

AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI TƏHSİL NAZİRLİYİ
BAKİ DÖVLƏT UNİVERSİTETİ

Təsdiq edirəm

Fizika fakültəsinin dekani

_____ **prof.R.Q.MƏMMƏDOV**

“ _____ ” _____ **2006**

NANOMATERİALLARIN KİMYƏVİ FİZİKASI

kafedrasında 2006-ci ildə elmi-tədqiqat
işlərinin yerinə yetirilməsi haqqında

H E S A B A T

B A K İ 2 0 0 6

I. Giriş

BDU “Nanomaterialların kimyəvi fizikası” kafedrası Azərbaycan Respublikası Nazirlər Sovetinin 21/4-157 sayılı 15 noyabr 1971-ci il tarixli sərəncamına əsasən Ali və Orta İxtisas Təhsili Nazirliyi Kollegiyasının 7/8 sayılı 12 may 1972-ci il tarixli qərarı ilə “Atom və molekulların kvant mexanikası” adı ilə yaradılmış və 1988-ci ildən etibarən “Kimyəvi fizika” adlandırılmış kafedranın bazasında 2006-cı ildə BDU-nun Elmi Şurasının qərarı əsasında təşkil edilmişdir.

Kafedra Azərbaycan Respublikasında atom, molekul fizikası və nanomaterialların kimyəvi fizikası üzrə elmi-pedaqoji kadrlar hazırlayan struktur vahididir.

Hesabat ilində kafedranın əməkdaşları fakültənin və BDU-nun elmi-pedaqoji və ictimai həyatında fəal iştirak etmişlər. Kafedrada çalışan müəllimlər magistrantların dissertasiya işlərinə və bakalavr təhsil pilləsi üzrə kurs və buraxılış işlərinə rəhbərlik edir, fakültənin və BDU-nun ictimai işlərində fəal iştirak edirlər. Baş müəllim f.r.e.n. M.R.Vahabova BDU “Sevil” qadınlar cəmiyyətinin, fakültə Azad Həmkarlar təşkilatı bürosunun və 2-ci Yasamal 16 sayılı seçki dairəsi 9 sayılı məntəqə seçki komissiyasının üzvüdür, BDU-da keçirilən imtahanlarda nəzarətçi-koordinatordur. Kafedranın dosenti f.r.e.n., dos. N.S.Nəbiyev Dövlət Yekun Attestasiya Komissiyasının üzvi olmuşdur. Dosent N.S.Nəbiyev və baş laborant f.r.e.n. A.İ.Əhmədov BDU-da Fizika fakültəsində fəaliyyət göstərən Dissertasiya Şurasının elmi seminarının üzvüdürlər. Kafedranın baş müəllimi f.r.e.n. Paşayev F.H magistr dissertasiyalarının müdafiəsi üçün yaradılmış Elmi Şuranın üzvü olmuşdur.

2. Kafedranın strukturu və ştat cədvəli

«Nanomaterialların kimyəvi fizikası» kafedrası BDU-nun əsas binasında 161-cı otaqda yerləşir və kafedrada bir tədris laboratoriyası vardır.

Hesabat ilinin sonunda (2006) « Nanomaterialların kimyəvi fizikası» kafedrasının ştat cədvəli aşağıdakı kimi olmuşdur:

№	A.a.a. soyadı	vəzifəsi, elmi adı
1	Ramazanov Məhəmmədəli Əhməd oğlu	f.r.e.n., dosent., kafedra müdiri
2	Axundov Səttar Əbdüləli oğlu	f.r.e.n., dosent
3	Nəbiyev Naqif Səftər oğlu	f.r.e.n., dosent
4	Paşayev Faiq Heydər oğlu	f.r.e.n., baş müəllim
5	Vahabova Mina Rza qızı	f.r.e.n., baş müəllim
6	Həsənov Arzuman Qardaşxan oğlu	f.r.e.n., tədris lab. müdiri
7	Əhmədov Azər İnşalla oğlu	f.r.e.n., baş laborant
8	Hacıyeva Flora Vidadi qızı	baş laborant

F.r.e.n. dosent Ramazanov Məhəmmədəli Əhməd oğlu müsabiqə yolu ilə kafedranın müdiri vəzifəsinə seçilmişdir.

