumdur ki, nanohissəciklərin bir çox xassələri onların ölçülərindən, nanohissəcikdəki atomların sayından asılıdır. Nanohissəcikdəki atomların sayı və ölçüləri üçün yuxarıdakı düsturlardan istifadə olunması bir sıra çətinliklərlə bağlıdır. Beləki bu ifadələrə məlum olmayan hesalanması tələb olunan kəmiyyətlər daxildir. Onların hesablanması çətinləşir. Buna görə də istifadə üçün daha əlverişli üsulların olması zəruridir. Əvvəlcə eyni atomlardan təşkil olunmuş nanohissəcikdəki atomların sayı nanohissəcikin ölçüləri arasında əlaqə düsturunu

tapaq. Maddə miqdarında atomların sayının $N = \frac{m}{M} N_A$ kimi təyin olunur. Burada N - nanohissəcikdəki atomların sayı, ρ - materialın sıxlığı, N_A -Avoqadro ədədi, M - molyar kütlədir. $m = V \rho$, $V = \frac{4}{3} \pi r^3$ və $r = \frac{D}{2}$ olduğunu nəzərə

alsaq. Onda $m = \frac{\pi \rho D^3}{6}$ alırıq. Nəticədə eyni atomlardan təşkil olunmuş nanohissəcikdəki atomların sayının nanohissəciyin ölçüləri arasında aşağıdakı əlaqə düsturunu almış olarıq [1]:

$$N = \frac{\pi \rho D^3 N_A}{6M} \quad (3.15)$$

N - nanohissəcikdəki atomların sayı, ρ - materialın sıxlığı, N_A -Avoqadro ədədi, M - molyar kütlə, D - nanohissəciyi daxilində saxlayan sferanın diametridir. (1) düsturu ilə Au_{16} qızıl nanohissəciyin ölçüsü $D = 0,8nm$ alınır.

Müxtəlif atomlardan təşkil olunmuş nanohissəciyin ölçüsü məlum olduqda ondakı atomların sayının tapılması məsələsinə baxılır. Bu zaman nanohissəcik kürə formasında təsəvvür olunur.

$(CdS)_n$ nanohissəciyinin ölçüsünün təyininə baxaq. Kürə kimi təsəvvür olunan bir CdS birləşməsinin ölçüsü $r_h = r_{cd} + r_s$ kimi təyin olunur(Şəkil 1.). Burada r_{cd} və r_s - Cd və S atomlarının kovalent radiuslarıdır. R radiuslu (Şəkil 2.) nanohissəciyinin (R - verilir) atomlarının sayı aşağıdakı kimi tapıla bilər:

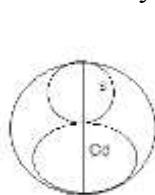
$$n = \frac{R^3 - r^3}{r_h^3} \quad (3.16)$$

Burada $r = R - 2r_h$, R- nanohissəciyi öz daxilində saxlayan sferanın(Şəkil 3.3.) radiusu, r_h - CdS birləşməsinə öz daxilində saxlayan sferanın(Şəkil 3.2.) radiusudur. $R = 0,52 \text{ nm}$ olduqda $(\text{CdS})_n$ nanohissəciyi üçün $n = 9$ alınır. Bütün atomların sayı isə 18 olar.

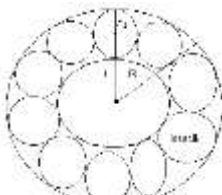
$(\text{Au}_2\text{S})_n$ nanohissəciyinə baxaq. Au_2S birləşməsi Şəkil 3.4-də təsvir olunmuşdur.

$$AD = a = 4r_{\text{Au}}, CD = b = 2(r_{\text{Au}} + r_{\text{S}}), r_h = \frac{\sqrt{a^2 + b^2}}{2}.$$

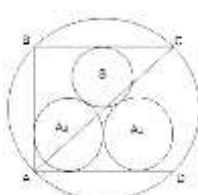
$R = 0,5 \text{ nm}$ olduqda $(\text{Au}_2\text{S})_n$ nanohissəciyi üçün $n = 3$ alınır. Bütün atomların sayı isə 9 olar.



Şəkil 3.2.



Şəkil 3.3.



Şəkil 3.4

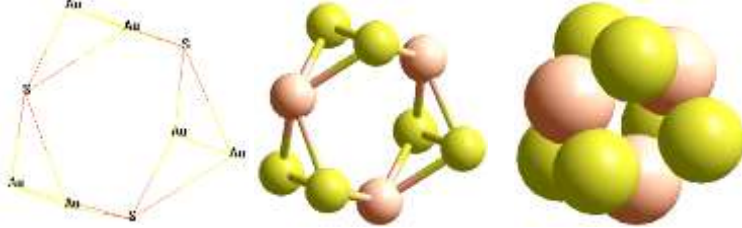
Yuxarıdakı hesablamaların nəticəsi olaraq Au_{16} , $(\text{CdS})_9$ və $(\text{Au}_2\text{S})_3$ nanohissəciklərinin aşağıdakı nəzəri vizual modellərini (Şəkil 4-6.) qurmaq olar. Bu modellər əsasında həmin nanohissəcikləri kvantmexaniki tədqiq etmək olar:



Şəkil 4. Au_{16} nanohissəciyinin nəzəri vizual modelləri



Şəkil 5. (CdS)₉ nanohissəciyinin nəzəri vizual modelləri



Şəkil 6. (Au₂S)₃ nanohissəciyinin nəzəri vizual modelləri

Ədəbiyyat

1.Liu, X., Atwater, M., Wang, J., & Huo, Q. Extinction coefficient of gold nanoparticles with different sizes and different capping ligands. [Colloids and Surfaces B: Biointerfaces](#). 2007 Jul 1;58(1):3-7.

2. Kvant səviyyəsində nanosistemlərin modelləşdirilməsi

Kvant səviyyəsində nanosistemlərin öyrənilməsi üçün istifadə olunan qeyri empirik metodlardan biri Xartri-Fok-Rutan metodudur. Bu metodun əsas ideyası ondan ibarətdir ki, sistemə daxil olan hər bir zərrəciyin digər zərrəciklərlə qarşılıqlı təsiri, hər hansı $V(\vec{r})$ potensialı ilə əvəz olunur. Beləliklə çoxzərrəcikli kvantmexaniki məsələ bir zərrəcikli

məsələyə gəlir və kvant səviyyəsində nanosistemlərin öyrənilməsində aşağıdakı ümumiləşmiş Xartri-Fok-Rutan tənliklərindən istifadə olunur:

$$\sum_{q=1}^m (F_{i,pq} - \varepsilon_i S_{pq}) c_{qi} = 0, \quad (p = \overline{1, m}) \quad (2.1)$$

burada

$$F_{i,pq} = f_i H_{pq} + \sum_{jklrs} c_{rk}^* c_{sl} (2A_{ij,kl} J_{prqs} - B_{ij,kl} J_{prsq}) \quad (2.2)$$

$$S_{pq} = \int \chi_p \chi_q dV \quad (2.3)$$

işarə edilmişdir. ε_i - i -ci elektronun orbital enerjisi, f_i - i -ci təbəqənin elektronlarla məskunluğu dərəcəsi, c_{qi} - naməlum əmsallar, χ_p - bazis funksiyalarıdır, S_{pq} - örtmə matrisi, H_{pq} - Hamilton operatorunun 1-elektronlu matris elementləri, J_{prqs} , J_{prsq} - 2-elektronlu matris elementləri, $A_{ij,kl}$ və $B_{ij,kl}$ verilmiş matrislərdir. (1) ifadəsi ümumiləşmiş XFR tənlikləri adlanır. Sistemin tam elektron enerjisi hesablamaq üçün

$$E = 2 \sum_{ipq} c_{pi}^* c_{qi} f_i H_{pq} + \sum_{ijklprqs} c_{pi}^* c_{rk}^* c_{qj} c_{sl} (2A_{ij,kl} J_{prqs} - B_{ij,kl} J_{prsq})$$

düsturundan istifadə olunur. c_{qi} naməlum əmsallarını tapmaq üçün (2.1) qeyri-xətti bircinsli cəbri tənliklər sistemini həll etmək lazımdır. Bu zaman atomları xarakterizə edən χ_q bazis funksiyaları məlum hesab olunur və buna görə də bu tənliklərə daxil olan S_{pq} , H_{pq} , J_{prqs} , J_{prsq} , $A_{ij,kl}$ və $B_{ij,kl}$ matris elementlərinin ədədi qiymətlərinin məlum olduğu fərz edilir. $F_{i,pq}$ kəmiyyətləri c_{qi} məchullardan qeyri-xətti asılı olduğuna görə də (2.1) tənlikləri qeyri-xətti cəbri tənliklər sistemidir və bu tənliklər sistemini matris formasında aşağıdakı kimi də yazmaq olar:

$$FC = ESC \quad (2.4)$$

Burada, E-elektronların orbital enerjiləri vektoru, S –örtmə və C- naməlum əmsallar matrisi, F – Fok matrisi olub C- naməlum

əmsallar matrisinin elementlərindən asılıdır. (4) ümumiləşmiş məxsusi qiymətlər tənliyi olub Rutan tənliyi adlanır. Unitar çevirmə vasitəsi ilə (2.4) ümumiləşmiş məxsusi qiymətlər tənliyini adi məxsusi qiymətlər tənliyinə gətirmək olar. Bunun üçün S matrisini I vahid matrisə çevirən V – unitar matrisi üçün $V^T S V = I$ isə, onda $X = V^{-1} C$ və $F' = V^T F V$ əvəzləməsi apararaq nəticədə

$$F' X = E X \quad (2.5)$$

adi məxsusi qiymətlər tənliyi alınır. (2.5) tənliyini həll etmək üçün F' - Fok matrisinin diaqonallaşdırılması üsulundan istifadə olunur. Nəticədə ε_i -orbital enerjilərinin və C_{qi} - əmsallarının qiymətləri tapılır, ε_i və C_{qi} qiymətlərinin hesablanmış qiymətləri nanosistemlərin tam elektron enerjisi, ionlaşma potensialını, atomların effektiv yüklərini və s. hesablamağa imkan verir.

Alınmış nəticələrin interpretasiyası

Nanomaterialın stabilliyini, mexaniki, optik, elektrik və maqnit xassələrini müəyyənləşdirmək olar. Məlumdur ki, elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Qadağan olunmuş zonanın qiymətini hesablamaq üçün $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO}$ fərqi tapılır. Burada ε_{ABMO} - ən aşağı boş və ε_{YTMO} - elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisidir. Qadağan olunmuş zonanın qiymətinin 2 - dən kiçikdirsə nanomaterialın keçirici, 2 - dən böyük 3-dən kiçikdirsə yarımkeçirici və 3-dən böyükdürsə dielektrik olduğunu göstərir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi əks işarə ilə ionlaşma potensialının qiymətinə bərabərdir: $I_p = -\varepsilon_{YTMO}$. Möhkəmlik

$\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə müəyyən oluna bilər.

Beləliklə, $\eta > 1eV$ olduğundan nanohissəciyi möhkəm, $\eta < 1eV$ yumşaq material hesab olunur. ε_{ABMO} mənfi işarəlidirsə nanohissəciyi elektrofil, müsbət işarəlidirsə nüklefil hesab olunur. Nanohissəciyinin stabilliyi $\Delta E = E_{nh} - E_h$ düsturu ilə hesablanıla bilər. Burada E_{nh} nanohissəciyin tam enerjisi, E_h isə bu nanohissəyə daxil olan hissəciklərin ayrılıqda tam enerjiləri cəmidir. $\Delta E > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. Materialın şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = \frac{ch}{(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO}) \times 1,6 \times 10^{-19}} \times 10^9$ nm düsturu ilə hesablanır. Burada $c = 3 \cdot 10^8$ m/san, $h = 6,63 \times 10^{-34}$ C·san.

Rutan metodu ilə hesablama alqoritmi

1. Giriş verilənlər: baş, orbital və maqnit kvant ədədləri; atomların koordinatları, elektronların və bazis funksiyalarının sayı, bazis funksiyalarının eksponensial parametrlərinin, $A_{ij,kl}$ və $B_{ij,kl}$ matris elementlərinin qiymətləri (açıq təbəqə üçün).
2. 1 və 2 elektronlu inteqralların matris elementlərinin hesablanması
3. İlk C-nin verilməsi üçün $X = H \cdot f$ matrisinin qurulması və diaqonallaşdırılması
4. Örtmə S matrisinin vahid I matrisinə gətirilməsi: $S = C^T S C$ hesablanması və diaqonallaşdırılması və $RO_{ij} = RO_{ij} \cdot (\sqrt{S_{jj}})^{-1}$,
 $S \cdot RO = I$.
5. $V = C \cdot RO$ və $\varepsilon_i^0 = X_{ii}$, $i = 1, 2, \dots, m$
6. Sıxlıq $RO = C^T C f$ və Fok $F = Hf + RO(2A \cdot J - BK)$ matrisinin elementlərinin hesablanması
7. $F' = V^T F V$ hesablanması və diaqonallaşdırılması: $F' \cdot X = F H$

$$FH_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ \neq 0 & i = j \end{cases}$$

FH_{ii} elementləri artan sıra ilə nizamlanması və $\varepsilon_i = FH_{ii}$,
 $i = 1, 2, \dots, m$.

8. Problemin həllinin dəqiqliyi alındımı ($f \max = \max_i |\varepsilon_i - \varepsilon_i^0|$)?

Yox alınmış məxsusi vektorlar üçün $C = VX$, $V = C$ hesablanır və hesablama prosesini 6-ci addımdan davam et!
 Bəli, növbəti addıma keç!

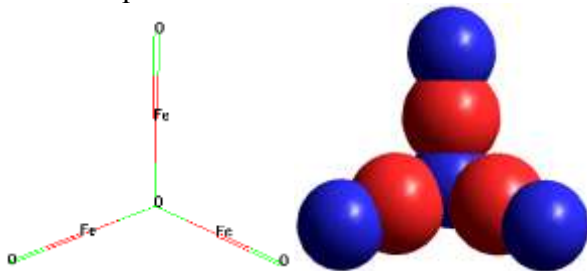
9. $C = VX$ üçün sistemin tam elektron enerjisi, ionlaşma potensialı, atomların effektiv yükləri və s. hesablanır.

Hesablamanın sonu.

Alınmış nəticələrin doğruluğu Virial şərti ilə müəyyənləşir.

Virial şərti belədir: $\frac{-V}{T} \approx 2$. Burada V və T uyğun olaraq sistemin potensial və kinetik enerjisidir.

Bu metod ilə kvant səviyyəsində nanosistemlərin modelləşdirilməsinə baxaq. Bununun üçün Fe_3O_4 hissəciyinin vizual modelini quraq (Şəkil 2.1) və kvant səviyyəsində kompüterdə hesablanmasını aparmaq lazımdır. Nəticədə aşağıdakıları alarıq:



Şəkil 2.1. Fe_3O_4 hissəciyinin vizual modelləri

Tam Enerji	= -4041.460231944 (a.v.),
Elektronların kinetik enerjisi	= 4016.484721383 (a.v.),
Virial şərti (-V/T)	= 2.0062.

ATOMLARIN YÜKLƏRİ VƏ KOORDINATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)		
		x	y	z
3 26	0.325387	-0.71883092	-1.20489795	-0.58858283
5 26	0.260842	1.07250870	1.32842848	-0.58858283
7 26	0.375242	-1.61448609	1.32842848	0.96277123
4 8	-0.203110	2.86384836	1.96175480	-0.58858283
2 8	-0.137197	-2.51014091	1.96175466	2.51412561
6 8	-0.449784	-0.71883092	0.69510205	-0.58858283
1 8	-0.171380	-0.71883092	-3.10489795	-0.58858283

Alınmış nəticələrin analizi haqqında məlumat növbəti mövzularda veriləcəkdir. Virial şərtinin 2,0062 bərabər olması hesablamaların nəticələrinin real prosesi düzgün əks etdirməsini göstərir.

3. Sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi metoduna əsaslanan modelləşdirmə

Sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi(SFN) metodunun qeyriempirik metodlardan fərqi ondan ibarətdir ki, sistem halı elektron sıxlığı funksionalı $\rho\left(\vec{r}\right)$ vasitəsilə təyin olunur və

$\rho\left(\vec{r}\right) = \int \dots \int |\Phi_e|^2 d\sigma_1 \dots d\sigma_N$ düsturu ilə ifadə olunur. Burada Φ_e -

sistemin çoxelektronlu dalğa funksiyası, $d\sigma_i$ - i-ci elektronun

fəza və spin koordinatlarıdır. Beləliklə $\rho\left(\vec{r}\right)$ elektronun fəza

və spin koordinatlarının funksiyası olub, sistemə daxil olan

elektronlardan hər hansı birinin aşkar olunması ehtimalıdır. Bu

nəzəriyyə sistemin cırlaşmayan əsas halının elektron

quruluşunun bütün xassələrini tamamilə müəyyən edir. 1964-cü

ildə Honeberq və Kon tərəfindən əsas qoyulan bu metod

təcrübədə tətbiq olunmağa başlanılmışdır. Əgər sistemin əsas

halının bütün xassələri $\rho\left(\vec{r}\right)$ ilə ifadə olunursa, onda sistemin elektron enerjisi

$$E[\rho]=T[\rho]+V_{\text{en}}[\rho]+V_{\text{ee}}[\rho] \quad (3.1)$$

düsturu ilə hesablanır. Burada $T[\rho]$ - sistemin kinetik enerjisi, $V_{\text{en}}[\rho]$ -elektronların nüvə ilə qarşılıqlı təsir, $V_{\text{ee}}[\rho]$ - elektronlararası qarşılıqlı təsir potensiallarıdır. $V_{\text{ee}}[\rho]$ potensialı $V_{\text{ee}}[\rho]=V_{\text{coul}}[\rho]+V_{\text{xc}}[\rho]$ düsturu ilə hesablanır. $V_{\text{coul}}[\rho]$ - elektronların kulon qarşılıqlı təsir potensialı, $V_{\text{xc}}[\rho]$ mübadilə korrelyasiya potensialıdır. $T[\rho]$, $V_{\text{en}}[\rho]$ və $V_{\text{coul}}[\rho]$ Kon-Şem metodu ilə hesablanır. Bu metodda $\rho\left(\vec{r}\right)$ aşağıdakı kimi təyin olunur:

$$\rho\left(\vec{r}\right)=\sum_{m=1}^N\left|\psi_m\left(\vec{r}\right)\right|^2 \quad (3.2)$$

Qeyd edək ki, ψ_i -Kon-Şem orbitalı olub Xartri-Fok orbitalından $V_{\text{xc}}[\rho]$ mübadilə-korrelyasiya potensialının olması ilə fərqlənir. $V_{\text{xc}}[\rho]$ mübadilə-korrelyasiya potensialının dəqiq ifadəsi məlum olmadığına görə və bunun üçün əlavə yaxınlaşmalardan istifadə olunur. Belə yaxınlaşmalardan biri Lokal sıxlıq yaxınlaşması olub, elektronun lokal xassələrindən asılıdır. Bu yaxınlaşmada $V_{\text{xc}}[\rho]=\int dr\rho\left(\vec{r}\right)E_{\text{xc}}\left(\rho\left(\vec{r}\right)\right)$ kimi

hesablanır. Burada $E_{\text{xc}}\left(\rho\left(\vec{r}\right)\right)$ mübadilə-korrelyasiya enerjisi olub, onun hesablanması üçün ədədi və ya təqribi düsturlar vardır. Kon-Şem metodunun dəqiqliyini artırmaq üçün sıxlıq qradientini nəzərə almaq lazımdır. Bu yanaşma ümumiləşmiş qradient yaxınlaşması adlanır. $V_{\text{xc}}[\rho]$ mübadilə-korrelyasiya

potensialı $V_{xc}[\rho] = \int dr \rho(\vec{r}) E_{xc}\left(\rho(\vec{r}), \frac{d\rho(\vec{r})}{dr}\right)$ düsturu ilə

hesablanır.

Hal-hazırda $V_{xc}[\rho]$ hesablanmasında ümumiləşmiş qradient yaxınlaşmasından istifadə olunur. $V_{xc}[\rho]$ mübadilə-korrelyasiya potensialı məlum olarsa, onda aşağıdakı Kon-Şen tənliyi həll edilir:

$$\left(-\frac{\Delta}{2} + V_{eff}(\vec{r})\right) \psi_m(\vec{r}) = \varepsilon_m \psi_m(\vec{r}). \quad (3.3)$$

Nəticədə məxsusi qiymətlər ε_m və $\psi_m(\vec{r})$ məxsusi

funksiyaları tapılır və $\rho(\vec{r}) = \sum_{m=1}^N \left| \psi_m(\vec{r}) \right|^2$ sıxlıq funksionalı

müəyyənənmiş olur. Burda

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_{ex}(\vec{r}) + V_{XC}(\vec{r}) + \int \left(\rho(\vec{r}') / \left| \vec{r} - \vec{r}' \right| \right) d\vec{r}', \quad V_{XC}(\vec{r}) -$$

mübadilə və $V_H(\vec{r}) = \int \left(\rho(\vec{r}') / \left| \vec{r} - \vec{r}' \right| \right) d\vec{r}'$ - Hartri potensialını

xarakterizə edir. Sistemin elektron enerjisi, kimyəvi potensialı, hissəciklərinin sayını və digər kəmiyyətlərin qiymətlərini hesablamaq olar:

$$E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i - \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' - \int V_{XC}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} + E_{XC}(\rho(\vec{r}))$$

$$C = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3}, \quad \gamma = \left(\frac{3}{5C} \right)^{3/2}, \quad \mu = \frac{\delta E}{\delta \rho} + V_{eff}(\vec{r}),$$

$$\rho(\vec{r}) = \gamma \left(\lambda - V_{eff}(\vec{r}) \right)^{3/2}, \quad N = \int \rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.4)$$

burada N elektronların sayı, λ - sistemin kimyəvi potensialını xarakterizə edir, $V_{ex}(\vec{r})$ - xarici effektiv sahənin potensialı, $V_{eff}(\vec{r})$ isə sistemin effektiv sahənin potensialıdır. Sistemə daxil olan hissəciklərarası qarşılıqlı təsir nəzərə alınmazsa onda bu hal üçün Kon-Şem tənliyinin aşağıdakı kimidir:

$$\left(-\frac{\Delta}{2} + V_{ex}(\vec{r})\right)\psi_m(\vec{r}) = \varepsilon_m \psi_m(\vec{r}) \quad (3.5)$$

(3.2) tənliyi həll edilərək məxsusi qiymətləri ε_m və $\psi_m(\vec{r})$

məxsusi funksiyaları və sıxlığı funksionalı $\rho(\vec{r}) = \sum_{m=1}^N \left| \psi_m(\vec{r}) \right|^2$

tapılır. Sistemin elektron enerjisi $E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i$ və digər kəmiyyətlər hesablanır.

SFN metodunun hesablama alqoritmi

1. Giriş verilənləri: Atomların koordinatları və elektronların sayı
2. Ehtimal olunan elektron sıxlığı funksionalının verilməsi $\rho(\vec{r})$. Bu halda elektron sıxlığını verilmiş atomların yüklərinin cəmi kimi və ya qabaqcadan yarımempirik metodlarla hesablamaq olar.
3. Hartri $V_H(\vec{r})$ potensialının hesablanması. $\Delta V_H(\vec{r}) = -4\pi\rho(\vec{r})$
Puasson tənliyinin həllindən tapılır.
4. Effektiv $V_{eff}(\vec{r})$ potensialın qurulması
5. Kon-Şem tənliyinin həll edilməsi

7. Kon-Şem tənliyinin həllindən yeni elektron sıxlığı funksionalının qurulması

8. Alınmış yeni elektron sıxlığı funksionalının əvvəlki elektron sıxlığı funksionalı ilə kifayət qədər dəqiqliklə üst-üstə düşməsi şərtinin yoxlanması?

Əgər şərt ödənmirsə, hesablanmış yeni elektron sıxlığı girişi verilən kimi qəbul edib, prosesi 3-dən davam etməli.

Şərt ödənərsə hesablamaların sonu hesab edilir.

SFN metodu ilə Fe_3O_4 hissəciyinin tədqiqinə baxaq. Fe_3O_4 hissəciyinin vizual modeli Şəkil 3.1.-də verilmişdir və SFN metodu tətbiq etməklə kompüterdə hesablanmasını aparmaq lazımdır. Beləliklə biz Fe_3O_4 hissəciyi üçün kompüterdə hesablamaların nəticə aşağıdakı kimidir:

Tam enerji	= -3916.861115183 (a.v.),
Elektronların kinetik enerjisi	= 3978.165287900 (a.v.),
Virial şərti (-V/T)	= 1.9846.

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDINATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)		
			x	y	z
3	26	-14.246023	-0.71883080	-1.20489800	-0.58858280
5	26	2.588963	1.07250900	1.32842800	-0.58858280
7	26	9.257804	-1.61448600	1.32842800	0.96277130
4	8	-3.898432	2.86384800	1.96175500	-0.58858280
2	8	6.001310	-2.51014100	1.96175400	2.51412600
6	8	2.822991	-0.71883080	0.69510180	-0.58858280
1	8	-2.526635	-0.71883080	-3.10489800	-0.58858280

Alınmış nəticələrin interpretasiyası və analizi haqqında məlumat növbəti mövzularda veriləcəkdir. Virial şərtinin 1.9846 bərabər olması hesablamaların nəticələrinin real prosesi müyyən mənada düzgün əks etdirdiyini göstərir.

4. Molekulyar dinamika metoduna əsaslanan modelləşdirmə

Nanosistemlərin molekulyar dinamika metoduna əsasən modelləşdirilməsi nəticəsində sistemə daxil olan nanoobyektlərin zamandan asılı olaraq qarşılıqlı təsirlərinin inkişafını izləməyə imkan verir. Bu metodun üstünlüyü ondan ibarətdir ki, atomların hərəkət sürətlərini və sistemin temperaturunu nəzərə almaqla modelləşdirməyə imkan verir. Sistemə daxil olan hissəciklər malik olduqları potensial sahələri vasitəsi ilə bir-biri ilə qarşılıqlı təsirdə olurlar. Potensial enerji, rabitə uzunluğu və bucağı, torsion bucaqlardan və kovalent olmayan qarşılıqlı təsirlərdən asılı olur. Hissəciklərə təsir edən qüvvələr onların koordinatlarından asılı funksiya hesab olunur və qarşılıqlı təsir potensiallarını bilməklə nanosistemi modelləşdirmək olar.

Hal - hazırda bu metod nanosistemlərdəki defektləri, çoxlu sayda atomlardan təşkil olunmuş nanoklasterlərin və bioloji nanoquruluşların öyrənilməsində geniş istifadə olunur.

$U(\vec{r})$ potensialının təsiri altında hərəkət edən n sayda nanohissəciklərdən ibarət olan sistemə baxaq. Hissəciklərin hərəkətini onların koordinatları \vec{r}_i və impulsları $\vec{p}_i = m_i \nu_i$ vasitəsi ilə təsvir etmək olar. Məlumdur ki, belə sistemin Hamilton funksiyası

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2 \cdot m_i} + U(\vec{r}) \quad (4.1)$$

düsturu ilə təyin olunur. i -ci nanohissəciyə təsir edən qüvvəni

$$\vec{F}_i = - \frac{\partial U(\vec{r}_i)}{\partial \vec{r}_i} \quad (4.2)$$

düsturu ilə hesablamaq olar.

Belə sistemin hərəkət tənliyini aşağıdakı kimi yazmaq olar:

$$\frac{\partial \vec{r}_i}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{\vec{p}}{m_i}, \quad \frac{\partial \vec{p}_i}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} = -\frac{\partial U}{\partial \vec{r}_i} = F_i(\vec{r}_i) \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} = \frac{1}{m_i} \cdot \frac{\partial \vec{p}_i}{\partial t} = \frac{1}{m_i} \cdot F_i(\vec{r}_i) \quad (4.4)$$

(4.3) və (4.4) tənliklərindən sistemin hərəkət tənliyi

$$m_i \cdot \frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} = F_i(\vec{r}_i) \quad (4.5)$$

Nyutonun ikinci qanunu alınır. Sistemin vəziyyətini izləmək üçün (4.5) tənliyini inteqrallamaq zəruridir. Yəni hissəciyin koordinat və sürətinin başlanğıc qiymətlərinə görə zamanın növbəti istənilən anında onun trayektoriyasını almaq olar. (4.5) hərəkət tənliyini müxtəlif metodlarla inteqrallamaq olar. Əksər metodlar sonlu fərqlər metoduna əsaslanır. Burada zaman müəyyən addımla diskret dəyişir. Ən mükəmməl metodlardan biri Verle alqoritmidir. Metodun əsas ideyası hissəciyin $\vec{r}(t + \Delta t)$ və $\vec{r}(t - \Delta t)$ vəziyyətlərini sıraya ayırmaq və sonra cəmləmək lazımdır. Nəticədə hissəciyin koordinatları üçün aşağıdakı düsturu almış olarıq:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4), \quad (4.6)$$

burada $\vec{a}(t)$ hissəciyin təcilidir və $\vec{a}(t) = -\frac{\text{grad}U(\vec{r}(t))}{m}$ hesablanır.

(4.6) tənliyi əsas Verle alqoritm adlanır. Bu alqoritm istifadə üçün kifayət qədər sadə olub və stabildir. Çatışmayan cəhəti koordinat üçün bir neçə başlanğıc qiymətlərinin olmamağıdır. Buna görə əsas Verle alqoritmindən əlavə bu alqoritmın sürətli variantı hazırlanmışdır. Bu zaman hissəciyin $t + \Delta t$ anındakı vəziyyəti, sürəti və təcili aşağıdakı kimi hesablanır:

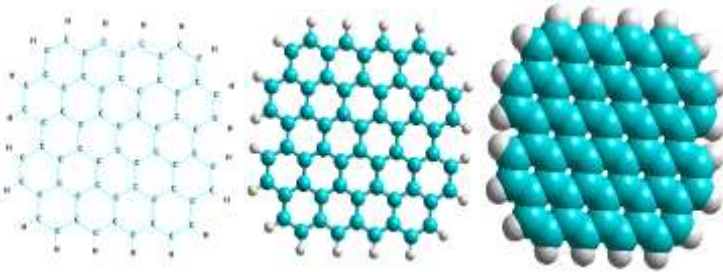
$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2$$

$$\vec{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t \quad (4.7)$$

$$\vec{a}(t) = -\frac{\text{grad}U\left(\vec{r}(t)\right)}{m}$$

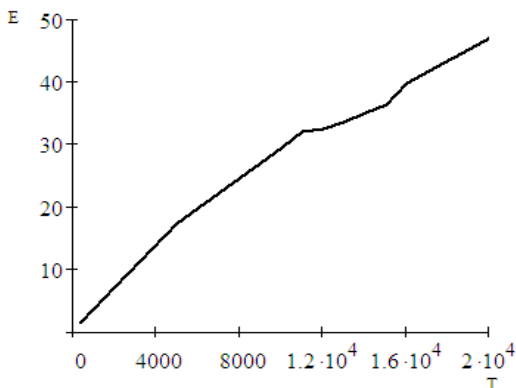
$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{1}{2}\vec{a}(t + \Delta t)\Delta t.$$

Nəticədə ixtiyari anda nanosistemin vəziyyətinin zamandan asılı olası haqqında məlumat əldə etmək və digər fiziki və kimyəvi kəmiyyətlərin qiymətlərini hesablamaq olar. Bu metod HeperChem və NanoEngineer-1 proqramlarında geniş istifadə olunur. Xüsusilə də son dövrdə hazırlanmış NanoEngineer proqramında əsas metod kimi reallaşdırılmışdır. Xüsusilə də son dövrdə hazırlanmış NanoEngineer-1 proqramında əsas metod kimi reallaşdırılmışdır. Molekulyar dinamika (MD) metodu ilə bəzi nanoquruluşların kompüterdə tədqiqinə baxaq. Məlumdur düzgün altı bucaqlının təpələrində C karbon atomları yerləşmiş və qalınlığı 10^{-10} m olan qrafen təbəqələrin alınması və tədqiqinə görə Rusiya alimləri Geym və Noveselyevə 2010 ildə Nobel mükafatı verilmişdir. Belə təbəqələrin elektronkada və müxtəlif sahələrdə geniş tətbiqi gözlənilir. Məhz buna görə də MD metodu ilə tə qrafenləri tədqiq edək. Bunun üçün NanoEngineer proqramından istifadə edək. 62 karbon atomdan ibarət qrafenin müxtəlif formada vizual modelləri aşağıdakı kimidir:

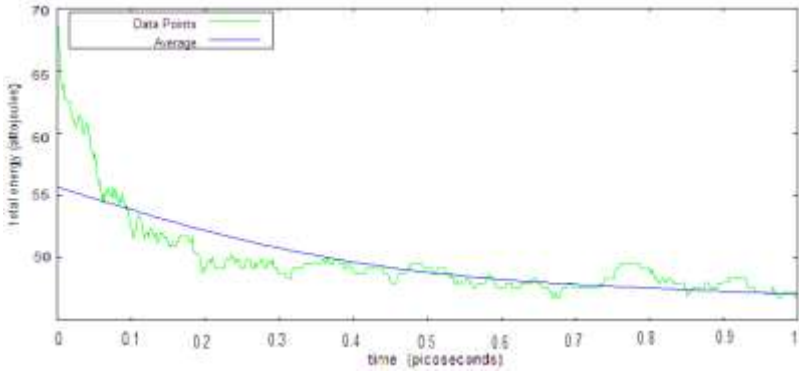


Şəkil 4.1. Qrafenin vizual modelləri

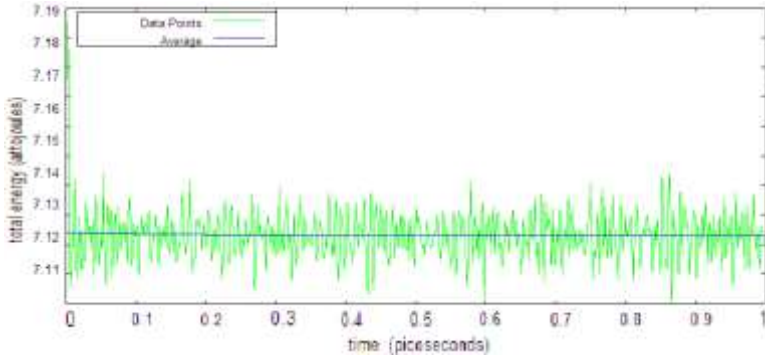
Qrafenin temperatúra davamlılığını NanoEngineer-1 proqramı vasitəsilə molekulyar dinamika metodu ilə temperatur və zamandan asılı olaraq tədqiq etmək məqsədilə temperaturun $T=300\text{K}$, 1000K , 2000K , 5000K , 10000K , 11000K , 12000K , 13000K , 14000K , 15000K , 20000K qiymətləri üçün, zamanın 1ps qiymətində, 0-dan başlayaraq $0,001\text{ps}$ addımı ilə 1ps qədər zaman müddətində kompüter hesablamaları aparılmışdır. Alınmış nəticələr əsasında qrafenin tam enerjisinin attocoul vahidi ilə verilmiş qiymətlərinin temperaturdan asılılıq qrafiki (Şəkil 4.2) qurulmuşdur. Aparılmış kompüter tədqiqatlarının nəticələri bunu deməyə imkan verir ki, qrafen yüksək temperatúra davamlı olub və onun quruluşunun dağılması $T=15000\text{K}$ qiymətində müşahidə olunmağa başlayır, $T=16000\text{K}$ qiymətində isə artıq qrafenin quruluşunun dağılması aydın müşahidə olunur və $T=20000\text{K}$ qiymətində isə onun quruluşunun tamam dağılması müşahidə olunmuşdur, bu hala uyğun qrafenin tam enerjisinin zamandan asılılıq qrafiki qurulmuşdur (Şəkil 4.5). Göründüyü kimi tam enerji zamandan asılı olaraq dəyişir. Stabil quruluşlarda isə tam enerjinin qiyməti zamandan asılı olaraq demək olar ki, dəyişmir. Şəkil 4.6-da $T=2000\text{K}$ temperaturdakı stabil quruluşun tam enerjisinin zamandan asılılığı verilmişdir. Nəticələr Cədvəl 4.1-də verilmişdir.



Şəkil 4.2. Qrafenin tam enerjisinin temperaturdan asılılıq qrafiki



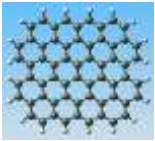
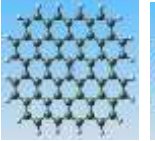
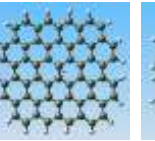
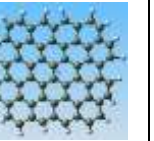
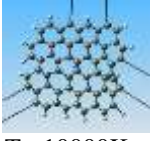
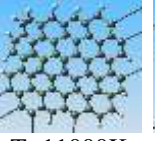
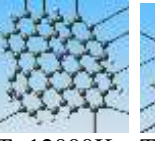
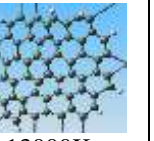

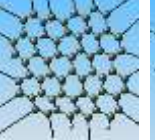


Şəkil 4.3. Qrafenin tam enerjisinin zamandan asılılıq qrafiki(T=20000K)



Şəkil 4.4. Qrafenin tam enerjisinin zamandan asılılıq qrafiki(T=2000K)

Temperaturun müxtəlif qiymətlərində və zamanın 1ps qiymətində, 0-dan başlayar 0.001 addımı ilə 1ps qədər zaman müddətində qrafenin NanoEngineer-1 proqramı vasitəsilə aparılmış hesablamalardan sonra alınmış vizual modelləri Cədvəl 4.1.-də verilmişdir.

Cədvəl 4.1.

Sıra N-si	Qrafenin temperaturdan asılı olaraq vizual modelləri			
1				
	T=300K	T=1000K	T=2000K	T=5000K
2				
	T= 10000K	T=11000K	T=12000K	T=13000K
3				
	T=14000K	T=15000K	T=16000K	T=20000K

5. Yarımemirik metodlara əsaslanan modelləşdirmə

Nanosistemlərin öyrənilməsində istifadə olunan Şredinger tənliyi yarım-empirik metodlar ilə bəzi sadələşmə və yaxınlaşmalardan istifadə edərək həll olunur. Bütün istifadə olunan metodlar aşağıdakı xüsusiyyətlərə malikdir:

Hesablamalar yalnız valent elektronlar üçün aparılır, bir sıra qarşılıqlı təsir inteqralları nəzərə alınmır, elektron orbitalları üçün standart bazis funksiyalar və təcrübədən alınmış bəzi parametrlər istifadə olunur. Məlumdur ki, qeyri-empirik və digər metodlarla nanosistemlərin öyrənilməsi zamanı kompüter hesablamaları apararkən bazis funksiyaların m sayı nə qədər böyük olarsa alınmış nəticələr prinsipcə daha dəqiq olar. Məhz buna görə də daha dəqiq nəticələr almaq məqsədilə bazis funksiyalarının sayını böyütməyə cəhd göstərilir. Lakin bu meyl bir sıra ciddi məhdudiyyətlərlə qarşılaşır. Qeyri-empirik

və digər metodlarla kompüter hesablamaları aparmaq üçün ilk növbədə 1 və 2 elektronlu inteqralların hesablanması ilə əlaqədar olaraq riyazi və kompüter hesablamaları çətinlikləri meydana çıxır. Məlumdur ki, bielektronlu inteqralların k sayı bazisin m ölçüsü ilə $k = \frac{1}{2}m(m+1)$, ikielektronlu inteqralların

ℓ sayı isə $\ell = \frac{1}{2}k(k+1) = \frac{1}{8}m(m+1)[m(m+1)+2]$ kimi

əlaqədardır. Beləliklə, qeyri-empirik və digər metodlarla kompüter hesablamaları aparmaq üçün m ölçülü bazisdən istifadə etdikdə hesablanması tələb olunan inteqralların ümumi sayı

$$k + \ell = \frac{1}{4}m(m+1) \left[\frac{1}{2}m(m+1) + 3 \right] \approx \frac{m^4}{8} \quad (5.1)$$

düsturu ilə qiymətləndirilə bilər. Deməli bazis funksiyaların sayı artdıqca inteqralların sayı kəskin şəkildə artır. Qarşıya çıxan çətinlikləri aradan qaldırmaq üçün yarım-empirik kvantmexaniki metodlardan istifadə edilməsini zəruri edir. Bu yarım-empirik kvantmexaniki metodlar əsasında aparılmış tədqiqatlar nəticəsində nanosistemlərin fəza quruluşunu, elektrik, maqnit və digər xassələrinin öyrənilməsində böyük imkanlar yaranmışdır.

Yarım-empirik kvantmexaniki metodların əsas ideyası ondan ibarətdir ki, sistemin elektron quruluşunu onların fiziki xassələrini dəyişməz saxlayan bielektronlu MO LCAO SCF yaxınlaşmasında təsvir etmək olar. Yarım-empirik metodlarda təqribilik dərəcəsi əsasən iki amillə təyin olunur:

1. Baxılan sistemdə əhəmiyyət kəsb edən elektronların ayrılması; məsələn π -elektronlu yaxınlaşmada bütün elektronlardan yalnız π -elektronlar; valent yaxınlaşmasında isə yalnız valent elektronları nəzərə alınır.
2. Molekulyar inteqrallar haqqında sadələşmələr.

Valent yaxınlaşmasına görə MO LCAO metodunda bazis funksiyaları olaraq sistemi təşkil edən atomların yalnız valent

elektronlarına aid olan valent atom orbitalları götürülür, bu atomların daxili elektronları (məsələn, karbon atomunun və ikinci dövrün digər elementlərinin atomlarının $1s$ -elektronları) nəzərə alınmır və belə hesab edilir ki, həmin daxili elektronlar uyğun atom orbitallarında lokallaşmışlar və polyarizə olunmamış gövdə yaradırlar. İnteqralların sayını azaltmaq üçün isə yarım-empirik kvantmexaniki metodlarda Kulon qarşılıqlı təsir inteqrallarının əsas hissəsi və ya hamısı nəzərə alınmır. Bundan başqa H_{pq} və H_{pp} gövdə inteqralları adətən dəqiq hesablanmır və parametrlər kimi qəbul edilir. Özü də bu parametrlər elə götürülür ki, fiziki kəmiyyətlərin həmin metodla hesablanmış qiymətləri yaxşı olduqda, hesablanmış və təcrübədən məlum olan xassələrin ən yaxşı uzlaşması alınsın.

Hər bir yarım-empirik metodda parametrlərin uyğunlaşdırılması bir, nadir hallarda isə iki xassə üzrə həyata keçirildiyindən təbiidir ki, yarım-empirik metodlarla aparılmış hesablamaların nəticələri sistemin bütün fiziki və kimyəvi xassələrini eyni zamanda kifayət qədər dəqiq əks etdirə bilməz. Bununla əlaqədar olaraq yarım-empirik metodların sistemin müəyyən xassəsini və ya bir neçə xassəsini qənaətbəxş təsvir edən müxtəlif parametrləşdirmələri meydana çıxır. Yarım-empirik kvantmexaniki metodlar üçün aşağıdakı əsas tələblər ödənməlidir:

1. Yarım-empirik metodlar elə sadə olmalıdırlar ki, onları kompüterlər vasitəsilə çoxlu sayda atomlardan təşkil olunmuş sistemin quruluşunu öyrənmək üçün tətbiq etmək mümkün olsun.
2. Sistemdə elektronlar arasındakı kulon itələmə, elektronların atom nüvələri tərəfindən cəzb olunması və s. kimi əsas qarşılıqlı təsirlərin saxlanması zəruridir.
3. Hesablamaların nəticələri asanlıqla şərh olunan və həm də əvvəlcədən hesablama sxeminə daxil edilməyən keyfiyyət xarakterli modellərin qurulmasına imkan verməlidir.

4. Yarım-empirik kvantmexaniki metodlar elektron korrelyasiyanı, sıfırıncı rəqslərin enerjisini və s. mümkün qədər nəzərə almalıdır.

5. Yarım-empirik kvantmexaniki metodlar vasitəsilə aparılmış hesablamaların nəticələri elektronlarla məskunlaşmış orbitalların ortoqonal çevrilmələrinə nəzərən invariant qalmalıdır.

Yarım-empirik kvantmexaniki metodların yaranmasında və inkişafında sıfırıncı diferensial örtmə (SDO) yaxınlaşması mühüm rol oynamışdır. 1952-ci ildə Parizer və Parr və onlardan asılı olmayaraq 1953-cü ildə Popl tərəfindən təklif olunmuş SDO yaxınlaşması (bəzən buna müəlliflərin şərəfinə PPP yaxınlaşması da deyirlər) elektronlar arasında Kulon itələmə inteqrallarının sayını kəskin şəkildə azaltmağa imkan verir. Bu yaxınlaşmanın ideyası ondan ibarətdir ki, Kulon itələmə inteqrallarının çoxunun qiyməti sıfıra yaxındır. Ona görə də SDO yaxınlaşmasında örtmə və əksər ikielektronlu inteqralların qiymətləri hesablanır.

Hal-hazırda geniş istifadə olunan SDO yarım-empirik metodlar valent yaxınlaşmasına əsaslanır və bu metodlar şərti olaraq iki qrupa bölünə bilər:

1. Diferensial örtmənin tam nəzərə alınmaması (complet neglect of differential overlap-CNDO) metodları;
2. Diferensial örtmənin qismən nəzərə alınmaması INDO (intermediate neglect of differential overlap) və diferensial örtmənin modifikasiyanmasını qismən nəzərə alınmaması MINDO (modified intermediate neglect of differential overlap) metodları. İkinci qrupa aid edilən yarım-empirik metodlar bir-birindən parametrləşmənin xarakteri ilə fərqlənirlər.

CNDO metoduda ikielektronlu inteqrallardan yalnız Kulon inteqrallarını nəzərə alaraq hesablamalar aparılır.

INDO və MINDO3 metodlarında isə Kulon inteqralları ilə yanaşı, həm də birmərkəzli mübadilə inteqralları da nəzərə alınır. Burada birmərkəzli ikielektronlu inteqrallar üçün yaxınlaşma aşağıdakından ibarətdir:

$$(pq|rs) = \gamma_{pp}\delta_{pq}\delta_{rs}\delta_{pr} + \gamma_{pr}\delta_{pq}\delta_{rs}(1 - \delta_{pq}) + \\ + h_{pq}(\delta_{pr}\delta_{qs} + \delta_{ps}\delta_{qr})(1 - \delta_{pq}) \quad (5.2)$$

γ_{pq} və h_{pq} kəmiyyətləri, uyğun olaraq Kulon və mübadilə inteqrallarıdır.

MNDO metodu sistemin quruluşunu optimallaşdıraraq, elektron və atom quruluşunu hesablamağa imkan verir.

MNDO/d d-orbitalları nəzərə almaqla sistemi öyrənməyə imkan verir.

AML metodu MNDO metodunun yaxşılaşdırılmış variantı olub, daha dəqiq yarım-empirik metoddur.

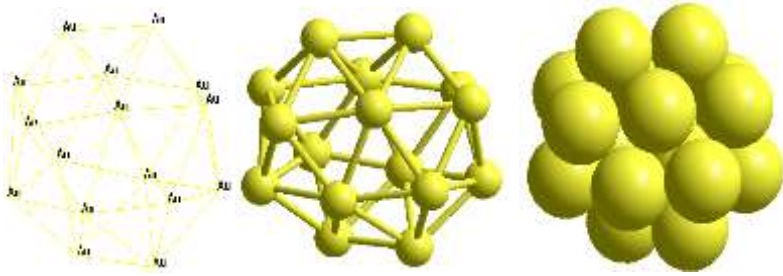
PM3 metodu AML metodundan parametrlərin qiymətlərinin görə fərqlənir.

ZINDO/l metodu MNDO metodunun variantı olub keçid elementləri olan sistemləri hesablamaq üçün istifadə olunur.

ZINDO/s metodu INDO metodunun versiyası olub və görünən spektrləri tədqiq etmək üçün istifadə olunması faydalıdır.

TNDO ən yeni yarım-empirik metod olub yüksək dəqiqliklə nanosistemlərin öyrənilməsində istifadə etmək olar. Extended Huckel metodunda sistemin quruluşunu optimallaşdırmadan hesablamalar aparılır. Bu zaman sistemə daxil olan hissəciklər arası qarşılıqlı təsir nəzərə alınmır və öz-özünə qərarlaşmış sahə yaxınlaşması istifadə olunmur.

Qızıl nanohissəciyi və onun nanokopozisiyalarının modelləşdirilməsi və yarım-empirik Genişləniş Hükkel metodu kompüterdə hesablamaların nəticəsi aşağıdakı kimidir:



Şəkil 5.1. Au₁₆ qızıl nanohissəciyinin vizual modelləri

Tam enerji = -96.224831756 (a.v.)

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

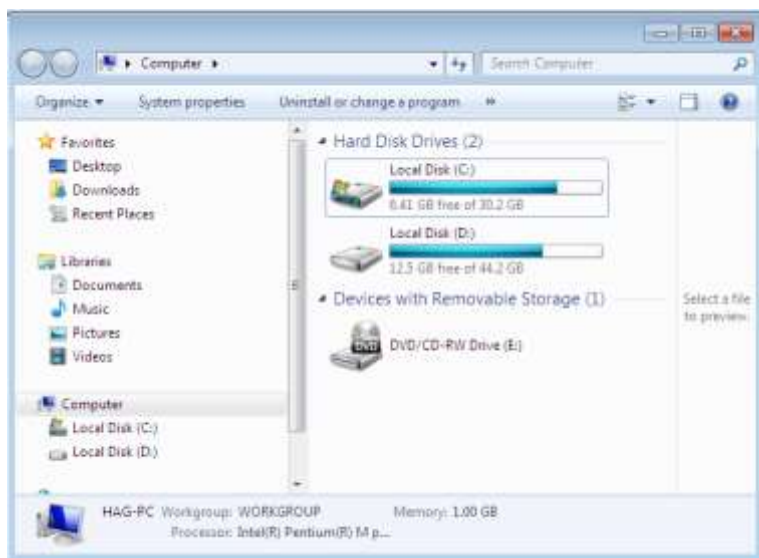
Z	Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)		
			x	y	z
1	79	0.013892	-2.66668	-1.11036	-1.22597
2	79	0.013875	1.43153	2.79064	-0.09537
3	79	0.013888	2.98308	0.80712	0.54449
4	79	0.041471	1.36563	0.53539	-1.60525
5	79	-0.029281	2.50325	-1.60286	-0.41826
6	79	-0.026048	2.21390	-1.08694	2.20114
7	79	0.041474	0.59167	1.05973	1.80441
8	79	-0.029300	-1.12446	2.72660	0.55861
9	79	-0.026080	-0.36022	2.59747	-2.01257
10	79	0.041479	-1.90627	0.20016	1.02679
11	79	-0.029293	-0.38269	-1.28222	2.68710
12	79	-0.026087	0.81308	-3.03145	1.03732
13	79	0.041474	-0.05096	-1.79531	-1.22597
14	79	-0.029261	-0.99614	0.15857	-2.82742
15	79	-0.026074	-2.66668	1.52083	-1.22597
16	79	0.013872	-1.74805	-2.48737	0.77692

Alınmış nəticələrin analizi növbəti mövzularda veriləcəkdir.

II FƏSİL. NANOSİSTEMLƏRİN TƏDQIQI KOMPÜTER PROQRAMLARI

6.Vizual proqramlaşdırma riyazi modelin kompüter realizasiyası üçün əsas vasitə kimi

Məlumdur ki, Windows tərcümədə "pəncərələr" deməkdir. Pəncərə düzbucaqlı çərçivə olub Windows əməliyyat sisteminin əsas işçi elementidir. Bütün proqram pəncərələri oxşar struktur və tərkibə malikdir. Windows 7 ƏS-də Pəncərə aşağıdakı elementlərdən ibarətdir (Şəkil 6.1):






Şəkil 6.1. Windows Explorer proqramının pəncərəsi

Başlıq sətiri – pəncərənin ən yuxarı hissəsi, burada adətən pəncərənin və ya proqramın adı yerləşir;
Pəncərənin gizlədilməsi üçün düymə;
Pəncərənin bərpası üçün düymə (görünüşü pəncərənin vəziyyətindən asılıdır);

Pəncərənin bağlanması üçün düymə;
Sistem menyusunun düyməsi – pəncərəyə aid sistem əməliyyatlarından ibarət menyunu açır;
Menyu sətri – pəncərəni idarə edən əməliyyatlar siyahısından ibarətdir;
Alətlər lövhəsi – tez-tez istifadə olunan əməliyyatları icra edən düymələrdən ibarət olur;
Scroll (lift) zolaqları– pəncərənin tərkibinə baxmaq üçün istifadə olunur;
İş sahəsi – obyektlərin (mətn, şəkil və s.) yerləşdiyi və üzərində iş aparıldığı yer;
Status (vəziyyət) lövhəsi – vəziyyət indikatorlarının yerləşdiyi lövhə;
Pəncərənin çərçivəsi. Proqram pəncərəsi üç müxtəlif vəziyyətdə ola bilər:
Tam ekran – pəncərə ekranın tam boyuna bərabərdir;
Normal – pəncərə ekranın bir hissəsini tutur;
Gizlədilmiş – pəncərə görünməzdir.

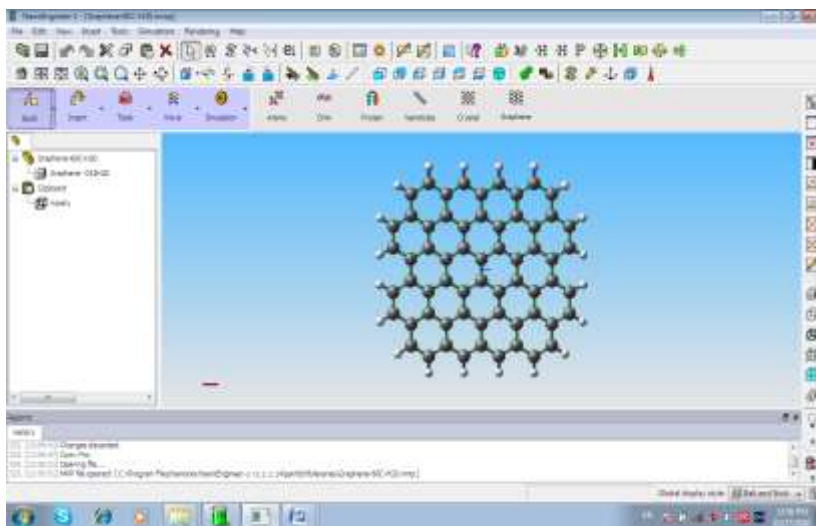
Proqram pəncərəsinin 4 növü vardır:

1. Proqram pəncərəsi. Proqram pəncərəsi sərlövhə sətrinə, standart menyu sətrinə, alətlər panelinə və cari vəziyyət sətrinə malik olur. Pəncərənin ümumi görünüşü Görünüş (Vid, View) menyusunu ilə tənzimlənir (Şəkil 6.2.). Sərlövhə sətrinin sol hissəsində pəncərənin adı (Qovluğun və ya proqramın adı), sağ küncündə isə idarəedicilərin düymələri:  pəncərəni bağlayan;  pəncərənin ölçüsünü böyüdüüb kiçildən;

 -pəncərəni müvəqqəti qapayan düymələr yerləşir.

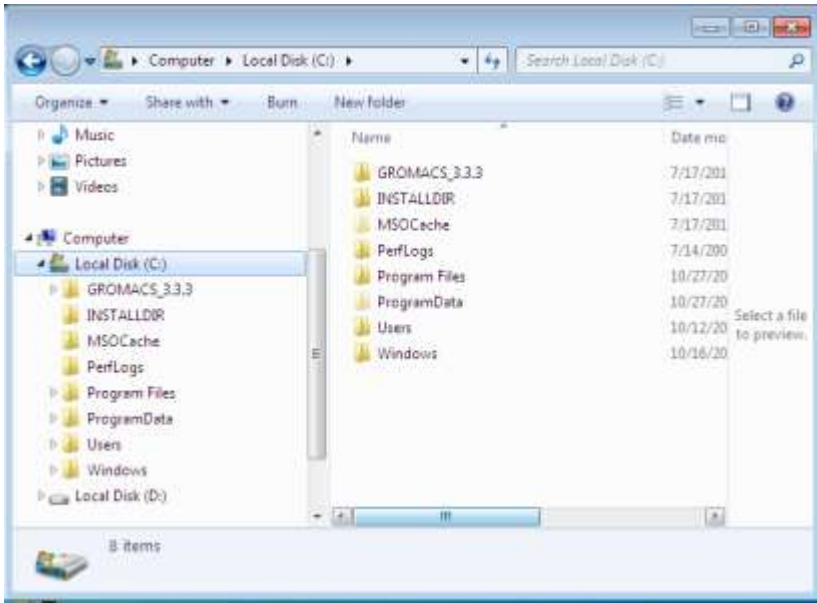
2. Dialoq pəncərəsi. Dialoq pəncərəsi(Şəkil 6.3) əməliyyat sisteminin və ya işlədilən proqramın bu və ya digər parametrlərinin dəyişdirilməsini və ya əlavə edilməsini, istifadəçi ilə dialoqu, xəbərdarlıq funksiyalarını yerinə yetirir. Dialoq pəncərədə yerləşən müxtəlif düymələrin, mətn sətrlərinin köməyiylə yerinə yetirilir. Dialoq pəncərəsi bir neçə bölmədən ibarət olsun. Bir bölmədən digərinə keçid Başlıq düyməsi ilə həyata keçirilir.

3. Qovluq pəncərəsi. Qovluq pəncərəsində qovluqlar və fayllar əks olunur. Qovluqlar sarı rəngli nişanlara, fayllar isə tipinə müvafiq nişanlara malik olur (Şəkil 6.3).



Şəkil 6.2. NanoEngineer-1 program

4. Məlumat pəncərəsi. Məlumat pəncərəsi yardımçı məlumatlar almağa xidmət edir (Şəkil 6.4.). O bir neçə bölmədən ibarət ola bilər. Bu və ya digər məlumatı kursoru məlumatın adının üzərinə qoyub siçanın sol düyməsini sıxmaqla almaq olar. Məlumatı həmçinin Axtarış (Search) və ya Predmet göstəricisi (Index) başlıq düyməsini sıxıb açılmış bölmənin mətn sətirində axtarış göstəricisini (predmet göstəricisi və ya söz) qeyd etməklə almaq olar.



Şəkil 6.3.

Windows əməliyyat sistemlərində(Şəkil 6.1) çoxsaylı məsələ rejimi, yəni eyni vaxtda bir neçə proqram ilə işləməyi təmin edir. Proqram pəncərəsinin yerini dəyişməyə kursoru pəncərənin sərlövhə sətirinə qoyub siçanın sol düyməsini sıxıb buraxmamaq şərtilə hərəkət etdirməklə nail olmaq olar. Pəncərənin ölçülərini dəyişmək üçün isə kursoru pəncərənin sərhədinə qoyub, bu zaman kursor öz formasını dəyişib \leftrightarrow şəklini alacaqdır. Sonra siçanın sol düyməsini sıxıb hərəkət etdirmək lazımdır.

Pəncərələrin bağlanması: hər hansı bir proqramla işi başa çatdırmaq üçün onun pəncərəsini bağlamaq kifayətdir. Aktiv pəncərəni aşağıdakı üsullar ilə bağlamaq olar: Pəncərənin başlığında olan Close (X) düyməsi ilə; klaviaturadakı Alt+F4 düymələr cütü ilə; File menyusunda File \rightarrow Exit əmrini seçməklə; pəncərənin sistem menyusu siyahısından Close seçməklə.



Şəkil 6.4.

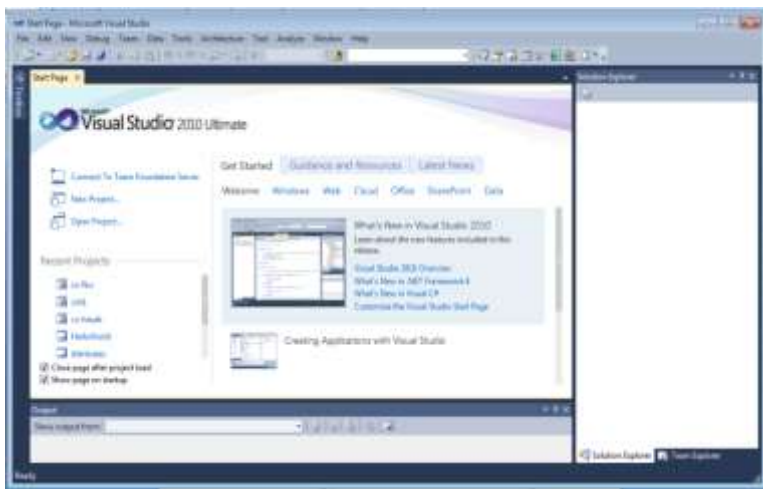


Şəkil 6.5. Windows 7 ƏS-nin İş stolu

Hal-hazırda hər hansı problemin öyrənilməsi üçün kompüterdə proqramların hazırlanması prosesində müasir vizual proqram vasitələrindən Delphi, MS Visual Studio və s.

geniş istifadə olunur. Hər yeni problemin proqramının hazırlanması yeni proyektin(formanın) yaradılması ilə başlayır.

Proqramın hazırlanması üçün Baş, alt proqramlar yığılımı və dinamik qoşula bilən proqram modullardan istifadə olunur. Hazırlanmış işləyən proqram yerləşmiş qovluqlarda icra olunma, dinamik qoşulma və s. digər koməkçi fayl tiplərinə malik fayllar şəklində yerləşdirilir. Vizual proqramlaşdırmanın əsasında sinif anlayışı durur. Sinif verilən və metodların birlikdə istifadə olunması kimi təsəvvür etmək olar. Bunun köməyi ilə yeni obyektlər təyin olunur. Beləliklə yaradılan və işlədilən vizual obyektlərin istifadəsi müasir etibarlı proqram vasitələrinin yaradılması işini xeyli sadələşdirmişdir. Hal-hazırda vizual obyektlərin və tətbiqi proqramların yaradılmasında ən geniş istifadə olunan proqram vasitələrindən biri MS Visual Studio sistemidir(Şəkil 6.6).



Şəkil 6.6. Visual Studio-nun əsas pəncərəsi

Bu proqramlaşdırma sistemi Microsoft kompaniyasına məxsus olub və daimə təkmilləşdirilir. MS Visual Studio sistemin aşağıdakı ümumi elementlərindən istifadə olunur: All windows Forms, Common controls, Containers, Menu & ToolBars, Data,

Companents, Printing, Dialogs, Crystal Reports və General. Bu elementlər aktiv olaraq isifadə edilir.

Məlumdur ki, hal-hazırda nano quruluşlu obyektlərin tədqiqi üçün onlarla müxtəlif proqramlar hazırlanmışdır. Müxtəlif dərəcədə belə obyektlərin öyrənilməsində istifadə oluna bilər. Nano obyektlərin tədqiqi zamanı lazımı kəmiyyətlərin hesablanması üçün öz proqramımızın olması daha yaxşı olardı. Bu baxımdan MS Vizual Studionun alətlərdən istifadə edərək nanohissəciyin morfoloqiyasının sferik formada olduğunu qəbul edərək, quruluşa daxil atomların sayını təqribi hesablamaq üçün riyazi düstur lazımdır. Məlumdur ki, nanohissəcik eyni və müxtəlif atomlardan təşkil ola bilər. Nanohissəcik eyni atomlardan təşkil olunmuşdusa

atomların sayı $N = \frac{V_{nh}}{V_a}$ düsturu ilə hesablamaq olar. Burada V_{nh}

- nanohissəciyin həcmi, V_a - atomun həcmidir. Nanohissəcik sfera formasında olduğunu fərz etsək onda $V_{nh} = \frac{4}{3}\pi r^3$ və

$V_a = \frac{4}{3}\pi r_a^3$. Burada $r = \frac{d}{2}$, d -nanohissəciyin ölçüsü və r_a

atomun radiusudur. Beləliklə eyni atomlardan təşkil olunmuş və sfera formasında olan nanohissəciklər üçün atomların sayını

$N = \frac{r^3}{r_a^3}$ düsturu ilə hesablamaq olar. Bu düstur əsasında vizual

proqram hazırlayaq. Bunun üçün Vizual C# proqramlaşdırma dilində **File** → New Project əmri ilə yeni proyekt yaradar. Proyektə ad verərək, proyekt üzərində sferanın diametri, atomların kovalent radiuslarının ortalanmış qiymətini daxil etmək və atomların sayını almaq üçün üç Label və üç TextBox alətlərini istifadə olunur. Atomların sayını tapmaq və yeni nanohissəcik üçün bu hesablamanı aparmaq üçün proqram düymələrini yaratmaq üçün Buttion alətindən istifadə olunur.

Beləliklə nəticədə aşağıda proyekt formasını və nanohissəcikdə atomların sayını tapılması üçün programın mətnini almış olarıq:

```
private void button1_Click(object sender, EventArgs e)
{
    double Dnh, Ra, Rnh;
    int N;
    if ((textBox1.Text != "") && (textBox2.Text != ""))
    {
        Dnh = Convert.ToDouble(textBox1.Text);
        Ra = Convert.ToDouble(textBox2.Text);
        Rnh=Dnh/2;
        N = Convert.ToInt32((Rnh/Ra)*(Rnh/Ra)*(Rnh/Ra));
        textBox3.Text = Convert.ToString(N);
    }
}

private void button2_Click(object sender, EventArgs e)
{
    textBox1.Clear();
    textBox2.Clear();
    textBox3.Clear();
}
```

Bu programla qızıl, gümüş, dəmir, aluminium və silisium atomlardan təşkil olunmuş nanohissəciklərin ölçülərinə görə atomlarının sayını hesablamaq olar.

Məsəl 1. Radiusu 0.179nm olan qızıl atomlarından təşkil olunmuş və diametri 0.6nm nanohissəcikdə atomların sayını təqribi hesablayaq. Nəticədə $N=21$.

Məsəl 2. Radiusu 0.175 nm olan gümüş atomlarından təşkil olunmuş və diametri 1 nm nanohissəcikdə atomların sayını təqribi hesablayaq. İlk verilənləri daxil edərək nəticədə $N=23$ alarıq.

Məsəl 3. Radiusu 0.172 nm olan dəmir atomlarından təşkil olunmuş və diametri 1nm nanohissəcikdə atomların sayını təqribi hesablayaq. İlk verilənləri daxil edərək nəticədə $N=196$ alarıq.

Məsələ 4. Radiusu 0.161 nm olan aluminium atomlarından təşkil olunmuş və diametri 1nm nanohissəcikdə atomların sayını təqribi hesablayaq. İlk verilənləri daxil edərək nəticədə N=29 alarıq.

Məsələ 5. Radiusu 0.146 nm olan silisium atomlarından təşkil olunmuş və diametri 1nm nanohissəcikdə atomların sayını təqribi hesablayaq. İlk verilənləri daxil edərək nəticədə N=40 alarıq.

n sayda müxtəlif atomlardan təşkil olunmuş və sfera formasındakı nanohissəciklərdə atomların sayını təqribi hesablamaq üçün $N = \frac{V_{nh}}{V_{oa}}$ düsturundan istifadə oluna bilər.

Burda V_{nh} - nanohissəciyin həcmi, V_{oa} - müxtəlif atomlardan təşkil olunmuş hissəciyin həcmidir. Nanohissəcik sfera formasında olduğunu fərz etsək onda $V_{nh} = \frac{4}{3}\pi r^3$ və $V_{oa} = \frac{4}{3}r_{or}^3$.

Burada $r = \frac{d}{2}$, d-nanohissəciyin ölçüsü, r_{or} - müxtəlif atomlardan təşkil olunmuş hissəciyin ortalanmış radiusunun ölçüsüdür. Beləliklə müxtəlif atomlardan təşkil olunmuş və sfera formasında olan nanohissəciklər üçün atomların sayını təqribi olaraq $N = \frac{r^3}{r_{or}^3}$ düsturu ilə hesablamaq olar. Bu düstur

əsasında vizual proqram hazırlayaq(Məs., iki müxtəlif atomlardan təşkil olunmuş). Yuxarıdakı proqramın mətnində bəzi düzəlişlər edək və nəticədə aşağıdakı proqramın mətnini alarıq:

```
private void button1_Click(object sender, EventArgs e)
{
    double Dnh, Ror, Rnh;
    int N;
    if ((textBox1.Text != "") && (textBox2.Text != "") &&
        (textBox4.Text != ""))
    {
```

```

Dnh = Convert.ToDouble(textBox1.Text);
Ror = Convert.ToDouble(textBox2.Text);
Rnh=Dnh/2;
N = Convert.ToInt32(Math.Pow(Rnh,3)/(Math.Pow(Ror,3)));
textBox3.Text = Convert.ToString(N);
}
}
private void button2_Click(object sender, EventArgs e)
{
    textBox1.Clear();
    textBox2.Clear();
    textBox3.Clear();
}

```

Proqramdan istifadə edərək bəzi nanohissəciklər üçün atomların ümumi və hər atomuun sayını hesablayaq.

Məsələ 4. Dəmir və oksigen atomlarının kovalent radiusları uyğun olaraq 0.117nm və 0.073nm olan dəmir və oksigen atomlarından təşkil olunmuş və diametri 10nm olan Fe₃O₄ nanohissəcikdə atomların sayını təqribi hesablayaq. İlkin verilənləri daxil edərək nəticədə N=62794,

$$N_{\text{Fe}} = \frac{3}{7}N = \frac{3}{7}62794 = 26912 \quad \text{və} \quad N_{\text{O}} = \frac{4}{7}N = \frac{4}{7}62794 = 35882$$

alarıq.

Məsələ 5. Zr və oksigen atomlarının kovalent radiusları uyğun olaraq 0.145nm və 0.073nm olan sirkonim və oksigen atomlarından təşkil olunmuş və ölçüsü 7nm olan ZrO₂ nanohissəcikdə atomların sayını təqribi hesablayaq. İlkin verilənləri daxil edərək nəticədə N=12473,

$$N_{\text{Zr}} = \frac{1}{3}N = \frac{1}{3}12473 = 4157 \quad \text{və} \quad N_{\text{O}} = \frac{2}{3}N = \frac{2}{3}12473 = 8316$$

alarıq.

Məsələ 6. Sink və sulfid atomlarının kovalent radiusları uyğun olaraq 0.145nm və 0.102nm olan sirkonim və oksigen atomlarından təşkil olunmuş və ölçüsü 21nm olan ZnS nanohissəcikdə atomların sayını təqribi hesablayaq. İlkin

verilənləri daxil edərək nəticədə $N=384040$,
 $N_{Zn} = \frac{1}{2}N = 192020$ və $N_S = \frac{1}{2}N = 192020$ alarıq.

Məsələ 7. Kadium və sulfid atomlarının kovalent radiusları uyğun olaraq 0.148nm və 0.102nm olan sirkonim və oksigen atomlarından təşkil olunmuş və ölçüsü 3nm olan CdS nanohissəcikdə atomların sayını təqribi hesablayaq. İlkin verilənləri daxil edərək nəticədə $N=784$, $N_{Cd} = \frac{1}{2}N = 392$ və

$$N_S = \frac{1}{2}N = 392 \text{ alarıq.}$$

Məsələ 8. Kadium və Se atomlarının kovalent radiusları uyğun olaraq 0.148nm və 0.116nm olan sirkonim və oksigen atomlarından təşkil olunmuş və ölçüsü 3nm olan CdSe nanohissəcikdə atomların sayını təqribi hesablayaq. İlkin verilənləri daxil edərək nəticədə $N=702$, $N_{Cd} = \frac{1}{2}N = 351$ və

$$N_S = \frac{1}{2}N = 351 \text{ alarıq.}$$

Beləliklə sadə hazırlanmış proqramların tətbiqindən göründüyü kimi fundamental tədqiqat işləri zamanı vizual proqramlaşdırmanın zəruriliyi hiss olunur və onun nanotexnologiya sahəsində əsas vasitə kimi geniş tətbiqi hazırkı zamanın işidir.

7. Nanosistemlərin modelləşdirilməsinin əsas tipləri

Hər hansı yeni nanoobyekti yaratmaq üçün əvvəlcə onun quruluşu və hazırlanması texnologiyası ətraflı öyrənilir. Nəzərə alınsa ki, belə quruluşu görmək belə mümkün olmadığına görə bunu necə etməli? Nanosistemləri tədqiq etmək üçün onların nəzəri modellərindən istifadə olunur. Modellər müxtəlif ola bilər. Məlumdur ki, atomlar mürəkkəb fiziki obyekt olub özünə məxsus qanunlar daxilində

mövcuddür. Nanotexnologiyada adətən istifadə olunan kompüter modellərində kvant fizikasının qanunlarından istifadə olunur. Güclü riyazi aparata əsaslanan kompüter modelləşdirməsi nanoobyektlərin hazırlanmasında əsas rol oynayır. Müxtəlif peşə sahibləri,- təhsil, elm, mühəndis, dizayner və arxitektorlar və s. öz işlərində kompüter modelləşdirmədən geniş miqyasda istifadə edirlər.

Hal-hazırda nanotexnologiyada isə adi məsələlərə oxşar olaraq yüksək dəqiqliklə kvant qanunlarına əsaslanan nanoobyektlərin modelləşdirilməsi və kompüter hesablanması geniş tətbiq olunur.

Hal-hazırda nanotexnologiyada riyazi modelləşdirmənin bir neçə tipləri istifadə olunur:

Vizual (RasMol proqramı), Hesablama (Chem3D, HyperChem və NanoEngineer-1 proqramları) və Mühəndis (NanoEngineer-1, NanoXplorer proqramı) kompüter modelləşdirməsi.

Vizual kompüter modelləşdirməsi

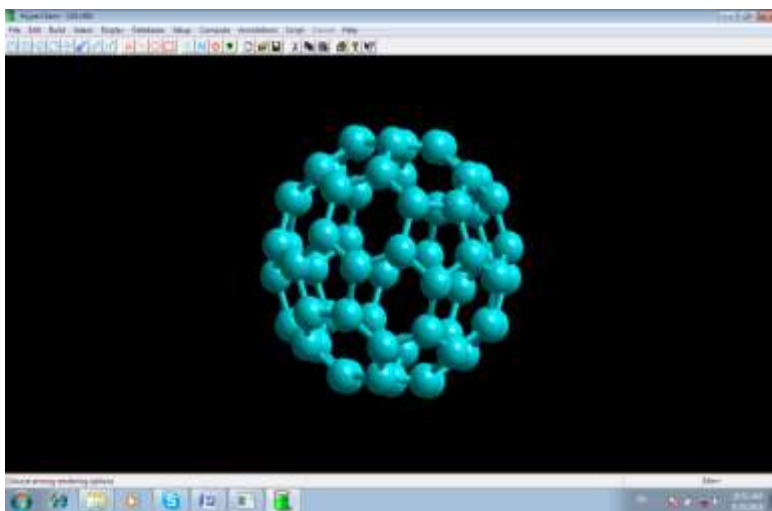
Bu modelləşdirmə zamanı üçölçülü koordinat sistemində nanoquruluşlu sistemlərin yaradılmış formalarını vizual müşahidə etmək olar. Bu zaman nanoquruluşa baxmaq, onları müxtəlif vəziyyətlərdə müşahidə etmək, sistemə daxil olan obyektleri və əlaqəni görmək olar(Şəkil 7.1, 7.2).

Hesablama modelləşdirməsi

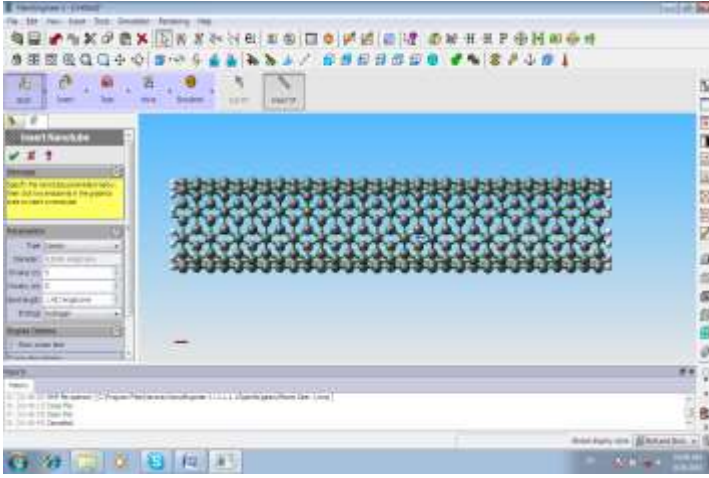
Hər hansı qurulmuş nanoquruluşlu modellərə baxmaq maraqlıdır. Ancaq daha çox maraqlı olardı ki, bu modelləri hər bir mütəxəssis özü qurmuş olsun. Bunun üçün kvant mexanikası və molekulyar dinamikasının metodlarından, müxtəlif statistik yanaşmalara əsaslanan riyazi modelləşdirmədən istifadə olunur. Bunun köməyi ilə nanoobyektin nəinki üçölmülü modelini, həmçinin onun

temperatur, elektromaqnit sahəsi və başqa təsirlər olarkən özünü necə aparmasını müşahidə etmək olar.

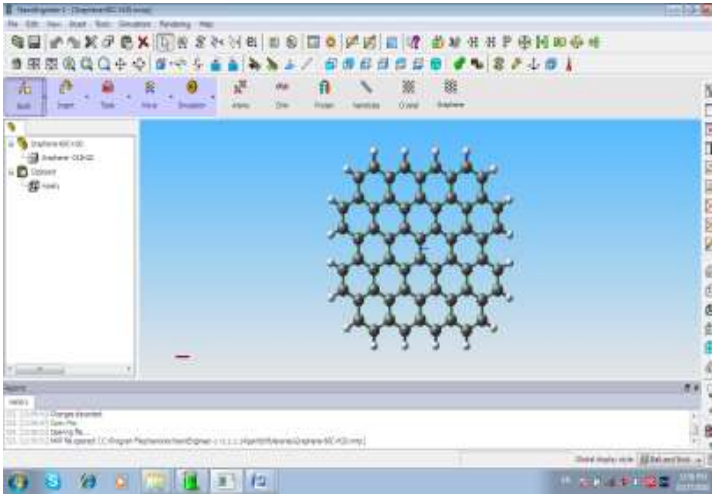
Hesablama modelləşdirmədə istifadə olunan müasir proqramlardan biri HyperChem (demo versiyası istifadə olunur) proqramıdır, bu Şəkil 7.1-də göstərilmişdir. Proqramın sadə grafiki interfeysə malik olması, onun geniş miqyasda istifadə olunmasına imkan verir. Proqramdan istifadə edərək müxtəlif nanoquruluşlu obyektləri qurmaq və proqramın köməyi ilə enerjinin minimumluq şərtinə görə real obyektin modelini yaratmaq olar. Məsələn karbon atomlarından təşkil olunmuş qrafenin HyperChem proqramı vasitəsi ilə qurulmuş visual modelləri aşağıdakı kimidir:



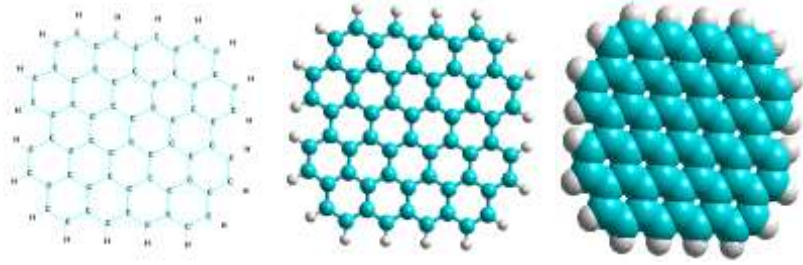
Şəkil 7.1. HeperChem proqramında füllerenin modeli



Şekil 7.2. Nanoborunun viziual modeli



Şekil 7.3. Qrafenin viziual modeli



Şəkil 7.4. Qrafenin modelləri

Hal-hazırda müxtəlif üsullarla nanoobyektləri öyrənmək olar. Məsələn, molekulyar dinamika metodu imkan verir ki, nanoquruluşlu obyektı “qızdırmaq”, elektromaqnit sahəsi ilə təsir edərək obyektin dinamikasına baxmaq olar. Məsələn C_{60} fülleren nanoquluşunun müxtəlif temperaturda zamandan asılı olaraq tədqiqi aşağıdakı nəticələri verir:

1. 0-dan başlayar 0.001 addımı ilə 1ps qədər zaman müddətində temperaturun $T=10K$ qiymətində aparılmış kompüter hesablaması nəticəsində müəyyən olunur ki, C_{60} fülleren daxil olan karbon atomlarının həyəcanlanması baş verdiyinə baxmayaraq, öz stabil formasını saxlayaraq və heç bir fırlanma hərəkəti müşahidə olunmur.

2. 0-dan başlayar 0.001 addımı ilə 1ps qədər zaman müddətində temperaturun $T=300K$ qiymətində aparılmış kompüter hesablaması nəticəsində müəyyən olunur ki, karbon atomlarının həyəcanlanması baş verir, öz stabil formasını saxlayaraq və saat əqrəbinin əksi istiqamətində fırlanma hərəkəti müşahidə olunur.

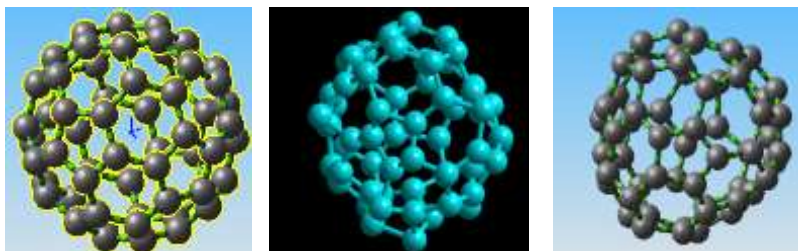
3. 0-dan başlayar 0.001 addımı ilə 1ps qədər zaman müddətində temperaturun $T=300K$ qiymətindən böyük qiymətlərdə aparılmış kompüter hesablamaları nəticəsində aşağıdakılar müəyyən olunur:

$T=1000K$ füllerenə daxil olan karbon atomları həyəcanlanmasının mütəhərrikliliyi artır, səthin deformasiya olumasına baxmayaraq, bu nanoquruluş öz stabil formasını

saxlayaraq və saat əqrəbinin əksi istiqamətində fırlanma müşahidə olunur.

$T=2000K$ fülleren nanoquruluşuna daxil olan karbon atomları temperaturun artması nəticəsində atomların həyəcanlanması mütəhərriqliyi daha artmış olur, səthin deformasiya olunması aydın hiss olunmaqla, bu nanoquruluş öz stabil formasını saxlayaraq və saat əqrəbinin əksi istiqamətində fırlanma müşahidə olunur.

4.Temperaturun daha yüksək $T=6000K$ qiymətində HyperChem və NanoEngineer-1 proqramları ilə aparılmış hesablamalar(Şəkil 7.5) təsdiq edir ki, C_{60} fülleren yüksək temperatura davamlı olduğunu göstərir.



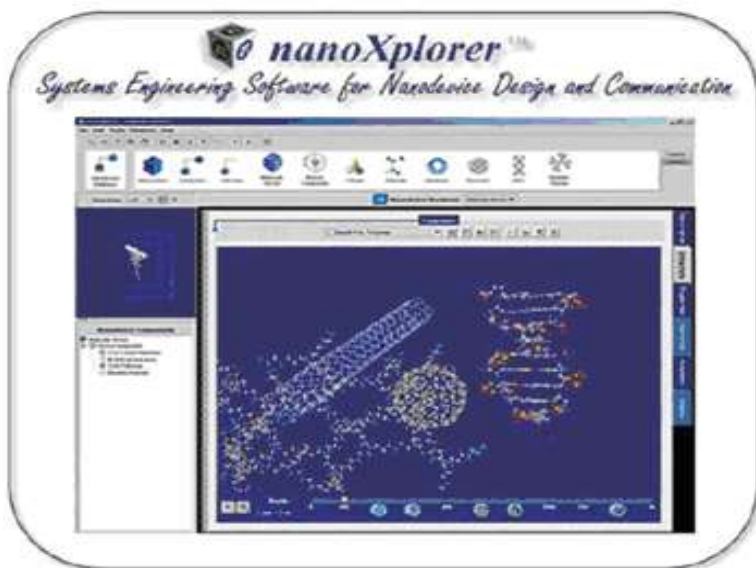
Şəkil 7.5. Hesablamaların nəticələri(HyperChem və Nanoengineer-1)

5.Temperaturun daha yüksək $T=50000K$ qiymətində HyperChem və NanoEngineer-1 proqramları ilə aparılmış hesablamalar(Şəkil 7.5) təsdiq edir ki, C_{60} füllerenin quruluşunun dağılması müşahidə olunur.

Mühəndis modelləşdirməsi

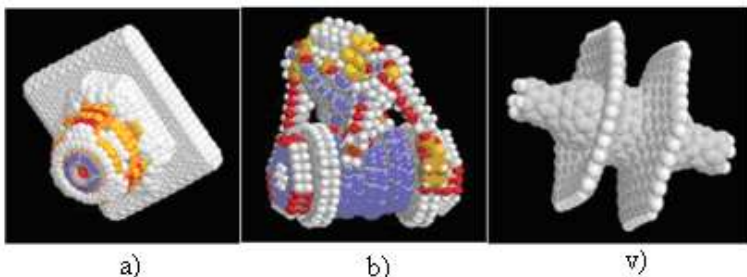
Nanoobyekti yaratmaq və sonra isə müxtəlif testlər əsasında təcrübə işində mühəndis nanotexnoloqa kömək edən müxtəlif proqramlar vardır. NanoTitan kompaniyası nanoquruluşları təsvir etmək üçün iyerarxiv nanoML dilini hazırlamışdır(XML dili əsasında). Bunun köməyi ilə nanoobyektin molekulyar səviyyədə təsvir etmək, həmçinin

onun əsas elektrik, optik və maqnit fiziki xassələrini və tətbiqi haqqında informasiya əldə etmək olar. Nanoqurğuların modeli ayrı-ayrı nanosistem və molekulyar maşınlar vasitəsilə təsvir olunur və bu öz növbəsində molekullar yığımına, nanoborulara çevrilir. nanoML dilində işləməyi asanlaşdırmaq üçün NanoXplorer proqramı yaradılmışdır. Bu proqram müxtəlif nanoqurğular yaratmağa imkan verir. Nanoqurğuları proyektləşdirmək bu proqramda digər proqramlardan daha sadə olub, işləmək çox asandır. NanoXplorer proqramının ümumi görünüşü aşağıdakı kimidir:



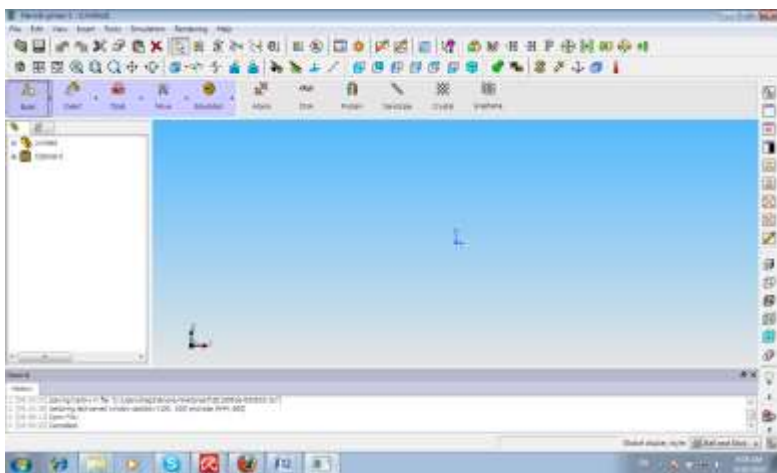
Şəkil 7.6. NanoXplorer proqramı

NanoXplorer proqramının köməyi ilə çoxlu sayda müxtəlif və çoxfunksiyalı nanosistemlər hazırlanmışdır (Şəkil 7.7.-ə bax):



Şəkil 7.7. Nanosistemlərin modelləri. a) Ne atomları üçün nanonəso, b) nanomanipulyator, v) karbon atomlarından ibarət nanopodşibnik

NanoEngineer-1 proqramı müasir dövrdə daha geniş tətbiq olunan proqramlardan biridir. Bu proqramın ümumi görünüşü Şəkil 7.8 –də verilmişdir.

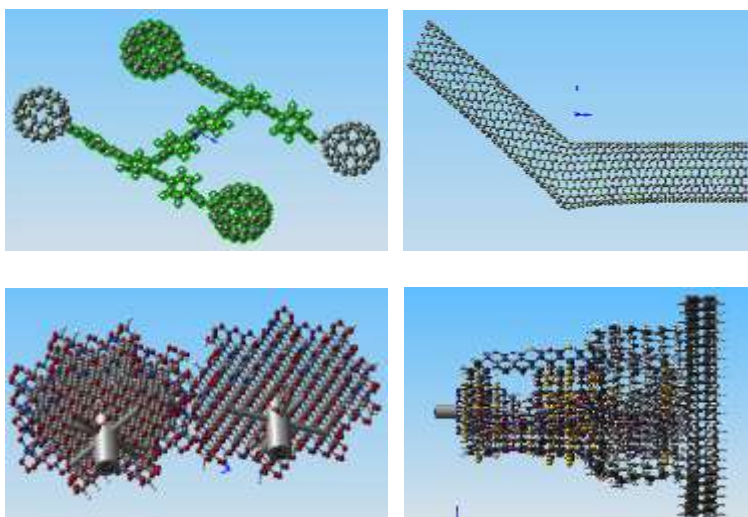


Şəkil 7.8. NanoEngineer-1 proqramı

Molkulyar dinamika metoduna əsaslanan proqram olub nanoobyektlərin qurulması və tədqiqi üçün əvəzsiz bir vasitədir. Bunun köməyi ilə nanoölçülü obyektləri yaratmaq və tədqiqi etmək olar. Artıq yüzlərlə nanoölçülü obyektlər yaradılmışdır və təhsil və elmin müxtəlif sahələrində istifadə olunur. Biokimyə, fülleren, nanoavtomobil, nanoboru,

nanonasos, nanomexanizmlər, orqanik kimya, funksional qrup, və s. kimi (Bearings, biochemistry, bushings, casings, couplings, fullerenes, functional groups, gears, moieties, nanocars, nanokids, nanotubes, neon pump, organic chemistry) oyektlər artıq qurulmuşdur və tədqiq olunur.

Hal-hazırda nanoquruluşların modelləşdirilməsi kompüterlərin imkanlarından çox asılıdır. Kompüter nə qədər sürətli məhsuldar işləyərsə, onda onun üçün hazırlanmış proqram vasitəsilə daha mürəkkəb nanosistemləri proyektləşdirmək olar (Şəkil 7.9).

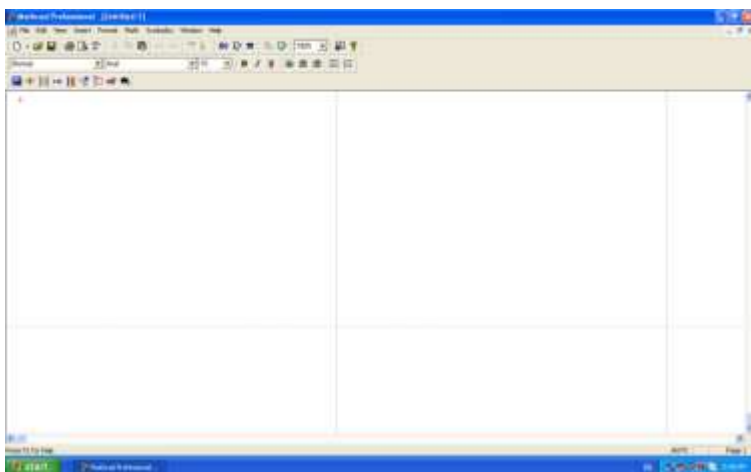


Şəkil 7.9. Nanoavtomobil, nanoboru, nanomexanizm və nanonasos

Hal hazırda bir neçə atomdan ibarət nanoquruluşu tədqiq etmək üçün kompüter vasitəsi ilə çoxlu sayda əməliyyat aparılması tələb olunur. Məhz buna görə də yüksək məhsuldar kvant kompüterlərin yaradılmasına zərurət yaranır. Bu yaxın gələcəyin işidir. İlk kvant kompüterlərin yaradılması 2034 ilə proqnoz edilir.

8. Mathcad proqramı

Nanosistemlərin öyrənilməsi zamanı müxtəlif kəmiyyətlərin ədədi qiymətlərinin kompüterdə hesablanması və qrafiklərinin qurulması bəzi hallarda zəruridir. Bunun üçün müxtəlif proqram paketlərindən istifadə oluna bilər. Belə proqramlardan biri ümumi riyazi Mathcad proqramıdır. Proqramın ümumi görünüşü aşağıdakı kimidir:



Şəkil 8.1. Mathcad Proqramı

Mathcad proqramının pəncərəsi başlıq, menyü,- File - Fayl, Edit - Düzəliş, View - Görünüş, Insert - Əlavə Et, Format - Format, Math -Riyazi, Symbolics - Simvolik, Window - Pəncərə və Help - Kömək, standart, formalaşdıran, riyazi və xətkəş sətirlərindən, işçi sahədən və vəziyyət sətirindən ibarətdir. Proqramın işçi sahəsinə üfüqi və şaquli elektron səhifələr, üfüqi və şaquli liftlər daxildir. Bu proqram vasitəsilə müxtəlif hesabi və cəbri hesablamalar, ifadələr üzərində əməllər, funksiyaların qiymətlərini hesablamağa, qrafiklərin qurulması və vizualizasiyası; vektor və matrislər üzərində təyin olunmuş əməllərin yerinə yetirilməsi; sadə, qeyri xətti

tənlik və tənliklər sistemini həll etmək, funksiyaların ixtiyari tərtibdən törəmələrinin tapılması, müəyyən və qeyri müəyyən inteqralların hesablanması, diferensial tənliklərin həlli, funksiyalar və xüsusi funksiyalar yığımı, proqramlaşdırma dilinin operatorları, simvolik ifadələrin sadələşdirilməsi və zəruri əməllərin yerinə yetirilməsi və i.a. imkanlarına malik olub və kalkulyator, qrafik qurma, vektor və matris, təyinetmə, hesablama, məntiqi, proqramlaşdırma, yunan simvolları və simvolik hesablama alətləri vardır(Şəkil 8.2.).

İşləmək üçün proqramı başlatmaq lazımdır. Yeni sənədi yaratmaq üçün isə File→New əmrindən istifadə olunur. İşçi sahə hissəsində kursurun işarəsi(qırmızı rəngli) “ + ” formasındadır. Konkret olaraq aşağıdakı məsələyə baxaq və bu riyazi proqramın imkanlarından istifadə edərək onu həll edək.

Atom-quvvə mikrospunda skanedicinin məxsusi rezonans tezliyini qiymətləndirilməsi

Bunun üçün bir tərəfi möhkəm bərkidilmiş çubuğun X, Z müstəvisində eninə rəqslərinin əsas harmonik tezliyinin ifadəsindən istifadə edilir:

$$\omega = \frac{1}{2\pi} \frac{(1,875)^2}{\ell^2} \sqrt{\frac{EI_Y}{m}}$$

burada $I_Y(z)$ - z oxuna nəzərən uzununa ətalət momenti, ℓ - uzunluq, m-kütlə, $E = c^2 \rho$ -Yung modulu, c – pyezomaterialda səsin sürəti, ρ -pyezokeramikanın sıxlığıdır. Uzunluğu - ℓ , radiusu - R və divarının qalınlığı - h olan içi boş silindir üçün ətalət momenti

$$I_Y(R) = \frac{\pi R^4}{2} \left[1 - \left(\frac{R-h}{R} \right)^4 \right]$$

düsturu vasitəsilə hesablanır. $\ell = 30$ mm, $h = 1$ mm, $m=10q$, $R = 6$ mm, $c = 3,3 \cdot 10^3$ m/san, $\rho = 7q/\text{sm}^2$ qiymətləri üçün ω

hesablayaq. Mathcad program paketindən istifadə etdikdə ilk növbədə verilənləri, ifadələri və sonra funksiyalar təyin etmək lazımdır. Bunun üçün adlanmanı yazıb təyin etmə “ := ” işarəsindən istifadə etmək lazımdır. Müəyyən hesablamaları aparmaq üçün isə “ = ” Bunları Mathcad programında aşağıdakı kimi yerinə yetirmək olar:



Şəkil 8.2. Programın alətləri

$$l := 30 \cdot 10^{-3} \qquad m := 10 \cdot 10^{-3} \qquad h := 1 \cdot 10^{-3}$$

$$R := 6 \cdot 10^{-3} \qquad c := 3.3 \cdot 10^3 \qquad \rho := 70$$

$$E := c^2 \cdot \rho \qquad I_y(R) := \frac{\pi R^4}{2} \cdot \left[1 - \left(\frac{R-h}{R} \right)^4 \right]$$

$$E = 7.623 \times 10^8 \qquad I_y(R) = 1.571 \times 10^{-12}$$

$$R = 0.006$$

$$\omega(R) := \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{(1.875)^2}{l^2} \cdot \sqrt{E \cdot \frac{I_y(R)}{m}} \qquad \omega(R) = 215.131$$

$$R := 0.001, 0.001 + 0.1 .. 10$$

Qiymətlərində $\omega(R)$ və $I_y(R)$ kəmiyyətlərinin qrafiklərini qurmaq üçün aşağıdakı əmrlərdən istifadə olunur:

Insert → **X-Y Plot**

$\omega(R)$



R

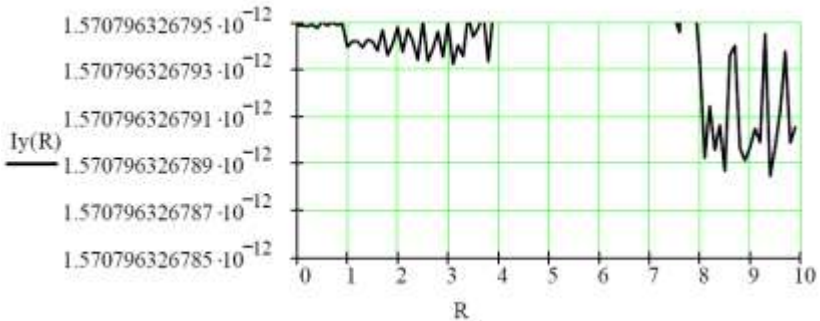
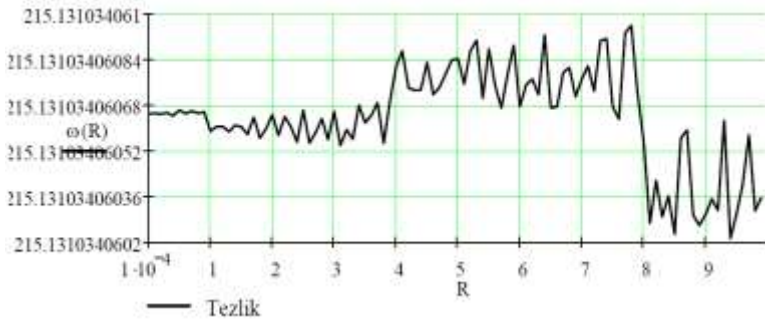
Insert → **X-Y Plot**

$I_y(R)$



R

Grafiklərin bizə lazım olan formada alınması üçün uyğun qrafik seçilir və sonra **Format** → **Graph** → **X-Y Plot** əmrindən istifadə etmək lazımdır. Nəticədə aşağıdakı qrafiklər alınır:



AQM-də atomlararası qarşılıqlı təsir qüvvəsinin qiymətlərinin kompüterdə hesablanması və qrafik qurulması

AQM-də atomlar arası F qarşılıqlı təsir qüvvəsinin atomlar arasındakı R məsafəsindən asılılığı

$$F(R) = -\frac{6A}{R^m} + \frac{12B}{R^n}$$

kimidir. Burada A , B Leonard-Conson sabitləridir və m və n - qüvvət göstəriciləri atomların və kimyəvi rabitələrin növündən asılıdır. Van-der-Vaals cazibə qüvvələri üçün $m=7$, üçün $n \approx 13$:

$$A := 96 \cdot 10^{-79}$$

$$B := 10^{-134}$$

$$R := 0.001 \cdot 10^{-9}, 0.001 \cdot 10^{-9} + 0.01 \cdot 10^{-9} .. 100 \cdot 10^{-9}$$

$$F(R) := \frac{-6 \cdot A}{R^7} + \frac{12 \cdot B}{R^{13}}$$

R =

0.000000000001
0.000000000011
0.000000000021
0.000000000031
0.000000000041
0.000000000051
0.000000000061
0.000000000071
0.000000000081
0.000000000091
0.00000000101
0.00000000111
0.00000000121
0.00000000131
0.00000000141
0.00000000151

F(R) =

1.2 · 10 ²³
3.47597255388446 · 10 ⁹
7.76837884003658 · 10 ⁵
4.91449662541826 · 10 ³
1.29714975653745 · 10 ²
7.59915474988612 · 10 ⁰
7.41109961446468 · 10 ⁻¹
1.02990225232947 · 10 ⁻¹
1.85702230858212 · 10 ⁻²
4.08813050176079 · 10 ⁻³
1.0538578735274 · 10 ⁻³
3.08739671364755 · 10 ⁻⁴
1.00534864663408 · 10 ⁻⁴
3.57766421475515 · 10 ⁻⁶
1.37306654334876 · 10 ⁻⁶
5.6234494032566 · 10 ⁻⁶

$$a := 0.001 \cdot 10^{-9}$$

$$h := 0.01 \cdot 10^{-9}$$

$$b := 100 \cdot 10^{-9}$$

$$N := \frac{b-a}{h}$$

$$i := 0 .. N-1$$

$$x_i := a + h \cdot i$$

$x =$

	0
0	0.000000000001
1	0.000000000011
2	0.000000000021
3	0.000000000031
4	0.000000000041
5	0.000000000051
6	0.000000000061
7	0.000000000071
8	0.000000000081
9	0.000000000091
10	0.000000000101
11	0.000000000111
12	0.000000000121
13	0.000000000131
14	0.000000000141
15	0.000000000151

$F(x_i) =$

	$1.2 \cdot 10^{23}$
	3475972553.88446
	776837.884003658
	4914.49662541826
	129.714975653744
	7.5991547498861
	0.74110996144647
	0.102990225232947
	0.018570223085821
	0.004088130501761
	0.001053857873527
	0.000308739671365
	0.000100534864663
	0.000035776642148
	0.000013730665433
	0.000005623449403

$$y_i := x_i \cdot 10^9$$

$$F2_i := 10^9 \cdot F(x_i)$$

$y =$

	0
0	0.001
1	0.011
2	0.021
3	0.031
4	0.041
5	0.051
6	0.061
7	0.071
8	0.081
9	0.091
10	0.101
11	0.111
12	0.121
13	0.131
14	0.141
15	0.151

$F2 =$

	0
0	$1.2 \cdot 10^{32}$
1	$3.47597255388446 \cdot 10^{18}$
2	776837884003658
3	4914496625418.26
4	129714975653.744
5	7599154749.8861
6	741109961.44647
7	102990225.232947
8	18570223.0858212
9	4088130.5017608
10	1053857.8735274
11	308739.671364756
12	100534.864663408
13	35776.6421475515
14	13730.6654334876
15	5623.44940325659



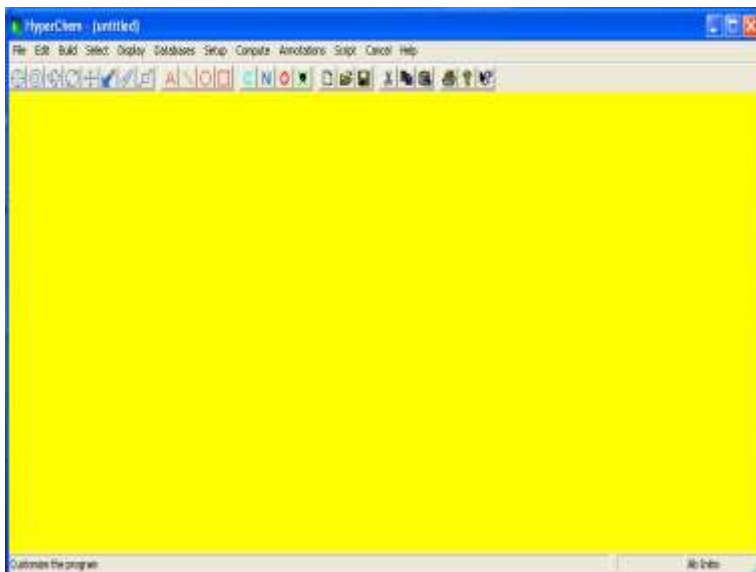
Şəkil 8.2. Atomlar aras^y qarşılıqlı təsir F qüvvəsinin atomlar aras^y R məsafəsindən asılılıq qrafiki

9. HyperChem proqramı

Məlumdur ki, müasir dövrdə qeyri empirik kvantmexaniki, yarım-empirik, molekulyar dinamika və s. metodları mürəkkəb nanosistemlərin elektron və atom quruluşlarının riyazi modelləşdirilməsində geniş tətbiq olunmaq imkanına malikdir. Bu imkanlar uyğun proqram paketlərinin olması və texnoloji inkişafı ilə əlaqədardır.

Hal-hazırda qeyri empirik kvantmexaniki, sıxlıq funksionalı nəzəiyyəsi, yarım-empirik, molekulyar dinamika və s. metodlarını realizasiya edən kifayət qədər çoxlu sayda müasir kompüter proqramları hazırlanıb və istifadə olunur. Modelləşdirmə üçün elm və təhsildə istifadə olunan HyperChem və NanoEngineer-1 proqramları daha münasibdir.

HyperChem istifadə üçün münasib, əlverişli və sadədir. Proqramın ümumi görünüşü aşağıdakı kimidir:



Şəkil 9.1. HeperChem proqramı

HyperChem proqramının pəncərəsinə aşağıdakı menyü, alətlər, işçi sahə və vəziyyət sətiri daxildir. Proqramın menyusuna daxildir:

File	Edit	Build	Select	Display	Databases	Setup	Compute	Annotations	Script	Cancel	Help
File											
Edit											
Build											
Select											
Display											
Database											
Setup											
Compute											
Annotations											
Script											
Cancel											

Help

Kömək

Alətlər panelinə daxildir.



- Obyektin quruluşunu çəkmə



- Seç



- Obyekti ixtiyarı istiqamətdə fırlatma



- Görünüş üzrə fırlatma



- yerini dəyişmə



- Z-çevirmə



- Modelin Şəklin böyüdülməsi və kiçildilməsi



- Kəsmə



- Izahvermə mətni



- xətt çək



- çevrə çək



- düzbucaqlı çək



- karbon atomunu qur



- Azot atomunu qur

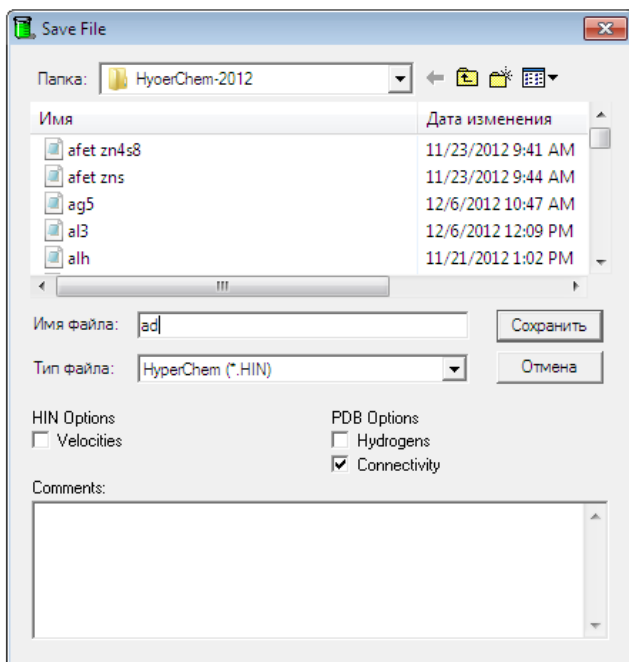


- Oksigen atomunu qur

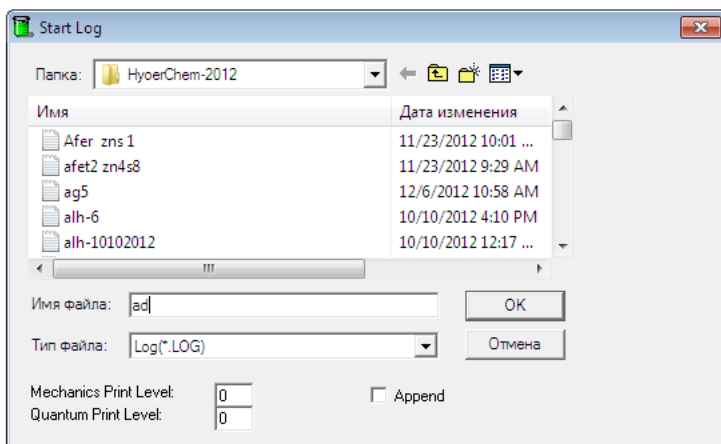


- Obyektin yaradılmasına kömək et və s.