13 oktyabr 2006-cı il tarixində Hacıyeva Flora Vidadi qızı “Nanomaterialların kimyəvi fizikası” kafedrasına müvəqqəti olaraq Babayeva Aidanın yerinə o analiq məzuniyyətindən qayıdana kimi müvəqqəti baş laborant vəzifəsinə təyin edilib.

Hesabat ili ərzində kafedrada elmi-tədqiqat işləri 2006-cı il üçün təsdiq olunmuş plan üzrə yerinə yetirilmişdir.

3. Kafedrada aparılan elmi-tədqiqat işlərinin əsas istiqamətləri, adı, sayı, qısa annotasiyası və yerinə yetirilməsi

İstiqamət: Kimyəvi fizika, yanma və partlayış

Problem: Çoxelektronlu məsələlərin həlli üçün kvantmexaniki və hesablama metodlarının inkişaf etdirilməsi

Mövzu: Atom və molekulların quruluşunun kvantmexaniki hesablanması metodları

Rəhbər: f.r.e.n., dos. N.S.Nəbiyev

Bu mövzu üzrə 2 iş yerinə yetirilmişdir.

İş A: Volsberq-Helmhols metodu ilə dioksin molekulunun bəzi xlorlu törəmələrinin electron quruluşunun tətqiqi

İcraçılar: dos. N.S.Nəbiyev, dos. S.Ə.Axundov, b/m. F.H.Paşayev, H.S.Axundov, b/lab. f.r.e.n. A.İ.Əhmədov, f.r.e.n A.Q.Həsənov

İşdə dioksin molekulunun və onun bəzi xlorlu törəmələrinin electron quruluşu öyrənilmişdir. Hesablamalar molekulyar orbitallar metodunun sadə yarımempirik variantı olan Volsberq-Helmhols metodu ilə aparılmışdır. Valent elektronları yaxınlaşmasından istifadə olunmuş və molekulyar orbitallar C və O atomlarının $2s$ -, $2p_x$ -, $2p_y$ -, $2p_z$ -, xlor atomlarının $3s$ -, $3p_x$ -, $3p_y$ -, $3p_z$ - və H atomlarının $1s$ - atom orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində axtarılmışdır. Atom orbitalları kimi Sleyter funksiyalarından istifadə olunmuşdur. Molekulyar orbitalların analitik ifadələrini tapmaq üçün tənliklər sistemi qurulmuşdur. Bu tənliklərə daxil olan effektiv Hamilton operatoru matris elementləri Volsberq-Helmhols yaxınlaşmaları ilə qiymətləndirilmiş, örtmə inteqralları hesablamaq üçün kafedra əməkdaşlarının aldıkları ifadələrdən istifadə olunmuşdur. Hesablamalar dioksin molekulu və onun 1 xlorlu (1 izomer), 2 xlorlu (10 izomer) və 3 xlorlu (14 izomer) törəmələri üçün aparılmışdır. Hesablamalar nəticəsində hər bir izomer üçün molekulyar orbitalların analitik ifadələri tapılmış, orbital enerjilər, elektron enerjisi, ionlaşma potensialının qiyməti hesablanmışdır. Molekulyar orbitalların analitik ifadələrindən istifadə etməklə hər bir izomerdə atomların effektiv yüklərinin qiyməti hesablanmışdır.