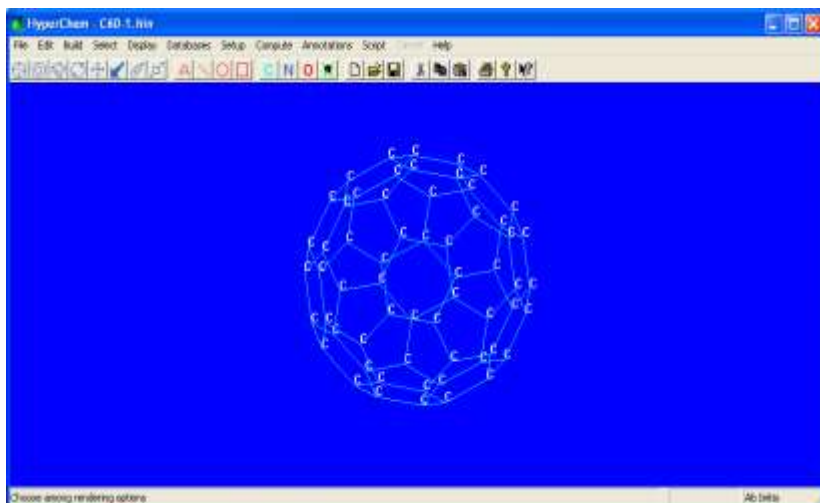
Yeni obyektin tədqiqi üçün yeni obyektin və quruluş ad.hin faylının yaradılması başlanır. Bunun üçün zəruri alətlər və uyğun əmrləri seçməklə **File**→Save As yerinə yetirilir:



Hesablamların nəticəsini saxlamaq üçün **File**→Start Log əmri ilə ad.log faylı yaradılır:



Məsələn C_{60} fülleren üçün qurulmuş vizual model aşağıdakı kimidir:



Şəkil 9.2. Füllerenin vizual modeli

Fülleren üçün quruluş və kompüterdə aparılmış hesablamanın nəticəsi fayllarının məzmunu aşağıdakı kimidir:

Buckminsterfullerene

forcefield mm+

sys 0 0 1

view 40 0.16312 55 15 1 0 0 0 1 0 0 0 1 5.2851 -6.5255 -53.282

seed -1111

mol 1

atom 1 - C CA - 0 -6.498399 5.824873 1.456922 3 2 a 6 a 7 a
atom 2 - C CA - 0 -6.498399 7.225 1.456922 3 1 a 3 a 9 a
atom 3 - C CA - 0 -5.285984 7.924989 1.456922 3 2 a 4 a 11 a
atom 4 - C CA - 0 -4.073571 7.225002 1.456922 3 3 a 5 a 12 a
atom 5 - C CA - 0 -4.073571 5.824977 1.456922 3 4 a 6 a 15 a
atom 6 - C CA - 0 -5.285718 5.124731 1.456922 3 5 a 1 a 17 a
atom 7 - C CA - 0 -7.556101 5.392268 0.6482528 3 1 a 8 a 19 a
atom 8 - C CA - 0 -8.209916 6.525048 0.1483769 3 7 a 9 a 20 a
atom 9 - C CA - 0 -7.55669 7.657858 0.6487809 3 8 a 2 a 10 a
atom 10 - C CA - 0 -7.40211 8.790651 -0.1597567 3 9 a 59 a 57 a
atom 11 - C CA - 0 -5.131682 9.057729 0.6487823 3 3 a 29 a 59 a
atom 12 - C CA - 0 -3.16986 7.92495 0.6487833 3 4 a 13 a 29 a
atom 13 - C CA - 0 -2.266209 7.224931 -0.1594827 3 12 a 14 a 39 a
atom 14 - C CA - 0 -2.265947 5.825442 -0.1589145 3 13 a 15 a 28 a
atom 15 - C CA - 0 -3.169365 5.124714 0.6492094 3 14 a 5 a 16 a
atom 16 - C CA - 0 -3.823216 3.992284 0.1490938 3 15 a 17 a 26 a
atom 17 - C CA - 0 -5.131246 3.992251 0.648391 3 16 a 6 a 18 a
atom 18 - C CA - 0 -6.189142 3.559773 -0.1599417 3 17 a 19 a 24 a
atom 19 - C CA - 0 -7.400437 4.260026 -0.1603605 3 18 a 7 a 22 a
atom 20 - C CA - 0 -8.708728 6.525345 -1.159735 3 8 a 21 a 56 a
atom 21 - C CA - 0 -8.552192 5.393007 -1.968461 3 20 a 22 a 54 a
atom 22 - C CA - 0 -7.89917 4.260137 -1.468407 3 21 a 19 a 23 a
atom 23 - C CA - 0 -6.996901 3.559793 -2.276227 3 22 a 24 a 52 a
atom 24 - C CA - 0 -5.938855 3.127534 -1.46781 3 23 a 18 a 25 a
atom 25 - C CA - 0 -4.63133 3.128472 -1.967978 3 24 a 26 a 50 a
atom 26 - C CA - 0 -3.573205 3.560246 -1.159036 3 25 a 16 a 27 a
atom 27 - C CA - 0 -2.669563 4.260638 -1.96654 3 26 a 28 a 49 a
atom 28 - C CA - 0 -2.015668 5.393104 -1.466823 3 27 a 14 a 38 a
atom 29 - C CA - 0 -3.82369 9.057609 0.1492508 3 12 a 11 a 58 a
atom 30 - C CA - 0 -3.016556 7.65849 -4.083593 3 31 a 37 a 60 a
atom 31 - C CA - 0 -3.169521 8.790795 -3.274694 3 30 a 32 a 40 a
atom 32 - C CA - 0 -4.382048 9.490908 -3.27458 3 31 a 33 a 41 a
atom 33 - C CA - 0 -5.439931 9.05876 -4.083293 3 32 a 34 a 44 a
atom 34 - C CA - 0 -5.285638 7.926226 -4.891682 3 33 a 46 a 60 a
atom 35 - C CA - 0 -4.073934 5.82418 -4.888375 3 36 a 48 a 60 a
atom 36 - C CA - 0 -3.014586 5.392603 -4.080077 3 35 a 37 a 49 a

atom 37 - C CA - 0 -2.361061 6.526279 -3.582672 3 36 a 30 a 38 a
atom 38 - C CA - 0 -1.861402 6.525997 -2.274928 3 37 a 39 a 28 a
atom 39 - C CA - 0 -2.015903 7.657043 -1.467295 3 38 a 40 a 13 a
atom 40 - C CA - 0 -2.669398 8.789721 -1.967451 3 39 a 31 a 58 a
atom 41 - C CA - 0 -4.631764 9.923402 -1.966688 3 32 a 42 a 58 a
atom 42 - C CA - 0 -5.939673 9.923384 -1.467377 3 41 a 43 a 59 a
atom 43 - C CA - 0 -6.997645 9.491331 -2.276044 3 42 a 44 a 57 a
atom 44 - C CA - 0 -6.747631 9.058806 -3.583976 3 43 a 33 a 45 a
atom 45 - C CA - 0 -7.401521 7.926177 -4.083572 3 44 a 46 a 55 a
atom 46 - C CA - 0 -6.49818 7.226572 -4.892095 3 45 a 34 a 47 a
atom 47 - C CA - 0 -6.498534 5.826574 -4.89241 3 46 a 48 a 53 a
atom 48 - C CA - 0 -5.28621 5.12623 -4.892313 3 47 a 35 a 51 a
atom 49 - C CA - 0 -3.169215 4.260895 -3.274442 3 36 a 50 a 27 a
atom 50 - C CA - 0 -4.380914 3.561636 -3.27556 3 49 a 51 a 25 a
atom 51 - C CA - 0 -5.438423 3.994909 -4.084282 3 50 a 48 a 52 a
atom 52 - C CA - 0 -6.747067 3.992651 -3.583865 3 51 a 53 a 23 a
atom 53 - C CA - 0 -7.400079 5.12611 -4.082838 3 52 a 47 a 54 a
atom 54 - C CA - 0 -8.301808 5.82504 -3.276317 3 53 a 55 a 21 a
atom 55 - C CA - 0 -8.303344 7.224985 -3.277224 3 54 a 45 a 56 a
atom 56 - C CA - 0 -8.554997 7.657999 -1.967513 3 55 a 57 a 20 a
atom 57 - C CA - 0 -7.901526 8.790824 -1.467764 3 56 a 43 a 10 a
atom 58 - C CA - 0 -3.57379 9.490428 -1.158413 3 41 a 40 a 29 a
atom 59 - C CA - 0 -6.18965 9.490567 -0.1595198 3 11 a 10 a 42 a
atom 60 - C CA - 0 -4.074866 7.224085 -4.890329 3 35 a 30 a 34 a
endmol 1

Tam Enerji = -1717.565825662 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi = 2383.910771700 (a.v.)
Virial şərti (-V/T) = 1.7205

Orbital enerjilər(eV)

-489.420960 -489.397844 -489.354956 -489.329238 -482.623335
-482.565757 -482.531577 -482.520222 -453.461513 -453.415443
-453.392385 -453.347916 -411.462188 -411.408046 -411.315966
-411.282961 -410.058880 -410.031232 -410.018099 -409.946036
-409.930134 -409.924881 -409.920772 -409.831697 -356.153536
-356.078856 -356.048041 -355.989898 -315.932551 -315.816149
-315.639287 -315.534450 -228.045546 -228.007328 -227.846472
-227.833543 -177.271542 -177.261645 -177.207231 -177.197024
-177.178306 -177.168202 -177.112595 -177.099820 -176.443459
-176.353124 -173.628539 -173.574357 -168.553322 -168.494544
-168.453904 -168.428794 -166.129135 -166.055339 -155.849126

-155.806598 -153.974916 -153.905949 -150.615593 -150.553592
 -150.548975 -150.542294 -147.240222 -147.179471 -147.168730
 -147.112090 -144.435983 -144.395527 -142.103427 -142.042111
 -138.305531 -138.262739 -137.909325 -137.849423 -136.057896
 -136.014048 -134.782790 -134.740388 -133.185699 -133.159785
 -130.160708 -130.125124 -130.021428 -130.004327 -125.460862
 -125.380570 -125.365690 -125.353251 -116.776314 -116.677593
 -114.786586 -114.769914 -114.543704 -114.538733 -111.309235
 -111.268781 -111.118161 -111.103604 -110.575707 -110.569066
 -110.156726 -110.148955 -106.709876 -106.684046 -106.626220
 -106.607746 -105.138044 -105.092680 -102.491552 -102.412041
 -95.648596 -95.640149 -95.237438 -95.224326 -94.341849
 -94.325246 -94.316145 -94.238700 -77.469197 -77.372956
 -75.935509 -75.832406 -74.811896 -74.793457 -74.746270
 -74.703102 -74.363621 -74.337370 -74.205726 -74.165766
 -70.698386 -70.589284 -68.984709 -68.976537 -68.770810
 -68.732401 -68.592291 -68.540648 -66.918543 -66.809324
 -65.113829 -65.062462 -64.798318 -64.740880 -57.924687
 -57.868761 -57.243666 -57.185100 -51.113641 -51.008489
 -50.982819 -50.872866 -49.254273 -49.148225 -45.918109
 -45.905972 -41.523921 -41.487223 -41.396137 -41.347877
 -41.280210 -41.270544 -37.629943 -37.570766 -33.087320
 -33.031304 -31.281868 -31.221584 -29.925127 -29.851421
 -19.221420 -19.205104 -18.388631 -18.332475 -17.182428
 -17.130995 -13.803329 -13.778845 -5.517811 -5.479003
 -4.905409 -4.873748 0.380628 0.382724 6.550377
 6.587682 14.444077 14.446076 19.539840 19.563265
 20.062390 20.081202 34.185901 34.197860 34.739153
 34.754308 36.944208 36.972329 42.139477 42.217700
 43.296227 43.371994 47.926602 48.115028 48.287557
 48.577867 49.194478 49.308103 56.988770 57.124396
 57.318122 57.441852 59.516137 59.683994 60.388935
 60.543195 68.951863 68.972993 70.756415 70.817500
 72.616923 72.672236 76.004139 76.021345 77.434194
 77.490896 78.853544 78.867100 82.806083 82.857593
 84.328169 84.355106 85.014465 85.045269 88.576102
 88.585565 92.696711 92.729807 95.427274 95.463128
 102.556797 102.597294 103.984692 104.026705 104.532058
 104.542681 112.001568 112.059399 112.069788 112.097670
 118.882666 118.912150 118.945807 118.974773 120.256529
 120.276598 121.265248 121.335412 122.745985 122.793195
 129.220650 129.283607 130.219126 130.275514 132.261265

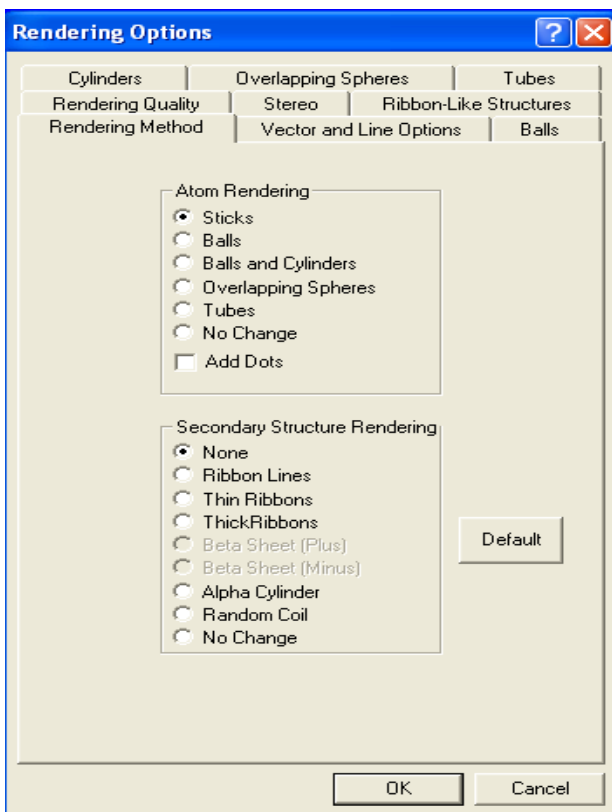
132.282153	141.908078	141.961043	143.066554	143.102452
143.353077	143.381998	145.678386	145.706486	146.192763
146.206085	152.363840	152.386652	154.379900	154.395920
157.724837	157.753755	160.489893	160.493994	161.221504
161.243740	166.578025	166.585939	172.399116	172.401902
174.491362	174.517412	177.271552	177.311572	194.438205
194.440476	200.044387	200.063058	202.170049	202.195526

ATOMLARIN YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstrem)			Kütləsi
			x	y	z	
1	6	-3.683385	-6.49839939	5.82487252	1.45692183	12.01100
2	6	4.305109	-6.49839939	7.22500032	1.45692183	12.01100
3	6	4.390723	-5.28598391	7.92498873	1.45692183	12.01100
4	6	-4.391246	-4.07357105	7.22500183	1.45692183	12.01100
5	6	-3.998154	-4.07357105	5.82497738	1.45692183	12.01100
6	6	-3.992729	-5.28571834	5.12473079	1.45692183	12.01100
7	6	-0.491117	-7.55610113	5.39226803	0.64825289	12.01100
8	6	4.184122	-8.20991578	6.52504749	0.14837700	12.01100
9	6	3.996987	-7.55669035	7.65785795	0.64878102	12.01100
10	6	3.996601	-7.40210973	8.79065065	-0.15975657	12.01100
11	6	3.997490	-5.13168167	9.05772943	0.64878237	12.01100
12	6	-4.391257	-3.16985968	7.92494990	0.64878344	12.01100
13	6	-3.998154	-2.26620941	7.22493099	-0.15948256	12.01100
14	6	-3.998316	-2.26594656	5.82544241	-0.15891439	12.01100
15	6	-3.998318	-3.16936533	5.12471419	0.64920954	12.01100
16	6	-4.387869	-3.82321558	3.99228422	0.14909391	12.01100
17	6	-4.298631	-5.13124611	3.99225060	0.64839108	12.01100
18	6	4.174134	-6.18914161	3.55977248	-0.15994154	12.01100
19	6	-0.525233	-7.40043732	4.26002630	-0.16036037	12.01100
20	6	-4.299365	-8.70872824	6.52534496	-1.15973485	12.01100
21	6	-3.992659	-8.55219166	5.39300712	-1.96846050	12.01100
22	6	-3.678335	-7.89916959	4.26013649	-1.46840663	12.01100
23	6	4.305527	-6.99690104	3.55979296	-2.27622640	12.01100
24	6	3.996946	-5.93885480	3.12753411	-1.46780973	12.01100
25	6	3.996592	-4.63132970	3.12847229	-1.96797802	12.01100
26	6	4.390273	-3.57320549	3.56024610	-1.15903618	12.01100
27	6	4.390499	-2.66956285	4.26063753	-1.96654012	12.01100
28	6	-4.388093	-2.01566758	5.39310446	-1.46682315	12.01100
29	6	4.390739	-3.82369049	9.05760934	0.14925092	12.01100
30	6	-0.530686	-3.01655620	7.65849013	-4.08359257	12.01100
31	6	-0.480907	-3.16952148	8.79079468	-3.27469406	12.01100
32	6	4.179041	-4.38204831	9.49090795	-3.27458027	12.01100
33	6	-4.299420	-5.43993067	9.05875955	-4.08329304	12.01100
34	6	-3.992707	-5.28563803	7.92622582	-4.89168237	12.01100
35	6	4.305832	-4.07393428	5.82417959	-4.88837485	12.01100

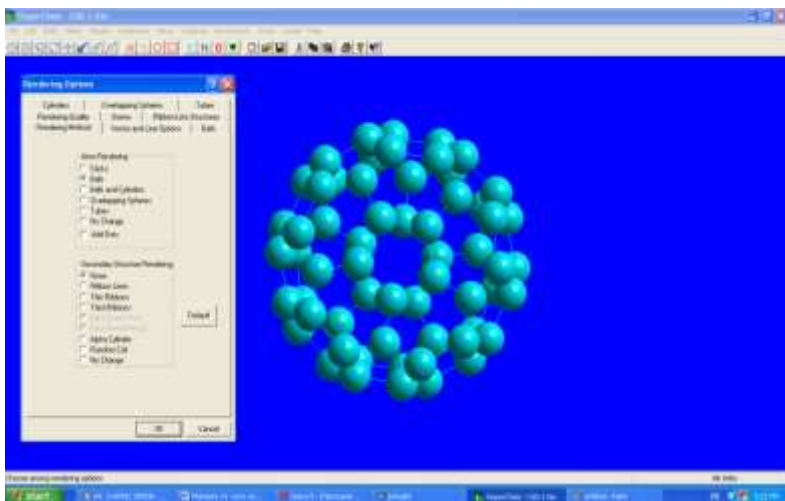
36	6	3.997005	-3.01458585	5.39260249	-4.08007703	12.01100
37	6	4.178939	-2.36106060	6.52627885	-3.58267161	12.01100
38	6	-4.298874	-1.86140182	6.52599739	-2.27492792	12.01100
39	6	-3.992661	-2.01590301	7.65704303	-1.46729506	12.01100
40	6	-3.675965	-2.66939792	8.78972075	-1.96745061	12.01100
41	6	3.996890	-4.63176383	9.92340241	-1.96668795	12.01100
42	6	3.996593	-5.93967305	9.92338401	-1.46737732	12.01100
43	6	4.390348	-6.99764528	9.49133088	-2.27604407	12.01100
44	6	-4.387937	-6.74763125	9.05880547	-3.58397555	12.01100
45	6	-3.998315	-7.40152105	7.92617699	-4.08357195	12.01100
46	6	-3.998152	-6.49818048	7.22657246	-4.89209464	12.01100
47	6	-4.391132	-6.49853409	5.82657373	-4.89240997	12.01100
48	6	4.390672	-5.28621007	5.12622975	-4.89231300	12.01100
49	6	3.996568	-3.16921501	4.26089507	-3.27444216	12.01100
50	6	3.997117	-4.38091445	3.56163564	-3.27555939	12.01100
51	6	3.997500	-5.43842310	3.99490944	-4.08428142	12.01100
52	6	4.390676	-6.74706676	3.99265069	-3.58386487	12.01100
53	6	-4.391301	-7.40007891	5.12611037	-4.08283741	12.01100
54	6	-3.998129	-8.30180773	5.82504041	-3.27631724	12.01100
55	6	-3.998334	-8.30334360	7.22498522	-3.27722413	12.01100
56	6	-4.387863	-8.55499707	7.65799934	-1.96751329	12.01100
57	6	4.390290	-7.90152577	8.79082391	-1.46776347	12.01100
58	6	4.303928	-3.57378986	9.49042844	-1.15841326	12.01100
59	6	3.997121	-6.18964959	9.49056729	-0.15951969	12.01100
60	6	-3.689020	-4.07486610	7.22408466	-4.89032909	12.01100

Obyektlərin quruluşunun ekranda görünüşünün təsvirini dəyişmək üçün (təsvir et) Display →Renderings əmrindən istifadə olunur:




Şəkil 9.3. Görünüş seçimləri

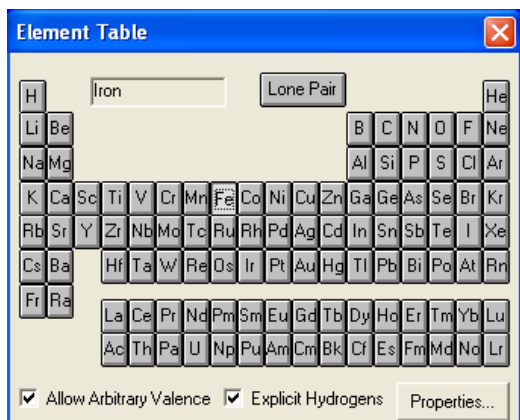
Dialog menyusunda Balls(kürələr) seçməklə fülleren nano quruluşun təsviri aşağıdakı kimi dəyişmiş olar:



Şəkil 9.4. fulleren nano quruluşun kürələr ilə təsviri

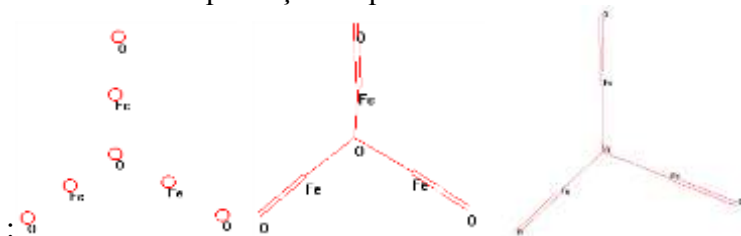
Nanoölçülü obyektlərin qurulması və redaktəsi

Proqramın icra etdikdən sonra onun pəncərəsini tam ekrana böyütmək məqsədəuyğundur. Tam ekran pəncərəsində yeni obyektin qurulması məqsədəuyğundur. Atomların qurulması üçün **Built** → Default elements əmrini və ya  - obyektin quruluşunu çək alətini seçərək yerinə yetirilir. Bu zaman Diaqoq menyusunda D.İ.Mendeleyevin Elements Table - elementlərin dövrü cədvəli görünəcəkdir:



Şəkil 9.5. Elementlərin dövrü cədvəli

Fe_3O_4 hissəciyinin vizual modelini qurmaq üçün Fe və O atomlarını seçərək onları proqramın pəncərəsində qeyd edək, atomların valentliyini nəzərə almaqla onların rabitə xətləri ilə birləşdirək və Build→Model Build əmri ilə etdikdən sonra vizual modeli qurmuş olarıq:



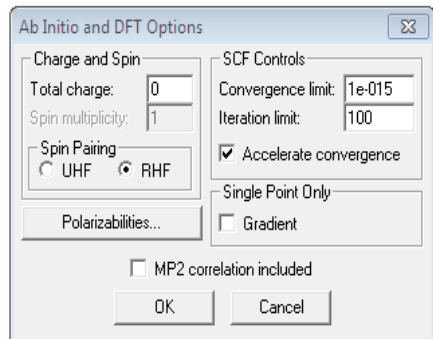
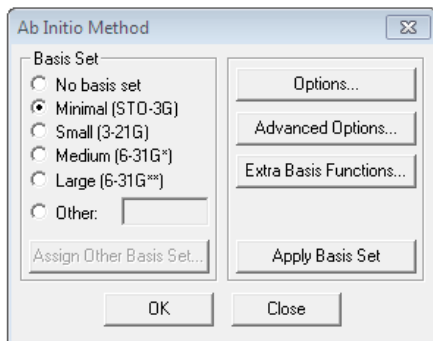
Beləliklə Fe_3O_4 nanohissəciyinin müxtəlif formada aşağıdakı modellərini alarıq:



Şəkil 9.6. Fe_3O_4 nanohissəciyin xətt, küre və silindirlə, kürelərlə vizual modelləri

Fe₃O₄ nanohissəciyin qurulmuş vizual modeli əsasında qeyriempirik metod ilə hesablamanın aparılması ardıcılığı aşağıdakı kimidir:

Setup → Ab Initio əmri ilə qeyriempirik metod seçilir və parametrlər təyin edilir və bu qiymətlər tətbiq edilir.



Hesablmanı **Compute** → Single Point əmri ilə aparılır.

Fe₃O₄ hissəciyin üçün quruluş və hesablamanın nəticə fayllarının məzmunları aşağıdakı kimidir:

forcefield amber

sys 0 0 1

view 40 0.19177 55 15 0.3243609 0.9267363 0.1896042 -0.9304256

0.3487145 -0.1127227 -0.170582 -0.1398498 0.9753686

0.15917 -0.50219 -55.97

seed -1111

mol 1

atom 1 - O OS - 0 -0.7188309 -3.104898 -0.5885828 1 3 d
 basisset 1 STO-3G
 atom 2 - O OS - 0 -2.510141 1.961755 2.514126 1 7 d
 basisset 2 STO-3G
 atom 3 - Fe FE - 0 -0.7188309 -1.204898 -0.5885828 2 6 s 1 d
 basisset 3 STO-3G
 atom 4 - O OS - 0 2.863848 1.961755 -0.5885828 1 5 d
 basisset 4 STO-3G
 atom 5 - Fe FE - 0 1.072509 1.328428 -0.5885828 2 4 d 6 s
 basisset 5 STO-3G
 atom 6 - O OS - 0 -0.7188309 0.695102 -0.5885828 3 5 s 3 s 7 s
 basisset 6 STO-3G
 atom 7 - Fe FE - 0 -1.614486 1.328428 0.9627712 2 6 s 2 d
 basisset 7 STO-3G
 endmol 1

Tam Enerji = -4041.460231944 (a.v.)
 Elektronların kinetik enerjisi = 4016.484721383 (a.v.)
 Virial şartı (-V/T) = 2.0062

Orbital enerjilär(eV)

-7049.515651 -7049.206480 -7048.846571 -863.846393 -863.571523
 -863.179151 -752.714724 -752.334204 -752.290964 -752.251398
 -752.188294 -752.181565 -752.063431 -751.646449 -751.514761
 -552.123452 -551.435983 -551.288503 -550.314637 -115.996807
 -115.583944 -115.424384 -77.493591 -77.461981 -77.163006
 -77.034478 -76.968192 -76.923182 -76.885273 -76.840915
 -76.581631 -34.015080 -31.932591 -31.379796 -30.562583
 -14.451689 -14.346333 -13.274959 -12.882997 -12.376820
 -12.303038 -12.224683 -12.127914 -12.029838 -11.645122
 -11.391705 -11.196848 -10.575174 -10.253620 -9.603771
 -8.822587 -7.620677 -7.207418 -4.350473 -4.170870
 -0.975480 4.072365 4.204564 4.553643 5.565211
 6.065665 6.139453 7.727357 8.347363 8.428068
 11.502040 11.812136 12.009849 12.152883 12.283812
 12.461683 13.022971 17.144427 17.425403 67.713308
 71.647342 71.950979

ATOMIC ORBITAL ELECTRON POPULATIONS

Fe 3 S Fe 3 S Fe 3 Px Fe 3 Py Fe 3 Pz
 1.999326 1.956616 1.999394 1.999378 1.999397
 Fe 3 S Fe 3 Px Fe 3 Py Fe 3 Pz Fe 3 Dx2
 2.665285 1.975806 1.983051 1.976499 0.465582
 Fe 3 Dy2 Fe 3 Dz2 Fe 3 Dxy Fe 3 Dxz Fe 3 Dyz






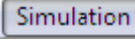
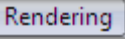

0.389441 0.035989 0.210752 1.689412 1.763223
 Fe 3 S Fe 3 Px Fe 3 Py Fe 3 Pz Fe 5 S
 1.270222 0.471788 0.399353 0.424098 1.999329
 Fe 5 S Fe 5 Px Fe 5 Py Fe 5 Pz Fe 5 S
 1.956808 1.999400 1.999398 1.999409 2.675950
 Fe 5 Px Fe 5 Py Fe 5 Pz Fe 5 Dx2 Fe 5 Dy2
 1.983281 1.977527 1.976794 0.448989 0.305362
 Fe 5 Dz2 Fe 5 Dxy Fe 5 Dxz Fe 5 Dy2 Fe 5 S
 0.655002 1.246348 0.571568 1.273125 1.325762
 Fe 5 Px Fe 5 Py Fe 5 Pz Fe 7 S Fe 7 S
 0.416163 0.483104 0.445837 1.999327 1.956674
 Fe 7 Px Fe 7 Py Fe 7 Pz Fe 7 S Fe 7 Px
 1.999354 1.999406 1.999407 2.667887 1.976273
 Fe 7 Py Fe 7 Pz Fe 7 Dx2 Fe 7 Dy2 Fe 7 Dz2
 1.977521 1.981854 0.718062 1.018235 0.435441
 Fe 7 Dxy Fe 7 Dxz Fe 7 Dy2 Fe 7 S Fe 7 Px
 0.570332 1.186657 0.611855 1.267383 0.380745
 Fe 7 Py Fe 7 Pz O 4 S O 4 S O 4 Px
 0.526329 0.352015 1.998916 1.941228 1.548970
 O 4 Py O 4 Pz O 2 S O 2 S O 2 Px
 1.326371 1.387626 1.998937 1.945436 1.470668
 O 2 Py O 2 Pz O 6 S O 6 S O 6 Px
 1.000557 1.721599 1.997997 1.850831 1.504129
 O 6 Py O 6 Pz O 1 S O 1 S O 1 Px
 1.483614 1.613213 1.998929 1.943979 1.294105
 O 1 Py O 1 Pz
 1.616905 1.317462


ATOMLARIN YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)			
		Kütləsi	x	y	z	
3	26	0.325387	-0.71883092	-1.20489795	-0.58858283	
5	26	0.260842	1.07250870	1.32842848	-0.58858283	
7	26	0.375242	-1.61448609	1.32842848	0.96277123	
4	8	-0.203110	2.86384836	1.96175480	-0.58858283	15.99900
2	8	-0.137197	-2.51014091	1.96175466	2.51412561	15.99900
6	8	-0.449784	-0.71883092	0.69510205	-0.58858283	15.99900
1	8	-0.171380	-0.71883092	-3.10489795	-0.58858283	15.99900


10. NanoEngineer-1 proqramı

Müasir dövrdə NanoEngineer-1 proqramı geniş tətbiq olunan proqramlardan biridir. Bu proqramın molekulyar mexanika və molekulyar dinamika metoduna əsaslanır və proqramın ümumi görünüşü Şəkil 10.1-də verilmişdir. Bu proqram atom, DNK, nanoboru, kristal, qrafeni və i.a. tədqiq etmək üçün əlverişli bir proqramdır. Proqramın pəncərəsinə aşağıdaılar daxildir: Başlıq və menyü sətirləri, üç alətlər sətiri, iki hissədən ibarət olan işçi sahə, hesabat sahəsindən və proqram pəncərəsinin sağ hissəsində şaqüli hissəsindəki alətlər zolağı.


Proqramın menyusuna menyusuna  -fayllar ilə  -düzəliş imkanları,  -görünüş,  -əlavə et,  -alətlər,  -modelləşdirmə,  -vizual modelin müxtəlif formalara çevrilməsi,  - kömək daxildir

 menyusuna aiddir: Open – qurulmuş visual modelin çağırılması, Open Recent Files - son işlədilmiş vizual modellər, Close and begin new model- hazırkı modellə işi qurtarmaq və yeni visual modelin qurulması, Save-hazırkı faylda dəyişikliklərin saxlanması, Save As visual faylın yeni adla saxlanması, Import – müəyyən verilənlərin cari modelə oxunması, Export-müxtəlif formatlarda vizual model haqqında fayllarda saxlanması, Fetch-lazım olan verilənlərin əldə olunması, Exit-proqramı bağlamaq üçün istifadə olunur.

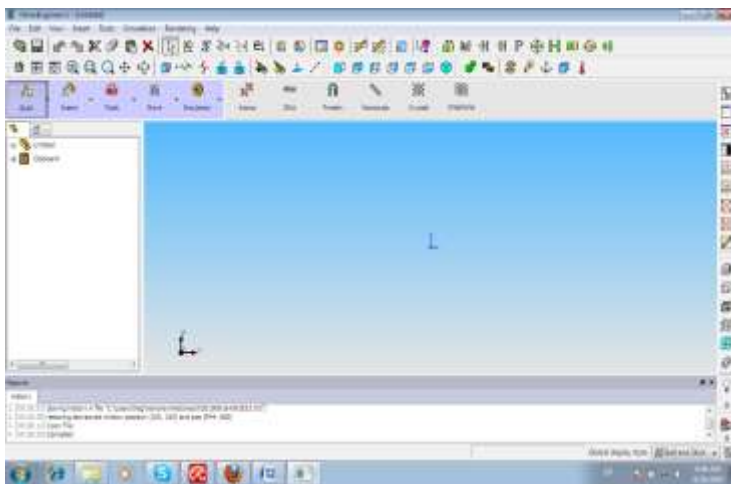
Yeni atomlardan təşkil olunmuş nanoobyekti tədqiq etmək üçün əvvəlcə onun modelini qurmaq lazımdır. Bunun

üçün  alətini iki dəfə mış vasitəsilə sıxmaq lazımdır. Bu zaman atomların periodik cədvəli ilə işləmək imkanı yaranacaq və uyğun atomu həmin cədvəldən seçilməsi üçün mışı elimin üzərinə gətirib bir dəfə sıxılması kifayətdir. Sonra isə proqramın sağ işçi hissəsində mışı bir dəfə sıxmaqla həmin atomu yaratmış oluruq və təkrar olaraq həmin atomun qurulması zəruridirsə yenə də mışı işçi sahədə təkrar sıxılması

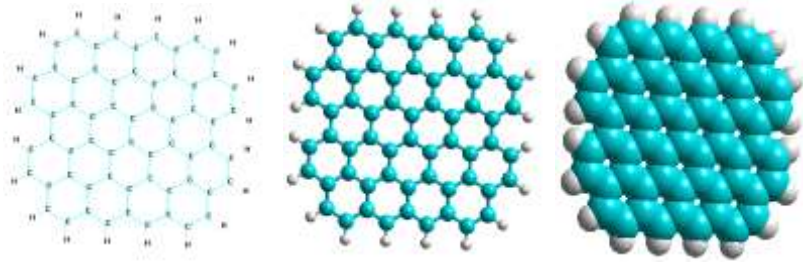
zəruridir. Prosesi yeni atomun seçilməsi və işin əvvəlki qayda da aparmaq lazımdır. Sonra isə atomlar arasına rabitə xətlərini çəkmək lazımdır. Bunun üçün atomların qırmızı rabirə nöqtələrindən istifadə olunur. Qurulmuş təqribi modeli enerjinin minimumluq şərtinə görə formalaşdırmaq üçün **Tools** → **Minimize Enenergy** əmri ilə modelləşdirilir. Atomlar

işini qurtarmaq üçün  aləni mış vasitəsilə sıxmaq lazımdır. Yeni qurulmuş obyekt müəyyən ad altında diskdə saxlamaq üçün **File** → **Close and begin new model** əmrindən istifadə olunur.

Məlumdur qrafenin alınması və tədqiqinə görə keçmiş SSRİ-nin alimləri A.Qeym və A. Novoselyevə Nobel mükafatı verilmişdir. Məhz buna görə də qrafeni NanoEngineer-1 proqramı ilə tədqiq olunması məqsədmüvafiq olar. Məlumdur ki, qrafen qalınlığı C atomunun diametri tərtibində olan, təpə nöqtələrində C atomları yerləşmiş düzgün 6 bucaqlılardan təşkil olunmuş iki ölçülü nanoquruluşlardır:



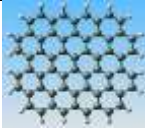
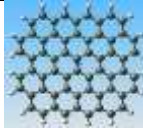

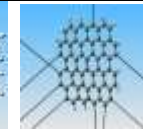
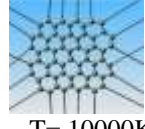






Şəkil 10.1. Proqramın baş pəncərəsi



Şəkil 10.2. Qrafenin vizual modelləri

Qrafenin tempertura davamlılığı NanoEngineer-1 proqramı ilə Molekulyar dinamika metodu vasitəsilə tədqiq etmək məqsədilə $T=300\text{K}$, 1000K , 2000K , 5000K , 10000K , 11000K , 12000K , 13000K , 14000K , 15000K , 20000K qiymətləri üçün, 1ps zaman müddətində kompüter hesablamaları aparılmışdır. Aparılmış kompüter tədqiqatlarının nəticələri bunu deməyə imkan verir ki, qrafen yüksək temperatura davamlı olub və onun quruluşunun dağılması $T=16000\text{K}$ qiymətində müşahidə olunmağa başlayır və $T=20000\text{K}$ qiymətində isə onun quruluşunun tam dağılması baş verir. Nəticələr Cədvəl 10.1.-də verilmişdir.

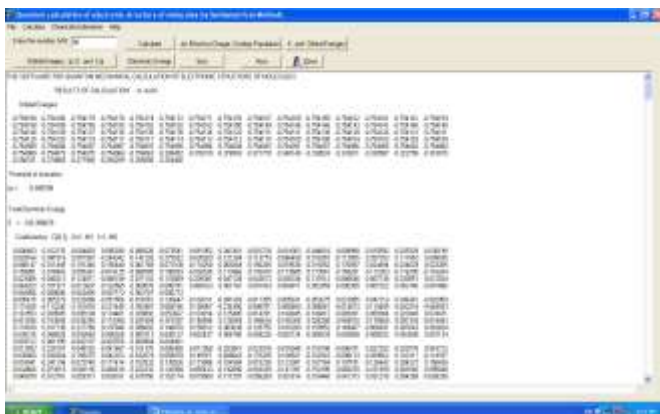
Cədvəl 10.1. Temperaturun müxtəlif qiymətlərində qrafenin NanoEngineer-1 proqramı vasitəsilə aparılmış hesablamaların nəticələri

Sıra nömrəsi	Qrafenin vizual modelləri			
1				
	T=300K	T=1000K	T=2000K	T=5000K
2				
	T= 10000K	T=11000K	T=12000K	T=13000K
3				
	T=14000K	T=15000K	T=20000K	

Aparılmış kompüter tədqiqatlarının nəticələri bunu deməyə imkan verir ki, qrafen yüksək temperaturla davamlı material olub, onun quruluşunun dağılması $T=14000K$ müşahidə olunmağa başlayır və $T=20000K$ qiymətində isə onun quruluşunun dağılması baş verir.

11. Yarımpiririk kvantmexaniki proqram

Nanosistemlərin öyrənilməsində istifadə olunan Volfberq-helmhols yarımpiririk metodunun əsasında “Nanomaterialların kimyəvi fizikası” kafedrasında sleyter funksiyaları bazisində Delphi Studio sistemində və MS Windows mühitində işləyən yarımpiririk kvantmexaniki proqram hazırlanmışdır. Bu proqramdan nanosistemlərin öyrənilməsində istifadə oluna bilər. Proqramın ümumi forması aşağıdakı kimidir:



Şəkil 11.1. Proqramın ümumi görünüşü

Proqrama aşağıdakı modullar daxildir:

DKCTVK – verilənlərin təyini: nv - bazis sleyter funksiyaların, mo - molekulyar orbitalların, me –atomların, eos -elektron olan orbitalların sayı olub integer kimi təyin oluar. nq - baş, lq - orbital və mq - maqnit kvant ədədlər, tc -mərkəzlərin tipləri, ch - nanoquruluşa daxil olan atomların sıra nomrələri olub $dm3$ kimi təyin olunur. zci - sleyter bazis funksiyalarının eksponensial parametrlərinin qiymətləri, xc , yc , zc – nanoquruluşa daxil olan atomların koordinatları olub $dm2$ kimi təyin olunur və i.a.:

Unit dkctvk;

const

$nv=96$; $mo=96$; $me=16$; $eos=88$;

type

$ms2$ =array[1..20] of real;
 $ms3$ =array[1..50] of real;
 $ms5$ =array[1..30] of integer;
 $ms6$ =array[1..100] of real;
 $ms7$ =array[1..51] of extended;
 $ms8$ =array[1..400] of longint;
 $ms9$ =array[1..2111] of real;
 $ms10$ =array[1..2000] of real;
 $ms11$ =array[1..1326] of real;


```

ms12 =array[1..800] of real;
dm1 =array[1..nv,1..nv] of extended;
dm2 =array[1..nv] of extended;
dm3 =array[1..nv] of integer;
var
os                                     :ms2;
ww,ww1,vv,vs,wth                       :ms3;
le2,le3,le4,le5,le6,le7,le8,knf        :ms5;
at,av,bt,bv                             :ms6;
fa,dg                                   :ms7;
le1,lt1,id4,id5                         :ms8;
f                                       :^ms11;
ws,dla                                  :^ms3;
dlb                                     :ms3;
og                                       :^ms9;
ii,jj,iz,kp,kq,kr,ks,itr,jp           :integer;
za,zc1,zb,zd,rac,rad,rab,alp,
bet,yj,hj,dp,zpr,eps,fmax,kor,kof     :extended;
tp,so,hp,fh,v,xx,c                     :dm1;
oe,oe0,oed,x99,sd,fn                   :dm2;
iq99                                    :dm3;
implementation
end.

```

DKBANTK – sleyter funksiyalar bazisində örtmə integrallarının hesablanması üçün istifadə olunan funksiya və proseduralar moduludur:

```

Unit dkbantk;
{$n+}
interface
uses dkctvk, Math;
function OVER(n1, n2, l1, l2, mi, mj:integer; x,
ra:extended):extended;
function CLEBS(var j1, j2, m1, m2, j, m:integer):extended;
function GB(var l, l1, la, la1, ia, ib, lb:integer):extended;
function FS(var n, n1, m:integer):extended;
procedure DIS(i, j:integer;var r:extended);
function DLM(var l, m:integer):extended;
procedure BS(var n:integer;var p, t:extended;var b:ms6);
procedure ASN(var n:integer;var p:extended;var a:ms6);

```

function AF(var n1, n2, nq:integer; a, b:ms6):extended;
function RC(k1, k2:integer; p, t, sp:extended):extended;
function PWI(i, j:integer):longint;
implementation
proqramların mətni
end;

OVER- örtmə inteqrallarını qiymətlərini, CLEBS- Kəbşə- Qordon, FS-binomial hasilin

$$F_m(N, N') = N!N'! \sum_{k=0}^m \frac{(-1)^k}{k!(m-k)!(N'-k)! [N-(m-k)]!}$$

$$\text{GB- } g_{\alpha\beta}^q(\ell\lambda, \ell'\lambda'; \Lambda) = g_{\alpha\beta}^0(\ell\lambda, \ell'\lambda'; \Lambda) F_q(\alpha + 2\Lambda - \lambda, \beta - \lambda'),$$

$$\text{burda } g_{\alpha\beta}^0(\ell\lambda, \ell'\lambda'; \Lambda) = \sum_{i=0}^{\Lambda} (-1)^i F_i(\Lambda, 0) K_{\alpha+2\Lambda-2i}^{\ell\lambda} K_{\beta}^{\ell'\lambda'}$$

$$K_{\beta}^{\ell\lambda} = (-1)^{\frac{1}{2}(\ell-\beta)} \frac{\sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell-\lambda)!}{(\ell+\lambda)!}} (\ell+\beta)!}{2^{\ell} \left[\frac{1}{2}(\ell-\beta) \right]! \left[\frac{1}{2}(\ell+\beta) \right]! (\beta-\lambda)!}$$

DLM-

$$d_{m0}^{\ell}(t) = \ell! [(\ell+m)! (\ell-m)!]^{\frac{1}{2}} \sum_s \frac{(-1)^s \left[\frac{1}{2}(1-t) \right]^{s-\frac{m}{2}} \left[\frac{1}{2}(1+t) \right]^{\ell+\frac{m}{2}-s}}{s! (\ell-s)! (\ell-m)! (\ell+m-s)!}$$

əmsallarının qiymətlərini,

DIS prosedurası iki atom arasındakı məsafəni hesablayır.

$$\text{BS - } B_n(\beta) = \int_{-1}^1 v^n e^{-\beta v} dv,$$

$$\text{ASN - } A_n(p) = \int_1^{\infty} \mu^n e^{-p\mu} d\mu \quad \text{proseduraları inteqrallarının}$$

qiymətlərini hesablayaraq bir ölçülü massivdə saxlayır.

$$\text{AF- } Q_{NN'}^q(p, t) = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 (\mu\nu)^q (\mu+\nu)^N (\mu-\nu)^{N'} e^{-p\mu-p\nu} d\mu d\nu$$

$$\text{RC- } N_{nn'}(p, t) = \frac{(1+t)^{n+\frac{1}{2}} (1-t)^{n'+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n)!(2n')!}} \cdot p^{n+n'+1}$$

PWI- $PWI(i, j) := i^j$ ifadələri hesablayır.

SMCICK – hesablama prosesi üçün zəruri əmsalları (faktorial, binomial, binomial hasil və s.) hesablayaraq onların çoxsaylı istifadəsini asanlaşdır:

```
Unit smcick;
{$n+}
interface
uses dkbantk, dkctvk, math;
procedure cstm;
implementation
  proqramın mətni
end;
```

OVERRUN - örtmə inteqrallarının qiymətlərini hesablanması və nəticələrin saxlanması:

```
unit          overrun;
interface
uses          dkbantk, dkctvk;
procedure     overun(var a, b:extended);
implementation
  proqramın mətni
end;
```

OVERRUND - ikiölçülü matrislərinin qurulması, dioqonallaşdırma prosesində istifadə olunması və nəticələrin saxlanması:

```
Unit          overrund;
interface
uses          dkctvk, dkbantk;
procedure     MPMAS(var v, x, c:dm1;n:integer);
procedure     VTFV(var Fh, V:dm1;n:integer);
procedure     HDIAG(var H, U:dm1;var x:dm2;var IQ:dm3;N, NBMX,
IEGEN, nr:longint);
procedure     ORD(var fh, u:dm1;var oe:dm2; ns, next:dm3; n,
nbmx:integer);
procedure     hpq(n:integer);
procedure     hpdiag;
```

implementation

proqramların mətni

end;

MPMAS - iki ölçülü kvadrat matrislərin hasilini hesablanması $C=V*X$.

VTFV- $F = V^T * FH * V$ matrislərinin hasilinin hesablanması, burda FH və V – verilmiş iki ölçülü kvadrat matrislər və V^T matrisi V trasponirə olunmasıdır;

HPQ-Volfsberq-Helmhols

$$H_{pq} = 0,5 \cdot K \cdot S_{pq} (H_{pp} + H_{qq}), p, q = 1, \dots, nv$$

və ya Kusak $H_{pq} = 0,5 \cdot (2 - S_{pq}) \cdot S_{pq} (H_{pp} + H_{qq}), p, q = 1, \dots, nv$
düsturlarına əsasən iki ölçülü matrisin qurulması;

HDIAG – iki ölçülü kvadrat matrisin dioqonallaşdırılması;

ORD - dioqonallaşmış iki ölçülü matrisin dioqonal elementlərini artan ardıcılıqla düzür və bir ölçülü matrisdə saxlanması.

HPDIAG - dioqonallaşdırılma prosesinin realizasiyası;

YEMP – əsas proqram olub yarım-empirik metodu realizasiya edir.

Proqram sistemin orbital enerjilərini, tam elektron enerjisini, sistemə daxil olan atomların effektiv yüklərini və və s. hesablamağa imkan verir. Proqramın yerinə yetirilməsi üçün ilkin verilənlər zəruridir. Bura bazis funksiyaların, sistemə daxil olan atom və molekulyar orbitalların, elektron olan molekulyar orbitalların sayı, baş, orbital və maqnit kvant ədədləri, atomların sıra nömrəsi, atom orbitallarının eksponensial parametrlərin qiymətləri, atomların molekulyar koordinat sistemində dekart koordinatları daxildir.

Yarım-empirik kvantmexaniki proqram vasitəsi ilə 16 qızıl Au atomu daxil olan Au_{16} (Şəkil 11.1) qızıl nanohissəciyi üçün Volfsberq-Helmhols metodu ilə kompüter hesablamaları aparılmışdır:



Şəkil 11.1 Au₁₆ nanohissəciyi

Tam elektron enerji $E = -6.339366$ a.v.

İonlaşma potensialı $I_p = 3.703389914$ eV

Orbital enerjilər (a.v.)

-0.684817	-0.661433	-0.623058	-0.598719	-0.169649	-0.158814	-0.137098	-0.136096
-0.118915	-0.027240	-0.024011	-0.019275	-0.016488	-0.012503	-0.010608	-0.000524
-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000
-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000
-0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.016042	1.204702	1.229904	1.285250	1.303929	1.349486	1.407488	1.970694
2.249531	2.896924	3.378143	3.463406	3.665532	3.846329	3.914490	3.988562

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

N-si	Z Atomu	Yükü	Koordinatları(a.v.)		
			x	y	z
1	79	-0.477725	0.7273814	0.14770909	2.65187515
2	79	-0.556951	-1.87186795	0.56232986	2.58630971
3	79	-0.609782	0.3630383	-2.26437264	1.37450644
4	79	-0.477706	-2.20357127	-1.40494744	0.86809597
5	79	-0.489172	2.67199854	-0.86560465	1.07587674
6	79	-0.537255	2.24897258	1.75132253	1.07268487
7	79	-0.342177	-0.36228144	2.40525927	1.39682705
8	79	0.431552	0.00377388	0.05200688	-0.05143089
9	79	-0.590981	0.87839365	2.64291629	-0.99603353
10	79	-0.342212	-2.49680715	1.27442059	0.09783097
11	79	-0.498185	2.38512292	0.43716801	-1.35228525
12	79	-0.489191	-0.80251563	-2.70621679	-1.03866935
13	79	-0.537262	-2.39001153	-0.70620755	-1.75069312
14	79	-0.349636	1.78344705	-2.18175034	-1.03139997
15	79	-0.590996	-1.14737978	1.56980459	-2.22882881
16	79	-0.498192	0.21230642	-0.71383772	-2.67466599

Nəticələrin interpretasiyası

Au₁₆ nanohissəciyinin 16 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir.

Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi əks işarə ilə ionlaşma potensialının qiymətinə bərabərdir: $I_p = -\varepsilon_8 = 3.703389914\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiymətini hesablamaq üçün mənfi işarəli ən yuxarı orbital enerji ilə $\varepsilon_8 = -3.703389914\text{eV}$, mənfi işarəli dolmamış ən aşağı orbital enerjinin $\varepsilon_9 = -3.235867414\text{eV}$ fərqi tapılır: $\varepsilon_9 - \varepsilon_8 = 0.4675225\text{eV}$. Bu isə Ag nanohissəciyinin keçirici material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər. Burada ε_{ABMO} - ən aşağı boş molekulyar orbitalin enerjisi, ε_{YTMO} -elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalin enerjisidir. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_9 = -3.235867414\text{eV}$. $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_8 = -3.703389914\text{eV}$. Beləliklə $\eta = 0.23376125\text{a.v.}$ $\eta < 1\text{eV}$ olduğundan Au nanohissəciyi yumşaq material hesab olunur. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_9 = -3.235867414\text{eV}$ ən aşağı boş molekulyar orbitalin enerjisi mənfi işarəli olduğuna görə Au nanohissəciyinin elektrofildir. Au nanohissəciyinin stabilliyi $\Delta E(Au_{16}) = E_{Au_8} - 8 \cdot E_{Au_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(Au_{16})$ Au nanohissəciyinin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\Delta E(Au_{16}) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(Au_{16}) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. $E_{Au_{16}}$ - Au nanohissəciyinin, E_{Au_2} - Au₂ molekulunun tam enerjisidir. $E_{Au_{16}} = -6.339366\text{a.v.}$, $E_{Au_2} = -0.759462\text{a.v.}$ olduğundan $\Delta E(Au_{16}) = -0.26367\text{a.v.}$ $\Delta E(Au_{16}) < 0$ olduğundan Au₁₆ nanohissəciyi stabildir.

Nəticə. Qızıl nanohissəciyinin elektron quruluşu Wolfsberg-Helmhols(VH) metodu ilə Sleyter funksiyalarından istifadə etməklə öyrənilmişdir. Kompüter hesablamaları BDU “Nanomaterialların kimyəvi fizikası” kafedrası əməkdaşları tərəfindən Delphi Studio sistemində hazırlanmış Windows

əmaliyyat sistemində işləyən proqram vasitəsilə aparılmışdır. Nanohissəciyinin orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin qiymətləri və nanohissəciyə daxi olan atomların effektiv yükləri hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, qızıl nanohissəciyi yumşaq, elektrofil və stabil keçirici materialdır, nanosistemlərin öyrənilməsində və tədqiqində Sleyter funksiyalarından istifadə olunması məqsədəuyğundur.

Proqram vasitəsilə Fe_3O_4 hissəciyi üçün aparılmış hesablamaların nəticələri aşağıdakı kimidir:

Orbital Energies

-1.299356	-1.297211	-1.295351	-1.290554	-1.290530
-1.290518	-1.290516	-1.290502	-1.290479	-1.290281
-1.290241	-1.290143	-0.731870	-0.648077	-0.546851
-0.500004	-0.292457	-0.291279	-0.290735	-0.290391
-0.290391	-0.290391	-0.290391	-0.290390	-0.290385
-0.290378	-0.290350	-0.290348	-0.290318	-0.290296
-0.290270	-0.222430	-0.172229	-0.104144	

İonlaş potensialı: $I_p = 7.901970\text{eV}$

Tam enerji: $E = -40.517817\text{a.v.}$

Effektiv yüklər

Fe	Fe	Fe	
1.369612	3.206013	1.369612	
O	O	O	O
-1.287900	-0.893340	-0.893340	-1.287900

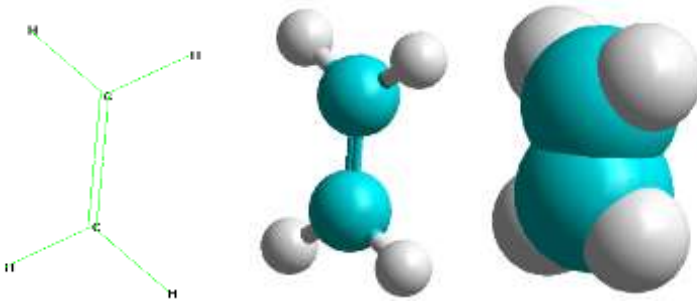
Ortmə məskunluğu

0.092262	-0.003448	0.318952	0.174603	-0.001597	0.000028
0.092262	-0.001917	0.212293	0.212293	-0.001917	0.000028
-0.001597	0.174603	0.318952	-0.001085	0.000000	-0.000000
-0.000870	0.000000	-0.001085			

Alınan nəticələr göstərir ki, həqiqətə uyğun real nəticələr vermişdir. Bunu hissəciyə daxil olan atomların effektiv yüklərinin hesablanmış qiymətlərindən görünür. Bu işə proqramın nanoquruluşların öyrənilməsi və tədqiqində istifadə olunmasının yararlı olduğunu göstərir.

12. Bəzi nanosistemlərin vizual modelləri

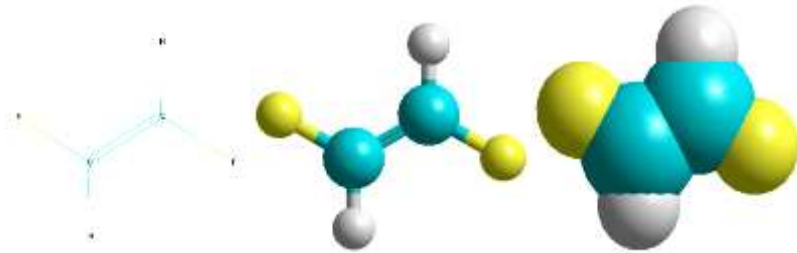
BDU “Nanomaterialların kimyəvi fizikası” kafedrasında 2006-cı ildən başlayaraq nanohissəciklərin sintezi, stabiləşdirilməsi və tətbiqi ilə əlaqədar olaraq nəzəri və təcrübi elmi-tədqiqat işləri aparılır. Buna görə də bəzi nanohissəciklərin vizual modellərinin qurulması və kompüterdə tədqiqi olunması hazırkı dövrün aktual məsələlərindən biridir. Nanoobyektlərin vizual modelini qurmadan nəzəri metodu tətbiq etmək mümkün deyildir. Buna görə də bəzi nanohissəcik, nanokompozit və nanosistemlərin qurulmuş vizual modelləri aşağıda verilmişdir:



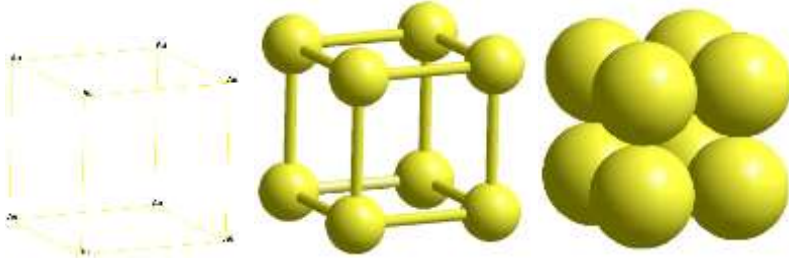
Şəkil 12.1. Polietilenin (PE) modelləri



Şəkil 12.2. Polipropilenin (PP) modelləri



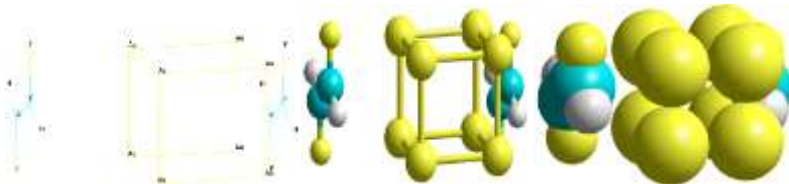
Şəkil 12.3. Poliviniliden fluoridin (PDVF) modelləri



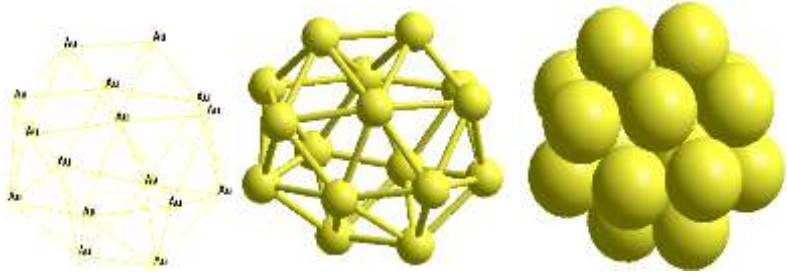
Şəkil 12.4. Au₈ nanohissəciyinin modelləri



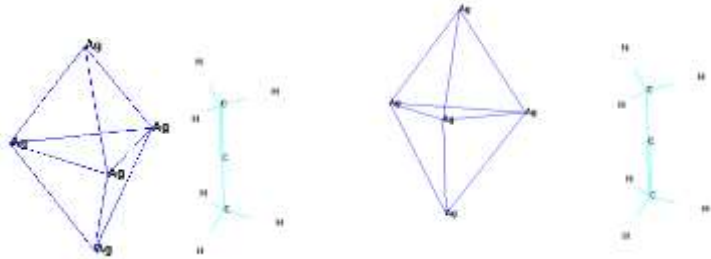
Şəkil 12.5. PP+Au₈ nanohissəciyinin modelləri



Şəkil 12.6. PP+Au₈ nanohissəciyinin modelləri

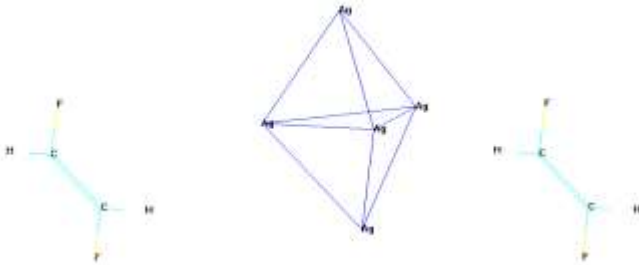


Şəkil 12.7. Au₁₆ qızıl nanohissəciyinin modelləri

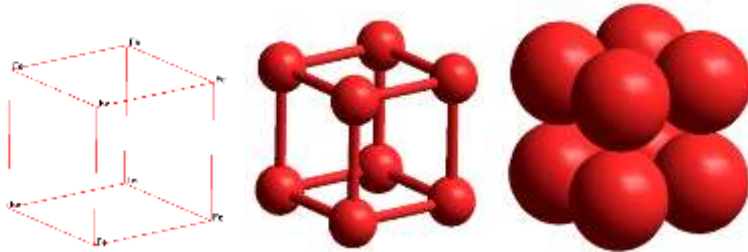


Şəkil 12.8. Ag₅ nanohissəciyinin modeli

Şəkil 12.9. PP+Ag₅ nanokompozitinin modeli



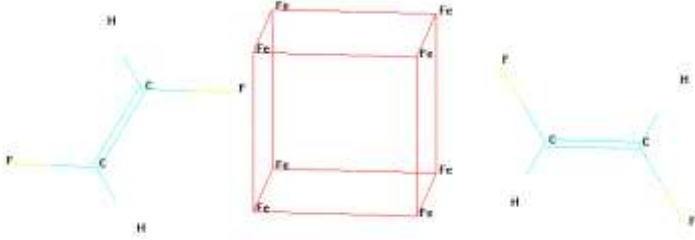
Şəkil 12.10. PVDF+Ag₅ nanokompozitinin modeli



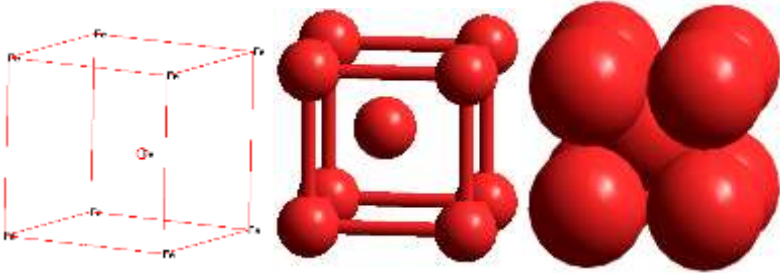
Şəkil 12.11. Fe₈ nanohissəciyi modelləri



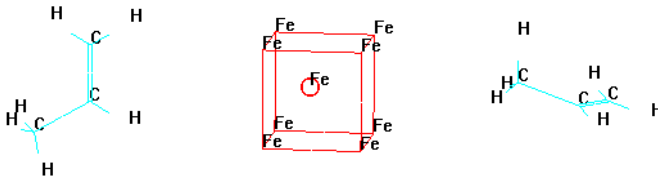
Şəkil 12.12. PP+Fe₈ nanokompozitinin modeli

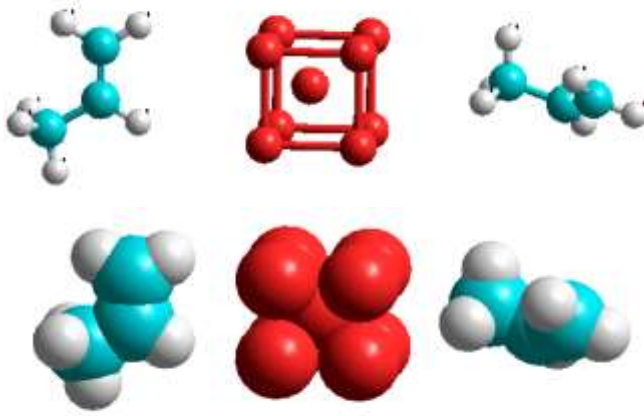


Şəkil 12.13. PVDF+Fe₈ nanokompozitinin modeli

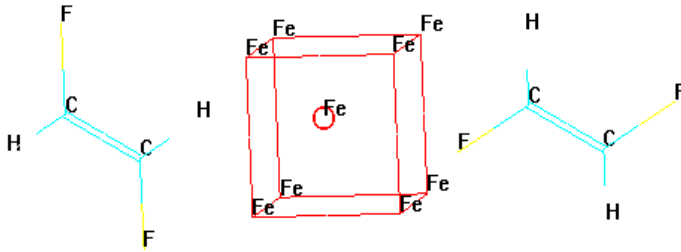


Şəkil 12.14. Fe₉ həcmə mərkəzləşmiş nanohissəciyi modelləri

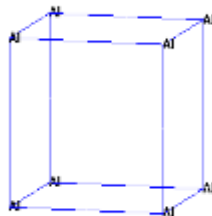




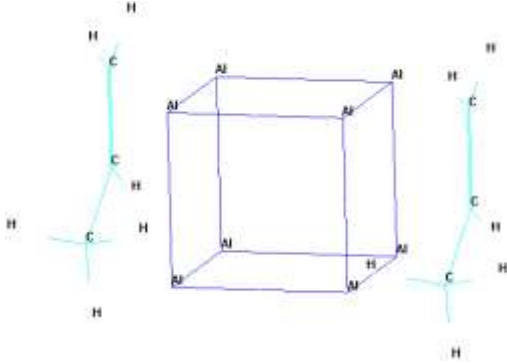
Şekil 12.15. PP+Fe₉ nanokompozitinin modelleri



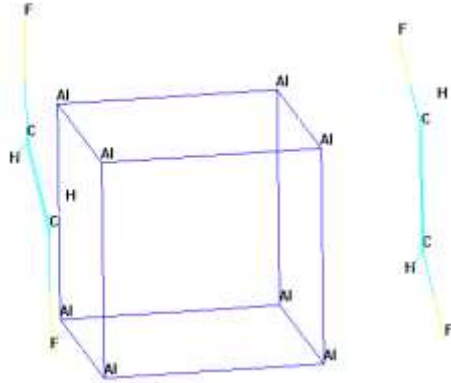
Şekil 12.16. PVDF+Fe₉ nanokompozitinin modeli



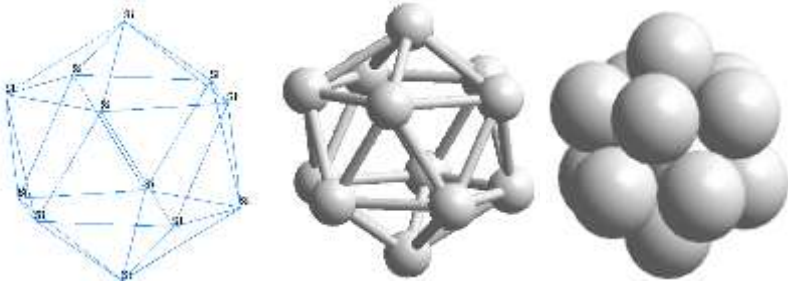
Şekil 12.17. Al₈ nanohisseyinin modeli



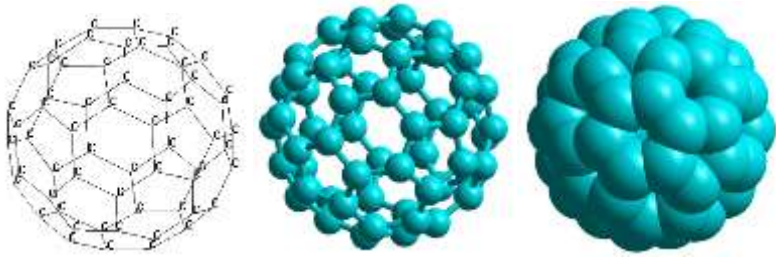
Şekil 12.18. PP+ Al_8 nanokompozitinin modeli



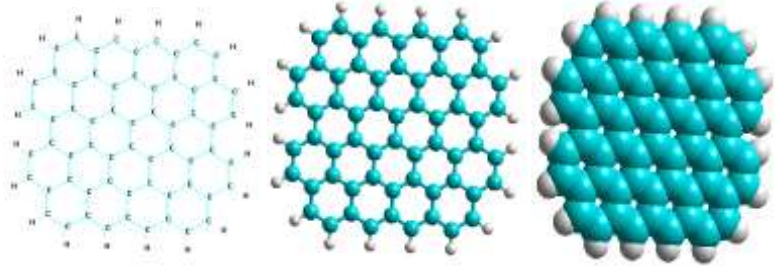
Şekil 12.19. PVDF+ Al_8 nanokompozitinin modeli



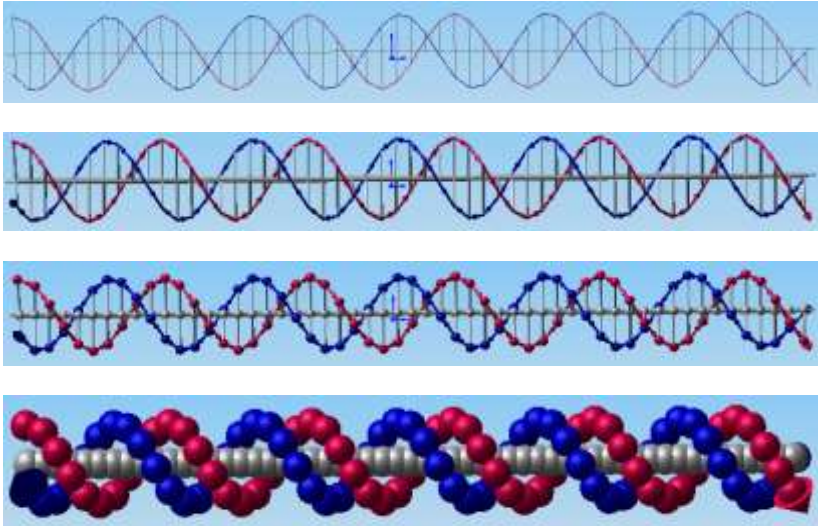
Şekil 12.20. Si_{12} nanohisseyinin modelleri

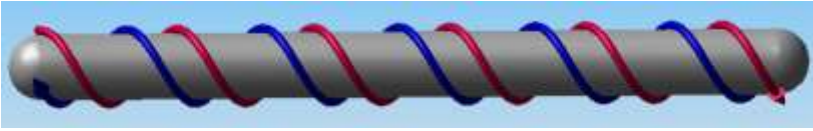


Şekil 12.21 Füllerenin modelləri

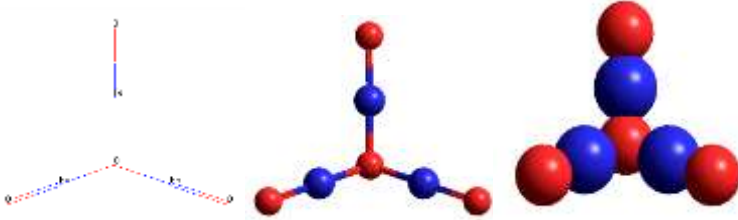


Şekil 12.22. Qrafenin modelləri

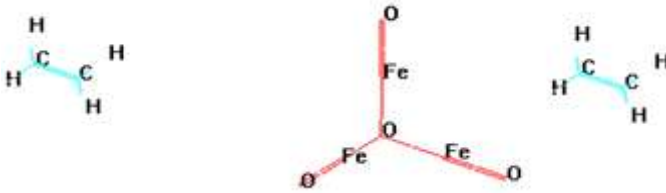




Şəkil 12.23. DNT-nin xət, boru, kürə və qələmlərlə, həcmi, silindir formalı modelləri



Şəkil 12.24. Fe_3O_4 hissəciyinin modelləri



Şəkil 12.25. PE+ Fe_3O_4 kompozitinin modeli



Şəkil 12.26. PP+ Fe_3O_4 kompozitinin modelləri



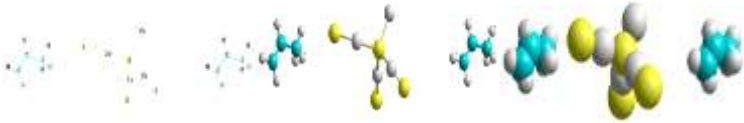
Şəkil 12.27. PVDF+ Fe_3O_4 kompozitinin modelləri



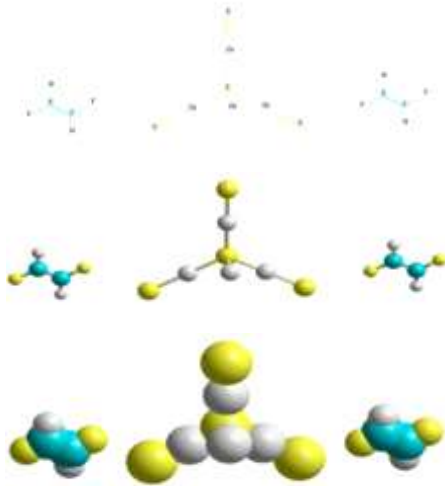
Şekil12.28. $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4$ nanohissəciiyinin modelləri



Şəkil 12.29. $(\text{ZnS})_4$ nanohissəciiyinin modelləri



Şəkil 12.30. $\text{PP}+(\text{ZnS})_4$ nanokompozitinin modelləri



Şəkil 12.31. $\text{PVDF}+(\text{ZnS})_4$ nanokompozitinin modelləri



Şəkil 12.32. $(ZrO_2)_9$ nanohissəciyinin xətt, kürə-silindir və kürələrlə modeli



Şəkil 12.33. $PP+(ZrO_2)_9$ nanokompoziti modelləri



Şəkil 12.34. $PVDF+ZrO_2$ nanokompoziti modelləri



Şəkil 12.35. $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyinin modelləri



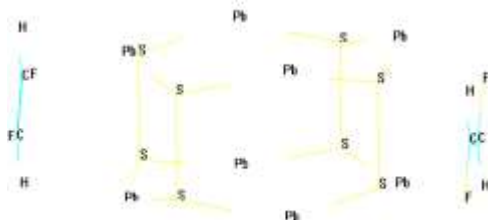
Şəkil 12.36. $(Au_2S)_{22} + PP$ və $(Au_2S)_{22} + PVDF$ nanokompozitlərinin modelləri



Şəkil 12.37. $(PbS)_8$ nanohissəciyinin vizual modelləri



Şəkil 12.38. $(PbS)_8 + PP$ nanokompozitlərinin vizual modelləri



Şəkil 12.39. $(PbS)_8 + PVDF$ nanokompozitlərinin vizual modelləri



Şekil 12.40. MnO₂ nanohissəciiyinin modelləri

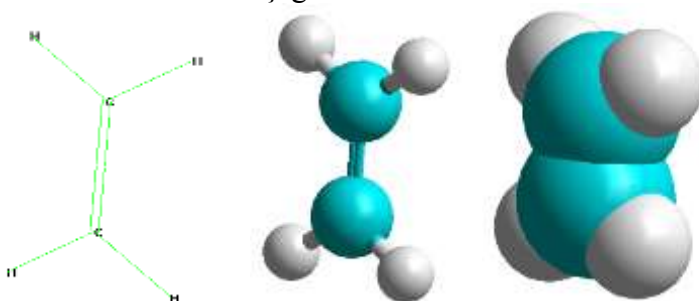


Şekil 12.41. CdS nanohissəciiyinin modelləri

III FƏSİL. NANOSİSTEMLƏRİN KOMPÜTERDƏ HESABLANMASI

13. Polietilen (PE), Polipropilen(PP) və Poliviniliden fluorid(PVDF) kompozitlərinin modelləşdirilməsi və qeyriempirik metod ilə tədqiqi

Polietilen (C_2H_4)_n PE-nin qurulmuş modeli əsasında(Şkil 12.1) qeyriempirik metodla kompüterdə aparılmış hesablamanın nəticəsi aşağıdakı kimidir:



Şəkil 13.1. PE-nin vizual modelləri

Tam Enerji	= -77.071203165 (a.v.),
Elektronların kinetik enerjisi	= 76.579848336 (a.v.),
Virial şərti (-V/T)	= 2.0064.

ATOMLARIN YÜKLƏRİ VƏ KOORDINATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)		
			x	y	z
1	6	-0.126925	-0.68987332	-0.10081400	0.00618310
2	6	-0.126926	-0.68987332	1.23918600	0.00618310
3	1	0.063463	-1.62518076	1.77918600	0.00618310
4	1	0.063463	0.24543411	1.77918600	0.00618310
5	1	0.063463	0.24543411	-0.64081400	0.00618310
6	1	0.063463	-1.62518076	-0.64081400	0.00618310

Nəticələrin interpretasiyası. PE-nin 16 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı

molekulyar orbitalın enerjisi $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_8 = -8.779404\text{eV}$ ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_9 = 8.628841\text{eV}$. İonlaşma potensialının qiymətin: $I_p = -\varepsilon_8 = 8.779404\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiymətini: $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO} = 17.408245\text{eV}$. Bu isə PE-nin dielektrik material olmasını göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər. Beləliklə $\eta = 8.7041225\text{eV}$. $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan PP möhkəm material hesab olunur. ε_{ABMO} -nin şəraisi müsbət olduğuna görə PE nuklefidir. PE-nin stabilliyi $\Delta E(C_2H_4) = E_{C_2H_4} - E_{C_2} - 2 \cdot E_{H_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(C_2H_4)$ PE-nin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\Delta E(C_2H_4) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(C_2H_4) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. $E_{C_3H_6}$ - PE-nin, E_{C_2} - C_2 molekulunun, E_{H_2} - H_2 molekulunun tam enerjisidir. $E_{C_2H_4} = -77.07120317\text{a.v.}$, $E_{C_2} = -74.31543142\text{a.v.}$ və $E_{H_2} = -1.111298185\text{a.v.}$ olduğundan $\Delta E(C_2H_4) = -0.533175377\text{eV}$. $\Delta E(C_2H_4) < 0$ olduğundan PE stabildir. PE-nin şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = \frac{ch}{(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO}) \times 1,6 \times 10^{-19}} \times 10^9$ nm düsturu ilə hesablanır. Burada $c = 3 \cdot 10^8$ m/san, $h = 6,63 \times 10^{-34}$ C·san. Onda $\lambda = 71$ nm olar.

Polipropilen(PP)

Polipropilen propilenin polimer ləşməsindən alınan termoplastik polimerdir ($-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{CH}_3)-$)_n. Rəngsiz, kristal maddədir. Sıxlığı 20^0 C-də $0,92 - 0,93$ q/sm³ - dur. 172^0 C də

əriyir, zərbəyə davamlıdır. PP yaxşı dielektrik materialdır, istiliyi pis keçirir, adi üzvi həlledicilərdə həll olmur, qaynar suyun və qələvilərin təsirindən keyfiyyətini itirmir. Lakin, sulfat(SO₄) və nitrat(NO₃) turşularının təsirindən rəngi tutqunlaşır və dağılır. PP-dən sintetik, lif, plyonka, penoplast, maşın hissələri, müxtəlif armatur, məişət materialları və. s. istehsalında istifadə edilir. PP-nin qurulmuş modeli əsasında qeyriempirik metodla kompüterdə aparılmış hesablanmanın nəticəsi aşağıdakı kimidir:



Şəkil 13.2. PP-nin vizual modelləri

Tam Enerji	= -115.654423539 (a.v.),
Elektronların kinetik enerjisi	= 114.808545162 (a.v.),
Virial şərti (-V/T)	= 2.0074.

ATOMLARIN YÜKLƏRİ VƏ KOORDINATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)		
			x	y	z
5	6	-0.141313	0.43548171	0.48424481	-0.67000387
6	6	-0.047790	-0.38960828	0.80795842	0.33500160
7	6	-0.183974	-1.82267997	0.30129728	0.33500160
4	1	0.062510	-2.33650321	0.66462665	1.22498893
1	1	0.067900	-1.82267997	-0.78870272	0.33500160
2	1	0.059085	-0.03637103	1.42885801	1.14500601
3	1	0.058225	1.45371686	0.84424089	-0.67000387
8	1	0.057456	0.08224446	-0.13665478	-1.48000828
9	1	0.067900	-2.33651440	0.66463457	-0.55497604

Nəticələrin interpretasiyası. PP-nin 24 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı

səviyyənin enerjisi əks işarə ilə ionlaşma potensialının qiymətinə bərabərdir: $I_p = -\varepsilon_{12} = 8.224920\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiymətini hesablamaq üçün mənfi işarəli ən yuxarı orbital enerji ilə $\varepsilon_{12} = -8.224920\text{eV}$, müsbət işarəli ən aşağı orbital enerjinin $\varepsilon_{13} = 8.668170\text{eV}$ fərqi tapılır: $\varepsilon_{13} - \varepsilon_{12} = 16.89309\text{eV}$. Bu isə PP-nin dielektrik material olmasını göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanıla bilər. Burada ε_{ABMO} - ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi, ε_{YTMO} -elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisidir. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{13} = 8.668170\text{eV}$. $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{12} = -8.224920\text{eV}$. Beləliklə $\eta = 8.446545\text{eV}$. $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan PP möhkəm material hesab olunur. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{13} = 8.668170\text{eV}$ ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi müsbət olduğuna görə PP nuklefidir. PP-nin stabilliyi $\Delta E(C_3H_6) = E_{C_3H_6} - \frac{3}{2} \cdot E_{C_2} - 3 \cdot E_{H_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(C_3H_6)$ PP -nin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\Delta E(C_3H_6) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(C_3H_6) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. $E_{C_3H_6}$ - PP-nin, E_{C_2} - C₂ molekulunun, E_{H_2} - H₂ molekulunun tam enerjisidir. $E_{C_3H_6} = -115.6544235\text{a.v.}$, $E_{C_2} = -74.31543142\text{a.v.}$ və $E_{H_2} = -1.111298185\text{a.v.}$ olduğundan

$$\Delta E(C_3H_6) = -0.847381857\text{eV.}$$

$\Delta E(C_3H_6) < 0$ olduğundan PP stabildir. PP-nin şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 74\text{nm}$ olar.

Poliviniliden fluorid(PVDF).

Tam Enerji	= -271.982471990 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 269.030287510 (a.v.)

$$\text{Virial şərti } (-V/T) = 2.0110.$$

ATOMLARIN YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)		
		x	y	z
2 9	-0.127454	1.09298380	0.44434400	0.00000000
3 6	0.049042	-1.21930403	0.43934400	-0.00000000
4 6	0.049042	-0.05882999	1.10934400	-0.00000000
5 9	-0.127454	-2.37111781	1.10434400	0.00000000
1 1	0.078412	-1.21930403	-0.64065600	-0.00000000
6 1	0.078412	-0.05882999	2.18934400	-0.00000000



Şəkil 13.3. PVDF -in vizual modeli

Nəticələrin interpretasiyası. PVDF-nin 32 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi əks işarə ilə ionlaşma potensialının qiymətinə bərabərdir: $I_p = -\varepsilon_{16} = 7.662306\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiymətini hesablamaq üçün mənfi işarəli ən yuxarı orbital enerji ilə $\varepsilon_{16} = -7.662306\text{eV}$, müsbət işarəli ən aşağı orbital enerjinin $\varepsilon_{17} = 8.352145\text{eV}$ fərqi tapılır: $\varepsilon_{17} - \varepsilon_{16} = 16.014451\text{eV}$. Bu isə PVDF -in dielektrik material olmasını göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanıla bilər. Burada ε_{ABMO} - ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi, ε_{YTMO} -elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisidir. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{17} = 8.352145\text{ eV}$.

$\varepsilon_{YMO} = \varepsilon_{16} = -7.662306\text{eV}$. Beləliklə $\eta = 8.0072255\text{eV}$. $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan PVDF möhkəm material hesab olunur. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{17} = 8.352145\text{eV}$ ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi müsbət olduğuna görə PVDF nuklefidir. PVDF-in stabilliyi $\Delta E(C_2H_2F_2) = E_{C_2H_2F_2} - E_{C_2} - E_{H_2} - E_{F_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(C_2H_2F_2)$ PVDF-in stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\Delta E(C_2H_2F_2) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(C_2H_2F_2) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. $E_{C_2H_2F_2}$ - PVDF-in, E_{C_2} - C₂ molekulunun, E_{H_2} - H₂ molekulunun və E_{F_2} molekulunun tam enerjisidir.

$$E_{C_2H_2F_2} = -271.982472 \text{ a.v.}, E_{C_2} = -74.31543142 \text{ a.v.},$$

$$E_{H_2} = -1.111298185 \text{ a.v.} \text{ və } E_{F_2} = -195.9593201 \text{ a.v.}$$

olduğundan $\Delta E(C_2H_2F_2) = -0.596422244 \text{ a.v.}$

$\Delta E(C_2H_2F_2) < 0$ olduğundan PVDF stabildir. PVDF-nin şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 78\text{nm}$ olar.

14.Qızıl nanohissəciyi və onun nanokopozisiyalarının modelləşdirilməsi və Genişləniş Hükkel metodu ilə tədqiqi

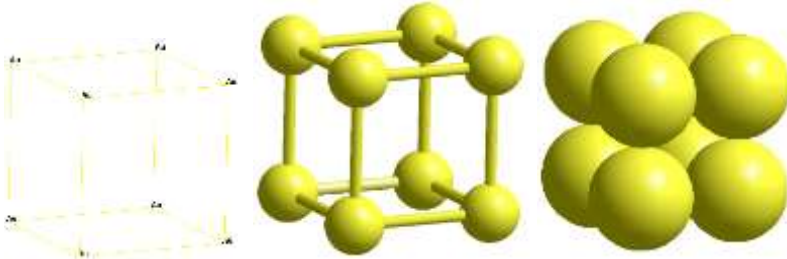
Au₈ nanohissəciyinin Genişləniş Hükkel metodu ilə kompüterdə aparılmış hesablamaların nəticəsi aşağıda verimişdir:

Tam enerji = -47.976407338 (a.v.).

ATOMLARIN YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstrom)		
			x	y	z
1	79	-0.000003	-3.39064	-0.36549	-1.23794
2	79	0.000001	-3.39057	-0.36541	1.44207
3	79	-0.000003	-0.71062	-0.36552	-1.23794
4	79	0.000012	-0.71062	2.31451	1.44207
5	79	-0.000015	-0.71062	2.31451	-1.23794

6	79	0.000010	-3.39057	2.31451	1.44207
7	79	-0.000013	-3.39064	2.31451	-1.23794
8	79	0.000010	-0.71060	-0.36541	1.44199



Şəkil 14.1. Au₈ nanohissəciiyinin vizual modelləri

Nəticələrin interpretasiyası. Au₈ nanohissəciiyinin 88 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi əks işarə ilə ionlaşma potensialının qiymətinə bərabərdir: $I_p = -\varepsilon_{44} = 11.551598\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiymətini hesablamaq üçün mənfi işarəli ən yuxarı orbital enerji ilə $\varepsilon_{44} = -11.55159\text{ eV}$, mənfi işarəli dolmamış ən aşağı orbital enerjinin $\varepsilon_{45} = -9.401934\text{eV}$ fərqi tapılır: $\varepsilon_{45} - \varepsilon_{44} = 2.149664\text{eV}$. Bu isə Ag nanohissəciiyinin yarımkeçirici material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər. Burada ε_{ABMO} - ən aşağı boş molekulyar orbitalin enerjisi, ε_{YTMO} -elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalin enerjisidir. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{45} = -9.401934\text{eV}$. $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{44} = -11.551598\text{eV}$. Beləliklə $\eta = 1.074832\text{a.v.}$ $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan Au nanohissəciiyi möhkəm material hesab olunur.

$\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{45} = -9.401934\text{ eV}$ ən aşağı boş molekulyar orbitalin enerjisi mənfi işarəli olduğuna görə Au nanohissəciiyinin elektrofildir. Au nanohissəciiyinin stabilliyi $\Delta E(Au_8) = E_{Au_8} - 4 \cdot E_{Au}$ düsturu ilə hesablanır. Burada

$\Delta E(Au_8)$ Au nanohissəciyinin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\Delta E(Au_8) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(Au_8) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. E_{Au_5} - Au nanohissəciyinin, E_{Au_2} - Au₂ molekulunun tam enerjisidir. $E_{Au_8} = -47.97640734$ a.v., $E_{Au_2} = -11.97236618$ a.v. olduğundan $\Delta E(Au_8) = -0.08694263$ a.v. $\Delta E(Au_8) < 0$ olduğundan Au₈ nanohissəciyi stabildir.

PP+Au₈ nanonankompozitinn hückel metodu ilə tədqiqi



Şəkil 14.2. PP+Au₈ nanohissəciyinin vizual modelləri

Tam enerji = -70.841990080 (a.v.).

ATOMLARIN YÜKLƏRİ VƏ KOORDINATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)		
			x	y	z
1	79	-0.237035	-3.39064	-0.36549	-1.23794
2	79	0.013975	-3.39057	-0.36541	1.44207
3	79	0.086105	-0.71062	-0.36552	-1.23794
4	79	-0.417935	-0.71062	2.31451	1.44207
5	79	0.396105	-0.71062	2.31451	-1.23794
6	79	-0.551301	-3.39057	2.31451	1.44207
7	79	0.641506	-3.39064	2.31451	-1.23794
8	79	0.064304	-0.71060	-0.36541	1.44199
9	6	-0.179610	-3.24924	-0.39971	3.22124
11	6	0.084699	-2.08877	-1.06971	3.22124
14	6	-0.074003	-0.77241	-0.30971	3.22124
18	6	-0.120294	-1.50547	0.17210	-2.44184
19	6	-0.156018	-1.50547	1.51210	-2.44184
20	6	0.022500	-2.82183	2.27210	-2.44184

15	1	0.000112	0.05607	-1.01803	3.22124
16	1	0.107694	-0.71467	0.31694	2.33126
17	1	0.024127	-0.71467	0.31695	4.11122
12	1	0.029604	-2.08877	-2.14971	3.22124
13	1	0.030551	-4.18455	-0.93971	3.22124
10	1	0.029329	-3.24924	0.68029	3.22124
21	1	0.082075	-0.57016	-0.36790	-2.44184
22	1	0.037800	-2.44078	-0.36790	-2.44184
23	1	0.083353	-0.57016	2.05210	-2.44184
24	1	-0.032850	-2.62265	3.34374	-2.44184
25	1	-0.057535	-3.39339	2.00878	-3.33182
26	1	0.092742	-3.39340	2.00877	-1.55186

Nəticələrin interpretasiyası. PP+Au₈ nanokompozitinin 124 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi əks işarə ilə ionlaşma potensialının qiymətinə bərabərdir: $I_p = -\varepsilon_{62} = 9.123462\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiymətini hesablamaq üçün mənfi işarəli ən yuxarı orbital enerji ilə $\varepsilon_{62} = -9.123462\text{eV}$, mənfi işarəli dolmamış ən aşağı orbital enerjinin $\varepsilon_{63} = -8.51505\text{eV}$ fərqi tapılır: $\varepsilon_{63} - \varepsilon_{62} = 0.608412\text{eV}$. Bu isə PP+Au₈ nanokompozitinin keçirici material olduğunu göstərir.

Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər.

Burada ε_{ABMO} - ən aşağı boş molekulyar orbitalin enerjisi, ε_{YTMO} -elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalin enerjisidir. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{63} = -8.51505\text{eV}$. $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{62} = -9.123462\text{eV}$. Beləliklə $\eta = 0.304206\text{a.v.}$ $\eta < 1\text{eV}$ olduğundan PP+Au nanokompoziti yumşaq material hesab olunur. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{63} = -8.51505\text{eV}$ ən aşağı boş molekulyar orbitalin enerjisi mənfi işarəli olduğuna görə PP+Au₈ nanokompoziti elektrofildir. PP+Au nanokompozitinin stabilliyi

$\Delta E(PP + Au_8) = E_{PP+Au_8} - 4E_{Au_2} - 3E_{C_2} - 6E_{H_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(PP + Au_8)$ PP+Au₈ nanokompozitinin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\Delta E(PP + Au_8) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(PP + Au_8) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. E_{PP+Au_8} - PP+Au₈ nanokompozitinin, E_{Au_2} - Au₂ molekulunun, E_{C_2} - C₂ molekulunun, E_{H_2} - H₂ molekulunun tam enerjisidir.

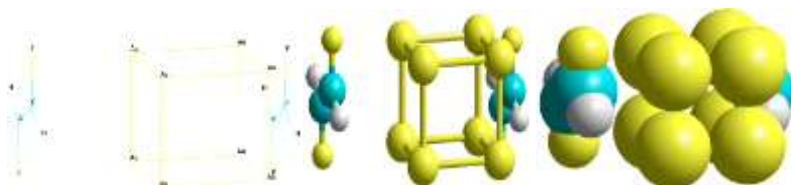
$$E_{PP+Au_8} = -70.84199008 \text{ a.v.}, E_{Au_2} = -11.97236618 \text{ a.v.},$$

$$E_{C_2} = -5.015905604 \text{ a.v.}, E_{H_2} = -1.309564163 \text{ a.v.} \text{ olduğundan}$$

$$\Delta E(PP + Au_8) = -0.047423582 \text{ a.v.} \quad \Delta E(PP + Au_8) < 0$$

olduğundan PP+Au₈ nanokompoziti stabildir.

PVDF+Au₈ nanonokompoziti üçün Genişlənmiş Hükkel metodu ilə alınmış nəticələr



Şəkil 14.3. PP+Au₈ nanohissəciyinin vizual modelləri

$$\text{Tam enerji} = -85.725611364 \text{ (a.v.)}$$

ATOMLARIN YÜKLƏRİ VƏ KOORDINATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları(Ånqstremlə)		
			x	y	z
1	79	-0.192579	-3.39064	-0.36549	-1.23794
2	79	-0.394253	-3.39057	-0.36541	1.44207
3	79	0.625447	-0.71062	-0.36552	-1.23794
4	79	-0.200363	-0.71062	2.31451	1.44207
5	79	1.043552	-0.71062	2.31451	-1.23794
6	79	-0.337933	-3.39057	2.31451	1.44207
7	79	-0.121985	-3.39064	2.31451	-1.23794

8	79	-0.252572	-0.71060	-0.36541	1.44199
9	9	-0.329480	-1.14154	-0.24347	-2.29575
10	6	0.281819	-1.14154	1.08653	-2.29575
11	6	0.405539	0.01893	1.75653	-2.29575
14	9	-0.529252	0.01893	3.08653	-2.29575
15	9	-0.597715	-3.70290	-1.28563	4.74731
16	6	0.548483	-2.54242	0.71437	4.74731
17	6	0.554152	-3.70290	0.04437	4.74731
20	9	-0.597242	-2.54242	2.04437	4.74731
13	1	-0.023665	0.95424	1.21653	-2.29575
18	1	0.046186	-4.63820	0.58437	4.74731
19	1	0.046339	-1.60712	0.17437	4.74731
12	1	0.025522	-2.07685	1.62653	-2.29575

Nəticələrin interpretasiyası. PVDF+Au₈ nanokompozitinin 136 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi əks işarə ilə ionlaşma potensialının qiymətinə bərabərdir: $I_p = -\varepsilon_{68} = 9.931404\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiymətini hesablamaq üçün mənfi işarəli ən yuxarı orbital enerji ilə $\varepsilon_{68} = -9.931404\text{eV}$, mənfi işarəli dolmamış ən aşağı orbital enerjinin $\varepsilon_{69} = -9.286147\text{eV}$ fərqi tapılır: $\varepsilon_{69} - \varepsilon_{68} = 0.645257\text{eV}$. Bu isə PVDF+Au₈ nanokompozitinin keçirici material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər. Burada ε_{ABMO} - ən aşağı boş molekulyar orbitalin enerjisi, ε_{YTMO} -elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalin enerjisidir. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{69} = -9.286147\text{eV}$. $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{68} = -9.931404\text{eV}$. Beləliklə $\eta = 0.3226285$ a.v. $\eta < 1\text{eV}$ olduğundan PVDF+Au nanokompoziti yumşaq material hesab olunur. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{69} = -9.286147$ eV ən aşağı boş molekulyar orbitalin enerjisi mənfi işarəli olduğuna görə PVDF+Au₈ nanokompoziti elektrofildir. PVDF+Aunanokompozitinin stabilliyi

$$\Delta E(PVDF + Au_8) = E_{PVDF+Au_8} - 4 \cdot E_{Au_2} - 2E_{C_2} - 2E_{H_2} - 2E_{F_2}$$

düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(PVDF + Au_8)$ PVDF+Au₈ nanokompozitinin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\Delta E(PVDF + Au_5) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(PVDF + Au_5) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. $E_{PVDF+Au_8}$ - PVDF+Au₈ nanokompozitinin, E_{Au_2} - Au₂ molekulunun, E_{C_2} - C₂ molekulunun, E_{H_2} - H₂ molekulunun və E_{F_2} -F₂ molekulunun tam enerjisidir.

$$E_{PVDF+Au_5} = -85.72561136 \text{ a.v.}, E_{Au_2} = -11.97236618 \text{ a.v.},$$

$$E_{C_2} = -5.015905604 \text{ a.v.}, E_{H_2} = -1.309564163 \text{ a.v.} \text{ və}$$

$$E_{F_2} = -12.57307187 \text{ a.v.} \text{ olduğundan}$$

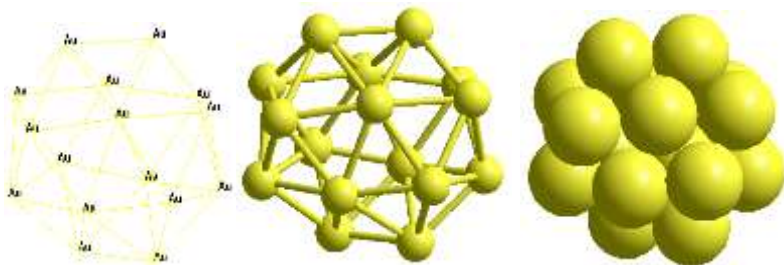
$\Delta E(PVDF + Au_8) = -0.039063634 \text{ a.v.}$ $\Delta E(PVDF + Au_8) < 0$ olduğundan PVDF+Au₈ nanokompoziti stabildir.

15. Qızıl nanohissəciyinin yarım-empirik metodla tədqiqi

Qızıl nanohissəcikləri öz xassələrinə görə geniş tətbiq sahələrinə malikdir. Bu nanohissəciklər elektronikada müxtəlif vericilərin hazırlanmasında, tibdə müxtəlif xəstəliklərin diaqnostikasında, kimyəvi proseslərdə katalizator rolunda və s. istifadə olunur və onun tətbiq sahələri daha da genişlənilir. Bu səbəbdən Au₁₆ qızıl nanohissəciyinin (Şəkil 15.1.) elektron quruluşunun kvantmexaniki metodlarla öyrənilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır [1, 25, 34]. Məlumdur ki, nanohissəciklərin quruluşu və xassələri nanohissəcikdə atomların sayı və ölçüsü ilə müəyyən olunur. N sayda atomundan ibarət olan nanohissəciyin ölçüsü

$$D = \sqrt[3]{\frac{6MN}{\pi \rho N_A}} \quad (15.1)$$

düsturu ilə müyyən olunur[34]. Burada N – atomların sayı, M – atomun kütləsi, ρ – materialın sıxlığı və N_A – Avaqadro ədədidir. $N=16$ sayda qızıl atomundan ibarət nanohissəciyin (15.1) düsturu ilə hesablanmış ölçüsü $D=0,8\text{nm}$ alınır.



Şəkil 15.1. Au_{16} qızıl nanohissəciyinin vizual modelləri

Au_{16} qızıl nanohissəciyinin elektron quruluşu və xassələri Volsberq-Helmhols(VH) metodu ilə öyrənilmişdir. Məlumdur ki, VH metodu molekulyar orbitallar (MO) metodunun sadə yarımempirik variantıdır. MO metodunda hesab olunur ki, molekulda hər bir elektron molekuldakı nüvələrin və digər elektronların yaratdığı müəyyən effektiv sahədə başqa elektronlardan asılı olmadan hərəkət edir. Molekulda elektronun halı molekulyar orbital adlanan birelektronlu dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. Bu funksiyalar çoxmərkəzli funksiyalardır. Belə ki, onların ifadəsinə elektronun müxtəlif atom nüvələrindən olan məsafələri daxil olur. Molekulyar orbitalların axtarılmasının müxtəlif variantları mövcuddur. Onlardan biri də U_i molekulyar orbitallarını molekula daxil olan atomların atom orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində axtarılması metodudur (MO LCAO metodu):

$$U_i = \sum_{q=1}^m C_{qi} \chi_q \quad (15.2)$$

Burada C_{qi} - naməlum əmsallar, χ_q - isə bazis funksiyaları kimi seçilən atom orbitalleridir. İşdə bazis funksiyaları kimi həqiqi Sleyter atom orbitallerindən (SAO) istifadə olunmuşdur.

$$\chi_q \equiv \chi_{nlm}(\xi, \bar{r}) = \frac{(2\xi)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-\xi r} S_{lm}(\theta, \varphi). \quad (15.3)$$

$S_{lm}(\theta, \varphi)$ - həqiqi sferik funksiyalardır. Burada n, ℓ, m - elektronun baş, orbital və maqnit kvant ədədləri, ξ - eksponensial parametridir[3]. Molekulların elektron quruluşunun kvantmexaniki hesablamalarında adətən valent elektronların atom orbitallarını nəzərə almaqla kifayətlənirlər. Qızıl nanohissəciyinin molekulyar orbitallarını qurmaq üçün hər qızıl atomundan 4 olmaqla (6s, 6p_y, 6p_z, 6p_x) 64 Sleyter atom orbitalından istifadə edilmişdir. Atom orbitallarını analitik ifadələri aşağıdakı kimi alınmışdır:

$$\chi_1 = 6s(Au) = \frac{1,027405}{\sqrt{\pi}} \cdot r^5 e^{-2,59900\#} \quad (15.4)$$

$$\chi_2 = 6p_y(Au) = \frac{1,316146}{\sqrt{\pi}} \cdot r^5 e^{-2,481152} \sin\theta \sin\varphi \quad (15.5)$$

$$\chi_3 = 6p_z(Au) = \frac{1,316146}{\sqrt{\pi}} \cdot r^5 e^{-2,481152} \cos\theta \quad (15.6)$$

$$\chi_4 = 6p_x(Au) = \frac{1,316146}{\sqrt{\pi}} \cdot r^5 e^{-2,481152} \sin\theta \cos\varphi \quad (15.7)$$

(15.2) düsturu əsasında 64 sayda molekulyar orbital qurulmuşdur. 16 aqızıl atomundan təşkil olunmuş nanohissəciyin 16*1=16 sayda elektronu ən aşağı enerjili 8 enerji səviyyəsini doldurur. (15.4)-(15.7) ifadələrində r, θ, φ ilə elektronun sferik koordinatları işarə edilmişdir. Digər qızıl atomlarına aid bazis funksiyaları da oxşar qaydada təyin olunurlar. C_{qi} - əmsalları aşağıdakı tənliklər sisteminin həllindən tapılır:

$$\sum_q (H_{pq} - \varepsilon_i S_{pq}) C_{qi} = 0 \quad (15.8)$$

Burada aşağıdakı kimi işarələmələr daxil edilmişdir:

$$H_{pq} = \int \chi_p^* \hat{H}_{ef} \chi_q dV \quad (15.9)$$

$$S_{pq} = \int \chi_p^* \chi_q dV \quad (15.10)$$

S_{pq} - χ_p və χ_q atom orbitalları arasında örtmə inteqrallarıdır.

\hat{H}_{ef} molekulda müəyyən effektiv sahədə digər elektronlardan asılı olmadan hərəkət edən bir elektron üçün effektiv Hamilton operatorudur:

$$\hat{H}_{ef} = -\frac{1}{2}\nabla^2 + U(r) \quad (15.11)$$

Effektiv Hamilton operatorunun aşkar ifadəsi məlum olmadığından H_{pq} matris elementlərinin qiymətləri dəqiq hesablanma bilmirlər və onlar müxtəlif üsullarla qiymətləndirirlər. VH metodunda H_{pq} kəmiyyətlərini qiymətləndirmək üçün atomların ionlaşma potensiallarının qiymətlərindən istifadə olunur. Bu matrisin H_{qq} diaqonal elementləri atomların uyğun valent hallarının ionlaşma potensiallarının qiymətlərinə bərabər götürülür. Qeyri-diaqonal elementləri isə

$$H_{pq} = 0.5 \cdot K \cdot S_{pq} (H_{pp} + H_{qq}) \quad (15.12)$$

ifadəsindən istifadə etməklə hesablanır [22]. K -əmsalının qiyməti təcrübi verilənlərlə müqayisədən və ya nəzəri olaraq enerjinin minimumluğu şərtindən tapılır. (15.9) və (15.12) ifadələrindən görüldüyü kimi VH metodu ilə nanohissəciyin kvantmexaniki hesablamalarını aparmaq üçün (15.10) örtmə inteqrallarının molekulyar koordinat sistemində qiymətlərini bilmək tələb olunur. İşdə örtmə inteqrallarını hesablamaq üçün uyğun elmi ədəbiyyatdan məlum olan [6, 10] analitik ifadələrindən istifadə olunmuşdur. Bu ifadələr əsasında örtmə inteqrallarını hesablamaq üçün bazis funksiyaları kimi seçilən atom orbitallarına uyğun n, ℓ, m kvant ədədlərini, ξ - eksponensial parametrinin qiymətini və atomların molekulyar

koordinat sistemindəki Dekart koordinatlarını daxil etmək lazımdır. H_{pq} matris elementlərini hesablamaq üçün qızıl atomunun $6s$ – valent halının ionlaşma potensialının aşağıdakı qiymətindən istifadə olunmuşdur.

$$(6s | Au | 6s) = -0.3389363 \text{ a.v.}$$

H_{pq} və S_{pq} matris elementlərinin qiymətlərini bilərək (15.8) tənliklər sistemini həll etməklə VH yaxınlaşmasında qızıl nanohissəciyinin ε_i orbital enerjilərinin qiymətlərini, $E = \sum_i \varepsilon_i$ elektron enerjisini, I -ionlaşma potensialının qiymətini və C_{qi} əmsallarının qiymətlərini hesablamaq olar. C_{qi} əmsallarının qiymətlərindən istifadə etməklə MO LCAO metoduna əsasən qızıl nanohissəciyə daxil olan atomların effektiv yüklərini (a.v. ilə):

$$q_A = n_A^o - \sum_i n_i \sum_{q \in A} |C_{qi}|^2 \quad (15.13)$$

düsturu ilə hesablamaq olar[38]. Burada n_A^o - A atomunun valent elektronlarını rabitələrin yaranmasına təqdim etdikdən sonra malik olduğu müsbət yük (qızıl atomları üçün: $n_A^o=1$), n_i i - ci molekulyar orbitaldəki elektronların sayıdır. i üzrə cəmləmə elektronlar tərəfindən tutulmuş molekulyar orbitallar üzrə aparılır.

Au₁₆ qızıl nanohissəciyi üçün Volsberq-Helmhols metodu ilə kompüter hesablamaları

Tam elektron enerji $E = -6.339366$ a.v.,

İonlaşma potensialı $I_p = 3.703389914$ eV

Orbital enerjilər (a.v.)

-0.684817	-0.661433	-0.623058	-0.598719	-0.169649	-0.158814
-0.137098	-0.136096				
-0.118915	-0.027240	-0.024011	-0.019275	-0.016488	-0.012503
-0.010608	-0.000524				

-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000
-0.000000	-0.000000				
-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000	-0.000000
-0.000000	-0.000000				
-0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.000000				
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
0.000000	0.000000				
0.016042	1.204702	1.229904	1.285250	1.303929	1.349486
1.407488	1.970694				
2.249531	2.896924	3.378143	3.463406	3.665532	3.846329
3.914490	3.988562				

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

N- si	Z Atomu	Yükü	Koordinatları(a.v.)		
			X	y	z
1	79	-0.477725	0.7273814	0.14770909	2.65187515
2	79	-0.556951	-1.87186795	0.56232986	2.58630971
3	79	-0.609782	0.3630383	-2.26437264	1.37450644
4	79	-0.477706	-2.20357127	-1.40494744	0.86809597
5	79	-0.489172	2.67199854	-0.86560465	1.07587674
6	79	-0.537255	2.24897258	1.75132253	1.07268487
7	79	-0.342177	-0.36228144	2.40525927	1.39682705
8	79	0.431552	0.00377388	0.05200688	-0.05143089
9	79	-0.590981	0.87839365	2.64291629	-0.99603353
10	79	-0.342212	-2.49680715	1.27442059	0.09783097
11	79	-0.498185	2.38512292	0.43716801	-1.35228525
12	79	-0.489191	-0.80251563	-2.70621679	-1.038866935
13	79	-0.537262	-2.39001153	-0.70620755	-1.75069312
14	79	-0.349636	1.78344705	-2.18175034	-1.03139997
15	79	-0.590996	-1.14737978	1.56980459	-2.22882881
16	79	-0.498192	0.21230642	-0.71383772	-2.67466599

Nəticələrin interpretasiyası. Au₁₆ nanohissəciyinin 16 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi əks işarə ilə ionlaşma potensialının qiymətinə bərabərdir: $I_p = -\varepsilon_8 = 3.703389914\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiymətini hesablamaq üçün mənfi işarəli ən yuxarı orbital enerji ilə $\varepsilon_8 = -3.703389914\text{eV}$, mənfi işarəli

dolmamış ən aşağı orbital enerjisinin $\varepsilon_9 = -3.235867414\text{eV}$ fərqi tapılır: $\varepsilon_9 - \varepsilon_8 = 0.4675225\text{eV}$. Bu isə Ag nanohissəciyinin keçirici material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanıla bilər. Burada ε_{ABMO} - ən aşağı boş molekulyar orbitalin enerjisi, ε_{YTMO} -elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalin enerjisidir. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_9 = -3.235867414\text{eV}$. $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_8 = -3.703389914\text{eV}$. Beləliklə $\eta = 0.23376125\text{a.v.}$ $\eta < 1\text{eV}$ olduğundan Au nanohissəciyi yumşaq material hesab olunur. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_9 = -3.235867414\text{eV}$ ən aşağı boş molekulyar orbitalin enerjisi mənfi işarəli olduğuna görə Au nanohissəciyinin elektrofildir. Au nanohissəciyinin stabilliyi $\Delta E(Au_{16}) = E_{Au_8} - 8 \cdot E_{Au_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(Au_{16})$ Au nanohissəciyinin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\Delta E(Au_{16}) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(Au_{16}) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. $E_{Au_{16}}$ - Au nanohissəciyinin, E_{Au_2} - Au₂ molekulunun tam enerjisidir. $E_{Au_{16}} = -6.339366\text{a.v.}$, $E_{Au_2} = -0.759462\text{a.v.}$ olduğundan $\Delta E(Au_{16}) = -0.26367\text{a.v.}$ $\Delta E(Au_{16}) < 0$ olduğundan Au₁₆ nanohissəciyi stabildir.

Nəticə. Qızıl nanohissəciyinin elektron quruluşu Volfsberq-Helmhols(VH) metodu ilə Sleyter funksiyalarından istifadə etməklə öyrənilmişdir. Kompüter hesablamaları BDU “Nanomaterialların kimyəvi fizikası” kafedrası əməkdaşları tərəfindən Delphi Studio sistemində hazırlanmış Windows əməliyyat sistemində işləyən proqram vasitəsilə aparılmışdır. Nanohissəciyin orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin qiymətləri və nanohissəciyə daxili olan atomların effektiv yükləri hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, qızıl nanohissəciyi yumşaq, elektrofil və stabil keçirici materialdır, nanosistemlərin öyrənilməsində və

tədqiqində Sleyter funksiyalarından istifadə olunması məqsədəuyğundur.

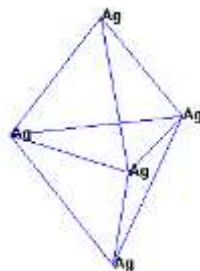
16.Gümüş nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının kvantmexaniki tədqiqi

Gümüş nanohissəciklərinin elektronikada və tibdə geniş tətbiq sahələri vardır. Buna görə də gümüş nanohissəcikləri və onların nanokompozisiyalarının elektron quruluşunun kvantmexaniki metodlarla öyrənilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır[28, 32]. Ag₅ Gümüş nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının elektron quruluşu və xassələri Xartri-Fok-Rutan (XFR) metodu ilə öyrənilmişdir. Gümüş nanohissəciyi və onun PP+Ag₅, PVDF+Ag₅ nanokompozisiyalarının tam enerjisini, ionlaşma potensialının qiymətini, elektrik keçiriciliyini, möhkəmliyini və s. tədqiq etmək olar. Hesablamalar zamanı χ_q atom orbitalları olaraq Ag atomundan 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, 3s-, 3p_x-, 3p_y-, 3p_z-, 3d_{x²-}, 3d_{y²-}, 3d_{z²-}, 3d_{xy}-, 3d_{xz}-, 3d_{yz}-, 4s-, 4p_x-, 4p_y-, 4p_z-, 4d_{x²-}, 4d_{y²-}, 4d_{z²-}, 4d_{xy}-, 4d_{xz}-, 4d_{yz}-, 5s-, 5p_x-, 5p_y-, 5p_z-, C və F atomlarından 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, H atomundan isə 1s-orbitalından istifadə edilmişdir. Atom orbitalları kimi Gauss funksiyalarından istifadə olunmuşdur.

Ag₅ nanohissəciyi üçün kompüter hesablamaları

Məlumdur ki, nanohissəciklərin quruluşu və xassələri nanohissəcikdə atomların sayı və ölçüsü ilə müəyyən olunur. N sayda atomdan ibarət olan nanohissəciyin ölçüsü (15.1) düsturu ilə müəyyən olunur[34]. N=5 sayda gümüş atomundan ibarət nanohissəciyin (15.1) düsturu ilə hesablanmış ölçüsü D=0,55nm alınır.