İşdə həmçinin 3-(2-hidroksifenilazo) pentadion-2,4 molekulunun elektron quruluşunun Hückel metodu ilə öyrənilməsi məsələsinə baxılmışdır. Molekulun end-azo, keto-azo və hidro-azo kimi 3 müxtəlif quruluş formasına baxılmışdır. Hər 3 quruluş forması 11 karbon, 3 oksid və 2 azot atomlarından ibarətdir. (Hückel metodunda hidrogen atomları nəzərə alınmır). Hesab olunur ki, qeyd olunan atomların hər biri 1 dənə π elektrona məxsusdur. Ona görə də molekulyar orbitallar 16 dənə π elektronun $2p_z$ -atom orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində axtarılmışdır. Atom orbitalları kimi Sleyter funksiyalarından istifadə olunmuşdur. Molekulyar orbitalların ifadələrindəki naməlum xətti kombinasiya əmsallarını hesablamaq üçün xətti bircinsli tənliklər sistemi qurulmuşdur. Bu tənliklər sisteminə daxil olan effektiv hamilton operatorunun matris elementləri (H_{pa}) və örtmə inteqralları (S_{pa}) Hückel yaxınlaşmaları əsasında qiymətləndirilmişdir. Qeyd olunan tənliklər sistemi həll olunaraq molekulyar orbitalların analitik ifadələri və orbital enerjilərin qiymətləri tapılmışdır.

Molekulyar orbitalların analitik ifadələrindən istifadə etməklə C, O və N atomlarının effektiv yükləri hesablanmış və hər bir quruluş forması üçün molekulyar diaqramlar qurulmuşdur.

İş B: Sisteamin qrupuna aid radioprotektorların elektron və fəza quruluşunun yarımempirik kvant kimyəvi metodlarla öyrənilməsi

İcraçılar: dos. N.S.Nəbiyev, dos. S.Ə.Axundov, b/m. F.H.Paşayev, f.r.e.n A.Q.Həsənov, b/m. M.R.Vahabova

İşdə sisteamin ailəsinə daxil olan radioprotektorların elektron və fəza quruluşu öyrənilmişdir.

Bunun üçün sisteamin, sistamin β -aminetilizonium, qammafos, setanonin, leksamin molekullarının mexaniki modelləri qurulmuş, molekulyar mexanika metodu ilə aşağı enerjili quruluşları müəyyənləşdirilmişdir. Hər bir molekulun ümumi enerjisinin minimumuna uyğun atomların koordinatları tapılmışdır. Alınmış həndəsi parametrlər kvant mexaniki hesablamalar zamanı istifadə edilmişdir. Yarımempirik kvant mexaniki CNDO.

**4. Dərc olunmuş elmi işlərin xarakteristikası:
dərc olunmuş elmi işlərin (məqalə, tezis), monoqrafiyaların
annotasiyası, dərslik və dərs vəsaitləri haqqında məlumat**

4.1. Məqalələr

№	İşin adı	Jurnal	Həmmüəlliflər
1	Квантовомеханический расчет электронной структуры дихлорпроизводных молекулы дибензо-п-диоксина в базисе слейтеровских атомных орбиталей	Bakı Universiteti Xəbərləri, fiz-riy. elmləri ser., 2005, № 3, s. 121-126	T.M.Mурсалов Ф.Г.Пашаев Ф.Г.Гасанов С.А.Ахундов
2	Расчет эффективных зарядов атомов в молекулах некоторых хлорпроизводных диоксина	Azərbaycan Kimya Jurnalı, 2005, № 4, s 30-32	M.C.Салахов Н.Д.Ашурова Т.М.Мурсалов Ф.Г.Пашаев