Hesablamalar zamanı hər Ag atomundan 29 olmaqla 145 atom orbitalından istifadə edilmişdir. Nanohissəciyin $47 \cdot 5 = 235$ sayda elektronu ən aşağı enerjili 118 enerjili səviyyəsini doldurur (118-ci səviyyədə bir elektron yerləşir). Şəkil 16.1-də Ag_5 üçün seçilmiş fəza quruluşu verilmişdir.



Şəkil 16.1.

Tam enerji	= -25748.64856971 (a.v.),
Elektronların kinetik enerjisi	= 25379.65592531 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0145

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDINATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)		
			x	y	z
1	47	0.077299	-1.03129183	-1.75593834	-0.73399966
2	47	0.076664	1.03129110	1.75593846	0.73399967
3	47	0.049193	1.29925865	-0.45625694	-0.73399966
4	47	-0.101458	-0.26796737	-0.45625705	1.46799981
5	47	-0.101698	-1.03129183	0.91251386	-0.73399966

Nəticələrin interpretasiyası. Ag_5 nanohissəciyinin 235 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi əks işarə ilə ionlaşma potensialının qiymətinə bərabərdir: $I_p = -\varepsilon_{118} = 3.450312\text{eV}$ [4]. Qadağan olunmuş zonanın qiymətini hesablamaq üçün mənfi işarəli ən yuxarı orbital enerji ilə $\varepsilon_{118} = -4.377313\text{eV}$, müsbət işarəli ən aşağı orbital enerjinin $\varepsilon_{119} = 2.815121\text{eV}$ fərqi tapılır: $\varepsilon_{119} - \varepsilon_{118} = 6.265433\text{eV}$. Bu isə Ag nanohissəciyinin dielektrik material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər. Burada ε_{ABMO} - ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi, ε_{YTMO} - elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisidir. $\varepsilon_{ABMO} =$

$\varepsilon_{119} = 2.815121\text{eV}$. $\varepsilon_{YMO} = \varepsilon_{118} = -3.450312\text{eV}$. Beləliklə $\eta = 3.1327165\text{a.v.}$ $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan Ag nanohissəciyi möhkəm material hesab olunur. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{119} = 2.815121\text{eV}$ ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi müsbəti işarəli olduğuna görə Ag nanohissəciyinin nuklefidir. Ag nanohissəciyinin stabilliyi $\Delta E(\text{Ag}_5) = E_{\text{Ag}_8} - \frac{5}{2} \cdot E_{\text{Ag}_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(\text{Ag}_5)$ Ag nanohissəciyinin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\Delta E(\text{Ag}_5) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(\text{Ag}_5) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. E_{Ag_5} - Ag nanohissəciyinin, E_{Ag_2} - Ag₂ molekulunun hesablanmış tam enerjidir. $E_{\text{Ag}_5} = -25748.64857\text{a.v.}$, $E_{\text{Ag}_2} = -10299.14996\text{a.v.}$ olduğundan $\Delta E(\text{Ag}_5) = -0.773681079\text{a.v.}$ $\Delta E(\text{Ag}_5) < 0$ olduğundan Ag₅ nanohissəciyi stabildir. Ag₅ nanohissəciyinin şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 198\text{ nm}$ olar.

PP+Ag₅ nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları

PP+Ag₅ nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki C₃H₆ polimeri arasında yerləşdirilmiş Ag₅ nanohissəciyinə baxılmışdır. Hesablamalar zamanı hər C atomundan 5, H atomundan bir, Ag atomundan 29 olmaqla 187 bazis funksiyalarından istifadə edilmişdir. Nanokompozitin 283 sayda elektronu ən aşağı enerjili 142 enerji səviyyəsini doldurur (142-ci səviyyədə bir elektron yerləşir). Şəkil 2-də PP+Ag₅ nanokompoziti üçün seçilmiş nəzəri modelin fəza quruluşu verilmişdir.

Tam enerji	= -25979.786473298 (a.v.),
Elektronların kinetik enerjisi	= 25610.683136688 (a.v.),
Virial şərti (-V/T)	= 2.0144.

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)
		x y z

1	47	-0.077577	-1.03129185	-1.75593834	-0.73399964
2	47	-0.074038	1.03129108	1.75593846	0.73399969
3	47	-0.028829	1.29925863	-0.45625694	-0.73399964
4	47	-0.016402	-0.26796739	-0.45625705	1.46799983
5	47	0.087590	-1.03129185	0.91251386	-0.73399964
6	6	-0.179671	1.63481902	-2.19766506	-4.30138305
7	6	-0.166477	1.63481902	0.80233494	-4.30138305
8	6	-0.059849	1.63481902	-0.73766506	-4.30138305
15	6	-0.043657	-2.08541708	-0.63475976	3.25002700
16	6	-0.182438	-2.08541708	0.82524024	3.25002700
17	6	-0.161516	-2.08541708	-2.17475976	3.25002700
12	1	0.067489	2.66248227	-2.56099443	-4.30138305
13	1	0.071864	1.12099579	-2.56099443	-3.41139572
14	1	0.066956	1.12098459	-2.56100235	-5.19136069
9	1	0.067814	2.66248227	1.16566432	-4.30138305
10	1	0.065141	1.12099579	1.16566432	-5.19137038
11	1	0.072979	1.12098459	1.16567223	-3.41140541
18	1	0.083211	-1.05775382	-2.53808913	3.25002700
19	1	0.076118	-2.59924031	-2.53808913	4.14001433
20	1	0.084871	-2.59925150	-2.53809705	2.36004936
21	1	0.083806	-1.05775382	1.18856962	3.25002700
22	1	0.084412	-2.59924031	1.18856962	2.36003967
23	1	0.078200	-2.59925150	1.18857753	4.14000464



Şəkil 16.2. PP+Ag₅ nanokompoziti

Nəticələrin interpretasiyası. PP+Ag₅ nanokompozitinin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{142} = 3.072905\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{143} - \varepsilon_{142} = 6.47304\text{eV}$. Bu isə PP+Ag₅ nanokompozitinin dielektrik material olduğunu

göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanır.

$$\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{143} = 3.400135\text{eV}. \quad \varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{142} = -3.072905\text{eV}.$$

Beləliklə $\eta = 3.23652\text{a.v.}$ $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan PP+Ag₅ nanokompoziti möhkəm material hesab olunur. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{143} = 3.400135\text{eV}$ ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi müsbət işarəli olduğuna görə PP+Ag₅ nanokompoziti nuklefidir. PP+Ag₅ nanokompozitinin stabilliyi $\Delta E(\text{PP} + \text{Ag}_5) = E_{\text{PP}+\text{Ag}_5} - \frac{5}{2} \cdot E_{\text{Ag}_2} - 3E_{\text{C}_2} - 6E_{\text{H}_2}$ düsturu ilə hesablanır. $E_{\text{PP}+\text{Ag}_5}$ - PP+Ag₅ nanokompozitinin, E_{Ag_2} -Ag₂ molekulunun, E_{C_2} - C₂ molekulunun, E_{H_2} - H₂ molekulunun tam enerjisidir. $E_{\text{Ag}_5} = -25979.78647\text{a.v.}$, $E_{\text{Ag}_2} = -10299.14996\text{a.v.}$, $E_{\text{C}_2} = -74.31543142\text{a.v.}$, $E_{\text{H}_2} = -1.111298185\text{a.v.}$ olduğundan $\Delta E(\text{PP} + \text{Ag}_5) = -2.297501299\text{a.v.}$ $\Delta E(\text{PP} + \text{Ag}_5) < 0$ olduğundan PP+Ag₅ nanokompoziti stabildir.

PP+Ag₅ nanokompozitinin şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 192\text{ nm}$ olar.

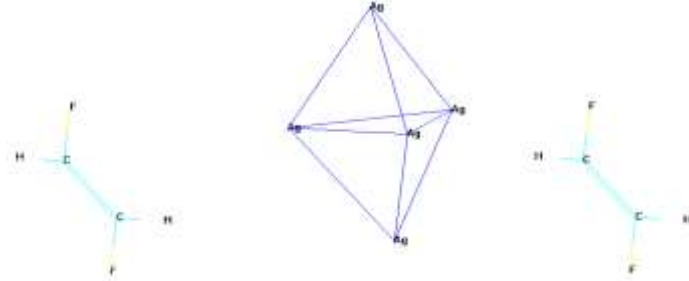
PVDF+Ag₅ nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları

PVDF+Ag₅ nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki C₂H₂F₂ polimeri arasında yerləşdirilmiş Ag₅ nanohissəciyinə baxılmışdır. Hesablamalar zamanı hər C və F atomlarından 5, H atomundan bir, Ag atomundan 29 olmaqla 189 sayda bazis funksiyalarından istifadə edilmiş və 189 sayda molekulyar orbital qurulmuşdur. Nanokompozitin 299 sayda elektronu ən aşağı enerjili 150 enerji səviyyəsini doldurur(150-ci səviyyədə bir elektron yerləşir). PVDF+Ag₅ nanokompoziti üçün seçilmiş nəzəri modelin fəza quruluşu Şəkil 15.3-də verilmişdir.

Tam enerji	= -26292.600749293 (a.v.),
Elektronların kinetik enerjisi	= 25918.525839869 (a.v.),
Virial şərti (-V/T)	= 2.0144.

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDINATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)		
		x	y	z
1 47	-0.021969	-1.03129185	-1.75593834	-0.73399964
2 47	-0.083623	1.03129108	1.75593846	0.73399969
3 47	-0.072589	1.29925863	-0.45625694	-0.73399964
4 47	0.139290	-0.26796739	-0.45625705	1.46799983
5 47	-0.065796	-1.03129185	0.91251386	-0.73399964
6 9	-0.128369	1.77192397	-1.85353792	-4.46329600
7 6	0.054984	1.77192397	-0.52353792	-4.46329600
8 6	0.052301	2.93239801	0.14646208	-4.46329600
11 9	-0.127024	2.93239801	1.47646208	-4.46329600
12 9	-0.104884	-3.37056600	-3.12461306	2.48630400
13 6	0.086149	-3.37056600	-1.79461306	2.48630400
14 6	0.016596	-2.21009196	-1.12461306	2.48630400
17 9	-0.074957	-2.21009196	0.20538694	2.48630400
10 1	0.080484	0.83661653	0.01646208	-4.46329600
15 1	0.100332	-4.30587344	-1.25461306	2.48630400
16 1	0.073733	-1.27478453	-1.66461306	2.48630400
9 1	0.075340	3.86770545	-0.39353792	-4.46329600



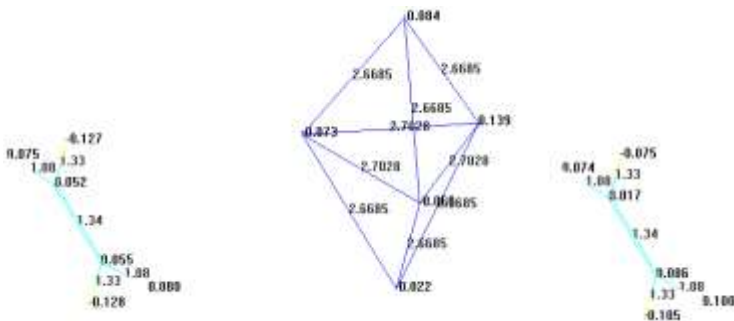
Şəkil 16.3. PVDF+Ag₅ nanokompoziti

Nəticələrin interpretasiyası. PVDF+Ag₅ nanokompozitin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\epsilon_{150} = -3.362369\text{eV}$.

Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\epsilon_{151} - \epsilon_{150} = 6.570365\text{eV}$. Bu isə nanokompozitin dielektrik material olduğunu göstərir.

Nanokompozitin möhkəmliyi $\eta = \frac{1}{2}(\epsilon_{ABMO} - \epsilon_{YTMO})$

$= 3.2851825\text{a.v.}$, burada $\epsilon_{ABMO} = \epsilon_{151} = 3.207996\text{eV}$ $\epsilon_{YTMO} =$



Şəkil 16.6. PVDF+Ag₅ nanokompozitinin molekulyar diaqramı

Nəticə. Gümüş nanohissəciyi və onun PP+Ag₅, PVDF+Ag₅ nanokompozisiyaları Xartri-Fok-Rutan (XFR) metodu ilə kompüterdə tədqiq olunmuşdur. Gümüş nanohissəciyin və onun nanokompozisiyalarının orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin qiymətləri, nanohissəciyə və onun nanokompozisiyalarına daxi olan atomların effektiv yükləri hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, gümüş nanohissəciyi və onun PP+Ag₅, PVDF+Ag₅ nanokompozisiyaları möhkəm, nüklefil və stabil dielektrik materiallardır. Gümüş Ag₅ nanohissəciyi və onun PP+Ag₅, PVDF+Ag₅ nanokompozisiyaları şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu uyğun olaraq 198nm, 192nm və 189nm-dir.

17. Dəmir nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının kvantmexaniki tədqiqi

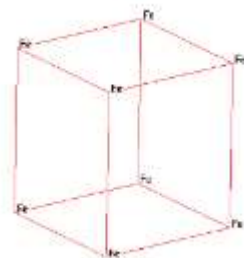
Dəmir nanohissəciklərinin elektronikada və tibdə geniş tətbiq sahələri vardır. Buna görə də dəmir nanohissəcikləri və onun nanokompozisiyalarının elektron quruluşunun kvantmexaniki metodlarla öyrənilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır [37, 8]. Dəmir nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının elektron quruluşu və xassələri Xartri-Fok-Rutan (XFR) metodu ilə öyrənilmişdir. Dəmir Fe₈ nanohissəciyi və onun

PP+Fe₈, PVDF+Fe₈ nanokompozisiyalarının tam enerjisini, ionlaşma potensialının qiymətini, elektrik keçiriciliyini, möhkəmliyini və s. tədqiq etmək olar. Hesablamalar zamanı χ_q atom orbitalları olaraq Fe atomundan 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, 3s-, 3p_x-, 3p_y-, 3p_z-, 3d_{x²-}, 3d_{y²-}, 3d_{z²-}, 3d_{xy}-, 3d_{xz}-, 3d_{yz}-, 4s-, 4p_x-, 4p_y-, 4p_z-, C və F atomlarından 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, H atomundan isə 1s- orbitalından istifadə edilmişdir. Atom orbitalları kimi Gauss funksiyalarından istifadə olunmuşdur.

Fe₈ nanohissəciyi üçün kompüter hesablamaları

Məlumdur ki, nanohissəciklərin quruluşu və xassələri nanohissəcikdə atomların sayı və ölçüsü ilə müəyyən olunur. N sayda atomdan ibarət olan nanohissəciyin (15.1) düsturu ilə müəyyən olunur[34]. N=8 sayda dəmir atomundan ibarət nanohissəciyin ölçüsü D=0,57nm alınır.

Hesablamalar zamanı hər Fe atomundan 19 olmaqla 152 atom orbitalından istifadə edilmişdir. Nanohissəciyin 26*8=208 sayda elektronu ən aşağı enerjili 104 enerji səviyyəsini doldurur. Şəkil 16.1-də Fe₈ üçün seçilmiş fəza quruluşu verilmişdir.



Şəkil 17.1.

Tam enerji	= -10171.418094282 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 9900.661386989 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0273

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)		
		x	y	z
1 26	8.228390	-1.23908700	-0.59242850	1.06279800
2 26	8.228306	-1.23908700	1.74754900	1.06279800
3 26	-8.228249	1.10082000	-0.59242850	1.06279800
4 26	-8.229038	1.10094700	1.74754900	1.06279800

5 26	-8.228307	1.10082000	-0.59242850	-1.27725700
6 26	8.228543	-1.23908700	-0.59242850	-1.27719800
7 26	-8.228143	1.10082000	1.74747000	-1.27725700
8 26	8.228501	-1.23908700	1.74765800	-1.27719800

Nəticələrin interpretasiyası. Fe₈ nanohissəciyinin 208 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Qadağan olunmuş zonanın qiymətini hesablamaq üçün $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO}$ fərqi tapılır. Burada ε_{ABMO} -ən aşağı boş və ε_{YTMO} -elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisidir. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{105} = -7.131742\text{eV}$, $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{104} = -12.686415\text{eV}$, $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO} = 5.554673\text{eV}$. Bu isə Fe nanohissəciyinin dielektrik material olduğunu göstərir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi əks işarə ilə ionlaşma potensialının qiymətinə bərabərdir:

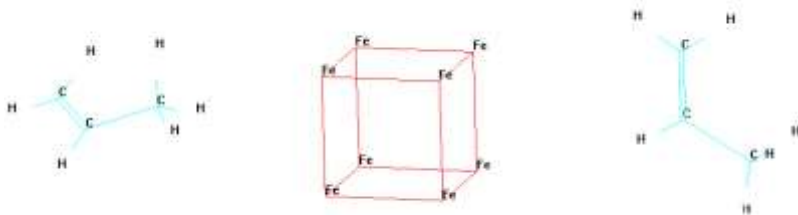
$$I_p = -\varepsilon_{YTMO} - \varepsilon_{104} = 12.686415\text{eV} [15].$$

Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablana bilər.

Beləliklə $\eta = 2.7773365\text{eV}$, $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan Fe nanohissəciyi möhkəm material hesab olunur. ε_{ABMO} mənfi işarəli olduğuna görə Fe nanohissəciyi elektrofildir. Fe₈ nanohissəciyinin stabilliyi $\Delta E(Fe_8) = E_{Fe_8} - 4 \cdot E_{Fe_2}$ düsturu ilə hesablanır. $\Delta E(Fe_8) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(Fe_8) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. E_{Fe_8} - Fe₈ nanohissəciyinin, E_{Fe_2} - Fe₂-nin hesablanmış tam enerjisidir. $E_{Fe_8} = -10171.41809$ a.v., $E_{Fe_2} = -2513.261434$ a.v. olduğundan $\Delta E(Fe_8) = -118.3723601$ a.v. $\Delta E(Fe_8) < 0$ olduğundan Fe₈ nanohissəciyi stabildir. Fe₈ nanohissəciyinin şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 224\text{nm}$ olar.

PP+Fe₈ nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları

PP+Fe₈ nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki C₃H₆ polimeri arasında yerləşdirilmiş Fe₈ nanohissəciyinə baxılmışdır. Hesablamalar zamanı hər C atomundan 5, H atomundan bir, Fe atomundan 19 olmaqla 194 bazis funksiyalarından istifadə edilmişdir. Nanokompozitin 256 sayda elektronu ən aşağı enerjili 128 enerji səviyyəsini doldurur. Şəkil 17.2-də PP+Fe₈ nanokompoziti üçün seçilmiş nəzəri modelin fəza quruluşu verilmişdir.



Şəkil 17.2. PP+Fe₈ nanokompoziti

Tam enerji = -11051.24584 (a.v.),
Elektronların kinetik enerjisi = 10132.206526127 (a.v.),
Virial şərti (-V/T) = 2.0907.

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)		
			x	y	z
1	26	6.704114	-1.23910832	-0.59237454	-1.27722725
2	26	-7.848253	1.10086245	-0.59250094	-1.27722725
3	26	6.729828	-1.23910832	1.74753304	-1.27722725
4	26	-7.851104	1.10086245	1.74753304	-1.27722725
5	26	7.786721	-1.23910832	1.74753304	1.06282733
6	26	7.388113	-1.23910832	-0.59237454	1.06276816
7	26	-7.390213	1.10079035	1.74753304	1.06282733
8	26	-7.518702	1.10097803	-0.59237454	1.06276816
13	6	-3.999999	6.87297390	0.48424481	-0.67000387
14	6	-4.000002	6.04788391	0.80795842	0.33500160
15	6	-4.000019	4.61481221	0.30129728	0.33500160
18	6	3.999345	-5.27093976	-0.66931905	-1.66616999
19	6	4.000217	-5.27093976	0.67068095	-1.66616999

20	6	5.999555	-6.58729837	1.43068095	-1.66616999
11	1	-1.000000	7.89120905	0.84424089	-0.67000387
16	1	-1.000000	6.51973665	-0.13665478	-1.48000828

Nəticələrin interpretasiyası. PP+Fe₈ nanokompozitinin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{128} = 0.11693\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{129} - \varepsilon_{128} = 2.681707\text{eV}$. Bu isə PP+Fe₈ nanokompozitinin yarımkeçirici material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanır.

$\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{129} = 2.564777\text{eV}$. $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{128} = -0.11693\text{eV}$. Beləliklə $\eta = 1.3408535\text{a.v.}$ $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan PP+Fe₈ nanokompoziti möhkəm material hesab olunur. ε_{ABMO} müsbət işarəli olduğuna görə PP+Fe₈ nanokompoziti nuklefidir. PP+Fe₈ nanokompozitinin stabilliyi

$$\Delta E(PP + Fe_8) = E_{PP+Fe_8} - 4 \cdot E_{Fe_2} - 3E_{C_2} - 6E_{H_2}$$

düsturu ilə hesablanır. E_{PP+Fe_8} - PP+Fe₈ nanokompozitinin, E_{Fe_2} - Fe₂-nin, E_{C_2} - C₂-nin, E_{H_2} - H₂-nin tam enerjisidir. $E_{PP+Fe_8} = -11051.24584\text{a.v.}$, $E_{Fe_2} = -2513.261434\text{a.v.}$, $E_{C_2} = -74.31543142\text{a.v.}$, $E_{H_2} = -1.111298185\text{ a.v.}$, olduğundan $\Delta E(PP + Fe_8) = -768.5860176\text{a.v.}$ $\Delta E(PP + Fe_8) < 0$ olduğundan PP+Fe₈ nanokompoziti stabildir. PP+Fe₈ nanokompozitinin süalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 464\text{nm}$ olar.

PVDF+Fe₈ nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları

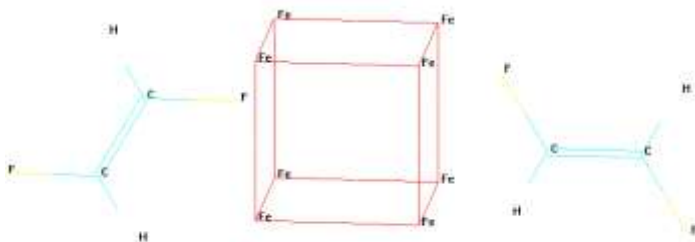
PVDF+Fe₈ nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki C₂H₂F₂ polimeri arasında yerləşdirilmiş Fe₈ nanohissəciyinə baxılmışdır. Hesablamalar zamanı hər C və F atomlarından 5, H atomundan bir, Fe atomundan 19 olmaqla 196 sayda bazis funksiyalarından istifadə edilmiş və 196 sayda molekulyar orbital qurulmuşdur. Nanokompozitin 272 sayda elektronu ən aşağı enerjili 136 enerji səviyyəsini doldurur. PVDF+Fe₈

nanokompoziti üçün seçilmiş nəzəri modelin fəza quruluşu
Şəkil 17.3-də verilmişdir.

Tam enerji = -10742.095170728 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi = 10452.694306077 (a.v.)
Virial şərti (-V/T) = 2.0277.

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları(Ånqstremlə)		
		x	y	z
1 26	7.661104	-1.23908721	-0.59242849	1.06279775
2 26	7.844495	-1.23908721	1.74754897	1.06279775
3 26	-7.278534	1.10082036	-0.59242849	1.06279775
4 26	-7.135825	1.10094677	1.74754897	1.06279775
5 26	-7.683772	1.10082036	-0.59242849	-1.27725683
6 26	8.175063	-1.23908721	-0.59242849	-1.27719766
7 26	-7.915455	1.10082036	1.74747018	-1.27725683
8 26	8.401979	-1.23908721	1.74765785	-1.27719766
9 6	-0.932745	0.42866191	-3.57436400	0.39854940
10 6	-0.406608	0.42866191	-2.23436400	0.39854940
11 9	1.735796	-0.72315187	-1.56936400	0.39854940
12 9	-1.004532	1.58047570	-4.23936400	0.39854940
15 9	-0.125206	-0.09164610	2.24624800	0.77426600
16 6	-3.249944	1.06882794	4.24624800	0.77426600
17 6	2.840179	-0.09164610	3.57624800	0.77426600
18 9	-0.995179	1.06882794	5.57624800	0.77426600
13 1	1.018749	-0.50664552	-4.11436400	0.39854940
14 1	-0.951997	1.36396935	-1.69436400	0.39854940
19 1	0.999348	-1.02695354	4.11624800	0.77426600
20 1	-0.996907	2.00413537	3.70624800	0.77426600



Şəkil 17.3. PVDF+Fe₈ nanokompoziti

Nəticələrin interpretasiyası. PVDF+Fe₈ nanokompozitin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{136} = 24.101256\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{137} - \varepsilon_{136} = 4.645418\text{eV}$. Bu işə nanokompozitin dielektrik material olduğunu göstərir. Nanokompozitin möhkəmliyi

$$\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO}) = 2.322709\text{a.v.}$$
 düsturu ilə hesablanır. Burada

$$\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{137} = -19.455838\text{eV}, \quad \varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{136} = -19.455838\text{eV}.$$

$\eta > 1\text{eV}$ olduğundan PVDF+Fe₈ nanokompoziti möhkəm material hesab olunur. ε_{ABMO} mənfi işarəli olduğuna görə PVDF+Fe₈ nanokompoziti elektrofildir. Nanokompozitin stabilliyi $\Delta E(PVDF + Fe_8) = E_{PVDF+Fe_8} - 4 \cdot E_{Fe_2} - 2E_{C_2} - 2E_{H_2} - 2E_{F_2}$ düsturu ilə hesablanır. $E_{PVDF+Fe_8}$ -PVDF+Fe₈ nanokompozitinin, E_{Fe_2} -Fe₂ -nin, E_{C_2} -C₂-nin, E_{H_2} - H₂-nin və E_{F_2} - F₂-nin tam enerjisidir.

$$E_{PVDF+Fe_8} = -10742.095170728\text{a.v.}, \quad E_{Fe_2} = -2513.261434\text{a.v.},$$

$$E_{C_2} = -74.31543142\text{a.v.}, \quad E_{H_2} = -1.111298185\text{ a.v.},$$

$$E_{F_2} = -195.9593201\text{a.v.}$$
 olduğundan

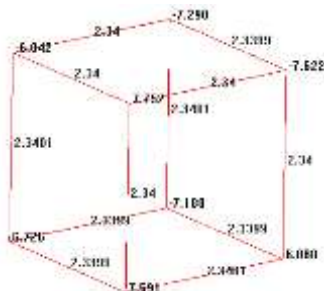
$$\Delta E(PVDF + Fe_8) = -146.277337\text{ a.v.}$$
 $\Delta E(PVDF + Fe_8) < 0$

olduğundan PVDF+Fe₈ nanokompoziti stabildir. PVDF+Fe₈ nanokompozitinin şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 268\text{nm}$ olar.

Atomların hesablanmış effektiv yükləri əsasında Fe₈ nanohissəciyinin, PP+Fe₈ və PVDF+Fe₈ nanokompozitlərinin molekulyar diaqramları qurulmuşdur. Diaqramlarda rabitə uzunluqların qiymətləri Anqstremlərlə verilmişdir (Şəkil 17.4-17.6.).

Nəticə. Dəmir nanohissəciyi və onun PP+Fe₈, PVDF+Fe₈ nanokompozisiyaları XFR metodu ilə kompüterdə tədqiq olunmuşdur. Dəmir nanohissəciyin və onun nanokompozisiyalarının orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin qiymətləri, nanohissəciyə və onun nanokompozisiyalarına daxili olan atomların effektiv yükləri hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, dəmir

nanohissəciyi və PVDF+Fe₈ nanokompoziti möhkəm, elektrofil və stabil dielektrik, PP+Fe₈ nanokompoziti möhkəm, nukleofil və stabil yarımkəçirici materiallardır.



Şəkil 17.4. Fe₈ nanohissəciyinin molekulyar diaqramı



Şəkil 17.5. PP+Fe₈ nanokompozitinin molekulyar diaqramı



Şəkil 17.6. PVDF+Fe₈ nanokompozitinin molekulyar diaqramı

18. Həcmə mərkəzləşmiş dəmir nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının kvantmexaniki tədqiqi

Həcmə mərkəzləşmiş dəmir nanohissəciklərinin elektronikada və tibdə geniş tətbiq sahələri vardır. Buna görə də həcmə mərkəzləşmiş dəmir nanohissəcikləri və onun nanokompozisiyalarının elektron quruluşunun kvantmexaniki metodlarla öyrənilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır [36, 8]. Həcmə mərkəzləşmiş dəmir nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının elektron quruluşu və xassələri Xartri-Fok-Rutan (XFR) metodu ilə öyrənilmişdir. Həcmə mərkəzləşmiş dəmir nanohissəciyi və onun PP+Fe₉, PVDF+Fe₉ nanokompozisiyalarının tam enerjisini, ionlaşma potensialının qiymətini, elektrik keçiriciliyini, möhkəmliyini və s. tədqiq etmək olar. Hesablamalar zamanı χ_q atom orbitalları olaraq Fe atomundan 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, 3s-, 3p_x-, 3p_y-, 3p_z-, 3d_{x²-}, 3d_{y²-}, 3d_{z²-}, 3d_{xy} -, 3d_{xz} -, 3d_{yz} -, 4s-, 4p_x-, 4p_y-, 4p_z-, C və F atomlarından 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, H atomundan isə 1s-orbitalından istifadə edilmişdir. Atom orbitalları kimi Gauss funksiyalarından istifadə olunmuşdur.

Fe₉ nanohissəciyi üçün kompüter hesablamaları

Məlumdur ki, nanohissəciklərin quruluşu və xassələri nanohissəcikdə atomların sayı və ölçüsü ilə müəyyən olunur. N sayda atomdan ibarət olan nanohissəciyin ölçüsü (15.1) düsturu ilə müəyyən olunur [34]. N=9 sayda dəmir atomundan ibarət nanohissəciyin ölçüsü D=0,587nm alınır. Hesablamalar zamanı hər Fe atomundan 19 olmaqla 171 atom orbitalından istifadə edilmişdir. Fe₉ nanohissəciyinin 26*9=234 sayda elektronu ən aşağı enerjili 117 enerji səviyyəsini doldurur. Şəkil 18.1-də Fe₉ üçün seçilmiş fəza quruluşu verilmişdir.

Tam enerji	= -11424.473812909(a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 11140.170314616(a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0255.



Şəkil 18.1.

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDINATLARI

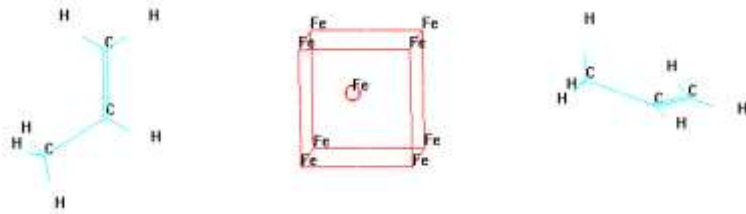
Z Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)		
		x	y	z
1 26	8.364852	-1.23910832	-0.59237449	-1.27722725
2 26	-8.239647	1.10086245	-0.59250089	-1.27722725
3 26	8.455448	-1.23910832	1.74753309	-1.27722725
4 26	-7.978471	1.10086245	1.74753309	-1.27722725
5 26	8.454862	-1.23910832	1.74753309	1.06282733
6 26	8.338149	-1.23910832	-0.59237449	1.06276816
7 26	-7.975956	1.10079035	1.74753309	1.06282733
8 26	-8.267027	1.10097803	-0.59237449	1.06276816
9 26	-1.152236	-0.25996420	0.46059830	-0.08510014

Nəticələrin interpretasiyası. Fe_9 nanohissəciyinin 234 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Qadağan olunmuş zonanın qiymətini hesablamaq üçün $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO}$ fərqi tapılır. Burada ε_{ABMO} -ən aşağı boş və ε_{YTMO} -elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisidir. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{118} = -9.703837\text{eV}$, $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{117} = -17.703022\text{eV}$, $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO} = 7.999185\text{eV}$. Bu isə Fe_9 nanohissəciyinin dielektrik material olduğunu göstərir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi əks işarə ilə ionlaşma potensialının qiymətinə bərabərdir: $I_p = -\varepsilon_{YTMO} = -\varepsilon_{117} = 17.703022\text{eV}$ [15].

Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanır. Beləliklə, $\eta = 3.9995925\text{eV}$, $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan Fe_9 nanohissəciyi möhkəm material hesab olunur. ε_{ABMO} mənfi işarəli olduğuna görə Fe_9 nanohissəciyi elektrofildir. Fe_9 nanohissəciyinin stabilliyi $\Delta E(\text{Fe}_9) = E_{\text{Fe}_9} - 4,5 \cdot E_{\text{Fe}_2}$ düsturu ilə hesablanır. $\Delta E(\text{Fe}_9) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(\text{Fe}_9) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. E_{Fe_8} - Fe_9 nanohissəciyinin, E_{Fe_2} - Fe_2 -nin hesablanmış tam enerjisidir. $E_{\text{Fe}_9} = -11424.47381\text{a.v.}$, $E_{\text{Fe}_2} = -2513.261434\text{a.v.}$ olduğundan $\Delta E(\text{Fe}_9) = -114.7973619\text{a.v.}$ $\Delta E(\text{Fe}_9) < 0$ olduğundan Fe_9 nanohissəciyi stabildir. Fe_9 nanohissəciyinin şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 155\text{nm}$ olar.

PP+ Fe_9 nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları

PP+ Fe_9 nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki C_3H_6 polimeri arasında yerləşdirilmiş Fe_9 nanohissəciyinə baxılmışdır. Hesablamalar zamanı hər C atomundan 5, H atomundan bir, Fe atomundan 19 olmaqla 213 bazis funksiyalarından istifadə edilmişdir. Nanokompozitin 282 sayda elektronu ən aşağı enerjili 141 enerji səviyyəsini doldurur. Şəkil 18.2-də PP+ Fe_9 nanokompoziti üçün seçilmiş nəzəri modelin fəza quruluşu verilmişdir.



Şəkil 18.2. PP+ Fe_9 nanokompoziti

Tam enerji = -12301.020290494 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi = 11356.356775207 (a.v.)

$$\text{Virial şərti } (-V/T) = 2.0832.$$

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)		
			x	y	z
1	26	6.884879	-1.23910832	-0.59237454	-1.27722725
2	26	-7.964933	1.10086245	-0.59250094	-1.27722725
3	26	6.893423	-1.23910832	1.74753304	-1.27722725
4	26	-7.852645	1.10086245	1.74753304	-1.27722725
5	26	6.719693	-1.23910832	1.74753304	1.06282733
6	26	7.065980	-1.23910832	-0.59237454	1.06276816
7	26	-7.571015	1.10079035	1.74753304	1.06282733
8	26	-7.647958	1.10097803	-0.59237454	1.06276816
9	26	-0.526692	-0.25996420	0.46059830	-0.08510014
14	6	-3.999998	6.87297390	0.48424481	-0.67000387
15	6	-4.000000	6.04788391	0.80795842	0.33500160
16	6	-4.000051	4.61481221	0.30129728	0.33500160
19	6	4.001105	-5.27093976	-0.66931905	-1.66616999
20	6	5.999803	-5.27093976	0.67068095	-1.66616999
21	6	6.000003	-6.58729837	1.43068095	-1.66616999
12	1	-1.000000	7.89120905	0.84424089	-0.67000387
17	1	-1.000000	6.51973665	-0.13665478	-1.48000828
18	1	-1.000364	4.10097779	0.66463457	-0.55497604
13	1	-1.000346	4.10098898	0.66462665	1.22498893
10	1	-1.000067	4.61481221	-0.78870272	0.33500160
11	1	-1.000001	6.40112115	1.42885801	1.14500601
22	1	1.000039	-4.33563232	1.21068095	-1.66616999
23	1	1.000000	-6.38811921	2.50232812	-1.66616999
24	1	1.000000	-7.15886246	1.16736166	-2.55615732
25	1	1.000000	-7.15887491	1.16735593	-0.77619235
26	1	1.000216	-4.33563232	-1.20931905	-1.66616999
27	1	0.998906	-6.20624719	-1.20931905	-1.66616999

Nəticələrin interpretasiyası. PP+Fe₉ nanokompozitinin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{141} = 3.829217\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{142} - \varepsilon_{141} = 10.857246\text{eV}$. Bu isə PP+Fe₉ nanokompozitinin dielektrik material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanır.

$$\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{142} = 7.028029\text{eV}. \quad \varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{141} = -3.829217\text{eV}.$$

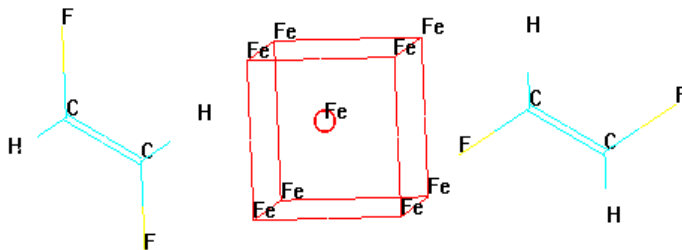
Beləliklə $\eta = 5.428623 \text{ a.v.}$ $\eta > 1 \text{ eV}$ olduğundan PP+Fe₉ nanokompoziti möhkəm material hesab olunur. ε_{ABMO} müsbət işarəli olduğuna görə PP+Fe₉ nanokompoziti nuklefeldir. PP+Fe₉ nanokompozitinin stabilliyi

$$\Delta E(PP + Fe_9) = E_{PP+Fe_9} - 4,5 \cdot E_{Fe_2} - 3E_{C_2} - 6E_{H_2}$$

düsturu ilə hesablanır. E_{PP+Fe_9} -PP+Fe₉ nanokompozitinin, E_{Fe_2} - Fe₂-nin, E_{C_2} -C₂-nin, E_{H_2} - H₂-nin tam enerjisidir. $E_{PP+Fe_9} = -12301.02029 \text{ a.v.}$, $E_{Fe_2} = -2513.261434 \text{ a.v.}$, $E_{C_2} = -74.31543142 \text{ a.v.}$, $E_{H_2} = -1.111298185 \text{ a.v.}$, olduğundan $\Delta E(PP + Fe_9) = -761.7297561 \text{ a.v.}$ $\Delta E(PP + Fe_9) < 0$ olduğundan PP+Fe₉ nanokompoziti stabildir. PP+Fe₉ nanokompozitinin süalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 114 \text{ nm}$ olar.

PVDF+Fe₉ nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları

PVDF+Fe₉ nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki C₂H₂F₂ polimeri arasında yerləşdirilmiş Fe₉ nanohissəciyinə baxılmışdır. Hesablamalar zamanı hər C və F atomlarından 5, H atomundan bir, Fe atomundan 19 olmaqla 215 sayda bazis funksiyalarından istifadə edilmiş və 215 sayda molekulyar orbital qurulmuşdur. Nanokompozitin 298 sayda elektronu ən aşağı enerjili 149 enerji səviyyəsini doldurur. PVDF+Fe₉ nanokompoziti üçün seçilmiş nəzəri modelin fəza quruluşu Şəkil 18.3-də verilmişdir.



Şəkil 18.3. PVDF+Fe₉ nanokompoziti

Tam enerji = -12264.694592466 (a.v.),
Elektronların kinetik enerjisi = 11719.656704128 (a.v.),
Virial şərti (-V/T) = 2.0465.

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları(Ånqstremlə)		
		x	y	z
1 26	5.956031	6.76607106	-2.00207211	-1.18715575
2 26	-8.526749	9.10604182	-2.00219852	-1.18715575
3 26	5.179724	6.76607106	0.33783546	-1.18715575
4 26	-8.410465	9.10604182	0.33783546	-1.18715575
5 26	5.869526	6.76607106	0.33783546	1.15289883
6 26	6.453944	6.76607106	-2.00207211	1.15283966
7 26	-8.251410	9.10596973	0.33783546	1.15289883
8 26	-8.378468	9.10615740	-2.00207211	1.15283966
9 26	-1.935518	7.74521500	-0.94909930	0.00497130
11 9	-1.000002	13.29034729	-1.04759505	0.08025453
12 6	-3.997137	10.97805946	-1.05259505	0.08025453
13 6	-4.000175	12.13853350	-0.38259505	0.08025453
14 9	-0.946372	9.82624568	-0.38759505	0.08025453
16 9	6.999946	3.68868298	-2.45944710	-0.30273520
17 6	3.996277	3.68868298	-1.12944710	-0.30273520
18 6	4.003328	4.84915702	-0.45944710	-0.30273520
21 9	6.985613	4.84915702	0.87055290	-0.30273520
10 1	-0.999147	10.97805946	-2.13259505	0.08025453
19 1	1.001813	5.78446446	-0.99944710	-0.30273520
20 1	0.999394	2.75337554	-0.58944710	-0.30273520
15 1	-1.000186	12.13853350	0.69740495	0.08025453

Nəticələrin interpretasiyası. PVDF+Fe₉ nanokompozitin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\epsilon_{149} = 799.447863\text{eV}$.

Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\epsilon_{150} - \epsilon_{149} = 9.602716\text{eV}$. Bu işə nanokompozitin dielektrik material olduğunu göstərir.

Nanokompozitin möhkəmliyi $\eta = \frac{1}{2}(\epsilon_{ABMO} - \epsilon_{YTMO}) =$

4.801358a.v. düsturu ilə hesablanır. Burada $\epsilon_{ABMO} = \epsilon_{150} = -$

789.845147eV, $\epsilon_{YTMO} = \epsilon_{149} = -799.447863\text{eV}$. $\eta > 1\text{eV}$

olduğundan PVDF+Fe₉ nanokompoziti möhkəm material

hesab olunur. ε_{ABMO} mənfi işarəli olduğuna görə PVDF+Fe9 nanokompoziti elektrofildir. Nanokompozitin stabilliyi

$\Delta E(PVDF + Fe_9) = E_{PVDF+Fe_9} - 4,5 \cdot E_{Fe_2} - 2E_{C_2} - 2E_{H_2} - 2E_{F_2}$ düsturu ilə hesablanır. $E_{PVDF+Fe_9}$ -PVDF+Fe9 nanokompozitinin, E_{Fe_2} -Fe2 -nin, E_{C_2} -C2-nin, E_{H_2} - H2-nin və E_{F_2} - F2-nin tam enerjisidir. $E_{PVDF+Fe_9} = -12264.694592466$ a.v., $E_{Fe_2} = -2513.261434$ a.v., $E_{C_2} = -74.31543142$ a.v., $E_{H_2} = -1.111298185$ a.v., $E_{F_2} = -195.9593201$ a.v. olduğundan

$\Delta E(PVDF + Fe_9) = -412.246042$ a.v. $\Delta E(PVDF + Fe_9) < 0$ olduğundan PVDF+Fe9 nanokompoziti stabildir.

PVDF+Fe9 nanokompozitinin şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 129$ nm olar.

Atomların hesablanmış effektiv yükləri əsasında Fe9 nanohissəciyinin, PP+Fe9 və PVDF+Fe9 nanokompozitlərinin molekulyar diaqramları qurulmuşdur. Diaqramlarda rabitə uzunluqların qiymətləri Anqstremlərlə verilmişdir(Şəkil 18.4-18.6.).



Şəkil 18.4. Fe9 nanohissəciyinin molekulyar diaqramı



Şəkil 18.5. PP+Fe₉ nanokompozitinin molekulyar diaqramı



Şəkil 18.6. PVDF+Fe₉ nanokompozitinin molekulyar diaqramı

Nəticə. Həcmə mərkəzləşmiş Fe₉ dəmir nanohissəciyi və onun PP+Fe₉, PVDF+Fe₉ nanokompozisiyaları XFR metodu ilə kompüterdə tədqiq olunmuşdur. Həcmə mərkəzləşmiş dəmir nanohissəciyin və onun nanokompozisiyalarının orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin qiymətləri, nanohissəciyə və onun nanokompozisiyalarına daxli olan atomların effektiv yükləri kompüterdə hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, həcmə mərkəzləşmiş Fe₉ dəmir nanohissəciyi və PP+Fe₉ nanokompoziti möhkəm, nuklefil, PVDF+Fe₉ nanokompozisi isə möhkəm elektrofil və stabil dielektrik materiallardır.

19. Aliminium nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının modelləşdirilməsi və sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi metodu ilə tədqiqi

Aluminium nanohissəciklərinin nanoelektronikada, nanofotonokada, nanobiotexnologiyada, tibdə və kosmonavtikada geniş tətbiq sahələri vardır. Buna görə də aluminium nanohissəcikləri və onların nanokompozisiyalarının elektron quruluşunun kvantmexaniki metodlarla öyrənilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır[11, 8]. Aluminium nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının elektron quruluşu və xassələri Sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi (SFN) metodu ilə öyrənilmişdir. SFN metodu daha yüksək hesablama dəqiqliyinə malik olmaqla qeyri-empirik modelləşdirmədən fərqli olaraq obyektin real elektron quruluşunu təsvir etməyə imkan verir. Hesablanmış ϵ_i - qiymətləri əsasında aluminium nanohissəciyi və onun PP+Al₈, PVDF+Al₈ nanokompozisiyalarının tam enerjisini, ionlaşma potensialının qiymətini, elektrik keçiriciliyini, möhkəmliyini və s. tədqiq etmək olar. Hesablamalar zamanı χ_0 atom orbitalları olaraq Al atomundan 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, 3s-, 3p_x-, 3p_y-, 3p_z-, C və F atomlarından 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, H atomundan isə 1s - orbitalından istifadə edilmişdir. Atom orbitalları kimi Gauss funksiyalarından istifadə olunmuşdur.

Al₈ nanohissəciyi üçün kompüter hesablamaları

Məlumdur ki, nanohissəciyin quruluşu və xassələri nanohissəcikdə atomların sayı və ölçüsü ilə müəyyən olunur. N sayda atomdan ibarət olan nanohissəciyin ölçüsü(15.1) düsturu ilə müəyyən olunur[34]. N=8 sayda aluminium atomundan ibarət nanohissəciyin (15.1) düsturu ilə hesablanmış ölçüsü D=0,63nm alınır. Hesablamalar zamanı hər Al atomundan 9 olmaqla 72 atom orbitalından istifadə edilmişdir. Nanohissəciyin 13*8=104 sayda elektronu ən aşağı enerjili 52

enerji səviyyəsini doldurur. Şəkil 18.1-də Al₈ üçün seçilmiş fəza quruluşu verilmişdir.

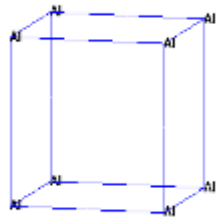
Tam enerji	= -1928.9872926 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 1922.318225472(a.v.)
Karelyasiya enerjisi	= -0.740363275 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0031

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

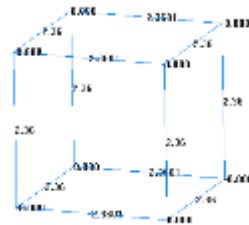
Z Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqştremlə)		
		x	y	z
1 13	-0.000021	-1.23378679	-0.66354639	-1.09908805
2 13	0.000051	1.12625007	-0.66354673	-1.09908805
3 13	-0.000037	-1.23378679	1.69649002	-1.09908805
4 13	0.000045	1.12625007	1.69649002	-1.09908805
5 13	-0.000273	1.12625007	1.69649002	1.26096705
6 13	0.000283	-1.23378735	1.69649002	1.26096705
7 13	0.000111	-1.23378735	-0.66354704	1.26096705
8 13	-0.000160	1.12625007	-0.66354724	1.26096705

Nəticələrin interpretasiyası. Al₈ nanohissəciyinin 104 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisi $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{52} = -3.715706\text{eV}$, ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi: $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{53} = -2.995985\text{eV}$. Nanohissəciyin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{52} = 3.715706\text{eV}$ [15]. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO} = 0.719721\text{eV}$. Bu isə Al₈ nanohissəciyinin keçirici material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər. $\eta = 0.3598605\text{eV}$. $\eta < 1\text{eV}$ olduğundan Al₈ nanohissəciyi yumşaq material hesab olunur. ε_{ABMO} mənfi işarəli olduğuna görə Al₈ nanohissəciyinin elektrofildir. Al₈ nanohissəciyinin stabilliyi $\Delta E(\text{Al}_8) = E_{\text{Al}_8} - 4 \cdot E_{\text{Al}_2}$ düsturu ilə hesablanır. $\Delta E(\text{Al}_8) > 0$

olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(Al_8) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. E_{Al_8} - Al_8 nanohissəciyinin, E_{Al_2} - Al_2 -nin hesablanmış tam enerjisidir. $E_{Al_8} = -1928.9872926$ a.v., $E_{Al_2} = -482.1626203$ a.v. olduğundan $\Delta E(Al_8) = -0.3368114$ a.v. $\Delta E(Al_8) < 0$ olduğundan Al_8 nanohissəciyi stabildir. Al_8 nanohissəciyinin şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = \frac{ch}{(\epsilon_{ABMO} - \epsilon_{VTMO}) \times 1,6 \times 10^{-19}} \times 10^9 \text{ nm} = 1727 \text{ nm}$ olar.



Şəkil 19.1. Al_8 nanohissəciyi Şəkil 19.2. Al_8 nanohissəciyinin molekulyar diaqramı



PP+ Al_8 nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları

PP+ Al_8 nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki C_3H_6 polimeri arasında yerləşdirilmiş Al_8 nanohissəciyinə baxılmışdır. Hesablamalar zamanı hər C atomundan 5, H atomundan bir, Al atomundan 9 olmaqla 114 bazis funksiyalarından istifadə edilmişdir. Nanokompozitin 152 sayda elektronu ən aşağı enerjili 76 enerji səviyyəsini doldurur. Şəkil 19.2-də PP+ Al_8 nanokompoziti üçün seçilmiş nəzəri modelin fəza quruluşu Şəkil 19.3-də verilmişdir.

Tam enerji	= -2452.4876064 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 2126.285389224 (a.v.)
Karelyasiya enerjisi	= -0.798125246 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.1530

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)			
		x	y	z	
1	13	5.093863	-1.23378679	-0.66354639	-1.09908805
2	13	-6.564613	1.12625007	-0.66354673	-1.09908805
3	13	2.962022	-1.23378679	1.69649002	-1.09908805
4	13	-7.501561	1.12625007	1.69649002	-1.09908805
5	13	-7.661688	1.12625007	1.69649002	1.26096705
6	13	3.336917	-1.23378735	1.69649002	1.26096705
7	13	5.244583	-1.23378735	-0.66354704	1.26096705
8	13	-8.398846	1.12625007	-0.66354724	1.26096705
9	6	2.249663	0.56498871	-0.84658288	2.54553302
10	6	-0.001350	0.56498871	0.49341712	2.54553302
11	6	4.504102	-0.75136991	1.25341712	2.54553302
18	6	2.494924	0.67321298	-0.42376293	-2.24659698
19	6	0.507245	0.67321298	0.91623707	-2.24659698
20	6	4.594009	-0.64314564	1.67623707	-2.24659698
15	1	0.950002	-1.32293399	0.99009784	1.65554569
16	1	0.986132	-1.32294644	0.99009210	3.43551065
17	1	-2.214404	1.50029614	1.03341712	2.54553302
12	1	-2.262523	1.50029614	-1.38658288	2.54553302
13	1	0.911836	-0.37031873	-1.38658288	2.54553302
14	1	1.068415	-0.55219075	2.32506429	2.54553302
21	1	-2.356913	1.60852041	-0.96376293	-2.24659698
22	1	0.928135	-0.26209446	-0.96376293	-2.24659698
23	1	-2.195478	1.60852041	1.45623707	-2.24659698
24	1	1.059881	-0.44396648	2.74788424	-2.24659698
25	1	1.003774	-1.21470972	1.41291778	-3.13658431
26	1	1.261772	-1.21472217	1.41291204	-1.35661935

Nəticələrin interpretasiyası. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{77} = -102.463501\text{eV}$.

$\varepsilon_{YMO} = \varepsilon_{76} = -103.912029\text{eV}$. PP+Al₈ nanokompozitinin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{76} = -103.912029\text{eV}$.

Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO} = 1.448528\text{eV}$. Bu isə PP+Al₈ nanokompozitinin keçirici material olduğunu göstərir. Nanokompozitin möhkəmliyi

$\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO})$ düsturu ilə hesablanır. $\eta = 0.724264\text{a.v}$.

$\eta < 1\text{eV}$ olduğundan PP+Al₈ nanokompoziti yumşaq material

hesab olunur. ε_{ABMO} mənfi işarəli olduğuna görə PP+Al₈ nanokompoziti elektrofildir. PP+Al₈ nanokompozitinin stabilliyi

$$\Delta E(PP + Al_8) = E_{PP+Al_8} - 4 \cdot E_{Al_2} - 3E_{C_2} - 6E_{H_2}$$

düsturu ilə hesablanır. Burada E_{PP+Al_8} -PP+Al₈ nanokompozitinin, E_{Al_2} -Al₂-nin, E_{C_2} -C₂-nin, E_{H_2} -H₂-nin tam enerjisidir.

$$E_{PP+Al_8} = -2452.487606 \text{ a.v.}, E_{Al_2} = -482.1626203 \text{ a.v.},$$

$$E_{C_2} = -76.0153893 \text{ a.v.}, E_{H_2} = -1.1770491 \text{ a.v.}$$

olduğundan $\Delta E(PP + Al_8) = -288.7286627 \text{ a.v.}$

$\Delta E(PP + Al_8) < 0$ olduğundan PP+Al₈ nanokompoziti stabildir. PP+Al₈ nanokompozitinin şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 858 \text{ nm}$ olar.

PVDF+Al₈ nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları

PVDF+Al₈ nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki C₂H₂F₂ polimeri arasında yerləşdirilmiş Al₈ nanohissəciyinə baxılmışdır. Hesablamalar zamanı hər C və F atomlarından 5, H atomundan bir, Al atomundan 9 olmaqla 116 sayda bazis funksiyalarından istifadə edilmiş və 184 sayda molekulyar orbital qurulmuşdur. Nanokompozitin 168 sayda elektronu ən aşağı enerjili 84 enerji səviyyəsini doldurur. PVDF+Al₈ nanokompoziti üçün seçilmiş nəzəri modelin fəza quruluşu Şəkil 19.5-də verilmişdir.

Tam enerji	= -2711.6071413 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 2403.509511427(a.v.)
Karelyasiya enerjisi	= -1.638786812 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.1275

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)			
		x	y	z	

Nəticə. Aluminium nanohissəciyi və onun PP+Al₈, PVDF+Al₈ nanokompozisiyaları SFN metodu ilə kompüterdə tədqiq olunmuşdur. Aluminium nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin qiymətləri, nanohissəciyə və onun nanokompozisiyalarına daxil olan atomların effektiv yükləri hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, aluminium nanohissəciyi və onun PP+Al₈, PVDF+Al₈ nanokompozisiyaları yumşaq, elektrofil və stabil keçirici materiallardır.

20. Silisium nanohissəciyinin modelləşdirilməsi və kompüter tədqiqi

Silisium nanohissəciklərinin nanoelektronikada, nanofotonokada və nanobiotexnologiyada geniş tətbiq olunması istiqamlərində elmi tədqiqat işləri aparılır. Buna görə də silisium nanohissəciklərinin elektron quruluşunun kvantmexaniki metodlarla öyrənilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır[39, 34]. Silisium nanohissəciyinin elektron quruluşu və xassələri Sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi (SFN) metodu ilə öyrənilmişdir. Hesablanmış ε_i - orbital enerjilərinin qiymətləri əsasında silisium nanohissəciyinin tam enerjisinin, ionlaşma potensialının qiymətini, elektrik keçiriciliyini, möhkəmliyini və s. tədqiq etmək olar. Hesablamalar zamanı χ_q atom orbitalları olaraq Si atomundan 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, 3s-, 3p_x-, 3p_y-, 3p_z-, orbitalından istifadə edilmişdir. Atom orbitalları kimi Gauss funksiyalarından istifadə olunmuşdur.

Si₁₂ nanohissəciyi üçün kompüter hesablamaları

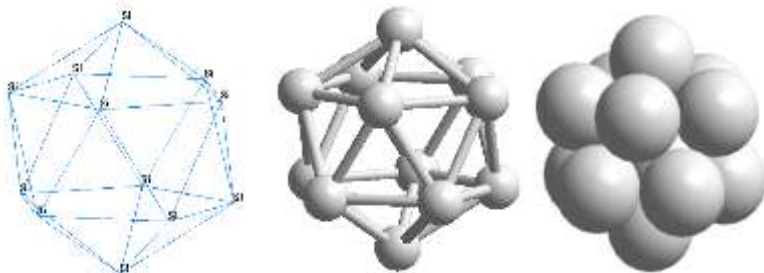
Məlumdur ki, nanohissəciklərin quruluşu və xassələri nanohissəcikdə atomların sayı və ölçüsü ilə müəyyən olunur. N sayda atomdan ibarət olan nanohissəciyin ölçüsü (15.1) düsturu

ilə müyyən olunur[34]. $N=12$ sayda silisium atomundan ibarət nanohissəciyin (15.1) düsturu ilə hesablanmış ölçüsü $D=0,77\text{nm}$ alınır. Hesablamalar zamanı hər Si atomundan 9 olmaqla 108 atom orbitalından istifadə edilmişdir. Nanohissəciyin $14 \cdot 12 = 168$ sayda elektronu ən aşağı enerjili 84 enerji səviyyəsini doldurur. Şəkil 19.1-də Si_{12} nanohissəciyi üçün seçilmiş fəza quruluşu verilmişdir.

Tam enerji	= -3433.4192150 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	=3381.396057347(a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0151

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)		
			x	y	z
1	14	-0.013897	-1.27374441	0.35983980	-0.11973150
2	14	0.013920	-1.27374441	2.57980685	-0.11973150
3	14	0.013906	-1.63440515	1.46980427	1.76871439
4	14	-0.013932	0.25404241	1.46979398	-1.28687491
5	14	0.013897	0.83758641	-0.32617946	-0.11971153
6	14	-0.013892	-0.32953075	-0.32616923	1.76875685
7	14	-0.013900	1.78180102	2.57980614	1.76869690
8	14	0.013914	1.78178236	0.35983060	1.76873191
9	14	-0.013935	0.25401981	1.46983390	2.93585662
10	14	0.013902	2.14245624	1.46981979	-0.11973150
11	14	-0.013895	0.83758594	3.26581967	-0.11973150
12	14	0.013911	-0.32952756	3.26583799	1.76871328



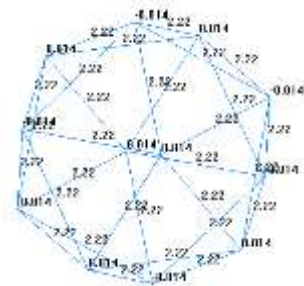
Şəkil 20.1. Si_{12} nanohissəciyinin vizual modelləri

Nəticələrin interpretasiyası. Si_{12} nanohissəciyinin 168 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq səviyyələrdə

yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi $\varepsilon_{YMO} = \varepsilon_{84} = -2.156103\text{eV}$ və ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi isə $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{85} = -1.397206\text{eV}$. İonlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{YMO} = 2.156103\text{eV}$ [15]. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO} = 0.758897\text{eV}$. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO})$ düsturu ilə hesablana bilər. Beləliklə $\eta = 0.379449\text{eV}$. $\eta < 1\text{eV}$ olduğundan Si_{12} nanohissəciyi yumşaq material hesab olunur. ε_{ABMO} mənfi işarəli olduğuna görə Si_{12} nanohissəciyi elektrofildir. Si_{12} nanohissəciyinin stabilliyi $\Delta E(\text{Si}_{12}) = E_{\text{Si}_{12}} - 6 \cdot E_{\text{Si}_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(\text{Si}_{12})$ Si_{12} nanohissəciyinin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\Delta E(\text{Si}_{12}) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(\text{Si}_{12}) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. $E_{\text{Si}_{12}} - \text{Si}_{12}$ nanohissəciyinin, $E_{\text{Si}_2} - \text{Si}_2$ -nin hesablanmış tam enerjisidir. $E_{\text{Si}_{12}} = -3432.305143368\text{a.v.}$, $E_{\text{Si}_2} = -572.0917415\text{a.v.}$ olduğundan $\Delta E(\text{Si}_{12}) = -0.868766\text{a.v.}$ $\Delta E(\text{Si}_{12}) < 0$ olduğundan Si_{12} nanohissəciyi stabildir və Si_{12} nanohissəciyinin şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 1638\text{ nm}$ olar.

Nəticə. Silisium nanohissəciyi SFN metodu ilə kompüterdə tədqiq olunmuşdur. Nanohissəciyi orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin

qiymətləri, nanohissəciyə daxi olan atomların effektiv yükləri hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, silisium nanohissəciyi yumşaq, elektrofil və stabil keçirici materiallardır. Si₁₂ nanohissəciyinin şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 1638$ nm-dir.



Şəkil 20.2. Si₁₂ nanohissəciyinin molekulyar diaqramı

21. Füllərenin modelləşdirilməsi, qeyriempirik və molekulyar dinamika metodu tədqiqi

Füllərenin vizual modeli (Şəkil 21.1) əsasında qeyri empirik metoddla aparılmış kompüter hesablamaların nəticələri aşağıda verilmişdir:

Tam Enerji	= -2244.026659758 (a.v.)
Electronic Kinetic Energy	= 2229.006081245 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0067

Orbital enerjilər(eV)

-301.206862	-301.199121	-301.139369	-301.125562	-300.926552
-300.926440	-300.925260	-300.921661	-300.918489	-300.913707
-300.900482	-300.896185	-300.893122	-300.890023	-300.886054
-300.874060	-300.870896	-300.868315	-300.866587	-300.861893
-300.849861	-300.837823	-300.837062	-300.833442	-300.832808
-300.832635	-300.818635	-300.815043	-300.799668	-300.794223
-300.793129	-300.785050	-300.782509	-300.776620	-300.775908
-300.753985	-300.751255	-300.749357	-300.743804	-300.737137
-300.730801	-300.727737	-300.724397	-300.719032	-300.718253
-300.718037	-300.709949	-300.707912	-300.706983	-300.705673
-300.704932	-300.688798	-300.531414	-300.519542	-300.511605
-300.509337	-300.495734	-300.468983	-300.329779	-300.303304
-33.936119	-33.240696	-33.232188	-33.199355	-31.929804
-31.903940	-31.898881	-31.864938	-31.809193	-30.633585
-30.609546	-30.594557	-29.011613	-28.989563	-28.984648
-28.970777	-27.397196	-27.382537	-27.371556	-27.333668
-27.324567	-26.577048	-26.566795	-26.524145	-26.510271

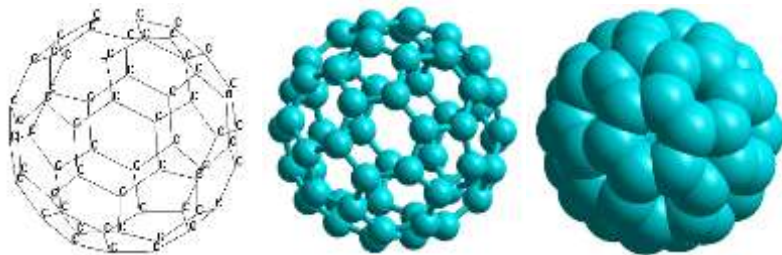
-24.573329	-24.519028	-24.509547	-24.486930	-24.477937
-24.336271	-24.307338	-24.294330	-22.415625	-22.406141
-22.397626	-21.410410	-21.396771	-21.386900	-20.912870
-20.888377	-20.884008	-20.875296	-20.847200	-20.241805
-18.868272	-18.843766	-18.807296	-18.803624	-17.809424
-17.804473	-17.801207	-17.773580	-17.765149	-17.296279
-17.287662	-17.237489	-16.471459	-15.994314	-15.992250
-15.984204	-15.618388	-15.603391	-15.577761	-15.574952
-15.562520	-15.530449	-15.502932	-14.680175	-14.672707
-14.636145	-14.605726	-14.596749	-14.132679	-14.124690
-14.035536	-13.895335	-13.877224	-13.839163	-13.825122
-13.802158	-13.785371	-13.767062	-13.745173	-13.689637
-12.993716	-12.968648	-12.960582	-12.955889	-11.660326
-11.608986	-11.600500	-11.584349	-11.580584	-11.543663
-11.538079	-11.520562	-11.273890	-11.255047	-11.244823
-11.211829	-11.200366	-10.534298	-10.507930	-10.495844
-10.483316	-7.640657	-7.633648	-7.608807	-7.594392
-7.497366	-7.465322	-7.429183	-7.410152	-7.400602
-5.438873	-5.407673	-5.384205	-5.379228	-5.360008
2.198036	2.261633	2.274268	3.926137	3.933651
3.954433	6.965293	6.971869	6.976987	6.990186
7.036408	7.140795	7.160633	7.208387	9.204135
9.222298	9.240294	9.278164	9.311869	10.289328
10.291763	10.357622	10.392446	11.562409	11.575417
11.627418	11.634351	11.969737	12.032184	12.055945
14.955687	14.961405	14.964444	16.177546	16.216483
16.224519	17.388522	17.398893	17.408842	17.419466
17.437301	18.514975	18.527114	18.545629	19.321905
19.337548	19.367243	19.386943	19.439660	19.483504
19.495611	19.503763	19.509389	20.159985	20.191983
20.223163	20.243678	20.282873	21.605966	21.669869
21.683481	21.691267	21.704316	21.710307	21.736038
23.029529	23.047170	23.055871	23.070399	23.105828
23.245401	23.264195	23.273646	23.724407	23.727666
23.748692	25.639513	25.651055	25.734660	26.567941
26.577258	26.640296	26.659049	26.702545	26.712232
26.751213	26.763926	27.009721	27.074457	27.099948
27.261043	27.284386	27.291515	27.307009	27.368634
28.599862	28.615998	28.634159	28.635106	28.698091
28.798431	28.806757	28.884811	28.929665	28.990683
29.022152	29.031513	29.083582	29.128825	31.350422
31.360882	31.415632	32.101802	32.121873	32.192495
32.200420	32.723503	32.750020	32.801342	32.825399

ATOMLARIN YÜKLƏRİ VƏ KOORDINATLARI

Z Atomu	Yükü (Malliken)	Koordinatları(Anqstrem)			Kütləsi
		x	y	z	

1	6	0.002444	-6.49839900	5.82487300	1.45692200	12.01100
2	6	0.010547	-6.49839900	7.22500000	1.45692200	12.01100
3	6	-0.003457	-5.28598400	7.92498900	1.45692200	12.01100
4	6	-0.004738	-4.07357100	7.22500200	1.45692200	12.01100
5	6	0.004305	-4.07357100	5.82497700	1.45692200	12.01100
6	6	0.002242	-5.28571800	5.12473100	1.45692200	12.01100
7	6	-0.012459	-7.55610100	5.39226800	0.64825290	12.01100
8	6	-0.011629	-8.20991600	6.52504700	0.14837700	12.01100
9	6	0.003888	-7.55669000	7.65785800	0.64878100	12.01100
10	6	-0.001743	-7.40211000	8.79065100	-0.15975660	12.01100
11	6	-0.002060	-5.13168200	9.05772900	0.64878240	12.01100
12	6	-0.004584	-3.16986000	7.92495000	0.64878340	12.01100
13	6	0.004209	-2.26620900	7.22493100	-0.15948260	12.01100
14	6	-0.000489	-2.26594700	5.82544200	-0.15891440	12.01100
15	6	-0.000421	-3.16936500	5.12471400	0.64920950	12.01100
16	6	-0.001089	-3.82321600	3.99228400	0.14909390	12.01100
17	6	-0.002189	-5.13124600	3.99225100	0.64839110	12.01100
18	6	-0.003241	-6.18914200	3.55977200	-0.15994150	12.01100
19	6	-0.000940	-7.40043700	4.26002600	-0.16036040	12.01100
20	6	-0.001644	-8.70872800	6.52534500	-1.15973500	12.01100
21	6	-0.000705	-8.55219200	5.39300700	-1.96846000	12.01100
22	6	0.008763	-7.89917000	4.26013600	-1.46840700	12.01100
23	6	0.014463	-6.99690100	3.55979300	-2.27622600	12.01100
24	6	0.008614	-5.93885500	3.12753400	-1.46781000	12.01100
25	6	-0.001575	-4.63133000	3.12847200	-1.96797800	12.01100
26	6	-0.001054	-3.57320500	3.56024600	-1.15903600	12.01100
27	6	-0.000963	-2.66956300	4.26063800	-1.96654000	12.01100
28	6	-0.000957	-2.01566800	5.39310400	-1.46682300	12.01100
29	6	-0.003813	-3.82369000	9.05760900	0.14925090	12.01100
30	6	-0.000712	-3.01655600	7.65849000	-4.08359300	12.01100
31	6	-0.012743	-3.16952100	8.79079500	-3.27469400	12.01100
32	6	-0.011563	-4.38204800	9.49090800	-3.27458000	12.01100
33	6	-0.001351	-5.43993100	9.05876000	-4.08329300	12.01100
34	6	-0.000878	-5.28563800	7.92622600	-4.89168200	12.01100
35	6	0.014238	-4.07393400	5.82418000	-4.88837500	12.01100
36	6	0.007536	-3.01458600	5.39260200	-4.08007700	12.01100
37	6	-0.002883	-2.36106100	6.52627900	-3.58267200	12.01100
38	6	-0.002454	-1.86140200	6.52599700	-2.27492800	12.01100
39	6	0.002008	-2.01590300	7.65704300	-1.46729500	12.01100
40	6	0.002511	-2.66939800	8.78972100	-1.96745100	12.01100
41	6	0.004611	-4.63176400	9.92340200	-1.96668800	12.01100
42	6	-0.001803	-5.93967300	9.92338400	-1.46737700	12.01100
43	6	-0.002497	-6.99764500	9.49133100	-2.27604400	12.01100
44	6	0.000718	-6.74763100	9.05880500	-3.58397600	12.01100
45	6	-0.000205	-7.40152100	7.92617700	-4.08357200	12.01100
46	6	0.002400	-6.49818000	7.22657200	-4.89209500	12.01100
47	6	-0.002801	-6.49853400	5.82657400	-4.89241000	12.01100

48	6	-0.003819	-5.28621000	5.12623000	-4.89231300	12.01100
49	6	-0.001691	-3.16921500	4.26089500	-3.27444200	12.01100
50	6	0.000083	-4.38091400	3.56163600	-3.27555900	12.01100
51	6	-0.002230	-5.43842300	3.99490900	-4.08428100	12.01100
52	6	-0.003495	-6.74706700	3.99265100	-3.58386500	12.01100
53	6	-0.002732	-7.40007900	5.12611000	-4.08283700	12.01100
54	6	0.001755	-8.30180800	5.82504000	-3.27631700	12.01100
55	6	0.000199	-8.30334400	7.22498500	-3.27722400	12.01100
56	6	0.000691	-8.55499700	7.65799900	-1.96751300	12.01100
57	6	-0.002625	-7.90152600	8.79082400	-1.46776300	12.01100
58	6	0.011415	-3.57379000	9.49042800	-1.15841300	12.01100
59	6	-0.000207	-6.18965000	9.49056700	-0.15951970	12.01100
60	6	0.008800	-4.07486600	7.22408500	-4.89032900	12.01100



Şəkil 21.1 Füllerenin vizual modelləri

Molekulyar dinamika metod ilə C_{60} füllerenin tədqiqi

C_{60} füllerenin müxtəlif temperaturda zamandan asılı olaraq tədqiqi aşağıdakı nəticələri verir:

1.0-dan başlayaraq 0.001 addımı ilə 1ps qədər zaman müddətində temperaturun $T=10K$ qiymətində aparılmış kompüter hesablaması nəticəsində müəyyən olunur ki, C_{60} füllerenə daxil olan karbon atomlarının həyəcanlanması baş verdiyinə baxmayaraq, öz stabil formasını saxlayaraq və heç bir fırlanma hərəkəti müşahidə olunmur.

2.0-dan başlayaraq 0.001 addımı ilə 1ps qədər zaman müddətində temperaturun $T=300K$ qiymətində aparılmış kompüter hesablaması nəticəsində müəyyən olunur ki, füllerenə daxil olan karbon atomlarının həyəcanlanması baş verir, öz stabil formasını saxlayaraq və saat əqrəbinin əksi istiqamətində fırlanma hərəkəti müşahidə olunur.

3.0-dan başlayaraq 0.001 addımı ilə 1ps qədər zaman müddətində temperaturun $T=300K$ qiymətindən böyük qiymətlərdə aparılmış kompüter hesablamaları nəticəsində aşağıdakılar müəyyən olunur:

$T=1000K$ füllerenə daxil olan karbon atomları həyəcanlanmasının mütəhərriqliyi artır, səthin deformasiya olumasına baxmayaraq, fülleren öz stabil formasını saxlayaraq və saat əqrəbinin əksi istiqamətində fırlanma müşahidə olunur.

$T=2000K$, füllerenə daxil olan karbon atomları temperaturun artması nəticəsində atomların həyəcanlanması mütəhərriqliyi daha artmış olur, səthin deformasiya olunması aydın hiss olunmaqla, bu nanohissəcik öz stabil formasını saxlayaraq və saat əqrəbinin əksi istiqamətində fırlanma müşahidə olunur.

4.Temperaturun daha yüksək $T=6000K$ qiymətində aparılmış hesablamalar təsdiq edir ki, C_{60} fülleren yüksək temperatura davamlı olduğunu göstərir.



Şəkil 21.2 Füllerenin molekulyar metodu (HyperChem və NanoEngineer-1) ilə aparılmış hesablamalardan sonra alınmış vizual modelləri

5.Temperaturun daha yüksək $T=50000K$ qiymətində isə hesablamalar göstərir ki, C_{60} füllerenin quruluşunun dağılması müşahidə olunur.

22. Qrafenin modelləşdirilməsi qeyriempirik və molekulyar dinamika metodları ilə tədqiqi

Qrafen - karbon atomunun çoxatomlu təbəqəsi olub və atomlar düzgün altıbucaqlı heksoqonal quruluş əmələ gətirir.

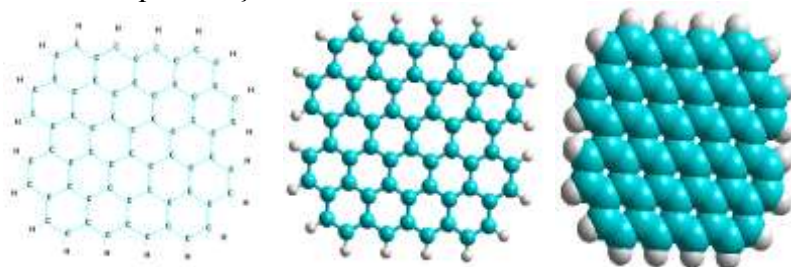
Bu material özünün unikal keyfiyyətləri ilə fərqlənir. Qrafen elektrik cərəyanını keçirir və şəffaflığı ilə diqqəti cəlb edir. Şəffaflıq xüsusiyyətinə görə bir sıra materialların, məsələn, sensor displeylərin yaradılması üçün əvəzsizdir. Belə hesab edilir ki, qrafenin tezliklə elektronika sənayesində geniş tətbiqinə başlanacaqdır. Keçmiş sovet alimləri Konstantin Novoselov və Andrey Qeym qrafenin sintezi və tədqiqi üçün apardıqları elmi işlərinə görə 2010-cu ildə Fizika sahəsində Nobel mükafatı almışlar.

Hal-hazırda qrafenin öyrənilməsi üçün alimlər nəzəri və təcrübə tədqiqatları aparırlar. ABŞ-ın Kolumbiya universitetinin alimləri iki elektrod arasında yerləşmiş qrafen təbəqəli lövhə ilə radio dalğaları qəbul etmək qabiliyyətinə malik olan ən kiçik ölçülü elektron qurğu yaratmışlar və onların istifadəsi reallaşdırılmağa başlanılmışdır. Gələcəkdə belə nanoölçülü radioqəbuledicilər müxtəlif simsiz vericilərin tərkib hissələri ola bilər və onların radio siqnalları emal edən elektron sexmlərin tərkibində işləməsi imkanları araşdırılır. Bu isə nanoölçülü qrafen radioqəbuledicilərinin mobil telefonlarda tətbiq olunmasına imkan verəcəkdir. Bundan əlavə rus alimləri qrafen əsasında planar heteraquruluşlu materialların sintezi və alınmasının yeni metodlarını işləyirlər və belə qrafen əsaslı heteraquruluşlar müxtəlif işıq şüalandırıcı qurğuların tərkib hissəsi olacaqdır. Qrafen maraqlı zona quruluşuna malikdir. Onun keçirici zonası valent zona ilə 6 nöqtədə kəsişir. Bu isə onun çoxlu elektron xassələrinə malik olmasına imkan verir. Qrafen məsaməli olmayan yarımkeçiricidir. Bununla yanaşı kerici zona ilə valent zonasının toxunma nöqtələrində sonlu energetik məsəmə yaranır, yəni qrafen kiçik məsaməli yarımkeçirici kimi özünü aparır. Bu isə kvant çuxura oxşar olaraq qrafenin planar heteraquruluşa malik olması ilə əlaqədardır və aşağı temperaturlarda bu energetik məsamənin energetik baryer kimi istifadə olunmasına imkan verir.

Yuxarıda sadə maraqlı xassələrini nəzərə alaraq qrafenin vizual modelləşdirilməsi və kvantmexaniki

metodlarla öyrənilməsi aktualdır. Məlumdur ki, müasir dövrdə qeyri empirik kvantmexaniki, yarım-empirik, molekulyar dinamika və s. metodları mürəkkəb nanosistemlərin elektron və atom quruluşlarının riyazi modelləşdirilməsində geniş tətbiq olunur.

Hal-hazırda yuxarıdakı metodları realizasiya edən kifayət qədər çoxlu sayda müasir kompüter proqramları hazırlanmışdır və istifadə olunur. Modelləşdirmə üçün elm və təhsildə istifadə olunan HeparChem və NanoEngineer-1 proqramları daha münasibdir. Hesablamalar bu proqramlar(demo və free versiyaları istifadə olunmuşdur) tətbiq olunmaqla aparılmışdır. Qrafenin Şəkil 21.2-dəki vizual modelləri qurulmuşdur:.



Şəkil 22.1. Qrafenin vizual modelləri

Qrafen üçün aparılmış kompüter hesablamaları

Tam Enerji	= -2179.373268204 (a.v.)
Electronic Kinetic Energy	= 2309.163341155 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 1.9438

Orbital enerjilər(eV)

-292.773450	-292.704793	-292.683824	-292.619940	-292.355195
-292.266994	-292.236813	-292.155093	-292.102887	-292.092299
-292.087174	-292.052549	-292.049106	-291.358565	-291.251096
-291.159577	-291.155355	-291.146650	-291.108632	-291.106573
-291.095484	-291.054110	-290.984442	-290.938619	-290.930428
-290.924163	-290.884309	-290.873735	-290.831259	-290.824492
-290.806333	-290.719285	-290.718185	-290.706437	-290.694457
-290.646516	-290.625905	-290.604031	-290.586639	-290.447995
-290.444033	-290.402706	-290.245743	-290.227782	-290.087473

-289.898222	-289.865969	-289.819692	-289.806973	-289.388697
-289.232229	-289.134433	-289.119210	-289.075019	-289.040179
-289.037413	-289.013672	-288.976238	-288.971293	-288.964596
-288.849206	-288.819615	-21.212922	-21.075359	-20.797792
-20.684934	-20.009939	-19.803156	-19.582007	-19.046662
-18.985473	-18.872503	-18.643819	-18.296089	-18.192875
-17.756457	-17.412327	-17.263154	-17.252593	-17.085644
-16.654695	-16.516442	-16.193579	-15.963288	-15.613003
-15.549190	-15.482744	-15.103655	-14.919049	-14.830886
-14.350466	-14.028093	-13.803709	-13.620650	-13.325003
-13.084739	-12.854110	-12.660000	-12.383546	-12.372571
-12.232949	-11.868261	-11.642484	-11.398736	-11.293114
-11.046613	-10.987891	-10.907577	-10.627995	-10.332886
-9.713055	-9.665075	-9.498095	-9.389856	-9.203797
-9.127592	-8.846323	-8.630215	-8.529009	-8.454713
-8.284635	-8.148183	-7.901460	-7.529473	-7.507155
-7.343735	-7.255040	-7.142924	-7.064360	-7.044499
-6.822965	-6.811950	-6.770504	-6.473078	-6.428887
-6.373185	-6.277489	-6.064315	-6.025156	-5.959462
-5.843034	-5.659933	-5.575812	-5.472049	-5.349245
-5.328186	-5.140439	-5.107073	-4.997737	-4.936510
-4.892665	-4.809928	-4.747203	-4.733031	-4.538105
-4.419840	-4.242064	-4.198858	-4.063475	-4.048222
-4.028295	-3.783638	-3.769701	-3.687738	-3.629573
-3.477706	-3.420211	-3.300633	-3.274071	-2.917640
-2.889969	-2.701717	-2.697233	-2.596353	-2.484298
-2.425559	-2.398627	-1.923561	-1.798672	-1.756769
-1.630971	-1.417570	-1.255316	-1.193432	-0.753015
-0.738170	-0.706683	-0.608270	-0.435386	-0.266416
-0.248189	-0.007091	0.369195	0.900279	0.964658
1.653647	2.799856	4.270771	4.395735	4.776053
5.468393	5.633572	5.738465	6.355027	6.572904
6.659557	6.847332	6.956445	7.049145	7.791427
7.923707	7.961485	8.308866	9.128790	9.392827
9.877148	9.976431	10.471446	11.403624	11.636161
11.902286	11.977364	12.188782	12.219639	12.537593
12.700826	12.967760	13.205904	13.277038	13.418332
13.570879	13.663481	13.732878	13.803839	14.120961
14.349242	14.468700	14.570214	14.700232	14.788637
14.856749	14.902643	15.009378	15.050957	15.266966
15.322412	15.468451	15.672260	15.778911	15.829448
15.963715	15.997688	16.112615	16.207842	16.361640
16.452025	16.608042	16.711872	16.797135	17.016704
17.123386	17.197833	17.270718	17.512852	17.673866
17.766696	17.841526	17.914788	18.003716	18.253752
18.386986	18.633543	18.719780	18.907797	19.127916
19.170328	19.422946	19.706918	19.998175	20.144673

20.456302	20.631646	20.725650	20.821643	21.064066
21.365793	21.851247	21.971288	22.083659	22.187221
22.309149	22.380137	22.592925	22.852501	22.967257
23.192393	23.309051	23.419322	23.632042	23.756370
23.939866	24.106054	24.545060	24.876778	24.956127
25.070266	25.197155	25.252814	25.537634	25.637575
26.223362	26.515578	26.778117	27.074788	27.206677
27.323450	27.614612	27.918085	28.345617	28.714471
29.309761	29.494876	29.888737	30.023296	30.802550
31.163322	31.360389	31.531358	32.686214	32.890266

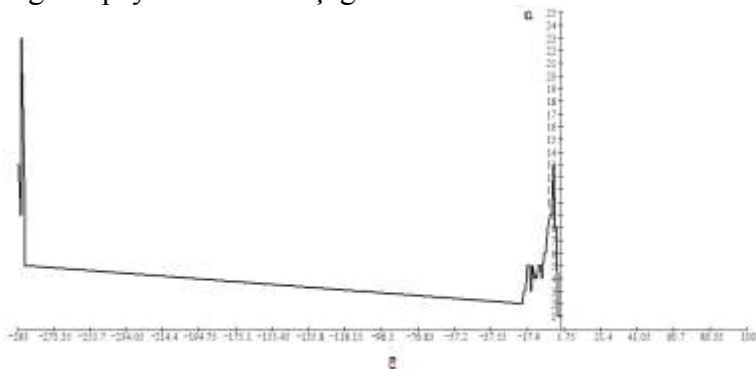
ATOMLARIN YÜKLƏRİ VƏ KOORDINATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)			Kütləsi
			x	y	z	
1	6	-0.059702	-5.68814512	-6.36427827	0.67177541	12.01100
2	6	-0.127621	-4.47543842	-7.06443482	0.67177541	12.01100
3	6	-0.003749	4.01451261	-4.96028006	0.68264420	12.01100
4	6	-0.017751	-0.83714320	-4.96494126	0.67177541	12.01100
5	6	0.116607	-5.68921377	-2.16338587	0.67177541	12.01100
6	6	0.085909	-3.26385830	-0.76448433	0.67177541	12.01100
7	6	-0.019748	-6.89802804	1.34061169	0.67177541	12.01100
8	6	-0.062147	-5.68157865	3.43858471	0.67177541	12.01100
9	6	-0.119864	-4.46752357	4.13630828	0.67177541	12.01100
10	6	0.047712	-3.26159614	3.43582514	0.66292123	12.01100
11	6	-0.196298	-2.04636822	4.13315824	0.66291447	12.01100
12	6	0.028606	-0.83287572	3.42873227	0.66744813	12.01100
13	6	-0.183188	0.38694570	4.11918511	0.66479854	12.01100
14	6	0.047254	1.55371139	3.45210298	0.66389057	12.01100
15	6	-0.111376	2.76009770	4.16286710	0.66096364	12.01100
16	6	-0.063169	3.97930943	3.47321672	0.66000434	12.01100
17	6	0.053538	-5.68436028	2.03811266	0.67177541	12.01100
18	6	0.047248	-4.47654780	1.33818366	0.67177541	12.01100
19	6	-0.009541	-3.26385291	2.03572845	0.66958004	12.01100
20	6	0.017272	-2.05096483	1.33287110	0.67404722	12.01100
21	6	-0.023389	-0.84083631	2.03212038	0.67184137	12.01100
22	6	0.011457	0.36897935	1.33772010	0.67337171	12.01100
23	6	-0.008894	1.57325027	2.04548899	0.67045807	12.01100
24	6	0.042784	2.78819959	1.35028898	0.66926859	12.01100
25	6	0.056040	3.99613890	2.05721483	0.66895714	12.01100
26	6	-0.020489	5.21139194	1.36169399	0.66776727	12.01100
27	6	-0.024268	-6.90080971	-0.05988225	0.67177541	12.01100
28	6	0.072948	-4.47756748	-0.06257049	0.67177541	12.01100
29	6	0.111713	-5.68942798	-0.76248557	0.67177541	12.01100
30	6	0.044313	-2.05198419	-0.06598424	0.67177541	12.01100
31	6	0.045774	0.37097384	-0.06614454	0.67118978	12.01100
32	6	0.059268	-0.84019484	-0.76678780	0.67177541	12.01100
33	6	0.076446	2.79397013	-0.05527956	0.67087718	12.01100

34	6	0.081148	1.58473412	-0.76114803	0.67118688	12.01100
35	6	-0.025853	5.21946355	-0.04291221	0.66358873	12.01100
36	6	0.102514	4.00977538	-0.74951001	0.67087385	12.01100
37	6	0.088407	-3.26385830	-2.16411025	0.67177541	12.01100
38	6	0.073026	-4.47590870	-2.86388788	0.67177541	12.01100
39	6	0.057026	-0.83900610	-2.16401277	0.67177541	12.01100
40	6	0.042245	-2.05090396	-2.86440977	0.67177541	12.01100
41	6	0.076169	1.58669325	-2.16139867	0.67175038	12.01100
42	6	0.042174	0.37424931	-2.86311194	0.67425408	12.01100
43	6	0.123194	4.01077300	-2.15434101	0.67036818	12.01100
44	6	0.050683	2.79956739	-2.85939227	0.67531349	12.01100
45	6	-0.057870	5.22419378	-2.85357310	0.67150547	12.01100
46	6	-0.027359	-6.90113102	-2.86333372	0.67177541	12.01100
47	6	-0.016415	-6.90113102	-4.26370665	0.67177541	12.01100
48	6	0.047733	-4.47590870	-4.26413937	0.67177541	12.01100
49	6	0.049236	-5.68814512	-4.96402439	0.67177541	12.01100
50	6	-0.012240	-3.26276164	-4.96455015	0.67177541	12.01100
51	6	0.017359	-2.05029113	-4.26452997	0.67177541	12.01100
52	6	0.025232	0.37572194	-4.26469324	0.67177541	12.01100
53	6	-0.016523	1.58895158	-4.96347440	0.67721376	12.01100
54	6	0.006770	2.80159877	-4.26168079	0.67720726	12.01100
55	6	-0.133870	5.22666116	-4.25877629	0.68239656	12.01100
56	6	0.051537	-3.26276164	-6.36423966	0.67177541	12.01100
57	6	-0.218093	-2.04990936	-7.06448025	0.67177541	12.01100
58	6	0.030098	-0.83714320	-6.36462219	0.67177541	12.01100
59	6	-0.204272	0.37573056	-7.06487760	0.67496635	12.01100
60	6	0.030953	1.59039194	-6.36353266	0.68265853	12.01100
61	6	-0.112741	2.80359318	-7.06392181	0.68585051	12.01100
62	6	-0.057212	4.01649802	-6.36362829	0.67966691	12.01100
63	1	-0.004190	2.75055690	5.24280328	0.65412117	1.00800
64	1	-0.007049	0.38927481	5.19918247	0.66533349	1.00800
65	1	-0.006113	-2.04381819	5.21314957	0.65941853	1.00800
66	1	-0.004976	-4.46465451	5.21628273	0.67862681	1.00800
67	1	-0.001639	-6.61581169	3.98044136	0.67177541	1.00800
68	1	-0.019109	-7.83226109	1.88246833	0.67177541	1.00800
69	1	-0.000443	-7.83718785	-0.59802347	0.67177541	1.00800
70	1	-0.000270	-7.83643846	-2.32333372	0.67177541	1.00800
71	1	-0.019061	-7.83643846	-4.80370665	0.67177541	1.00800
72	1	-0.001377	-6.62345255	-6.90427827	0.67177541	1.00800
73	1	-0.005061	-4.47543842	-8.14443482	0.67177541	1.00800
74	1	-0.005738	-2.05013167	-8.14448023	0.67177541	1.00800
75	1	-0.004367	0.37572987	-8.14486947	0.67915686	1.00800
76	1	0.000884	2.80358917	-8.14391940	0.68356890	1.00800
77	1	0.003077	4.95182069	-6.90359629	0.68212777	1.00800
78	1	0.057822	6.16252129	-4.79780155	0.68659159	1.00800
79	1	0.011065	6.15854959	-2.31193288	0.66925313	1.00800
80	1	-0.018031	6.14355290	1.90707868	0.66215613	1.00800

81	1	-0.001556	4.90812792	4.02430304	0.65971767	1.00800
82	1	-0.000623	6.15785835	-0.57752829	0.66267724	1.00800

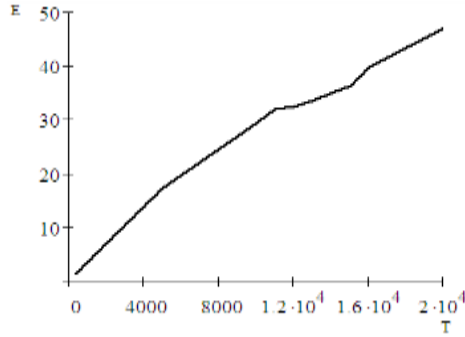
Nəticələrin interpretasiyası. Qrafenin 392 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi əks işarə ilə ionlaşma potensialının qiymətinə bərabərdir: $I_p = -\epsilon_{186} = 0,738170\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiymətini hesablamaq üçün mənfi işarəli ən yuxarı orbital enerji ilə $\epsilon_{192} = -0.007091\text{eV}$ müsbət işarəli ən aşağı orbital enerjinin $\epsilon_{193} = 0,369195\text{eV}$ fərqi tapılır: $\epsilon_{193} - \epsilon_{192} = 0,376286\text{eV}$. Bu isə onun elektrik keçiriciliyinə malik olmasını təsdiq edir. Qrafenin möhkəmliyi $\eta = \frac{1}{2}(\epsilon_{ABMO} - \epsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanıla bilər. Burada ϵ_{ABMO} - ən aşağı boş molekulyar orbitalin enerjisi, ϵ_{YTMO} - elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı tutulmuş molekulyar orbitalin enerjisidir. $\epsilon_{ABMO} = \epsilon_{187} = -0,706683\text{eV}$. $\epsilon_{YTMO} = \epsilon_{186} = -0,738170\text{eV}$. Beləliklə $\eta = 0,015744\text{eV}$. $\eta < 1\text{eV}$ olduğundan qrafen yumşaq material hesab olunur. Elektron sıxlığının paylanması isə aşağıdakı kimidir:



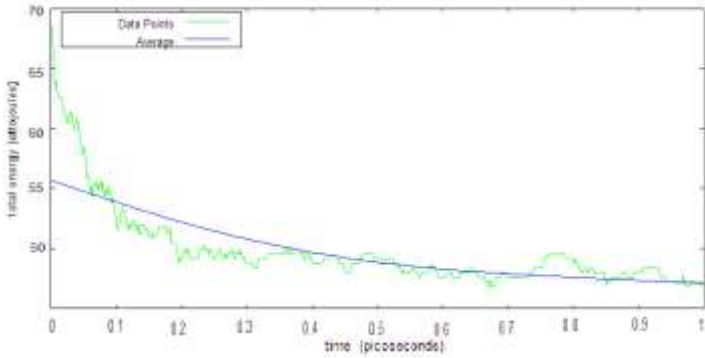
Şəkil 22.2. Qrafenin elektron sıxlığının paylanması

Qrafenin temperatura davamlılığını NanoEngineer-1 proqramı vasitəsilə molekulyar dinamika metodu ilə temperatur və zamandan asılı olaraq tədqiq etmək məqsədilə temperaturun $T=300\text{K}$, 1000K , 2000K , 5000K , 10000K , 11000K , 12000K , 13000K , 14000K , 15000K , 20000K qiymətləri üçün, zamanın 1ps qiymətində, 0-dan başlayaraq $0,001\text{ps}$ addımı ilə 1ps qədər zaman müddətində kompüter hesablamaları aparılmışdır. Alınmış nəticələr əsasında qrafenin tam enerjisinin attocoul vahidi ilə verilmiş qiymətlərinin temperaturdan asılılıq qrafiki (Şəkil 22.4.) qurulmuşdur. Aparılmış kompüter tədqiqatlarının nəticələri bunu deməyə imkan verir ki, qrafen yüksək temperatura davamlı olub və onun quruluşunun dağılması $T=15000\text{K}$ qiymətində müşahidə olunmağa başlayır, $T=16000\text{K}$ qiymətində isə artıq qrafenin quruluşunun dağılması aydın müşahidə olunur və $T=20000\text{K}$ qiymətində isə onun quruluşunun tamam dağılması müşahidə olunmuşdur, bu hala uyğun qrafenin tam enerjisinin zamandan asılılıq qrafiki qurulmuşdur (Şəkil 22.5). Göründüyü kimi tam enerji zamandan asılı olaraq dəyişir. Stabil quruluşlarda isə tam enerjinin qiyməti zamandan asılı olaraq demək olar ki, dəyişmir. Şəkil 22.6-da $T=2000\text{K}$ temperaturdakı stabil quruluşun tam enerjisinin zamandan asılılığı verilmişdir. Nəticələr Cədvəl 22.1. və Cədvəl 22.2. -də verilmişdir.

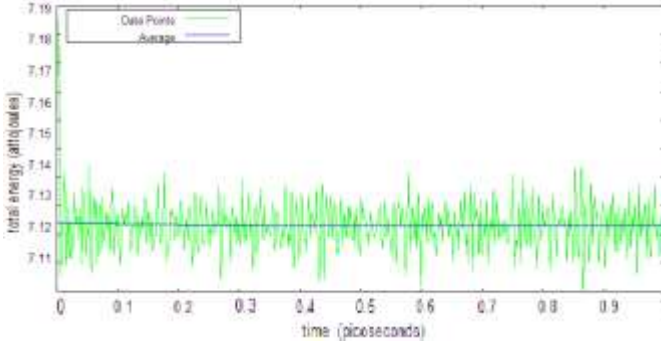
Temperaturun müxtəlif qiymətlərində və zamanın 1ps qiymətində, 0-dan başlayaraq 0.001 addımı ilə 1ps qədər zaman müddətində qrafenin NanoEngineer-1 proqramı vasitəsilə aparılmış hesablamalardan sonra alınmış vizual modelləri Cədvəl 22.2. -də verilmişdir



Şekil 22.3. Qrafenin tam enerjisinin temperaturdan asılılık grafiki



Şekil 22.4. Qrafenin tam enerjisinin zamandan asılılık grafiki($T=20000K$)

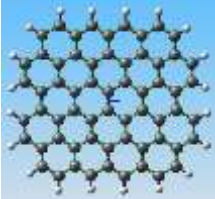
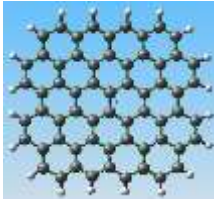
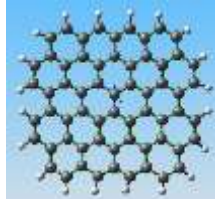
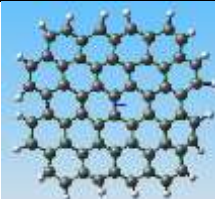
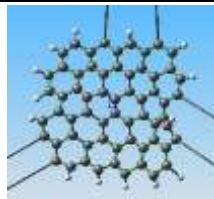



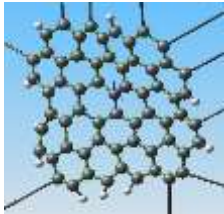
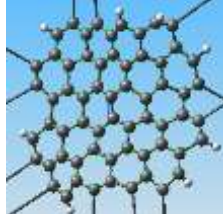
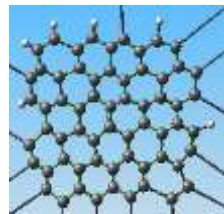
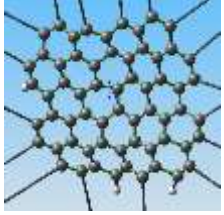


Şekil 22.5. Qrafenin tam enerjisinin zamandan asılılık grafiki($T=2000K$)

Cədvəl 21.1. Qrafenin tam enerjisinin temperaturdan asılı hesablanmış qiymətləri

Sıra N-si	T (temperaturun K ilə verilmiş qiymətləri)	E (attacoul) $1\text{attacoul}=10^{-18}\text{ coul}$
1	300	1.33770
2	1000	3.71546
3	2000	7.11364
4	5000	17.3054
5	10000	29.4025
6	11000	32.0124
7	12000	32.3742
8	13000	33.5636
9	14000	35.0732
10	15000	36.2183
11	16000	39.6897
12	20000	47.1242

Cədvəl 22.2.

Sıra N-si	Qrafenin vizual modelləri		
1	 T=300K	 T=1000K	 T=2000K
2	 T=5000K	 T= 10000K	 T=11000K

3			
	T=12000K	T=13000K	T=14000K
4			
	T=15000K	T=16000K	T=20000K

23. DNT-nin modelləşdirilməsi və kompüterdə tədqiqi

DNT çip texnologiyası keçən əsrin 90-cı illərindən yeni texnologiya kimi sürətlə inkişaf etməyə başlamışdır. Bu texnologiyanın fundamental və tətbiqi tibbdə, biologiyada və hətta elektronkada oynayacağı mühüm rolu nəzərə alaraq bu sahədə geniş tədqiqatlara başladılar və hal-hazırda da bu tendensiya sürətlə davam edir. DNT çiplərinin yaradılmasının nəzəri əsasları sadə və aydındır. Bunlar ikiqat spiral strukturlu DNT molekulunun formalaşmasına əsaslanır. Komplementarlıq prinsipinə əsaslanaraq bir qat polinukleotid zəncirindən alınır və DNT molekulunun strukturunu təkrar edir. DNT çipi sahəsi 1 sm^2 olan lövhədir və burada müəyyən edilmiş sıra ilə qəfəslər var və qəfəslərin hər birində bir qat polinukleotid zənciri yerləşir. Bu polinukleotid zəncirlərin sayı 1 milyondan çox ola bilər və hər bir zəncirin uzunluğu 10 – 1000 nukleotid ardıcılığının uzunluğuna bərabər olur. Son zamanları mikroelektronkanın ehtiyaclarını nəzərə alaraq DNT çiplərinin daha səmərəli sintezini həyata keçirən üsul tapılmışdır. Bu üsul ultrabənövşəyi şüalarla litoqrafiya texnologiyasına əsaslanır.

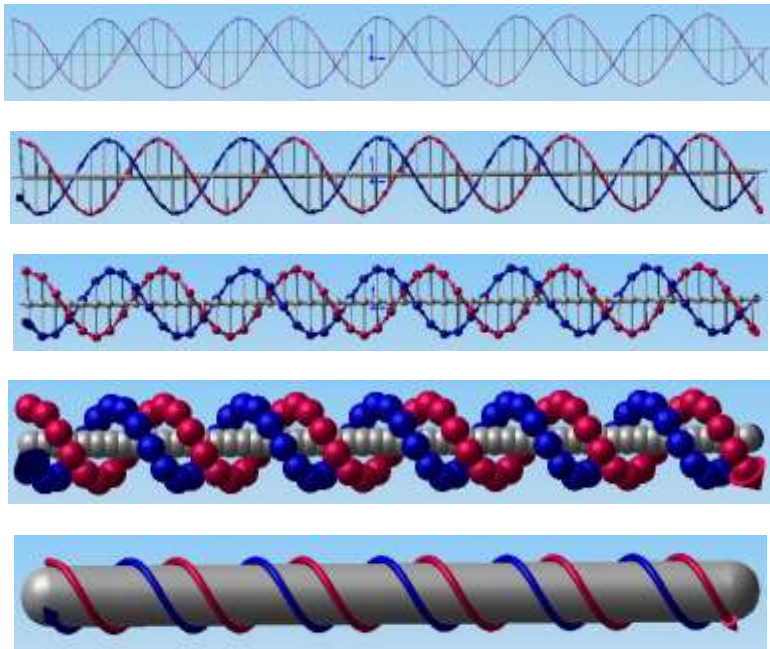
Bu texnologiya vasitəsilə lövhə üzərində oliqonukleotidləri sintez etmək olur. Sonradan oliqonukletid ardıcılığı bioloji DNT molekulu ilə hibridləşdirilərək lazım olan informasiyanı özündə saxlayır. DNT çiplərinin unikal xassələrindən istifadə edərək onların vasitəsilə qenomun oxunmasında, analiz edilməsində, mutasiyaların aşkarlanmasında istifadə edirlər. Bundan başqa DNT çipləri mikroelektronikada informasiya daşıyıcısı kimi əvəzsiz materiallardır. Geniş tətbiq sahələrinə malik olan DNT çiplərinin, xüsusilə onun nano tərtibdə yaradılmış formalarının alınması nanotexnologiyanın ən mühüm nailiyyətlərindən biridir. Əsas komponenti oliqonukleotid olan DNT çiplərinin bioloji DNT molekulları ilə hibridləşdirilməsi zamanı DNT-nin hansı energetik halda olması mühüm rol oynayır. Energetik vəziyyətlərindən asılı olaraq oliqonukleotide hibridləşən DNT molekulları spesifik DNT çiplərinin alınmasına şərait yaradır. Buna görə də model təcrübələrdə DNT molekulunun energetik səviyyələrinin müəyyən edilməsi, yəni onun temperaturdan asılı olaraq öyrənilməsi mühüm əhəmiyyət kəsb edir.

DNT-nin kompüterdə hesablanması

171 atomdan ibarət DNT-nin qurulmuş vizual modeli əsasında temperatura damamlığını tədqiq etmək üçün zamanın $t=1, \dots, 2ps$ ($1ps=10^{-12}$ san.) qiymətlərində DNT-nin tam enerjisinin temperaturun $[-80^{\circ}C, +120^{\circ}C]$ parçasında hesablanmış qiymətləri Cədvəl 22.1-də verilmişdir və DNT-nin tam enerjisinin temperaturdan asılılıq qrafiki qurulmuşdur (Şəkil 22.5). Şəkil 22.3 və 22.4-də isə temperaturun sərhəd qiymətlərində DNT-nin aparılmış hesablamalardan sonra alınmış formaları verilmişdir.

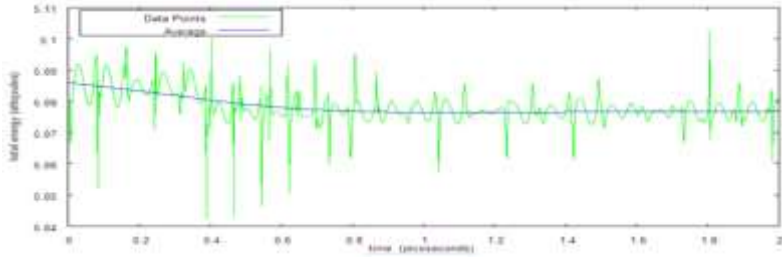
Nəticələrin interpretasiyası. Temperaturun verilmiş qiymətlərində DNT-nin vizual modelə əsaslanan formasında çox cüzi dəyişiklik baş verir (Şəkil 22.3, Şəkil 22.4). Bunla

yanaşı Şəkil 22.5-dən görüldüyü kimi temperaturun arması ilə DNT-nin tam enerjisinin çox kiçik xətti dəyişməsinə səbəb olur. Temperaturun $T=193,4\text{K}$ və $T=393,4\text{K}$ qiymətlərinə uyğun DNT-nin tam enerjiləri fərqi $E_{393,4\text{K}} - E_{193,4\text{K}}=0,64354$ attacoul bərabərdir. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, DNT-nin temperatura davamlı nanomaterial kimi gələcəkdə müxtəlif elektron çiplərdə geniş tətbiq oluna bilər.



Şəkil 22.1. DNT-nin xətt, boru, küre və qələmlərlə, həcmi, silindir formalı vizual modelləri

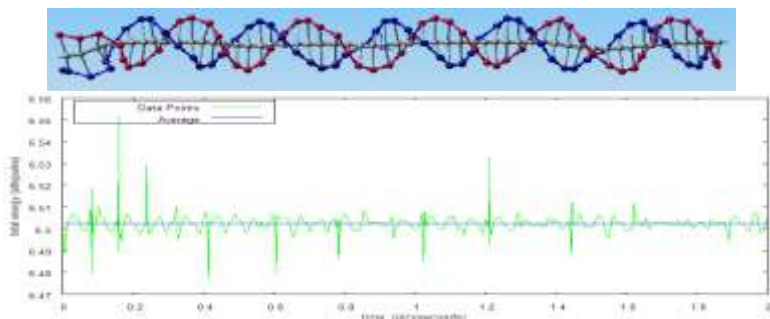




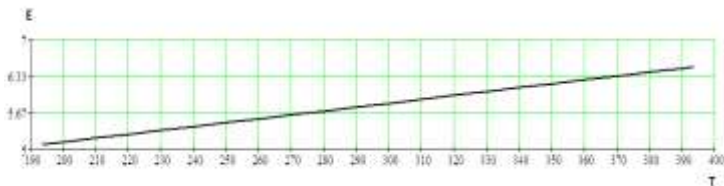
Şəkil 23.2. $T=193K$, $t=1, \dots, 2$ ps

Cədvəl 23.1. DNT -nin tam enerjisinin temperaturdan asılı hesablanmış qiymətləri

Sıra N-si	T		E
	(temperaturun C və K ilə verilmiş qiymətləri)		(attacoul) $1attacoul=10^{-18}$ coul
1	-80	193,4	5,08587
2	-73	200,4	5,13524
3	-63	210,4	5,20618
4	-53	220,4	5,27706
5	-43	230,4	5,34797
6	-33	240,4	5,41863
7	-23	250,4	5,48943
8	-13	260,4	5,56026
9	-3	270,4	5,63103
10	7	280,4	5,70183
11	17	290,4	5,77272
12	27	300,4	5,84327
13	37	310,4	5,91450
14	47	320,4	5,98516
15	57	330,4	6,05577
16	67	340,4	6,12652
17	77	350,4	6,19712
18	87	360,4	6,26839
19	97	370,4	6,33934
20	107	380,4	6,41007
21	117	390,4	6,48069
22	120	393,4	6,50224



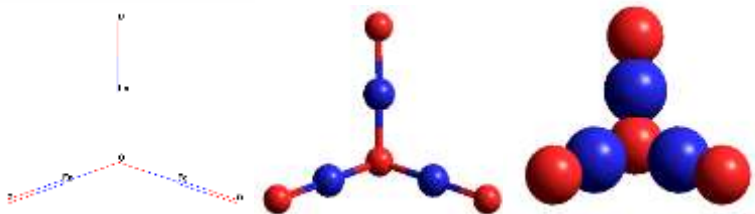
Şəkil 23.3. T=393K, t=1, ... , 2 ps



Şəkil 23.4. DNT-nin tam enerjisinin temperaturdan asılılıq qrafiki

24. Fe₃O₄ nanohissəciyin modelləşdirilməsi, qeyriempirik və SFN metodları ilə tədqiqi

Fe₃O₄ hissəciyi üçün kompüter hesablamaların nəticələri



Şəkil 24.1. Fe₃O₄ hissəciyinin modelləri

Tam enerji	= -4041.460231944 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 4016.484721383 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0062

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)
		x y z

3	26	0.325387	-0.71883092	-1.20489795	-0.58858283
5	26	0.260842	1.07250870	1.32842848	-0.58858283
7	26	0.375242	-1.61448609	1.32842848	0.96277123
4	8	-0.203110	2.86384836	1.96175480	-0.58858283
2	8	-0.137197	-2.51014091	1.96175466	2.51412561
6	8	-0.449784	-0.71883092	0.69510205	-0.58858283
1	8	-0.171380	-0.71883092	-3.10489795	-0.58858283

Nəticələrin interpretasiyası. Fe_3O_4 nanohissəciyinin 110 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi $\varepsilon_{YMO} = \varepsilon_{55} = -4.17087\text{eV}$, ən aşağı boş molekulyar orbitalin enerjisi $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{56} = -0.97548\text{eV}$ -dir. İonlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{55} = 4.17087\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO} = 3.19539\text{eV}$. Bu isə Fe_3O_4 nanohissəciyinin dielektrik material olduğunu göstərir.

Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər.

$\eta = 1.597695\text{eV}$. $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan Fe_3O_4 hissəciyi möhkəm material hesab olunur. ε_{ABMO} mənfi işarəli olduğuna görə Fe_3O_4 hissəciyinin elektrofildir. Fe_3O_4 hissəciyinin stabilliyi $\Delta E(\text{Fe}_3\text{O}_4) = E_{\text{Fe}_3\text{O}_4} - 3/2 \cdot E_{\text{Fe}_2} - 2 \cdot E_{\text{O}_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(\text{Fe}_3\text{O}_4)$ Fe_3O_4 hissəciyinin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $E_{\text{Fe}_3\text{O}_4}$ - Fe_3O_4 hissəciyinin, E_{Fe_2} - Fe_2 molekulyarının, E_{O_2} - O_2 molekulyarının tam enerjisidir.

$$E_{\text{Fe}_3\text{O}_4} = -4041.460232\text{a.v.}, E_{\text{Fe}_2} = -2497.061118\text{ a.v.} \text{ və} \\ E_{\text{O}_2} = -147.0186422\text{a.v.}$$

olduğundan $\Delta E(\text{Fe}_3\text{O}_4) = -1.831270805\text{ a.v.}$ $\Delta E(\text{Fe}_3\text{O}_4) < 0$ olduğundan Fe_3O_4 hissəciyi stabildir və şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu 389nm -dir.