4.2. Tezislər

№	İşin adı	Jurnal	Həmmüəlliflər
1	C ₄ Cl ₄ molekulun elektron quruluşunun Volsberq-Helmhols metodu ilə hesablanması	«Gənc fizik–2006» gənc tədqiqatçılar və magistrantların IX elmi konfransının materialları, Bakı, 20 may, 2006, s. 59.	A.Ə.Quliyev F.H.Paşayev
2	HeH ⁺ molekulunun tam enerjisinin korelyasiya vuruğu daxil olan dalğa funksiyaları metodu ilə hesablanması	. «Gənc fizik–2006» gənc tədqiqatçılar və magistrantların IX elmi konfransının materialları, Bakı, 20 may, 2006, s. 56.	A.Ə.Rəsulov F.H.Paşayev
3	Qapalı elektron təbəqəli ikiatomlu molekulların molekulyar orbitallarının Xartri-Fok-Rutan metodu ilə tapılması	«Gənc fizik–2006» gənc tədqiqatçılar və magistrantların IX elmi konfransının materialları, Bakı, 20 may, 2006, s. 66.	Ə.S.Mehdiyeva F.H.Paşayev
4	Metanın ftorlu törəmələrinin elektron və fəza quruluşlarının müqayisəli tədqiqi”.	“Gənc fizik-2006” gənc tədqiqatçılar və magistrantların IX elmi konfransının materialları. Bakı, 20 may, 2006, s.61	Nəbiyev.N.S., Balacayeva K.F
5	Metal atomu su molekulları komplekslərinin fəza quruluşlarının tədqiqi	“Gənc fizik-2006” gənc tədqiqatçılar və magistrantların IX elmi konfransının materialları. Bakı, 20 may, 2006, s.69	Nəbiyev.N.S., A.R.Sadiqova
6	Kükürd tərkibli bəzi radioprotektorların elektron və fəza quruluşunun tədqiqi	“Gənc fizik-2006” gənc tədqiqatçılar və magistrantların IX elmi konfransının materialları. Bakı, 20 may, 2006, s.70	Nəbiyev.N.S., Ü.F.Səmədova
7	Sistemin ailəsinə daxil olan bəzi radioprotektorların quruluşu və dinamik xüsusiyyətləri	Fizikanın aktual problemləri IV Respublika Elmi konfransının materialları. Bakı 2006. s.89	Nəbiyev N.S.
8	Ozon molekulunun simmetrikləşdirilmiş molekulyar orbitallarının tapılması	“Gənc fizik-2006” gənc tədqiqatçılar və magistrantların IX elmi konfransının materialları. Bakı, 20 may, 2006, s.65	M.R.Vahabova F.N.Salmanova

9	DFQ iştirakında və iştirakı olmadan 2,3,4-trihidroksi-4-xlor azobenzolla kompleksməhləgətirməsinin spektrofotometrik tətqiqi	“Gənc kimyaçı” II Respublika elmi konfransının materialları. Bakı, 17-18 may, 2006, s.99	F.V.Hacıyeva F.S.Əliyeva
10	Спектрофотометрическое определение алюминия(III) с 2,3,4-тригидрокси-4'-хлоразобензолом в присутствии уротропина	Aspirantların və gənc tətqi qatçıların XI Respublika Elmi konfransın materialları	Ф.В.Гаджиева
11	Спектрофотометрическое определение алюминия(III) с 2,3,4-тригидрокси-4'-бромазобензолом в присутствии уротропина	Tələbələrin və magistrantlarının IX Respublika Elmi konfransın materialları	Ф.В.Гаджиева

5. Xarici dövlətlərin təhsil və elmi müəssisələri ilə əlaqələr

5.1. Elmi-texniki əməkdaşlıq

Kafedra Türkiyənin bir sıra universitetləri - Ərzurum Atatürk Universiteti, Çanaqqala 18 mart Universiteti, Toqat Qaziosmanpaşa Universitetləri ilə əməkdaşlıq etmişdir.