Tam enerji	= -3916.861115183 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 3978.165287900 (a.v.)

$$\text{Virial şərti } (-V/T) = 1.9846$$

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları(Ångströmlə)		
		x	y	z
3 26	-14.246023	-0.71883080	-1.20489800	-0.58858280
5 26	2.588963	1.07250900	1.32842800	-0.58858280
7 26	9.257804	-1.61448600	1.32842800	0.96277130
4 8	-3.898432	2.86384800	1.96175500	-0.58858280
2 8	6.001310	-2.51014100	1.96175400	2.51412600
6 8	2.822991	-0.71883080	0.69510180	-0.58858280
1 8	-2.526635	-0.71883080	-3.10489800	-0.58858280

SFN metodu ilə alınmış nəticələrin interpretasiyası. Fe_3O_4 nanohissəciyinin 110 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi $\varepsilon_{YMO} = \varepsilon_{55} = -$

5.222873eV , ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{56} = -3.302946\text{eV}$. İonlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{55} = 5.222873\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti

$\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO} = 1.919927\text{eV}$. Bu isə Fe_3O_4 hissəciyinin keçiriciliyə malik material olduğunu göstərir. Möhkəmlik

$\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər. $\eta =$

0.9599635eV . $\eta < 1\text{eV}$ olduğundan Fe_3O_4 yumşaq material hesab olunur. ε_{ABMO} mənfi işarəli olduğuna görə Fe_3O_4 hissəciyinin elektrofildir. Fe_3O_4 hissəciyinin stabilliyi

$$\Delta E(\text{Fe}_3\text{O}_4) = E_{\text{Fe}_3\text{O}_4} - 3/2 \cdot E_{\text{Fe}_2} - 2 \cdot E_{\text{O}_2}$$

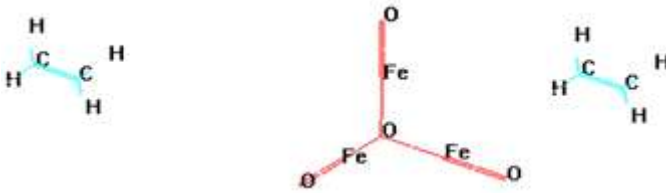
düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(\text{Fe}_3\text{O}_4)$ Fe_3O_4 hissəciyinin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $E_{\text{Fe}_3\text{O}_4}$ - Fe_3O_4

hissəciyinin, E_{Fe_2} - Fe_2 molekulunun, E_{O_2} - O_2 molekulunun tam enerjisidir. $E_{\text{Fe}_3\text{O}_4} = -3916.861115\text{a.v.}$, $E_{\text{Fe}_2} = -2383.11261\text{a.v.}$ və $E_{\text{O}_2} = -147.0186422\text{a.v.}$ olduğundan

$\Delta E(Fe_3O_4) = -45.90849206$ a.v. $\Delta E(Fe_3O_4) < 0$ olduğundan Fe_3O_4 hissəciyi stabildir və şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu 647nm-dir.

PE+Fe₃O₄ kompozitinin qeyriempirik metodu ilə tədqiqi

PE+Fe₃O₄ kompoziti üçün hesablamaların nəticəsi aşağıdakı kimidir:



Şəkil 24.2. PE+Fe₃O₄ kompozitinin modeli

Tam enerji	= -4195.614252574 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 4169.080644763 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0064

ATOMLARIN EFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDINATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)		
			x	y	z
3	26	0.221864	-0.71883081	-1.20489825	-0.58858277
5	26	0.396874	1.07250881	1.32842819	-0.58858277
7	26	0.440870	-1.61448598	1.32842819	0.96277130
4	8	-0.133419	2.86384847	1.96175451	-0.58858277
2	8	-0.302241	-2.51014081	1.96175436	2.51412567
6	8	-0.450579	-0.71883081	0.69510175	-0.58858277
1	8	-0.173012	-0.71883081	-3.10489825	-0.58858277
8	6	-0.127867	-1.54767764	9.04889686	2.42726981
9	6	-0.125944	-1.54767764	10.38889686	2.42726981
14	6	-0.126555	3.35384016	-5.27674196	-0.18115233
15	6	-0.129205	3.35384016	-3.93674196	-0.18115233
12	1	0.062335	-0.61237020	8.50889686	2.42726981
13	1	0.063709	-2.48298507	8.50889686	2.42726981
10	1	0.064090	-2.48298507	10.92889686	2.42726981
11	1	0.063678	-0.61237020	10.92889686	2.42726981
16	1	0.066935	2.41853273	-3.39674196	-0.18115233

17	1	0.059319	4.28914760	-3.39674196	-0.18115233
18	1	0.061512	4.28914760	-5.81674196	-0.18115233
19	1	0.067638	2.41853273	-5.81674196	-0.18115233

Nəticələrin interpretasiyası. $PP+Fe_3O_4$ üçün elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi $\varepsilon_{YMO} = \varepsilon_{71} = -4.276877eV$, ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{72} = -1.031582eV$ -dir. $PE+Fe_3O_4$ -nin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{71} = 4.276877eV$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti $\varepsilon_{A B \bar{M} \bar{O} T i} = 3.245295eV$. Bu isə $PE+Fe_3O_4$ nanohissəciyinin dielektrik material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər. $\eta = 1.6226475eV$. $\eta > 1eV$ olduğundan $PE+Fe_3O_4$ kompoziti möhkəm material hesab olunur. ε_{ABMO} mənfi işarəli olduğuna görə $PE+Fe_3O_4$ kompoziti elektrofildir. $PE+Fe_3O_4$ -nin stabilliyi $\Delta E(PE + Fe_3O_4) = E_{PE+Fe_3O_4} - 3/2 \cdot E_{Fe_2} - 2 \cdot E_{O_2} - 2E_{C_2} - 4E_{H_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(PE + Fe_3O_4)$ $PE+Fe_3O_4$ -nin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. Burada $E_{PE+Fe_3O_4}$ - $PE+Fe_3O_4$ kompozitinin, E_{Fe_2} - Fe_2 molekulunun, E_{O_2} - O_2 molekulunun tam enerjisidir. $E_{PE+Fe_3O_4} = -4195.614253a.v.$, $E_{Fe_2} = -2497.061118a.v.$ və $E_{O_2} = -147.0186422a.v.$, $E_{C_2} = -74.31543142a.v.$ $E_{H_2} = -1.111298185a.v.$ olduğundan $\Delta E(PE + Fe_3O_4) = -7.354428599a.v.$ $\Delta E(PE + Fe_3O_4) < 0$ olduğundan $PE+Fe_3O_4$ kompoziti stabildir və şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu 383nm-dir.

PP+Fe₃O₄ kompoziti qeyriempirik metodu ilə tədqiqi

$PP+Fe_3O_4$ kompoziti üçün hesablamaların nəticəsi aşağıdakı kimidir:

Tam enerji	= -4272.767473206 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 4245.582457078 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0064

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları (Ånqstremlə)		
		x	y	z
3 26	0.261135	-0.71883081	-1.20489825	-0.58858277
5 26	0.615520	1.07250881	1.32842819	-0.58858277
7 26	0.201480	-1.61448598	1.32842819	0.96277130
4 8	-0.003467	2.86384847	1.96175451	-0.58858277
2 8	-0.315370	-2.51014081	1.96175436	2.51412567
6 8	-0.448761	-0.71883081	0.69510175	-0.58858277
1 8	-0.303261	-0.71883081	-3.10489825	-0.58858277
12 6	-0.138630	8.51584371	0.48424481	-0.67000387
13 6	-0.048884	7.69075372	0.80795842	0.33500160
14 6	-0.184007	6.25768203	0.30129728	0.33500160
17 6	-0.185366	-4.81611987	-2.12209505	2.22530372
18 6	-0.055321	-4.81611987	-0.60209505	2.22530372
22 6	-0.145122	-5.97659391	0.06790495	2.22530372
10 1	0.061976	9.53407886	0.84424089	-0.67000387
15 1	0.058220	8.16260646	-0.13665478	-1.48000828
16 1	0.058269	5.74384760	0.66463457	-0.55497604
11 1	0.060629	5.74385879	0.66462665	1.22498893
8 1	0.071052	6.25768203	-0.78870272	0.33500160
19 1	0.062028	-3.78845661	-2.48542442	2.22530372
20 1	0.064991	-5.32994310	-2.48542442	3.11529105
21 1	0.064454	-5.32995429	-2.48543234	1.33532608
9 1	0.061409	8.04399097	1.42885801	1.14500601
23 1	0.076720	-3.88081243	-0.06209505	2.22530372
24 1	0.060087	-5.97659391	1.14790495	2.22530372
25 1	0.050223	-6.91190135	-0.47209505	2.22530372



Şəkil 24.3. PP+ Fe₃O₄ kompozitinin modelləri

Nəticələrin interpretasiyası. PP+Fe₃O₄ kompoziti üçün elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi $\varepsilon_{YMO} = \varepsilon_{79} = -5.691933\text{eV}$, ən aşağı boş molekulyar orbitalın

enerjisi $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{80} = -1.686084\text{eV}$ -dir. $\text{PE}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ -nn ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{79} = 5.691933\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTM} = 4.005849\text{ eV}$. Bu isə $\text{PP}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ nanohissəciiyinin dielektrik material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTM})$ düsturu ilə hesablanıla bilər. $\eta = 2.0029245\text{eV}$. $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan $\text{PP}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ kompoziti möhkəm material hesab olunur. ε_{ABMO} mənfi işarəli olduğuna görə $\text{PP}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ kompoziti elektrofildir. $\text{PP}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ -nin stabilliyi

$\Delta E(\text{PP} + \text{Fe}_3\text{O}_4) = E_{\text{PP}+\text{Fe}_3\text{O}_4} - 3/2 \cdot E_{\text{Fe}_2} - 2 \cdot E_{\text{O}_2} - 3E_{\text{C}_2} - 6E_{\text{H}_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(\text{PP} + \text{Fe}_3\text{O}_4)$ $\text{PP}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ -nin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. Burada $E_{\text{PP}+\text{Fe}_3\text{O}_4}$ - $\text{PP}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ kompozitinin, E_{Fe_2} - Fe_2 molekulunun, E_{O_2} - O_2 molekulunun tam enerjisidir. $E_{\text{PP}+\text{Fe}_3\text{O}_4} = -4272.767473206\text{ a.v.}$, $E_{\text{Fe}_2} = -2497.061118\text{a.v.}$ və $E_{\text{O}_2} = -147.0186422\text{a.v.}$, $E_{\text{C}_2} = -74.31543142\text{a.v.}$ $E_{\text{H}_2} = -1.111298185\text{a.v.}$ olduğundan $\Delta E(\text{PP} + \text{Fe}_3\text{O}_4) = -10.19221781\text{ a.v.}$ $\Delta E(\text{PP} + \text{Fe}_3\text{O}_4) < 0$ olduğundan $\text{PP} + \text{Fe}_3\text{O}_4$ kompoziti stabildir və şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu 310nm -dir.

PVDF+Fe₃O₄-kompozitinin qeyriempirik metodu ilə tədqiqi

$\text{PVDF}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ kompoziti üçün hesablamaların nəticəsi aşağıdakı kimidir:



Şəkil 24.4. $\text{PVDF}+\text{Fe}_3\text{O}_4$ kompozitinin modelləri

Tam enerji	= -4585.237555872 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 4553.564713821 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0070

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)		
		x	y	z
3 26	-0.044281	-0.33982217	-1.65970845	-0.58858283
5 26	0.362541	1.45151745	0.87361798	-0.58858283
7 26	-0.022477	-1.23547735	0.87361798	0.96277123
4 8	-0.170771	3.24285710	1.50694431	-0.58858283
2 8	-0.132051	-2.13113217	1.50694416	2.51412561
6 8	-0.439970	-0.33982217	0.24029155	-0.58858283
1 8	-0.373194	-0.33982217	-3.55970845	-0.58858283
8 9	-0.088807	-4.15269551	-2.66940452	3.28947167
9 6	0.111137	-4.15269551	-1.33940452	3.28947167
10 6	0.062755	-2.99222147	-0.66940452	3.28947167
12 9	0.014467	-2.99222147	0.66059548	3.28947167
14 9	-0.041044	2.65341911	-2.63717550	-1.30512450
15 6	0.153986	2.65341911	-1.30717550	-1.30512450
16 6	0.038823	3.81389315	-0.63717550	-1.30512450
17 9	0.085074	3.81389315	0.69282450	-1.30512450
11 1	0.104648	-5.08800295	-0.79940452	3.28947167
13 1	0.129774	-2.05691403	-1.20940452	3.28947167
18 1	0.150039	4.74920059	-1.17717550	-1.30512450
19 1	0.099352	1.71811168	-0.76717550	-1.30512450

Nəticələrin interpretasiyası. PVDF +Fe₃O₄ kompoziti üçün elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{87} = -1.387321\text{eV}$, ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{88} = 4.135264\text{ eV}$ -dir. PE+Fe₃O₄-nn ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{87} = 1.387321\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO} = 5.522585\text{ eV}$. Bu isə PVDF+Fe₃O₄ nanohissəciyinin dielektrik material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanıla bilər. $\eta = 2.76129\text{eV}$. $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan PVDF+Fe₃O₄

kompoziti möhkəm material hesab olunur. ε_{ABMO} müsbət işarəli olduğuna görə PVDF +Fe₃O₄ kompoziti nuklefeldir. PVDF +Fe₃O₄-nin stabilliyi

$$\Delta E(\text{PVDF} + \text{Fe}_3\text{O}_4) = E_{\text{Fe}_3\text{O}_4} - 3/2 \cdot E_{\text{Fe}_2} - 2 \cdot E_{\text{O}_2} - 2E_{\text{C}_2} - 2E_{\text{H}_2} - 2E_{\text{F}_2}$$

düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(\text{PVDF} + \text{Fe}_3\text{O}_4)$ PVDF + Fe₃O₄ -nin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. Burda $E_{\text{PE+Fe}_3\text{O}_4}$ - PVDF + Fe₃O₄ kompozitinin, E_{Fe_2} - Fe₂ molekulunun, E_{O_2} - O₂ molekulunun tam enerjisidir.

$$E_{\text{PVDF+Fe}_3\text{O}_4} = -4585.237555872 \text{ a.v.}, E_{\text{Fe}_2} = -2497.061118 \text{ a.v.},$$

$$E_{\text{O}_2} = -147.0186422 \text{ a.v.}, E_{\text{C}_2} = -74.31543142 \text{ a.v.},$$

$$E_{\text{H}_2} = -1.111298185 \text{ a.v.}, E_{\text{F}_2} = -195.9593201 \text{ a.v.} \text{ olduğundan}$$

$\Delta E(\text{PVDF} + \text{Fe}_3\text{O}_4) = -2.836495241 \text{ a.v.}$ $\Delta E(\text{PVDF} + \text{Fe}_3\text{O}_4) < 0$ olduğundan PVDF + Fe₃O₄ kompoziti stabildir və şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu 225 nm-dir.

(Fe₃O₄)₄ nanohissəciyi üçün qeyriempirik metodu ilə aparılmış kompüter hesablamaları



Şəkil 24.5. (Fe₃O₄)₄ nanohissəciyinin modelləri

Tam enerji	= -17006.475048856 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 16111.129899656 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0556

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)		
		x	y	z
2 26	8.103589	-2.18272690	1.20178927	0.81345214
3 26	-6.495435	-0.39138728	-1.33153716	0.81345214
4 26	8.087120	-3.07838207	-1.33153716	2.36480620
8 26	-10.055823	2.59416560	-0.48707637	0.81345214
9 26	8.266756	-0.39138728	3.73511571	0.81345214
10 26	8.032069	-2.69276497	-2.49512990	5.21506766
17 26	-9.250667	3.35561746	2.52071876	0.81345214
18 26	-9.114149	2.69820758	3.45043331	0.81345214
19 26	-10.055119	1.83271351	5.89845020	0.81345214
20 26	1.813498	0.16621231	-2.95070500	6.33101601
21 26	-12.006181	5.37513838	0.88872553	0.81345214
24 26	8.221089	-1.75107318	-3.61249781	7.95210000
13 8	-1.999639	4.47107340	-0.78240179	0.81345214
14 8	-1.549261	1.91147102	1.28603618	0.81345214
15 8	5.997986	-3.26714204	-3.17965137	6.89182684
16 8	3.955593	-0.83711596	-2.34087500	4.83721557
7 8	5.997722	-3.97403689	-1.96486334	3.91616058
1 8	3.958151	-2.18272690	-0.69821073	0.81345214
5 8	5.998520	-2.18272690	3.10178927	0.81345214
6 8	-1.992295	1.39995238	-1.96486349	0.81345214
11 8	3.955163	-0.04419425	5.60312454	0.81345214
22 8	-1.999965	6.27920307	2.55985300	0.81345214
23 8	-1.999055	4.79976380	3.75540146	0.81345214
12 8	0.148228	1.05275931	2.50043331	0.81345214
25 8	-0.018898	-0.23500439	-4.04534406	9.01237334
26 8	-1.999712	1.16954044	-3.56053473	7.82481666
27 8	-1.999603	4.34365586	4.40043329	0.81345214
28 8	-1.999578	3.70962129	6.19377574	0.81345214

Nəticələrin interpretasiyası. $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4$ nanohissəciyinin 440 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi $\varepsilon_{Y\text{TMO}} = \varepsilon_{220} = -30.1724\text{eV}$, ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi $\varepsilon_{AB\text{MO}} = \varepsilon_{221} = -29.750167\text{eV}$. İonlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{220} = 30.1724\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti $\varepsilon_{AB\text{MO}} - \varepsilon_{Y\text{TMO}} = 0.422233\text{eV}$. Bu isə $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4$ nanohissəciyinin keçiriciliyə malik material olduğunu

göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər. $\eta = 0.2111165\text{eV}$. $\eta < 1\text{eV}$ olduğundan $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4$ yumşaq material hesab olunur. ε_{ABMO} mənfi işarəli olduğuna görə $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4$ nanohissəciyinin elektrofildir. $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4$ nanohissəciyinin stabilliyi $\Delta E((\text{Fe}_3\text{O}_4)_4) = E_{(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4} - 4 \cdot (3/2 \cdot E_{\text{Fe}_2} + 2 \cdot E_{\text{O}_2})$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E((\text{Fe}_3\text{O}_4)_4)$ $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4$ hissəciyinin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $E_{(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4}$ - Fe_3O_4 hissəciyinin, E_{Fe_2} - Fe_2 molekulunun, E_{O_2} - O_2 molekulunun tam enerjisidir. $E_{(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4} = -17006.47505\text{a.v.}$, $E_{\text{Fe}_2} = -2383.11261\text{a.v.}$ və $E_{\text{O}_2} = -147.0186422\text{ a.v.}$ olduğundan $\Delta E((\text{Fe}_3\text{O}_4)_4) = -1531.650254\text{ a.v.}$ $\Delta E((\text{Fe}_3\text{O}_4)_4) < 0$ olduğundan $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4$ nanohissəciyi stabildir.

$(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4$ nanohissəciyi üçün SFN metodu ilə aparılmış kompüter hesablamaların nəticələri

Tam enerji	= -16939.972913162 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 16091.156546124 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0528

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)		
		x	y	z
2 26	0.213519	-2.18272700	1.20178900	0.81345210
3 26	-10.170670	-0.39138730	-1.33153700	0.81345210
4 26	8.160734	-3.07838200	-1.33153700	2.36480600
8 26	-11.999238	2.59416600	-0.48707630	0.81345210
9 26	6.065779	-0.39138730	3.73511600	0.81345210
10 26	11.999418	-2.69276500	-2.49513000	5.21506800
17 26	-11.058836	3.35561700	2.52071900	0.81345210
18 26	-10.948800	2.69820800	3.45043300	0.81345210
19 26	-12.050793	1.83271400	5.89845000	0.81345210
20 26	14.035147	0.16621230	-2.95070500	6.33101600
21 26	-12.007550	5.37513800	0.88872560	0.81345210
24 26	15.991908	-1.75107300	-3.61249800	7.95210000

13	8	-1.999990	4.47107300	-0.78240180	0.81345210
14	8	-1.999462	1.91147100	1.28603600	0.81345210
15	8	5.998316	-3.26714200	-3.17965100	6.89182700
16	8	6.003779	-0.83711600	-2.34087500	4.83721600
7	8	5.997687	-3.97403700	-1.96486300	3.91616100
1	8	-0.183084	-2.18272700	-0.69821070	0.81345210
5	8	5.968923	-2.18272700	3.10178900	0.81345210
6	8	-1.998139	1.39995200	-1.96486300	0.81345210
11	8	0.024644	-0.04419425	5.60312500	0.81345210
22	8	-1.999957	6.27920300	2.55985300	0.81345210
23	8	-1.999828	4.79976400	3.75540100	0.81345210
12	8	-2.015536	1.05275900	2.50043300	0.81345210
25	8	5.995241	-0.23500440	-4.04534400	9.01237300
26	8	-2.023167	1.16954000	-3.56053500	7.82481700
27	8	-2.000002	4.34365600	4.40043300	0.81345210
28	8	-1.999945	3.70962100	6.19377600	0.81345210

Nəticələrin interpretasiyası. $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4$ nanohissəciyinin 440 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin energyisi $\varepsilon_{Y_{TMO}} = \varepsilon_{220} = -24.153743\text{eV}$, ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi $\varepsilon_{A_{BMO}} = \varepsilon_{221} = -23.742201\text{eV}$. İonlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{220} = 24.153743\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti $\varepsilon_{A_{BMO}} - \varepsilon_{Y_{TMO}} = 0.411542\text{eV}$. Bu isə $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4$ nanohissəciyinin keçiriciliyə malik material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{A_{BMO}} - \varepsilon_{Y_{TMO}})$ düsturu ilə hesablanı bilər. $\eta = 0.205771\text{eV}$. $\eta < 1\text{eV}$ olduğundan $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4$ yumşaq material hesab olunur. $\varepsilon_{A_{BMO}}$ mənfi işarəli olduğuna görə $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4$ nanohissəciyinin elektrofildir. $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4$ nanohissəciyinin stabilliyi $\Delta E((\text{Fe}_3\text{O}_4)_4) = E_{(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4} - 4 \cdot (3/2 \cdot E_{Fe_2} + 2 \cdot E_{O_2})$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E((\text{Fe}_3\text{O}_4)_4)$ $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4$ hissəciyinin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $E_{(\text{Fe}_3\text{O}_4)_4} -$

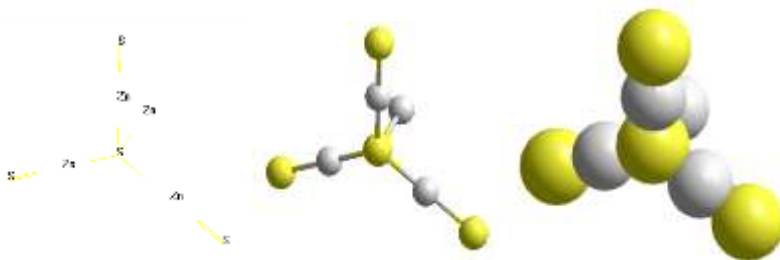
Fe_3O_4 hissəciyinin, E_{Fe_2} - Fe_2 molekulunun, E_{O_2} - O_2 molekulunun tam enerjisidir.

$$E_{(Fe_3O_4)_4} = -16939.97291 \text{ a.v.}, E_{Fe_2} = -2383.11261 \text{ a.v.} \text{ və}$$

$E_{O_2} = -148.1418541 \text{ a.v.}$ olduğundan $\Delta E((Fe_3O_4)_4) = 1456.162421 \text{ a.v.}$ $\Delta E((Fe_3O_4)_4) < 0$ olduğundan $(Fe_3O_4)_4$ nanohissəciyi stabildir.

25. ZnS nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının modelləşdirilməsi və tədqiqi

ZnS nanohissəciyi üçün qeyriempirik metodla ilə aparılmış kompüter hesablamaların nəticələri



Şəkil 25.1. $(ZnS)_4$ nanohissəciyinin modelləri

Tam Enerji	= -8601.822530176 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 8556.068336418 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0053

ATOMLARIN YÜKLƏRİ VƏ KOORDINATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqştremlər)		
			x	y	z
1	16	-0.228518	2.86114728	2.29915486	0.38667600
2	16	-0.045481	-5.00236341	2.29915486	0.38667600
3	16	-0.228290	-1.07060807	-4.51084512	0.38667600
4	30	0.139867	-1.07060807	-2.24084512	0.38667600
5	30	0.140752	-3.03648573	1.16415488	0.38667600

6 30	0.140286	0.89526960	1.16415488	0.38667600
7 16	-0.015268	-1.07060807	0.02915488	0.38667600
8 30	0.096650	-1.07060807	0.02915488	-1.88332400

Nəticələrin interpretasiyası. ZnS nanohissəciyinin 184 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi $\varepsilon_{YMO} = \varepsilon_{92} = -3.351554\text{eV}$, ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{93} = 3,105533\text{eV}$ və ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{92} = 3.351554\text{eV}$.

Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO} = 5.563311\text{eV}$. Bu isə ZnS nanohissəciyinin dielektrik material olmasını göstərir. ZnS nanohissəciyinin möhkəmliyi

$$\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO})$$

düsturu ilə hesablanı bilər. $\eta = 2.7816555\text{eV}$. $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan ZnS nanohissəciyinin möhkəm material hesab olunur. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{93} = 3,105533\text{eV}$ ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi müsbət olduğuna görə ZnS nanohissəciyinin nuklefidir. ZnS nanohissəciyinin nanohissəciyinin stabilliyi

$$\Delta E(Zn_4S_4) = E_{Zn_4S_4} - 2 \cdot E_{Zn_2} - 2 \cdot E_{S_2}$$

Burada $\Delta E(Zn_4S_4)$ Zn_4S_4 -in stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\Delta E(Zn_4S_4) > 0$ olduqda material qeyri stabil,

$\Delta E(Zn_4S_4) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. $E_{Zn_4S_4}$ - ZnS nanohissəciyinin, E_{Zn_2} - Zn_2 molekulinin, E_{S_2} - S_2 molekulinin tam enerjisidir.

$E_{Zn_4S_4} = -32876,58817$ a.v., $E_{Zn_2} = -3514,638404$ a.v., və $E_{S_2} = -785,9793878$ a.v. olduğundan

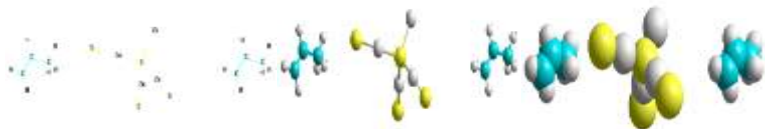
$\Delta E(Zn_4S_4) = -0,586947106$ $\Delta E(Zn_4S_4) < 0$ olduğundan ZnS nanohissəciyi stabildir və şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 224\text{nm}$ -dir.

PP+ZnS – nanokompoziti üçün qeyriempirik metod ilə kompüter hesablamaları

Tam Enerji	= -8833.114488824 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 8787.562501669 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0052

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları(Ånqstremlə)			
			x	y	z	
5	6	-0.142234	0.40965570	0.24305990	-0.67000390	12.01100
6	6	-0.046700	-0.41543430	0.56677350	0.33500160	12.01100
7	6	-0.184028	-1.84850600	0.06011234	0.33500160	12.01100
10	16	-0.154807	8.41356600	-4.38633700	0.31090700	32.06400
11	16	-0.277781	12.69393000	1.66697900	0.31090700	32.06400
12	16	-0.066403	6.27342200	1.66697900	-3.39601300	32.06400
13	30	0.136975	7.34349400	0.91032110	-1.54255300	65.37000
14	30	0.127700	10.55375000	0.91032110	0.31090700	65.37000
15	30	0.193185	8.41356600	-2.11633700	0.31090700	65.37000
16	16	0.040785	8.41356600	0.15366270	0.31090700	32.06400
17	30	0.001045	7.34347100	0.91033760	2.16434700	65.37000
22	6	-0.144408	18.52340000	0.48424480	-0.67000390	12.01100
23	6	-0.046194	17.69831000	0.80795840	0.33500160	12.01100
24	6	-0.183840	16.26524000	0.30129730	0.33500160	12.01100
9	1	0.068982	-2.36234000	0.42344960	-0.55497600	1.00800
4	1	0.063471	-2.36232900	0.42344170	1.22498900	1.00800
1	1	0.068284	-1.84850600	-1.02988800	0.33500160	1.00800
18	1	0.063275	16.26524000	-0.78870270	0.33500160	1.00800
19	1	0.057741	18.05154000	1.42885800	1.14500600	1.00800
20	1	0.054981	19.54163000	0.84424090	-0.67000390	1.00800
21	1	0.068110	15.75141000	0.66462670	1.22498900	1.00800
2	1	0.059260	-0.06219703	1.18767300	1.14500600	1.00800
3	1	0.054835	1.42789100	0.60305600	-0.67000390	1.00800
8	1	0.058130	0.05641846	-0.37783970	-1.48000800	1.00800
25	1	0.055433	18.17016000	-0.13665480	-1.48000800	1.00800
26	1	0.074203	15.75140000	0.66463460	-0.55497600	1.00800



Şəkil 25.2. PP+(ZnS)₄ nanokompozitinin modelləri

Nəticələrin interpretasiyası. PP+(ZnS)₄ nanokompozitinin üçün elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin energyisi $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{116} = -3.316548$ eV, ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{117} = 1.439883$ eV və ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{YTMO} = 3.316548$ eV. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO} = 4.756431$ eV. Bu isə PP+ZnS nanohissəciyinin dielektrik material olmasını göstərir.

PP+ZnS nanohissəciyinin möhkəmliyi $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər. $\eta = 2.3782155$ eV. $\eta > 1$ eV olduğundan PP+(ZnS)₄ nanokompoziti möhkəm material hesab olunur. Ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi ε_{ABMO} müsbət olduğuna görə PP+(ZnS)₄ nanokompoziti nuklefidir. PP+(ZnS)₄ nanokompozitinin stabilliyi

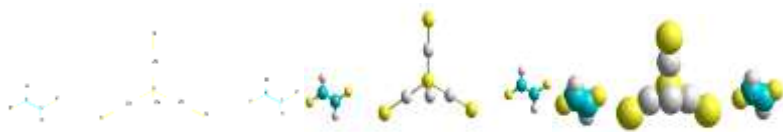
$\Delta E(PP + Zn_4S_4) = E_{Zn_4S_4} - 2 \cdot E_{Zn_2} - 2 \cdot E_{S_2} - 3 \cdot E_{C_2} - 6 \cdot E_{H_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(PP + Zn_4S_4)$ Zn₄S₄-in stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\Delta E(PP + Zn_4S_4) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(PP + Zn_4S_4) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. $E_{PP+Zn_4S_4}$ - PP+ZnS nanokompozitinin, E_{Zn_2} - Zn₂ molekulunun, E_{S_2} - S molekulunun, E_{C_2} - C₂-nin və E_{H_2} - H₂-nin tam enerjisidir. $E_{PP+Zn_4S_4} = -8833.114489$ a.v., $E_{Zn_2} = -3514,638404$ a.v., $E_{S_2} = -785,9793878$, $E_{C_2} = -74.31543142$ eV və $E_{H_2} = -1.111298185$ a.v. olduğundan $\Delta E(PP + Zn_4S_4) = -2.26482239$ eV. $\Delta E(PP + Zn_4S_4) < 0$ olduğundan PP+(ZnS)₄ nanokompoziti stabildir və şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 261$ nm-dir.

PVDF+(ZnS)₄ nanokompoziti üçün qeyriempirik metod ilə kompüterdə aparılmış hesablamalar

Tam Enerji	= -9251.328136920 (a.v.)
Electronic Kinetic Energy	= 9249.391533990 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0002

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları(Ånqstremlə)		
			x	y	z
2	9	-0.349708	1.09298400	0.44434400	0.00000000
3	6	0.138910	-1.21930400	0.43934400	-0.00000000
4	6	0.153080	-0.05882999	1.10934400	-0.00000000
5	9	-0.357895	-2.37111800	1.10434400	0.00000000
7	16	-0.473249	12.25649000	2.29915500	0.38667600
8	16	-0.499510	4.39298400	2.29915500	0.38667600
9	16	-0.509438	8.32473900	-4.51084500	0.38667600
10	30	0.561517	8.32473900	-2.24084500	0.38667600
11	30	0.572460	6.35886200	1.16415500	0.38667600
12	30	0.567904	10.29062000	1.16415500	0.38667600
13	16	-0.962108	8.32473900	0.02915497	0.38667600
14	30	0.737594	8.32473900	0.02915497	-1.88332400
16	9	-0.358103	19.02060000	0.44434400	0.00000000
17	6	0.148813	16.70831000	0.43934400	-0.00000000
18	6	0.141002	17.86878000	1.10934400	-0.00000000
19	9	-0.342729	15.55649000	1.10434400	0.00000000
6	1	0.212673	-0.05882999	2.18934400	-0.00000000
15	1	0.203628	16.70831000	-0.64065600	-0.00000000
1	1	0.204804	-1.21930400	-0.64065600	-0.00000000
20	1	0.210356	17.86878000	2.18934400	-0.00000000



Şəkil 25.3. PVDF+(ZnS)₄ nanokompozitinin modelləri

Nəticələrin interpretasiyası. PVDF+ZnS nanokompozitinin 248 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{124} = - 8.10793$ eV, ən

aşağı boş molekulyar orbitalin enerjisi $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{125} = -5.173701\text{eV}$ və ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{YTMO} = 8.10793\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO} = 2.934229\text{eV}$. Bu isə PVDF +ZnS nanohissəciyinin dielektrik material olmasını göstərir. PVDF+ZnS nanohissəciyinin möhkəmliyi $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər.

$\eta = 1.4671145\text{eV}$. $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan PVDF+ZnS nanohissəciyinin möhkəm material hesab olunur. ε_{ABMO} ən aşağı boş molekulyar orbitalin enerjisi müsbət olduğuna görə PVDF+ZnS nanokompoziti nuklefidir. PVDF+ZnS nanokompozitinin stabilliyi

$\Delta E(\text{PVDF} + \text{Zn}_4\text{S}_4) = E_{\text{Zn}_4\text{S}_4} - 2 \cdot E_{\text{Zn}_2} - 2 \cdot E_{\text{S}_2} - 2 \cdot E_{\text{C}_2} - 2 \cdot E_{\text{H}_2} - 2 \cdot E_{\text{F}_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(\text{PVDF} + \text{Zn}_4\text{S}_4)$ Zn₄S₄-in stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\Delta E(\text{PVDF} + \text{Zn}_4\text{S}_4) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(\text{PVDF} + \text{Zn}_4\text{S}_4) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. $E_{\text{PVDF} + \text{Zn}_4\text{S}_4}$ - PVDF+ZnS nanokompozitinin, E_{Zn_2} - Zn₂ molekulunun, E_{S_2} - S molekulunun, E_{C_2} C₂-nin, E_{F_2} F₂-nin və E_{H_2} H₂-nin tam enerjisidir.

$E_{\text{PVDF} + \text{Zn}_4\text{S}_4} = -9251.328137\text{a.v.}$, $E_{\text{Zn}_2} = -3514,638404\text{ a.v.}$,
 $E_{\text{S}_2} = -785,9793878$, $E_{\text{C}_2} = -74.31543142\text{eV}$,
 $E_{\text{F}_2} = -195.9593201\text{eV}$ və $E_{\text{H}_2} = -1.111298185\text{a.v.}$ olduğundan $\Delta E(\text{PVDF} + \text{Zn}_4\text{S}_4) = -28.5598302\text{eV}$. $\Delta E(\text{PVDF} + \text{Zn}_4\text{S}_4) < 0$ olduğundan PVDF +ZnS nanokompoziti stabildir və süaləndirəcəyi fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 424\text{ nm}$ -dir.

26. Sirkonim dioksid nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının modelləşdirilməsi və tədqiqi

Sirkonim dioksid nanohissəciklərinin geniş tətbiq sahələri vardır[30]. Buna görə də sirkonim dioksid nanohissəcikləri və onların nanokompozisiyalarının elektron quruluşunun kvantmexaniki metodlarla öyrənilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır[8, 15]. Sirkonim dioksid nanohissəciciyi və onun nanokompozisiyalarının elektron quruluşu və xassələri Xartri-Fok-Rutan (XFR) metodu ilə öyrənilmişdir. Sirkonim dioksid nanohissəciciyi və onun PP+ZrO₂, PVDF+ZrO₂ nanokompozisiyalarının tam enerjisini, ionlaşma potensialının qiymətini, elektrik keçiriciliyini, möhkəmliyini və s. tədqiq etmək olar. Hesablamalar zamanı χ_q atom orbitalları olaraq Zr atomundan 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, 3s-, 3p_x-, 3p_y-, 3p_z-, 3dx²-, 3dy²-, 3dz²-, 3dxy-, 3dxz-, 3dyz-, 4s-, 4p_x-, 4p_y-, 4p_z-, 4dx²-, 4dy²-, 4dz²-, 4dxy-, 4dxz-, 4dyz-, 5s-, 5p_x-, 5p_y-, 5p_z-, C, O və F atomlarından 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, H atomundan isə 1s- orbitalından istifadə edilmişdir. Atom orbitalları kimi Gauss funksiyalarından istifadə olunmuşdur[10]. Hesablamalar zamanı Mathcad, MS Excel və HyperChem proqramı istifadə olunmuşdur.

ZrO₂ nanohissəciciyi üçün kompüter hesablamaları

Məlumdur ki, nanohissəciklərin quruluşu və xassələri nanohissəcikdə atomların sayı və ölçüsü ilə müəyyən olunur. N sayda ZrO₂ – dən ibarət olan nanohissəciciyin ölçüsü

$$D = 2 * r * \sqrt[3]{N} \quad (26.1)$$

düsturu ilə hesablanı bilər. Burada $r = r_1 + 2 * r_2$, r_1 – Zr atomunun, r_2 – O atomunun kovalent radiusu, N – ZrO₂-nin sayıdır. $r_1=0,145\text{nm}$, $r_2=0,073\text{ nm}$ və $N=9$ olduqda sirkonim dioksid nanohissəciciyin (26.1) düsturu ilə hesablanmış ölçüsü $D=1,2\text{nm}$ alınır. Hesablamalar zamanı hər Zr atomundan 29 olmaqla $29*9=261$, O atomundan 5 olmaqla $5*18=90$ atom

orbitalından istifadə edilmişdir. (26.1) düsturu əsasında 351 sayda molekulyar orbital qurulmuşdur. Nanohissəciyin 504 sayda elektronu ən aşağı enerjili 252 enerji səviyyəsini doldurur. Şəkil 26.1-də $(\text{ZrO}_2)_9$ üçün seçilmiş fəza quruluşu verilmişdir.



Şəkil 26.1. $(\text{ZrO}_2)_9$ nanohissəciyinin xətt, kürə-silindir və kürələrlə vizual modelləri

Tam enerji	=	-32876.588165500 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	=	32503.105788184 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	=	2.0115

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları(Ångström)		
			x	y	z
3	40	0.598598	-5.59789930	-3.25602845	4.57141363
4	40	0.604038	-4.88144756	1.56574038	2.58681135
6	40	0.544658	1.60081672	-1.59456895	1.09249355
9	40	0.555248	0.04365576	0.62811962	0.47349562
12	40	0.557386	-2.57465918	1.91757279	1.08417086
16	40	0.583131	-6.19626588	-0.56023420	3.98748188
21	40	0.597746	1.38482183	-4.15952085	2.59048731
24	40	0.615033	-0.60326842	-5.54230784	3.92755547
27	40	0.554658	-3.41814080	-5.19790998	4.57141363
10	8	-0.305858	-0.91698385	2.46106421	-0.23106174
11	8	-0.219605	-1.60751114	0.10318373	1.77855513
5	8	-0.296791	-4.48567155	1.08005868	0.48934009
13	8	-0.315831	-3.48652865	3.22512073	2.58806797
14	8	-0.224028	-4.14695010	0.11949550	4.04116552
15	8	-0.319458	-6.93123559	1.38531135	3.30737646
1	8	-0.316416	-5.59789930	-5.43916095	4.57141363
17	8	-0.320228	-6.87699465	-1.84109068	5.63233928
18	8	-0.286939	-5.91718841	-2.25867702	2.65584037
19	8	-0.148577	-0.07703159	-2.85112231	1.67176557
20	8	-0.284285	3.06128100	-3.14055177	1.62732641
7	8	-0.296105	1.65449015	0.43363490	1.92340257

22	8	-0.443416	0.90946610	-6.28998514	2.54842251
23	8	-0.403699	0.67817118	-3.91265932	4.62562702
8	8	-0.288813	0.88542916	-0.90666249	-0.83773203
25	8	-0.162045	-2.31290783	-4.89681121	2.72929060
26	8	-0.288281	-1.89728567	-6.57080457	5.35210902
2	8	-0.290117	-3.55974123	-3.17068555	5.34401980

Nəticələrin interpretasiyası. ZrO_2 nanohissəciyinin 504 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi əks işarə ilə ionlaşma potensialının qiymətinə bərabərdir: $I_p = -\varepsilon_{252} = 6.538526\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiymətini hesablamaq üçün mənfi işarəli ən yuxarı orbital enerji ilə $\varepsilon_{252} = -6,538526$, müsbət işarəli ən aşağı orbital enerjinin $\varepsilon_{253} = 3,105533$ fərqi tapılır: $\varepsilon_{253} - \varepsilon_{252} = 9,644059\text{ eV}$. Bu isə ZrO_2 nanohissəciyinin dielektrik material olmasını göstərir. edir. ZrO_2 nanohissəciyinin möhkəmliyi

$\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər. Burada ε_{ABMO} - ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi, ε_{YTMO} -elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisidir. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{253} = 3,105533\text{eV}$. $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{252} = -6,538526\text{eV}$. Beləliklə $\eta = 4,8220295\text{eV}$. $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan ZrO_2 nanohissəciyinin möhkəm material hesab olunur. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{253} = 3,105533\text{eV}$ ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi müsbət olduğuna görə ZrO_2 nanohissəciyinin nuklefidir. ZrO_2 nanohissəciyinin stabilliyi

$$\Delta E(Zr_9O_{18}) = E_{Zr_9O_{18}} - \frac{9}{2} \cdot E_{Zr_2} - 9 \cdot E_{O_2}$$

düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E(Zr_9O_{18})$ ZrO_2 -in stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\Delta E(Zr_9O_{18}) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E(Zr_9O_{18}) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. $E_{Zr_9O_{18}}$ - ZrO_2 nanohissəciyinin, E_{Zr_2} - Zr_2 molekulunun,

E_{O_2} - O_2 molekulunun tam enerjisidir. $E_{Zr_9O_{18}} = -32876.58817$ a.v., $E_{Zz_2} = -7009.498508$ a.v., və $E_{O_2} = -147.0186422$ a.v. olduğundan $\Delta E(Zr_9O_{18}) = -10.67709958$ a.v. $\Delta E(Zr_9O_{18}) < 0$ olduğundan ZrO_2 nanohissəciyi stabildir və şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 129$ nm-dir.

PP+(ZrO_2), nanokompziti üçün kompüter hesablamaları

PP+(ZrO_2), nanokompzitinin nəzəri modeli kimi iki C_3H_6 polimeri arasında yerləşdirilmiş (ZrO_2), nanohissəciyinə baxılmışdır. Hesablamalar zamanı hər C və O atomundan 5, H atomundan bir, Zr atomundan 29 olmaqla 393 bazis funksiyalarından istifadə edilmişdir. Nanokompzitin 552 sayda elektronu ən aşağı enerjili 276 enerji səviyyəsini doldurur. Şəkil 26.2-də PP+ ZrO_2 nanokompziti üçün seçilmiş nəzəri modelin fəza quruluşu verilmişdir.



Şəkil 26.2. PP+(ZrO_2), nanokompziti

Tam enerji	=	-33108.030802107 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	=	32733.222157158 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	=	2.0115

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)		
		x	y	z
3 40	0.630620	-5.11733838	-3.11664840	5.57830621
4 40	0.629024	-5.19863361	1.04397802	2.11111875

6	40	0.620954	1.38380247	-1.53491604	0.60372870
9	40	0.629322	-0.37856323	0.41566167	-0.29362379
12	40	0.621285	-3.02182250	1.46774231	0.32813261
16	40	0.623773	-6.02207405	-0.71709204	4.17277707
21	40	0.631756	1.39395580	-3.76509782	2.54960869
24	40	0.632975	-0.31447251	-5.14107968	4.26974221
27	40	0.622636	-2.97011268	-4.87776322	5.57830621
10	8	-0.326982	-1.71992453	1.72795796	-1.40994106
11	8	-0.294469	-1.36486567	0.87982317	1.59566024
5	8	-0.303597	-4.34866774	-0.23360799	0.55673787
13	8	-0.323662	-4.50767023	2.86090010	1.12230064
14	8	-0.305895	-4.36919528	0.68978354	4.10126045
15	8	-0.324104	-7.19654586	0.43972706	2.73649177
1	8	-0.320251	-5.11733838	-5.29132671	5.57830621
17	8	-0.327317	-6.71181973	-1.68779062	6.00960645
18	8	-0.292871	-5.04591676	-2.52343748	3.48126676
19	8	-0.287712	0.27301375	-1.90168488	2.42600552
20	8	-0.329566	2.86671677	-3.06798760	1.09543231
7	8	-0.320372	1.76279253	0.54657000	0.05742369
22	8	-0.317375	0.32542311	-5.65251125	2.25991949
23	8	-0.317313	1.51347431	-4.01990971	4.70181639
8	8	-0.313165	-0.28636587	-1.71636275	-0.77192554
25	8	-0.286570	-2.12113395	-4.03544569	3.77185902
26	8	-0.329889	-1.34714605	-6.33218978	5.78374709
2	8	-0.314399	-3.21354622	-3.00415997	6.64848321
28	6	-0.142106	2.36873888	-10.81423945	1.13218479
29	6	-0.049198	2.36873888	-9.47423945	1.13218479
30	6	-0.186712	1.05238026	-8.71423945	1.13218479
37	6	-0.145012	-9.64067087	2.89765291	2.83169842
38	6	-0.051022	-9.64067087	4.23765291	2.83169842
39	6	-0.183894	-10.95702949	4.99765291	2.83169842
34	1	0.056446	3.30404631	-8.93423945	1.13218479
35	1	0.057283	3.30404631	-11.35423945	1.13218479
36	1	0.057409	1.43343144	-11.35423945	1.13218479
31	1	0.072952	1.25155942	-7.64259228	1.13218479
32	1	0.067634	0.48081618	-8.97755874	0.24219746
33	1	0.063452	0.48080373	-8.97756447	2.02216243
40	1	0.062008	-10.75785033	6.06930009	2.83169842
41	1	0.067556	-11.52859357	4.73433363	1.94171108
42	1	0.067273	-11.52860602	4.73432789	3.72167605
43	1	0.065548	-8.70536344	2.35765291	2.83169842
44	1	0.057145	-10.57597831	2.35765291	2.83169842
45	1	0.056401	-8.70536344	4.77765291	2.83169842

Nəticələrin interpretasiyası. PP+ (ZrO_2)_n nanokompozitinin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\epsilon_{276} = 7.261014eV$.

Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{277} - \varepsilon_{276} = 10.393691\text{eV}$. Bu isə $\text{PP}+(\text{ZrO}_2)_9$ nanokompozitinin dielektrik material olduğunu göstərir. Nanokompozitin möhkəmliyi $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanır. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{277} = 3.132677\text{eV}$. $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{276} = -7.261014\text{eV}$. Beləliklə $\eta = 5.1968455\text{a.v.}$ $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan $\text{PP}+(\text{ZrO}_2)_9$ nanokompoziti möhkəm material hesab olunur. ε_{ABMO} müsbət işarəli olduğuna görə $\text{PP}+\text{ZrO}_2$ nanokompoziti nuklefidir. $\text{PP}+(\text{ZrO}_2)_9$ nanokompozitinin stabilliyi $\Delta E(\text{PP}+(\text{ZrO}_2)_9) = E_{\text{PP}+(\text{ZrO}_2)_9} - 4,5 \cdot E_{\text{Zr}_2} - 9E_{\text{O}_2} - 3E_{\text{C}_2} - 6E_{\text{H}_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $E_{\text{PP}+(\text{ZrO}_2)_9}$ - $\text{PP}+(\text{ZrO}_2)_9$ nanokompozitinin, E_{Zr_2} - Zr_2 -nin, E_{O_2} - O_2 -nin, E_{C_2} - C_2 -nin, E_{H_2} - H_2 -nin tam enerjisidir. $E_{\text{PP}+\text{ZrO}_2} = -33108.0308$ a.v., $E_{\text{Zr}_2} = -7009.498508\text{a.v.}$, $E_{\text{O}_2} = -147.0186422$ a.v., $E_{\text{C}_2} = -74.31543142\text{a.v.}$, $E_{\text{H}_2} = -1.111298185\text{a.v.}$, olduğundan $\Delta E(\text{PP}+\text{ZrO}_2) = -12.50565282$ a.v. $\Delta E(\text{PP}+(\text{ZrO}_2)_9) < 0$ olduğundan $\text{PP}+(\text{ZrO}_2)_9$ nanokompoziti stabildir və şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 120$ nm-dir.

PVDF+(ZrO₂)₉ nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları

PVDF+(ZrO₂)₉ nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki C₂H₂F₂ polimeri arasında yerləşdirilmiş (ZrO₂)₉ nanohissəciyinə baxılmışdır. Hesablamalar zamanı hər C, O və F atomlarından 5, H atomundan bir, Zr atomundan 29 olmaqla 395 sayda bazis funksiyalarından istifadə edilmiş və 395 sayda molekulyar orbital qurulmuşdur. Nanokompozitin 568 sayda elektronu ən aşağı enerjili 284 enerji səviyyəsini doldurur. PVDF+(ZrO₂)₉

nanokompoziti üçün seçilmiş nəzəri modelin fəza quruluşu
Şəkil 26.3-də verilmişdir.



Şəkil 26.3. PVDF+ZrO₂ nanokompoziti

Tam enerji	= -33420.315552295 (a.v.)
Elektronların kinetik enerjisi	= 33042.025937857 (a.v.)
Virial şərti (-V/T)	= 2.0114

ATOMLARIN EFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)		
			x	y	z
3	40	0.728652	-2.70703131	-0.06666558	-0.81600220
4	40	0.631350	-4.57188493	1.74313904	3.65941109
6	40	0.649717	-1.57707908	-4.80446015	5.62678184
9	40	0.718785	-2.60397821	-2.25179120	6.94945200
12	40	0.590683	-4.19172849	0.03390851	5.84390659
16	40	0.590557	-3.93263000	2.11478104	1.07165100
21	40	0.650982	-0.48841303	-5.30658316	3.08136677
24	40	0.464143	0.22736622	-4.85550295	0.43625392
27	40	0.640047	-0.34558945	-2.78837955	-0.81600220
10	8	-0.331236	-4.36570081	-1.09749104	7.64945357
11	8	-0.299715	-2.23823895	-0.81298562	5.36646213
5	8	-0.314076	-4.63486179	2.17055050	5.70282406
13	8	-0.295425	-5.12785732	-0.41936391	3.89299198
14	8	-0.320676	-3.24650283	3.31223493	2.73276052
15	8	-0.312334	-5.85478147	2.10159245	2.01952148
1	8	-0.329415	-2.70703131	-2.34426078	-0.81600220
17	8	-0.307670	-2.60289789	0.35114025	1.30882563
18	8	-0.348749	-3.76069100	1.90139928	-1.08831444
19	8	-0.272986	-2.39764760	-4.47614013	3.60561004
20	8	-0.321849	-0.01956655	-6.18636940	5.00544529
7	8	-0.328293	-3.27483834	-4.31085846	6.83039074
22	8	-0.302763	-0.45914915	-3.34614129	1.97635877
23	8	-0.309801	-0.07562624	-6.58692122	1.40737696

8	8	-0.330573	-0.71615502	-3.31995814	6.89632676
25	8	-0.289886	-0.26648679	-4.88918238	-1.66433562
26	8	-0.327937	1.77261919	-3.58636883	-0.03457365
2	8	-0.338328	-0.94284377	-1.03146546	-1.83760484
28	9	-0.121458	-1.33022781	-9.45156900	8.36695600
29	6	0.048361	-1.33022781	-8.12156900	8.36695600
30	6	0.051394	-0.16975377	-7.45156900	8.36695600
33	9	-0.125101	-0.16975377	-6.12156900	8.36695600
34	9	-0.127995	-5.75462204	5.68222700	-2.04903700
35	6	0.049189	-4.59414800	7.68222700	-2.04903700
36	6	0.048838	-5.75462204	7.01222700	-2.04903700
39	9	-0.126806	-4.59414800	9.01222700	-2.04903700
32	1	0.087407	0.76555366	-7.99156900	8.36695600
37	1	0.077453	-3.65884056	7.14222700	-2.04903700
38	1	0.079324	-6.68992947	7.55222700	-2.04903700
31	1	0.076188	-2.26553525	-7.58156900	8.36695600

Nəticələrin interpretasiyası. PVDF+ (ZrO_2)₉ nanokompozitin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{284} = 5.626206\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{285} - \varepsilon_{284} = 8.162517\text{eV}$. Bu isə nanokompozitin dielektrik material olduğunu göstərir.

Nanokompozitin möhkəmliyi $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO}) = 4.0812585\text{a.v.}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{285} = 2.536311\text{eV}$, $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{284} = -5.626206\text{eV}$. $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan PVDF+ (ZrO_2)₉ nanokompoziti möhkəm material hesab olunur.

ε_{ABMO} müsbət işarəli olduğuna görə PVDF+ (ZrO_2)₉ nanokompoziti nuklefidir. Nanokompozitin stabilliyi

$$\Delta E(PVDF + (ZrO_2)_9) = E_{PVDF+(ZrO_2)_9} - 4,5 \cdot E_{Zr_2} - 9E_{O_2} - 2E_{C_2} - 2E_{H_2} - 2E_{F_2}$$

düsturu ilə hesablanır. $E_{PVDF+ZrO_2}$ -PVDF+ (ZrO_2)₉ nanokompozitinin, E_{Zr_2} -Zr₂-nin, E_{O_2} -O₂-nin, E_{C_2} -C₂-nin, E_{H_2} -H₂-nin və E_{F_2} -F₂-nin tam enerjisidir.

$E_{PVDF+(ZrO_2)_9} = -33420.315552295 \text{ a.v.}$, $E_{Zr_2} = -7009.498508 \text{ a.v.}$,
 $E_{O_2} = -147.0186422 \text{ a.v.}$, $E_{C_2} = -74.31543142 \text{ a.v.}$,
 $E_{H_2} = -1.111298185 \text{ a.v.}$, $E_{F_2} = -195.9593201 \text{ a.v.}$ olduğundan
 $\Delta E(PVDF + (ZrO_2)_9) = -11.63238688 \text{ a.v.}$ $\Delta E(PVDF + (ZrO_2)_9) < 0$
 olduğundan PVDF+ $(ZrO_2)_9$ nanokompoziti stabildir və
 şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = 152 \text{ nm}$ -dir.

Nəticə. Sirkonim dioksid nanohissəciyi və onun $PP+(ZrO_2)_9$,
 $PVDF+(ZrO_2)_9$ nanokompozisiyalarının nəzəri vizual modelləri
 qurulmuşdur. Bu modellər əsasında XFR metodu ilə
 kompüterdə hesablamalar aparılmışdır. Sirkonim dioksid
 nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının orbital
 enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin
 qiymətləri, nanohissəciyə və onun nanokompozisiyalarına daxil
 olan atomların effektiv yükləri hesablanmışdır[15].
 Hesablamaların nəticələri göstərir ki, sirkonim dioksid
 nanohissəciyi və onun $PP+(ZrO_2)_9$, $PVDF+(ZrO_2)_9$
 nanokompozisiyaları möhkəm, nuklefil və stabil dielektrik
 materiallardır.

27. Qızıl sulfid $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyi və onun $(Au_2S)_{22}+PP$, $(Au_2S)_{22}+PVDF$ nanokompozisiyalarının modelləşdirilməsi və tədqiqi

Qızıl sulfid Au_2S nanohissəcikləri öz xassələrinə görə
 geniş tətbiq sahələrinə malikdir [27]. Bu nanohissəcik
 rəngləyici maddələrin, elektron sxemlərin və s. hazırlanmasında
 geniş istifadə oluna bilər. Buna görə də $(Au_2S)_{22}$
 nanohissəciyinin (Şəkil 27.2) və onun $(Au_2S)_{22} + PP$,
 $(Au_2S)_{22}+PVDF$ nanokompozisiyalarının (Şəkil 27.3) elektron
 quruluşunun kvantmexaniki metodlarla öyrənilməsinin böyük

əhəmiyyəti vardır. Məlumdur ki, nanohissəciklərin quruluşu və xassələri

nanohissəcikdəki atomların sayı və ölçüsü ilə müəyyən olunur.

Au və S atomlarının kovalent radiuslarının qiymətlərini bilərək

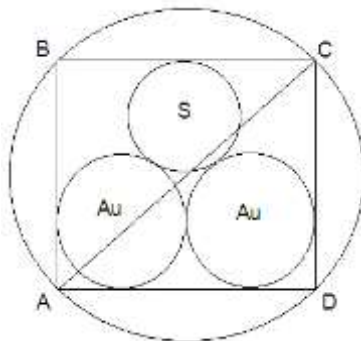
($r_{Au}=0,134\text{nm}$,

$r_S=0,102\text{nm}$) iki Au və bir S

atomlarınınin təqribi olaraq yerləşdiyi kürənin radiusunu

Şəkil 1.-dən istifadə edərək təyin etmək olar. $\triangle ACD$ - də r

$= AC/2$.



Şəkil 27.1.

Bu düzbucaqlı üçbucaqdan $AC = \sqrt{AD^2 + CD^2}$; $AD = 4r_{Au}$ və $CD \approx 2(r_{Au} + r_S)$ götürmək olar. Beləliklə, $AC = 0,71419885\text{nm}$. $r = 0,35709943\text{nm}$ alırıq. Nanohissəcikdəki

atomların sayı təqribi olaraq $n = \left(\frac{R}{r}\right)^3$ düsturu ilə hesablan

bilər. Burada R kürə formalı hesab olan $(Au_2S)_n$

nanohissəciyinin radiusu, r isə kürə formalı hesab olunan

Au_2S -nin radiusudur. Adətən $(Au_2S)_n$ nanohissəciyinin radiusu

$R \approx 1-2\text{nm}$ tərtibində olur. $R=1\text{nm}$ olduqda $n=22$ alınır. Onda

66 atomdan ibarət $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyinin nəzəri modelini

qurmaq olar(Şəkil 26.2). $(Au_2S)_{22} + PP$ və $(Au_2S)_{22} + PVDF$

nanokompozisiyalarının nəzəri modelləri isə Şəkil 26.3-də

verilmişdir. Qızıl sulfid $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyinin və onun

$(Au_2S)_{22} + PP$, $(Au_2S)_{22} + PVDF$ nanokompozisiyalarının

elektron quruluşu və xassələri Genişlənmiş Hükkel metodu ilə

öyrənilmişdir. Məlumdur ki, Genişlənmiş Hükkel metodu

molekulyar orbitallar (MO) metodunun sadə yarımempirik

variantıdır. MO metodunda hesab olunur ki, molekulda hər bir

elektron molekuldakı nüvələrin və digər elektronların yaratdığı müəyyən effektiv sahədə başqa elektronlardan asılı olmadan hərəkət edir. Molekulda elektronun halı molekulyar orbital adlanan birelektronlu dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. Onlar çoxmərkəzli funksiyalardır. Belə ki, onların ifadəsinə elektronun müxtəlif atom nüvələrindən olan məsafələri daxil olur. Molekulyar orbitalların axtarılmasının müxtəlif variantları mövcuddur. Onlardan biri də U_i molekulyar orbitallarını molekula daxil olan atomların atom orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində axtarılması metodudur (MO LCAO metodu) [1, 2, 3]:

$$U_i = \sum_{q=1}^m C_{qi} \chi_q \quad (27.1)$$

Burada C_{qi} - naməlum əmsallar, χ_q - isə bazis funksiyaları kimi seçilən atom orbitallarıdır. Molekulların elektron quruluşunun kvantmexaniki hesablamalarında adətən valent elektronların atom orbitallarını nəzərə almaqla kifayətlənilir. $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyinin molekulyar orbitallarını qurmaq üçün qızıl və kükürd atomlarının hər birindən 9 olmaqla $66 \cdot 9 = 594$ atom orbitallarından istifadə olunmuşdur. Hesablamalar zamanı χ_q atom orbitalları olaraq Au atomlarından $6s$ -, $6p_x$ -, $6p_y$ -, $6p_z$ -, $5d_{z^2}$ -, $5d_{xz}$ -, $5d_{yz}$, $5d_{x^2}$ -, $5d_{xy}$ - və S atomlarından isə $3s$ -, $3p_x$ -, $3p_y$ -, $3p_z$ -, $3d_{z^2}$ -, $3d_{xz}$ -, $3d_{yz}$, $3d_{x^2}$ -, $3d_{xy}$ -, atom orbitallarından istifadə edilmişdir. (27.1) düsturu əsasında molekulyar orbital qurulmuşdur. Hər qızıl atomundan 11 və hər kükürd atomundan 6 elektron olmaqla $44 \cdot 11 + 22 \cdot 6 = 616$ sayda valent elektronu ən aşağı enerjili 308 enerji səviyyəsini doldurur. C və F atomlarının hər birindən dörd ($2s$ -, $2p_x$ -, $2p_y$ -, $2p_z$) və H atomlarından hər birindən bir ($1s$ -) valent atom orbitalından istifadə olunmuşdur. $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyinin və onun $(Au_2S)_{22} + PP$, $(Au_2S)_{22} + PVDF$ nanokompozisiyalarının tam enerjisini, ionlaşma potensialının qiymətlərini hesablamaq, mexaniki, elektrik, maqnit xassələrini və s. tədqiq etmək olar.



Şəkil 27.2. $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyinin vizual modelləri



Şəkil 27.3. $(Au_2S)_{22}$ +PP və $(Au_2S)_{22}$ +PVDF nanokompozitlərinin vizual modelləri

$(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyi üçün kompüter hesablamaları və alınmış nəticələrin interpretasiyası

Hesablamalar nəticəsində $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyin orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin qiymətləri və nanohissəciyinə daxi olan atomların effektiv yükləri(Cədvəl 27.1.) və s. hesablanmışdır. $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyinin 616 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisi: $\varepsilon_{YMO} = \varepsilon_{308} = -11.540509\text{eV}$. Ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi: $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{309} = -10.324232\text{eV}$. Nanohissəciyin ionlaşma potensialı: $I_p = -\varepsilon_{YMO} = 11.540509 \text{ eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO} = 1.216277\text{eV}$ fərqi ilə müəyyən olunur. Bu isə $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyinin keçirici

material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər. $\eta = 0.6081385$ a.v. və $\eta < 1eV$ olduğundan $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyi yumşaq material hesab olunur. Ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi mənfə işarəli olduğuna görə $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyinin elektrofildir. $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyinin stabilliyi

$$\Delta E((Au_2S)_{22}) = E_{(Au_2S)_{22}} - 22 \cdot E_{Au_2} - 11 \cdot E_{S_2}$$

düsturu ilə hesablanır. $\Delta E((Au_2S)_{22}) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E((Au_2S)_{22}) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. $E_{(Au_2S)_{22}}$ - $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyinin, E_{Au_2} - Au_2 və E_{S_2} - S_2 molekulunun tam enerjisidir. $E_{(Au_2S)_{22}} = -344.4884046$ a.v., $E_{Au_2} = -9.996839837$ a.v. və $E_{S_2} = -7.156810571$ a.v. olduğundan $\Delta E((Au_2S)_{22}) = -45.83301192$ a.v. və $\Delta E((Au_2S)_{22}) < 0$ olduğundan $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyi stabildir.

$(Au_2S)_{22}$ +PP nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları və alınmış nəticələrin interpretasiyası

$(Au_2S)_{22}$ +PP nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki C_3H_6 polimeri arasında yerləşdirilmiş $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyinə baxılmışdır. Hər C atomundan 4, H atomundan bir, hər qızıl atomundan 11 və hər kükürd atomundan 6 elektron olmaqla nanokompozitin 652 sayda elektronu ən aşağı enerjili 326 enerji səviyyəsini doldurur. Hesablamalar nəticəsində $(Au_2S)_{22}$ +PP nanokompozitinin orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin qiymətləri və nanokompozitə daxili olan atomların effektiv yükləri (Cədvəl 27.2.) və s. hesablanmışdır. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı

molekulyar orbitalın enerjisi: $\varepsilon_{YMO} = \varepsilon_{326} = -11.449077\text{eV}$.
 Ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi: $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{327} = -10.436444\text{eV}$. Nanokompozitin ionlaşma potensialı: $I_p = -\varepsilon_{YMO} = 11.449077\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO} = 1.012633\text{eV}$ fərqi ilə müəyyən olunur. Bu isə $(\text{Au}_2\text{S})_{22} + \text{PP}$ nanokompoziti keçirici material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO})$ düsturu ilə hesablanıla bilər. $\eta = 0.5063165\text{a.v.}$ və $\eta < 1\text{eV}$ olduğundan $(\text{Au}_2\text{S})_{22} + \text{PP}$ nanokompoziti yumşaq material hesab olunur. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{327} = -10.436444\text{eV}$ ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi mənfi işarəli olduğuna görə $(\text{Au}_2\text{S})_{22} + \text{PP}$ nanokompoziti elektrofildir. $(\text{Au}_2\text{S})_{22} + \text{PP}$ nanokompozitinin stabilliyi

$$\Delta E((\text{Au}_2\text{S})_{22} + \text{PP}) = E_{(\text{Au}_2\text{S})_{22} + \text{PP}} - 22 \cdot E_{\text{Au}_2} - 11 \cdot E_{\text{S}_2} - 3 \cdot E_{\text{C}_2} - 6 \cdot E_{\text{H}_2}$$

düsturu ilə hesablanır. $E_{(\text{Au}_2\text{S})_{22} + \text{PP}} - (\text{Au}_2\text{S})_{22} + \text{PP}$ nanokompozitinin, $E_{\text{Au}_2} - \text{Au}_2$ -nin, $E_{\text{S}_2} - \text{S}_2$ -nin, $E_{\text{C}_2} - \text{C}_2$ -nin, $E_{\text{H}_2} - \text{H}_2$ -nin tam enerjisidir. $E_{(\text{Au}_2\text{S})_{22} + \text{PP}} = -367.3541543\text{a.v.}$, $E_{\text{Au}_2} = -9.996839837\text{a.v.}$ və $E_{\text{S}_2} = -7.156810571\text{a.v.}$, $E_{\text{C}_2} = 5.015905604\text{a.v.}$, $E_{\text{H}_2} = -1.291132619\text{a.v.}$ olduğundan $\Delta E((\text{Au}_2\text{S})_{22} + \text{PP}) = -53.65104481\text{a.v.}$ $\Delta E((\text{Au}_2\text{S})_{22} + \text{PP}) < 0$ olduğundan $(\text{Au}_2\text{S})_{22} + \text{PP}$ nanokompoziti stabildir.

$(\text{Au}_2\text{S})_{22} + \text{PVDF}$ nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları və alınmış nəticələrin interpretasiyası

$(Au_2S)_{22}$ +PVDF nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki $C_2H_2F_2$ polimeri arasında yerləşdirilmiş $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyinə baxılmışdır. Hər C atomundan 4, F atomlarından 7, H atomundan bir, hər qızıl atomundan 11 və hər kükürd atomundan 6 valent elektronu olmaqla nanokompozitin 664 sayda elektronu ən aşağı enerjili 332 enerji səviyyəsini doldurur. Hesablamalar nəticəsində $(Au_2S)_{22}$ +PVDF nanokompozitinin orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin qiymətləri və nanokompozitə daxi olan atomların effektiv yükləri(Cədvəl 27.3.) və s. tapılmışdır. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisi: $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{332} = -11.449075eV$. Ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi: $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{333} = -10.43641eV$. $(Au_2S)_{22}$ +PVDF nanokompozitinin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{YTMO} = 11.449075eV$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO} = 1.012665eV$ fərqi ilə müəyyən olunur. Bu isə $(Au_2S)_{22}$ +PVDF nanokompozitinin keçirici material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablana bilər. $\eta = 0.5063325a.v.$ $\eta < 1eV$ olduğundan $(Au_2S)_{22}$ +PVDF nanokompoziti yumşaq material hesab olunur. Ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi mənfi işarəli olduğuna görə $(Au_2S)_{22}$ +PVDF nanokompozitinin elektrofildir. $(Au_2S)_{22}$ +PVDF nanokompozitinin stabilliyi $\Delta E((Au_2S)_{22} + PVDF) = E_{(Au_2S)_{22}+PVDF} - 22 \cdot E_{Au_2} - 11 \cdot E_{S_2} - 3 \cdot E_{C_2} - 6 \cdot E_{H_2} - 2E_{F_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $E_{(Au_2S)_{22}+PVDF}$ - $(Au_2S)_{22}$ +PVDF nanokompozitinin, E_{Au_2} - Au₂-nin, E_{S_2} - S₂-nin, E_{C_2} - C₂-nin,

E_{H_2} - H₂-nin və E_{F_2} - F₂-nin tam enerjisidir. $E_{(Au_2S)_{22}+PVDF} = -367.3541543$ a.v., $E_{Au_2} = -9.996839837$ a.v. və $E_{S_2} = -7.156810571$ a.v., $E_{C_2} = -5.015905604$ a.v., $E_{H_2} = -1.291132619$ a.v. və $E_{F_2} = -12.57307174$ a.v. olduğundan $\Delta E((Au_2S)_{22} + PVDF) = -45.90495506$ a.v. $\Delta E((Au_2S)_{22} + PVDF) < 0$ olduğundan $(Au_2S)_{22} + PVDF$ nanokompoziti stabildir.

Nəticə. $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyi və onun $(Au_2S)_{22} + PP$, $(Au_2S)_{22} + PVDF$ nanokompozisiyalarının elektron quruluşu Genişlənmiş Hückel metodu ilə öyrənilmişdir. Nanohissəciyin və onun $(Au_2S)_{22} + PP$, $(Au_2S)_{22} + PVDF$ nanokompozisiyalarının orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin qiymətləri, nanohissəciyə və onun $(Au_2S)_{22} + PP$, $(Au_2S)_{22} + PVDF$ nanokompozisiyalarına daxili olan atomların effektiv yükləri hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, $(Au_2S)_{22}$ nanohissəciyi və onun $(Au_2S)_{22} + PP$, $(Au_2S)_{22} + PVDF$ nanokompozisiyaları yumşaq, elektrofil və stabil keçirici materiallardır. Bu materiallar müxtəlif elektron sxemlərin hazırlanmasında istifadə oluna bilər.

CƏDVƏL 27.1. ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI.

$E((Au_2S)_{22}) = -344.488404614$ a.v.

Z Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)		
		x	y	z
1 79	0.409826	8.61590	6.12927	-1.75731
2 79	0.419974	6.64769	9.87691	-1.50029
3 79	0.401680	4.15342	12.38713	-4.05704
5 79	0.404961	4.86187	10.54514	-5.59650
6 79	0.390752	1.18953	12.00498	-7.52999
8 79	0.405386	0.53089	10.38898	-5.72911
9 79	0.404957	10.19893	-0.51021	-2.57123
11 79	0.409191	11.77711	-3.79827	0.14261
12 79	0.413948	9.71501	-4.29797	-1.30567
14 79	0.422302	8.91456	-4.17194	3.10779
16 79	0.418854	6.95325	-7.39686	5.93042

17	79	0.426013	8.09430	-5.44691	7.00032
19	79	0.417536	3.88386	-5.73089	8.34874
20	79	0.401539	0.23121	-7.80484	9.71706
22	79	0.403068	1.33071	-9.25274	8.00290
23	79	0.390923	-2.85882	-10.50990	7.57434
24	79	0.407709	-6.62567	-10.00835	5.24321
26	79	0.412325	-4.90706	-10.35899	3.45880
27	79	0.409603	-9.14393	-9.41866	1.67078
29	79	0.396780	-11.15741	-5.36183	0.65268
30	79	0.420892	-14.22817	1.64581	1.51907
31	79	0.440065	-12.52581	2.30624	3.21086
32	79	0.451292	-11.57416	3.97029	-0.72344
33	79	0.406621	-9.85055	7.25849	-6.92518
34	79	0.402968	11.82953	3.12600	-0.94060
36	79	0.409757	11.56564	3.54187	-3.39032
39	79	0.412562	-2.92677	10.77831	-8.59859
41	79	0.424423	-1.63630	8.69686	-9.05389
42	79	0.430464	-6.39915	8.72004	-9.55867
43	79	0.428648	-5.43326	7.04981	-7.98497
45	79	0.414438	-8.43759	8.82208	-5.58284
47	79	0.413782	-11.32995	7.90807	-2.46462
48	79	0.444277	-10.38058	5.64809	-3.08702
50	79	0.405712	-12.89795	5.85592	0.33153
53	79	0.403070	-11.34868	-1.71920	2.86876
55	79	0.413662	-13.82057	-2.27976	2.88080
56	79	0.385064	-11.50696	-6.10014	3.09014
58	79	0.403257	-7.61216	-7.44979	1.87840
60	79	0.401650	-2.66284	-8.28154	6.44472
61	79	0.419530	4.90638	-7.52850	9.73417
62	79	0.404628	9.06674	-6.58847	2.45486
63	79	0.407267	12.73855	-0.87865	-2.65480
64	79	0.421911	8.34068	10.37908	-3.26224
66	79	0.399928	10.64428	7.42555	-1.07840
15	16	-0.889668	8.33690	-5.92308	4.64823
46	16	-0.836259	-10.18015	7.53464	-4.55795
4	16	-0.835868	6.03485	10.97613	-3.54859
7	16	-0.790987	2.66530	11.48148	-5.71223
49	16	-0.901847	-10.83405	6.23080	-0.83184
25	16	-0.802950	-4.27649	-9.90871	5.73306
51	16	-0.811611	-12.90388	3.62758	1.23597
52	16	-0.877324	-13.04245	-0.00779	2.79451
35	16	-0.804972	11.74427	1.31721	-2.51966
54	16	-0.788698	-12.05299	-3.88241	2.34616
18	16	-0.816058	6.13962	-6.45123	7.97148
37	16	-0.808205	10.79198	5.12802	-1.75731

57	16	-0.776310	-9.97316	-7.15252	1.63640
38	16	-0.808569	-0.67646	10.51679	-7.79582
59	16	-0.798170	-1.05201	-9.00041	8.06790
13	16	-0.764579	9.83554	-4.84610	0.99362
40	16	-0.874437	-4.04199	8.69906	-9.04611
28	16	-0.822458	-7.09570	-9.53236	2.93840
10	16	-0.852658	11.22638	-2.48585	-1.79458
21	16	-0.822636	2.56250	-7.55717	9.17952
65	16	-0.830631	8.61590	8.52551	-1.75731
44	16	-0.818299	-7.65423	7.90852	-7.67249

CƏDVƏL 27.2. ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

$E(\text{Au}_2\text{S})_{22+\text{pp}} = -367.3541543\text{a.v.}$

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)		
			x	y	z
1	79	0.528439	6.62704	6.68067	2.91626
2	79	0.423197	4.82312	10.86696	2.66876
3	79	0.501323	3.99113	13.70319	-0.45933
5	79	0.476995	4.56270	11.90028	-1.78621
6	79	0.492645	0.64342	12.38734	-3.65608
8	79	0.510462	0.47616	10.84999	-2.65864
9	79	0.502803	9.97653	1.14952	1.75268
11	79	0.504557	10.96222	-1.76507	5.39218
12	79	0.402876	11.14686	-2.77344	3.30584
14	79	0.474030	7.40111	-4.96075	4.70362
16	79	0.479859	5.88986	-7.73935	7.95559
17	79	0.524566	6.14992	-5.92779	9.16843
19	79	0.452115	1.71862	-6.50398	7.77758
20	79	0.469825	-1.39655	-9.67229	7.95597
22	79	0.534393	-0.14723	-10.81196	6.34849
23	79	0.596782	-4.27164	-9.65775	4.22085
24	79	0.482982	-6.46312	-11.56857	1.27490
26	79	0.482245	-4.71158	-11.82557	0.67237
27	79	0.451207	-6.61160	-10.08862	-3.30859
29	79	0.557640	-7.90192	-5.42304	-4.34578
30	79	0.666282	-13.50219	0.43766	-3.57876
31	79	0.552806	-13.97366	0.13278	-1.61776
32	79	0.433557	-10.46447	2.85320	-4.33229
33	79	0.485592	-7.75849	8.09304	-9.00825
34	79	0.528661	10.81905	4.63889	4.55729
36	79	0.478674	11.23267	5.85175	2.58250
39	79	0.418454	-0.96538	11.76055	-7.07611
41	79	0.512994	0.56648	10.46242	-8.05931
42	79	0.462511	-3.47910	9.23473	-9.50242

43	79	0.516376	-3.33600	7.65741	-7.85938
45	79	0.457340	-7.23140	9.08990	-6.67852
47	79	0.476264	-10.86428	6.57296	-5.56584
48	79	0.520374	-9.16196	4.82482	-5.76967
50	79	0.372509	-12.52536	4.23083	-3.63626
53	79	0.501328	-11.53530	-4.06133	-2.31149
55	79	0.529576	-13.04277	-4.36807	-3.69964
56	79	0.421103	-9.51926	-7.18373	-4.14841
58	79	0.519240	-6.44543	-7.94378	-2.20317
60	79	0.567405	-2.84393	-8.07321	3.52875
61	79	0.435976	1.83274	-7.98632	9.87347
62	79	0.479834	9.54246	-5.87808	5.48243
63	79	0.411797	12.36881	1.24249	2.55454
64	79	0.506776	7.20793	11.52834	2.15021
66	79	0.516951	7.14131	7.69298	4.36135
15	16	-1.105509	7.13747	-5.92244	6.84548
46	16	-1.056614	-8.64410	7.12796	-6.62369
4	16	-0.917124	4.96806	11.79237	0.64552
7	16	-1.025014	2.61474	12.14030	-2.41004
49	16	-1.032444	-10.26483	5.16440	-3.56565
25	16	-1.050715	-4.42436	-10.22700	2.59517
51	16	-0.832564	-12.30842	1.71230	-3.33509
52	16	-1.165522	-12.80501	-1.97428	-3.04614
35	16	-0.907939	11.14435	3.26767	2.75170
54	16	-0.886107	-10.32292	-5.23867	-3.68717
18	16	-0.984942	3.80768	-6.95179	8.40375
37	16	-1.247967	9.00526	6.36946	2.91626
57	16	-0.896453	-8.34747	-8.34635	-2.80079
38	16	-1.055922	0.36263	11.48789	-5.43884
59	16	-1.119534	-1.96723	-9.77849	5.39973
13	16	-0.817723	9.61960	-3.91513	4.78175
40	16	-0.925391	-1.79617	9.77369	-8.21480
28	16	-1.184739	-6.05896	-10.50294	-0.98183
10	16	-0.819806	10.85887	-0.43847	3.30713
21	16	-0.895136	0.55499	-8.61433	7.99401
65	16	-0.865001	6.62704	9.37116	2.91626
44	16	-0.829152	-5.60292	8.53556	-8.09762
67	6	-0.068798	3.63382	17.86510	-9.91045
68	6	0.019324	3.63382	19.38510	-9.91045
69	6	-0.182749	2.47335	20.05510	-9.91045
76	6	-0.068798	1.86247	-17.72474	10.10078
77	6	0.019324	1.86247	-16.20474	10.10078
78	6	-0.182749	0.70200	-15.53474	10.10078
73	1	0.025078	4.66149	17.50177	-9.91045
74	1	0.036013	3.12000	17.50177	-9.02046

75	1	0.036013	3.11999	17.50176	-10.80043
70	1	0.047806	1.53804	19.51510	-9.91045
71	1	0.047190	2.47335	21.13510	-9.91045
72	1	0.040123	4.56913	19.92510	-9.91045
79	1	0.040123	2.79778	-15.66474	10.10078
80	1	0.047190	0.70200	-14.45474	10.10078
81	1	0.047806	-0.23331	-16.07474	10.10078
82	1	0.025078	2.89014	-18.08807	10.10078
83	1	0.036013	1.34865	-18.08807	10.99076
84	1	0.036013	1.34864	-18.08808	9.21080

CƏDVƏL 27.3. ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI
E(Au₂S)₂₂+PVDF = -382.3205677a.v.

Z Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)		
		x	y	z
1 79	0.528439	6.62704	6.68067	2.91626
2 79	0.423196	4.82312	10.86696	2.66876
3 79	0.501323	3.99113	13.70319	-0.45933
5 79	0.476994	4.56270	11.90028	-1.78621
6 79	0.492634	0.64342	12.38734	-3.65608
8 79	0.510460	0.47616	10.84999	-2.65864
9 79	0.502803	9.97653	1.14952	1.75268
11 79	0.504557	10.96222	-1.76507	5.39218
12 79	0.402876	11.14686	-2.77344	3.30584
14 79	0.474030	7.40111	-4.96075	4.70362
16 79	0.479858	5.88986	-7.73935	7.95559
17 79	0.524565	6.14992	-5.92779	9.16843
19 79	0.452109	1.71862	-6.50398	7.77758
20 79	0.469811	-1.39655	-9.67229	7.95597
22 79	0.534356	-0.14723	-10.81196	6.34849
23 79	0.596778	-4.27164	-9.65775	4.22085
24 79	0.482981	-6.46312	-11.56857	1.27490
26 79	0.482243	-4.71158	-11.82557	0.67237
27 79	0.451206	-6.61160	-10.08862	-3.30859
29 79	0.557640	-7.90192	-5.42304	-4.34578
30 79	0.666282	-13.50219	0.43766	-3.57876
31 79	0.552806	-13.97366	0.13278	-1.61776
32 79	0.433557	-10.46447	2.85320	-4.33229
33 79	0.485592	-7.75849	8.09304	-9.00825
34 79	0.528661	10.81905	4.63889	4.55729
36 79	0.478673	11.23267	5.85175	2.58250
39 79	0.418514	-0.96538	11.76055	-7.07611
41 79	0.512985	0.56648	10.46242	-8.05931
42 79	0.462503	-3.47910	9.23473	-9.50242

43	79	0.516365	-3.33600	7.65741	-7.85938
45	79	0.457339	-7.23140	9.08990	-6.67852
47	79	0.476264	-10.86428	6.57296	-5.56584
48	79	0.520374	-9.16196	4.82482	-5.76967
50	79	0.372509	-12.52536	4.23083	-3.63626
53	79	0.501328	-11.53530	-4.06133	-2.31149
55	79	0.529576	-13.04277	-4.36807	-3.69964
56	79	0.421103	-9.51926	-7.18373	-4.14841
58	79	0.519239	-6.44543	-7.94378	-2.20317
60	79	0.567402	-2.84393	-8.07321	3.52875
61	79	0.435973	1.83274	-7.98632	9.87347
62	79	0.479834	9.54246	-5.87808	5.48243
63	79	0.411797	12.36881	1.24249	2.55454
64	79	0.506776	7.20793	11.52834	2.15021
66	79	0.516951	7.14131	7.69298	4.36135
15	16	-1.105511	7.13747	-5.92244	6.84548
46	16	-1.056614	-8.64410	7.12796	-6.62369
4	16	-0.917124	4.96806	11.79237	0.64552
7	16	-1.025017	2.61474	12.14030	-2.41004
49	16	-1.032444	-10.26483	5.16440	-3.56565
25	16	-1.050721	-4.42436	-10.22700	2.59517
51	16	-0.832564	-12.30842	1.71230	-3.33509
52	16	-1.165522	-12.80501	-1.97428	-3.04614
35	16	-0.907939	11.14436	3.26767	2.75170
54	16	-0.886108	-10.32292	-5.23867	-3.68717
18	16	-0.984945	3.80768	-6.95179	8.40375
37	16	-1.247967	9.00526	6.36946	2.91626
57	16	-0.896454	-8.34747	-8.34635	-2.80079
38	16	-1.055978	0.36263	11.48789	-5.43884
59	16	-1.119566	-1.96723	-9.77849	5.39973
13	16	-0.817723	9.61960	-3.91513	4.78175
40	16	-0.925451	-1.79617	9.77369	-8.21480
28	16	-1.184743	-6.05896	-10.50294	-0.98183
10	16	-0.819806	10.85887	-0.43847	3.30713
21	16	-0.895169	0.55499	-8.61433	7.99401
65	16	-0.865001	6.62704	9.37116	2.91626
44	16	-0.829155	-5.60292	8.53556	-8.09762
68	9	-0.597571	2.78566	-15.30978	7.88415
69	6	0.551183	0.47337	-15.31478	7.88415
70	6	0.551237	1.63385	-14.64478	7.88415
71	9	-0.597584	-0.67844	-14.64978	7.88415
74	9	-0.597588	0.78134	15.12942	-9.84565
75	6	0.551172	-1.53095	15.12442	-9.84565
76	6	0.551195	-0.37048	15.79442	-9.84565
77	9	-0.597577	-2.68276	15.78942	-9.84565

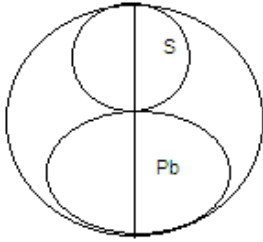
72	1	0.046434	1.63385	-13.56478	7.88415
73	1	0.046458	-1.53095	14.04442	-9.84565
67	1	0.046452	0.47337	-16.39478	7.88415
78	1	0.046447	-0.37048	16.87442	-9.84565

28. Plumbum sulfid (PbS)₈ nanohissəciyi və onun (PbS)₈+PP, (PbS)₈+PVDF nanokompozisiyalarının modelləşdirilməsi və tədqiqi

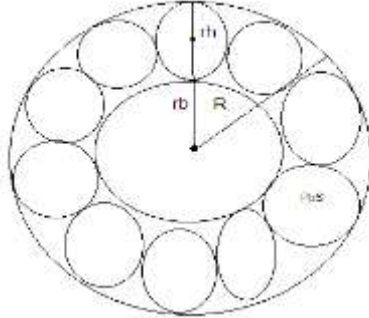
Plumbum sulfid (PbS)₈ nanohissəcikləri öz xassələrinə görə geniş tətbiq sahələrinə malikdir[35]. Bu nanohissəciklər rütübəti ölçən sensorların, elektron sxemlərin və s. hazırlanmasında geniş istifadə oluna bilər. Buna görə də (PbS)₈ nanohissəciyinin (Şəkil 28.3.) elektron quruluşunun kvantmexaniki metodlarla öyrənilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır. Məlumdur ki, nanohissəciklərin quruluşu və xassələri nanohissəcikdə atomların sayı və ölçüsü ilə müəyyən olunur. Pb və S atomlarının kovalent radiuslarının uzunluqlarını bilərək ($r_{Pb}=0,147nm$, $r_S=0,102nm$) Pb və S atomlarınının təqribi olaraq yerləşdiyi kürənin radiusunu Şəkil 28.1.-dən istifadə edərək təyin etmək olar. $r_h = r_{Pb}+r_S$. Beləliklə, $r_h=0,249nm$ alırıq. Nanohissəcikdəki (Pb və S) atomların sayı təqribi olaraq

$$n = \frac{R^3 - rb^3}{rh^3}$$
 düsturu ilə hesablanı bilər (Şəkil 28.2.). Burada

R kürə formalı olan (PbS)_n nanohissəciyinin radiusu, r_h isə kürə formalı hesab olunan PbS-nin radiusu və $rb = R - 2r_h$. Adətən (PbS)_n nanohissəciyinin radiusu $R \approx 2nm$ tərtibində olur. $R = 1nm$, $r_h = 0,249nm$ və $rb = 0,002nm$ olduqda $n = 8$ alınır. Onda 16 atomdan ibarət (PbS)₈ nanohissəciyinin nəzəri modelini qurmaq olar(Şəkil 28.3.).



Şəkil 28.1.



Şəkil 28.2.

Plumbum sulfid $(PbS)_8$ nanohissəciyinin elektron quruluşu və xassələri Genişlənmiş Hückel metodu ilə öyrənilmişdir[1, 2, 3]. Kvantmexaniki hesablamalar zamanı adətən valent elektronların atom orbitallarını nəzərə almaqla kifayətlənilir. $(PbS)_8$ nanohissəciyinin molekulyar orbitallarını qurmaq üçün plumbum 4 və kükürd atomlarının hər birindən 9 olmaqla 104 atom orbitallarından istifadə olunmuşdur. Hesablamalar zamanı χ_q atom orbitalları olaraq Pb atomlarından $6s-$, $6p_x-$, $6p_y-$, $6p_z-$, və S atomlarından isə $3s-$, $3p_x-$, $3p_y-$, $3p_z-$, $3d_{z^2}-$, $3d_{xz}-$, $3d_{yz}$, $3d_{x^2}-$, $3d_{xy}-$, atom orbitallarından istifadə edilmişdir. (28.1) düsturu əsasında molekulyar orbital qurulmuşdur. Hər Pb atomundan 4 və hər kükürd atomundan 8 elektron olmaqla 80 sayda valent elektronu ən aşağı enerjili 40 enerji səviyyəsini doldurur. C və F atomlarının hər birindən dörd ($2s-$, $2p_x-$, $2p_y-$, $2p_z$) və H atomlarından hər birindən bir ($1s-$) valent atom orbitalından istifadə olunmuşdur. $(PbS)_8$ nanohissəciyinin və onun $(PbS)_8 + PP$, $(PbS)_8 + PVDF$ nanokompozisiyalarının tam enerjisini, ionlaşma potensialının qiymətlərini hesablamaq, mexaniki, elektrik, maqnit xassələrini və s. tədqiq etmək olar.



Şəkil 28.3. $(\text{PbS})_8$ nanohissəciyinin vizual modelləri

$(\text{PbS})_8$ nanohissəciyi üçün kompüter hesablamaları və alınmış nəticələrin interpretasiyası

Hesablamalar nəticəsində $(\text{PbS})_8$ nanohissəciyin orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin qiymətləri və nanohissəciyinə daxi olan atomların effektiv yükləri (Şəkil 28.5.) və s. hesablanmışdır. $(\text{PbS})_8$ nanohissəciyinin 80 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisi: $\varepsilon_{YMO} = \varepsilon_{40} = -9.798899\text{eV}$. Ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi: $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{41} = -9.672250\text{eV}$. Nanohissəciyin ionlaşma potensialı: $I_p = -\varepsilon_{YMO} = 9.798899\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO} = 0.126649\text{ eV}$ fərqi ilə müəyyən olunur. Bu isə $(\text{PbS})_8$ nanohissəciyinin keçirici material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO})$ düsturu ilə hesablanı bilər. $\eta = 0.0633245\text{a.v.}$ və $\eta < 1\text{eV}$ olduğundan $(\text{PbS})_8$ nanohissəciyi yumşaq material hesab olunur. Ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi mənfi işarəli olduğuna görə $(\text{PbS})_8$ nanohissəciyinin elektrofildir. $(\text{PbS})_8$ nanohissəciyinin stabilliyi

$$\Delta E((\text{PbS})_8) = E(\text{PbS})_8 - 4 \cdot E_{\text{Pb}_2} - 4 \cdot E_{\text{S}_2}$$

düsturu ilə hesablanır. $\Delta E((\text{PbS})_8) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E((\text{PbS})_8) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. $E_{(\text{PbS})_8}$ - $(\text{PbS})_8$ nanohissəciyinin, EPb_2 - Pb_2 və ES_2 - S_2 molekulunun tam enerjisidir. $E_{(\text{PbS})_8} = -44.989225455 \text{ a.v.}$, $EPb_2 = -3.639985028 \text{ a.v.}$ və $ES_2 = -7.156810571 \text{ a.v.}$ olduğundan $\Delta E((\text{PbS})_8) = -1.802043059 \text{ a.v.}$ və $\Delta E((\text{PbS})_8) < 0$ olduğundan $(\text{PbS})_8$ nanohissəciyi stabildir.

$(\text{PbS})_8$ + PP nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları və alınmış nəticələrin interpretasiyası

$(\text{PbS})_8$ + PP nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki C_3H_6 polimeri arasında yerləşdirilmiş $(\text{PbS})_8$ nanohissəciyinə baxılmışdır. Hər C atomundan 4, H atomundan bir, hər Pb atomundan 4 və hər S atomundan 6 elektron olmaqla nanokompozitin 116 sayda elektronu ən aşağı enerjili 58 enerji səviyyəsini doldurur. Hesablamalar nəticəsində $(\text{PbS})_8$ + PP nanokompozitinin orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin qiymətləri və nanokompozitə daxi olan atomların effektiv yükləri (Şəkil 28.5.) və s. hesablanmışdır. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisi: $\varepsilon_{YMO} = \varepsilon_{58} = -9.475269 \text{ eV}$. Ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi: $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{59} = -9.423323 \text{ eV}$. Nanokompozitin ionlaşma potensialı: $I_p = -\varepsilon_{YMO} = 9.475269 \text{ eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO} = 0.051946 \text{ eV}$ fərqi ilə müəyyən olunur. Bu isə $(\text{PbS})_8$ + PP nanokompoziti keçirici material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO})$

düsturu ilə hesablanı bilər. $\eta = 0.025973$ a.v. və $\eta < 1eV$ olduğundan $(PbS)_8+PP$ nanokompoziti yumşaq material hesab olunur. Ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi mənfi işarəli olduğuna görə $(PbS)_8+PP$ nanokompoziti elektrofildir. $(PbS)_8+PP$ nanokompozitinin stabilliyi

$$\Delta E((PbS)_8 + PP) = E_{(PbS)_8+PP} - 4 \cdot E_{Pb_2} - 4 \cdot E_{S_2} - 3 \cdot E_{C_2} - 6 \cdot E_{H_2}$$

düsturu ilə hesablanır. $E_{(PbS)_8+PP}$ - $(PbS)_8+PP$ nanokompozitinin, E_{Pb_2} - Pb_2 -nin, E_{S_2} - S_2 -nin, E_{C_2} - C_2 -nin, E_{H_2} - H_2 -nin tam enerjisidir. $E_{(PbS)_8+PP} = -67.522995468$ a.v., $E_{Pb_2} = -3.639985028$ a.v. və $E_{S_2} = -7.156810571$ a.v., $E_{C_2} = -5.015905604$ a.v., $E_{H_2} = -1.291132619$ a.v. olduğundan $\Delta E((PbS)_8 + PP) = -1.541300546$ a.v. $\Delta E((PbS)_8 + PP) < 0$ olduğundan $(PbS)_8 + PP$ nanokompoziti stabildir.

$(PbS)_8 + PVDF$ nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları və alınmış nəticələrin interpretasiyası

$(PbS)_8+PVDF$ nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki $C_2H_2F_2$ polimeri arasında yerləşdirilmiş $(PbS)_8$ nanohissəciyinə baxılmışdır (Şəkil 27.4). Hər C atomundan 4, F atomlarından 7, H atomundan bir, hər Pb atomundan 4 və hər S atomundan 6 valent elektronu olmaqla nanokompozitin 128 sayda elektronu ən aşağı enerjili 64 enerji səviyyəsini doldurur. Hesablamalar nəticəsində $(PbS)_8 + PVDF$ nanokompozitinin orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin qiymətləri və nanokompozitə daxi olan atomların effektiv yükləri (Şəkil 28.6.) və s. tapılmışdır. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisi: $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{64} = -$

9.750834eV. Ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi: $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{65} = -9.704308\text{eV}$. $(\text{PbS})_8 + \text{PVDF}$ nanokompozitinin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{YTMO} = 9.750834\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO} = 0.046526\text{eV}$ fərqi ilə müəyyən olunur. Bu isə $(\text{PbS})_8 + \text{PVDF}$ nanokompozitinin keçirici material olduğunu

göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə

hesablana bilər. $\eta = 0.023263\text{a.v.}$ $\eta < 1\text{eV}$ olduğundan $(\text{PbS})_8 + \text{PVDF}$ nanokompoziti yumşaq material hesab olunur. Ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi mənfi işarəli olduğuna görə $(\text{PbS})_8 + \text{PVDF}$ nanokompozitinin elektrofildir. $(\text{PbS})_8 + \text{PVDF}$ nanokompozitinin stabilliyi

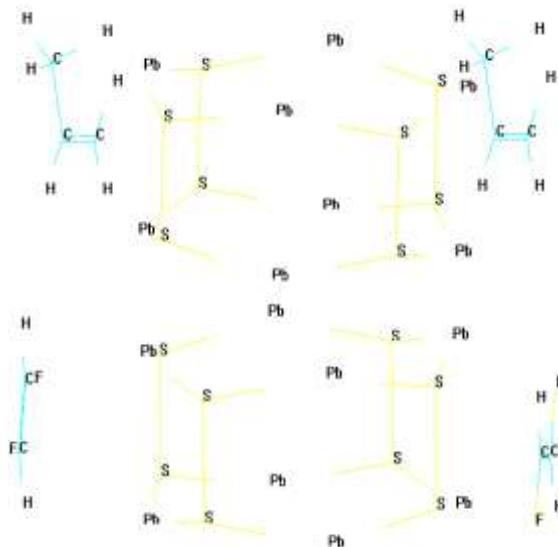
$$\Delta E((\text{PbS})_8 + \text{PVDF}) = E_{(\text{PbS})_8 + \text{PVDF}} - 4 \cdot E_{Pb_2} - 4 \cdot E_{S_2} - 3 \cdot E_{C_2} - 6 \cdot E_{H_2} - 2E_{F_2}$$

düsturu ilə hesablanır. Burada $E_{(\text{PbS})_8 + \text{PVDF}}$ - $(\text{PbS})_8 + \text{PVDF}$ nanokompozitinin, E_{Pb_2} - Pb₂-nin, E_{S_2} - S₂-nin, E_{C_2} - C₂-nin, E_{H_2} - H₂-nin və E_{F_2} - F₂-nin tam enerjisidir.

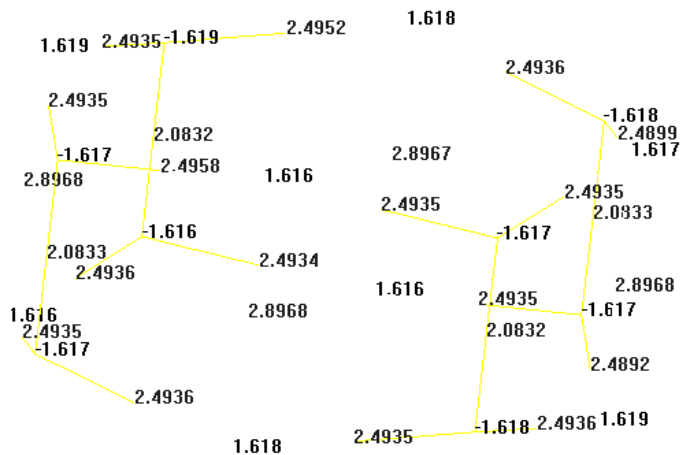
$E_{(\text{PbS})_8 + \text{PVDF}} = -83.234074913$ a.v., $E_{Pb_2} = -3.639985028\text{a.v.}$ və $E_{S_2} = -7.156810571\text{a.v.}$, $E_{C_2} = -5.015905604\text{a.v.}$, $E_{H_2} = -1.291132619\text{a.v.}$ və $E_{F_2} = -12.57307174\text{a.v.}$ olduğundan $\Delta E((\text{PbS})_8 + \text{PVDF}) = -2.286672583\text{a.v.}$ $\Delta E((\text{PbS})_8 + \text{PVDF}) < 0$ olduğundan $(\text{PbS})_8 + \text{PVDF}$ nanokompoziti stabildir.

Nəticə. $(\text{PbS})_8$ nanohissəciyi və onun $(\text{PbS})_8 + \text{PP}$, $(\text{PbS})_8 + \text{PVDF}$ nanokompozisiyalarının elektron quruluşu Genişlənmiş Hückel metodu ilə öyrənilmişdir. Nanohissəciyin və onun

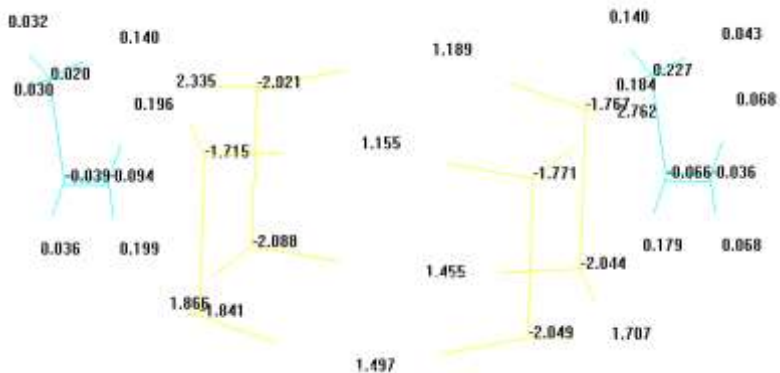
$(Au_2S)_{22} + PP$, $(PbS)_8 + PVDF$ nanokompozisiyalarının orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektorn enerjisinin qiymətləri, nanohissəciyə və onun $(PbS)_8 + PP$, $(PbS)_8 + PVDF$ nanokompozisiyalarına daxi olan atomların effektiv yükləri hesablanmışdır (Şəkil 28.5, Şəkil 28.6, Şəkil 28.7). Hesablamaların nəticələri göstərir ki, $(PbS)_8$ nanohissəciyi və onun $(PbS)_8 + PP$, $(PbS)_8 + PVDF$ nanokompozisiyaları yumşaq, elektrofil və stabil keçirici materiallardır. Bu materiallar müxtəlif elektron sxemlərin hazırlanmasında istifadə oluna bilər.



Şəkil 28.4. $(PbS)_8 + PP$ və $(PbS)_8 + PVDF$ nanokompozitlərinin vizual modelləri



Şekil 28.5. Atomların effektiv yükleri



Şekil 28.6. Atomların effektiv yükleri

ƏDƏBİYYAT

1. Həsənov A.Q. Qrafenin riyazi modelləşdirilməsi və kompüter tədqiqi. BDU-nun xəbərləri, №2, 2011, s.171-179.
2. Naoya Kobayasi. Nanotnologiyaya giriş. Rus dilindən tərcümə. Ramazanov M.Ə., Vəliyeva L.İ. Müəllim nəşriyyatı, Bakı 2013, 116s.
3. Paşayev F.H., Həsənov A.Q. Atom və molekul fizikasında riyazi metodlar. Müəllim nəşriyyatı, Bakı 2013, 124s.
4. Ramazanov M.Ə., Həsənov A.Q. Nanotexnologiyadan laboratoriya işləri. Bakı 2009, 224s.
5. Məhərrəmov A.M., Ramazanov M.Ə., Vəliyeva L.İ. Nanotexnologiya, Bakı 2007, 231s.
6. Венер М.В., Цирельсон В.Г.. Компьютерное моделирование супрамолекулярных систем и наноструктур. Москва: РХТУ, 2008, 128с.
7. Власов А. И., Назаров А. В. Основы моделирования микро- и наносистем : учеб. пособие – М. : Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2011. – 144 с.
8. Вьюрков В.В., Орликовский А.А., Семенихин И.А., Негров Д.В. Озерин А.Ю. Свинцов Д.А. Математическое и компьютерное моделирование наносистем. Учеб. пособие, Москва – 2011, 152с.
9. Дегтяренко Н.Н. Описание программных пакетов для квантовых расчетов наносистем. *Учебное пособие*. М.: МИФИ, 2008. – 180 с.
10. Дегтяренко Н.Н. Специальные разделы квантово-механических методов расчетов свойств кластеров и наноматериалов: *учебное пособие*. М.: МИФИ, 2008. - 156 с.
11. Заводинский В.Г. Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем. Институт материаловедения ХНЦ ДВО РАН, 2012, 137с.
12. Ибрагимов И.М., Овшов А.Н., Назаров Ю.Ф.. Основы компьютерное моделирование наносистем. Уч.пос., СПб, Изд., «Лань», 2010, 376с.
13. Игнатов С.К. Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности, Часть 1, Нижний Новгород, 2006, 82с.
14. Красильников П.С., Ревизников Д.Л. Математическое моделирование наносистем: Учебно-методический комплекс — Калуга, Москва: Изд., «Эйдос» 2011. – 220с.
15. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул, Ростов на/Д: Феникс, 2010, 560 с.
16. Романова Т.А., Краснов П.О., Качин С.В., Аврамов П.В. Теория и практика компьютерного моделирования нанообъектов.

- Мультимедийное справочное пособие. Красноярск: ИПЦ КТГУ. 2002, 223с.
17. Рыбалкина Мария. Нанотехнологии для всех, Москва 2007, 444с.
 18. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование, М.: Наука, 1997, 320с.
 19. Суздаев И.П. Физико-химия нанокластеров, Наноструктур и наноматериалов. М. КомКнига, 2006, 592с.
 20. Трубочкина Н.К. Компьютерное моделирование наноструктур и наносистем. Москва: 2011, 70с.
 21. Учебные методические пособия. Математическое моделирование структуры соединений с помощью пакета программ HyperChem 7.5. Воронеж: 2006, 44с.
 22. Федеров А.С., и др. Моделирование свойств, электронной структуры ряда углеродных и неуглеродных нанокластеров и их взаимодействия с легкими элементами, Новосибирск, Изд., СО РАН 2006, 220с.
 23. Abanin D.A., Morozov S.V., Ponomarenko L.A., Gorbachev R.V., Mayorov A.S., Katsnelson M.I., Watanabe K., Taniguchi T., Novoselov K.S., Levitov L.S., and Geim A.K. Giant Nonlocality Near the Dirac Point in Graphene. – Science. – 15 April 2011: Vol. 332 no. 6027 pp. 328–330; DOI: 10.1126/science.1199595.
 24. Ali R.Ranjbartoreh, Bei Wang, Xiaoping Shen and Guoxiu Wang. Advanced mechanical properties of graphene paper. – Journal of Applied Physics. – 109, 014306 (2011); doi:10.1063/1.3528213 (6 pages).
 25. Ashkarran Ali Akbar. Synthesis and characterization of gold nanoparticles via submerged arc discharge based on a seed-mediated approach. Journal of Theoretical and Applied Physics 2012, 6:14 <http://www.jtaphys.com/content/6/1/14>.
 26. Brian J. Bellott. Synthesis, characterization, and reactivity of volatile compounds for materials applications. Doctor dissertation, University of Illinois at Urbana-Champaign, 2010, 199p.
 27. Chi-Liang Kuo and Michael H. Huang. Hydrothermal Synthesis of Free-Floating Au₂S Nanoparticle Superstructures. J. Phys. Chem. C 2008, 112, 11661–11666.
 28. Christopher K. Rowan, Irina Paci. Nanoparticle morphology and aspect ratio effects in Ag/PVDF nanocomposites. Theoretical Chemistry Accounts, 05/2012; 131(1):1-11. DOI:10.1007/s00214-011-1078-6.
 29. Christopher K. Rowan, Irina Paci. Nanoparticle morphology and aspect ratio effects in Ag/PVDF nanocomposites. Theoretical Chemistry Accounts, 05/2012; 131(1):1-11. DOI:10.1007/s00214-011-1078-6.

30. Clifford Y. Tai, Bor-Yuan Hsiao, Hsien-Yi Chiu. Preparation of spherical hydrous-zirconia nanoparticles by low temperature hydrolysis in a reverse microemulsion. *Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects* 237 (2004) 105–111.
31. Guseinov I.I., Mamedov B.A., Unified treatment of overlap integrals with integer and noninteger n Slater-type orbitals using translational and rotational transformations for spherical harmonics, *Canadian Journal of Physics*, 82(2004)205-211.
32. Jang, Myung Wook, Kim, Ju-Young, Ihn, Kyo Jin. Properties of polypropylene nanocomposites containing silver nanoparticles. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, Volume 7, Number 11, November 2007, pp. 3990-3994(5).
33. Kazu Suenaga & Masanori Koshino. Atom-by-atom spectroscopy at graphene edge. – *Nature* (2010) doi:10.1038/nature09664; Published online 15 December 2010.
34. Liu X., Atwater M., Wang J., & Huo Q. Extinction coefficient of gold nanoparticles with different sizes and different capping ligands. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*. 2007 Jul 1;58(1):3-7.
35. M. Flores-Acosta, R. Pérez-Salas, M. Sotelo-Lerma, F. F. Castellón-Barraza and R. Ramírez-Bon. Optical and Structural Properties of PbS Nanoparticles in Zeolite Na-X. *The AZo Journal of Materials Online (ISSN 1833-122X) Volume 1 November 2005*.
36. Oleg V. Tolochko, Chul-Jin Choi, Albert G. Nasibulin, Katerina S. Vasilieva, D.-W. Lee, D. Kim. Thermal behavior of iron nanoparticles synthesized by chemical vapor condensation. *Materials Physics and Mechanics* 13 (2012) 57-63.
37. Pashaev F.G.. Use of Filter-Steinborn B and Guseinov Q_{ns}^q auxiliary functions in evaluation of two-center overlap integrals over Slater type orbitals. *J Math Chem* (2009) 45:884–890 DOI 10.1007/s10910-008-9436-x.
38. Ramazanov M.A., Pashaev F.H., Nabiev N.S., Gasanov A.G. Quantum mechanical calculation of electronic structure of molecule $C_{60}H$. *NAS of Azerbaijan, Jurnal Fizika, CİLD XIV, Vol. №1, pp. 7-9, 2008*.
39. Wafaa M. S., Al-Khayat, Gerhard Wilde. Characteristics Study of Silicon Nanoparticles Produced by Physical Vapour Deposition. *American Journal of Materials Science* 2012, 2(6): 210-214 DOI: 10.5923/j.materials.20120206.07.
40. Yuan Ming-liang, Tao Jia-hua, Yan Guan-jie, Tan Mei-yi, Qiu Guan-zhou. Preparation and characterization of Fe/SiO₂ core/shell nanocomposites. *Trans. Nonferrous Met.Soc. China* 20(2010) 632-636.

MÜƏLLİF HAQQINDA

Həsənov Arzuman Qardaşxan oğlu. 1981-ci ildə ADU-nun tətbiqi riyaziyyat fakültəsinin əyani şöbəsini bitirmişdir. «Nanosistemlərin riyazi modelləşdirilməsi», “Nanoquruluşların kompüter hesablanması” və «Atom və molekul fizikasında riyazi metodlar» fənlərini təhsilin magistraturası pilləsində tədris edir. Molekulların elektron quruluşunun kvantmexaniki hesablanması üçün Sleyter funksiyaları bazisində proqram təminatının hazırlanmasında iştirak etmişdir. Fizika-riyaziyyat elmləri namizədi, 87 elmi işin və ali məktəblər üçün «Nanotexnologiyadan laboratoriya işləri» və “Atom və molekul fizikasında riyazi metodlar” adlı dərslər vəsaitlərinin həmmüəllifidir. Müxtəlif ölkə və beynəlxalq qrant layihələrində iştirak etmişdir.

Nəşriyatın direktoru: X. A. Həsənov
Dizayn və səhifələnmə: A.Ə. Həsənov
Korrektor: Ü.R.Məmmədova

ARZUMAN HƏSƏNOV

**NANOSİSTEMLƏRİN
RİYAZİ MODELƏŞDİRİLMƏSİ VƏ
KOMPÜTER HESABLANMASI**

“Ləman nəşriyyat poliqrafiya” MMC
nəşriyyatında çap olunmuşdur.

Çapa imzalanmış 16.07.2013. Sifariş №160
Kağız formatı 60x84 ^{1/16}. Şərti 14,6 ç.v.
Tiraj 200.