5.2. Beynəlxalq konfranslarda, konqreslərdə və simpoziumlarda iştirak

№	İşin adı	Jurnal	Həmmüəlliflər
1	.The reasons for divergence between theoretical and experimental values of modulus of elasticity of compositions on the basis of polymers and piezoelectric ceramics	TPE-06 3 rd International Conference on Technical and Physical Problems in Power Engineering May 29-31, 2006, Ankara, TURKEY, p 797-798	M.A.Ramazanov Z.E.Mustafayev S.A.Abasov
2	Influence of preliminary electro treatment to the strength and thermal properties of compositions on the basis of polyethylene and piezoceramics.	TPE-06 3 rd International Conference on Technical and Physical Problems in Power Engineering May 29-31, 2006, Ankara, TURKEY, p 677-678	M.A.Ramazanov S.A.Abasov H.S.Ibragimova
3	Фотолюминисценция в нанокompозитах на основе ПВДФ+GdS	Материалы 8-ой международной конференции опто-, наноэлектроники, нанотехнологии и микросистемы стр. 210	Магеррамов А.М. Рамазанов М.А. Азизов А.А.
4	Применение нанотехнологии в нефтедобыче	Труды Международной научно-практической конференции «Нанотехнология-производство» 2005 стр. 47-52	Мирзаджанзаде А.Х Магеррамов М.А. Рамазанов М.А.
5	Применение нанотехнологии для сбора нефти с водной поверхности	Научно-практическая конференция. «Нанотехнология-производство»	Магеррамов М.А. Рамазанов М.А. Азизов А.А.

6	The thermodynamic characteristic of complexformation of some metals with 3-[4-iodphenyelazo]phentadion- 2,4 in aqua-ethanol solution	37-th International Conference of Coordinaton Chemistry 13-18 August 2006, Cape Town, South Africa	S.R.Hadjiyeva, F.G.Pashayev, F.M.Chiragov, A.G.Hasanov, K.T.Mahmudov
7	Influence of the category discharge processing on strength properties of piezocompositions	7-th International Symposium on ionizing radiation and polymers 23-28 September 2006. Antalya. Turkey	Ramazanov M.A.
8	«Polymer-piezoelectric compositions and application in medicine»	Конференция «Информационные технологии в образовании, технике и медицине»	Ramazanov M.A.

5.3. *Beynəlxalq proqramlar üzrə təkliflər*

Kafedra əməkdaşları tərəfindən aşağıdakı proyektlər təklif olunmuşdur.

1. **Proje STCU 4171**

Application of nanotechnology in the prevention of suppurative inflammatory processes in postsurgical complications.

2. Proje STCU. 3938. Elaboration and investigation of new photo-,electro-, thermoluminescent polymer nanocomposite material

3. Proje STCU. 3998 Radio ecological survey of the soil of the territory of Baku city of Absheron peninsular

5.4. *Xaricdə çap edilmiş məqalələr (ottisklər əlavə olunmalıdır)*

№	İşin adı	Jurnal	Həmmüəlliflər
1	.Влияние межфазного взаимодействия на модуль Юнга композиции на основе полимера и пьезокерамики	Электронная обработка материалов №4, 2006, стр. 86-90	Рамазанов.М.А, Мустафаев З.Е. Абасов С.А
2	Диэлектрические и прочностные свойства полимерных композиций.	Электронная обработка материалов №5, 2006, стр. 86-90	Рамазанов.М.А, Абасов С.А Мустафаев З.Е.
3	Effect of a steady magnetic field on the strength, dielectric and magnetic properties of composites..	International Polymer Science and Technology Issue Year: 2006. Volume 33. Issue №6	Ramazanov M.A. Kerimli Sadykhov R.Z
4	Higher twist effects in proton-proton collisions	International Journal of Modern Physics E Vol. 15, №6 (2006) 1209-1231	A.I.Ahmadov I.Boztosun R.Kh.Muradov A.Soylu

			E.A.Dadashov
5	Комплексообразование меди (II) с 3-[2 гидроксифенилазо) пентадионом-2,4	Журнал аналитической химии. 2006, т.61. №6, с. 598	С.Р.Гаджиева Т.М.Мурсалов К.Т.Махмудов Ф.Г.Пашаев, Ф.М.Чырагов

6. ELMİ-TƏDQIQAT İŞLƏRİNİN NƏTİCƏLƏRİNİN TƏTBİQİ

6.1. Dövlət və özəl strukturlarda tətbiq olunmuş elmi nəticələr

Kafedrada 2006-ci ildə aparılmış elmi-tədqiqat işlərinin bəzi nəticələri AMEA-nın Polimer Materialları İnstitutunda və BDU-nun bəzi elmi-tədqiqat laboratoriyalarında və kafedralarında tətbiq olunmuşdur.

6.2. Təhsildə elmi-tədqiqat işlərinin nəticələrinin və informasiya texnologiyasının tətbiqi

Kafedrada aparılan elmi-tədqiqat işlərinin nəticələrindən kafedra üzrə ixtisaslaşan bakalavrların kurs və buraxılış işlərinin hazırlanmasında, magistraturada tədris proqramının plan üzrə yerinə yetirilməsində və magistr dissertasiyalarının hazırlanmasında, metodik vəsaitlərin və dərs vəsaitlərinin yazılmasında, kompüter tədris proqramlarının hazırlanmasında və s. istifadə olunur.

7. Patent – informasiya işləri

Kafedrada keçirilmiş elmi konfransların, seminarların

və simpoziumların xarakteristikaları

Kafedrada müntəzəm olaraq hər ayın ilk həftəsinin II günü saat 13⁰⁰-də elmi seminar keçirilmişdir.

9. Kafedrada elmi və elmi-pedaqoji kadrların hazırlanması

Hal-hazırda kafedrada 2 dissertant və 2 aspirant öz elmi-tədqiqat işini davam etdirir.

Kafedrada təhsil alan üç nəfər magistrant TEM 03.00.12–atom və molekul fizikası üzrə dissertasiya müdafiə edərək magistr dərəcəsi almışlar. Onlardan 3 nəfər magistraturanı fərqlənmə diplomu ilə bitirmişdir.

Kafedra üzrə magistraturada 7 nəfər (I kurs 3 nəfər + II kurs 4 nəfər) təhsil alır.

Bakalavr ixtisas dərəcəsi almaq üçün kafedra üzrə 17 nəfər IV kurs tələbəsi buraxılış işini müvəffəqiyyətlə müdafiə etmişdir

10. Dissertasiya müdafiəsi və ixtisaslaşdırılmış şuraların fəaliyyəti

Dosent N.S.Nəbiyev və baş laborant f.r.e.n. A.İ.Əhmədov BDU-da Fizika fakültəsində fəaliyyət göstərən Dissertasiya Şurasının elmi seminarının

üzvüdürlər. Kafedranın baş müəllimi f.r.e.n. Paşayev F.H magistr dissertasiyalarının müdafiəsi üçün yaradılmış Elmi Şuranın üzvü olmuşdur.

11. Tələbələrin və gənc tədqiqatçıların (magistrlərin) elmi-tədqiqat işləri (konfransda iştirak)

Kafedra üzrə 3 tələbə Ali məktəb tələbələrinin XX Respublika elmi konfransında (Bakı, 16 fevral 2006-ci il) iştirak etmişlər.

1. Abdullayeva Nübar Adil qızı “CH₂Cl₂ molekulunun molekulyar orbitallarının tapılması
2. Rəcəbov Aftandil Qulam oğlu “Fenol molekulunun (C₆H₆O) elektron quruluşunun yarımempirik Volsberq-Helmhols metodu ilə hesablanması
3. Nəzərov Araz Qüdrət oğlu “İkiatomlu molekulların rəqs və rəqs-fırlanma enerji səviyyələri”.

Kafedra üzrə 7 magistrant «GƏNC FİZİK – 2006» elmi konfransında (Bakı, 20 may 2005-ci il) məruzə ilə çıxış etmişdir (bax: 4.2 bəndi).

12. Əsas nəticələr və təkliflər

12.1-Nəticələr

- Çox elektronlu sistemlərin elektron və fəza quruluşunun yarımempirik kvant kimyəvi metodlarla hesablanması zamanı istifadə edilən parametrlər, bazis funksiyaları və riyazi ifadələr, kompüter proqramları daha da təkmilləşdirilmiş, tətbiqi əhəmiyyətə malik məsələlərin həlli zamanı istifadə imkanları aydınlaşdırılmışdır.

12.2-Təkliflər

“Nanomaterialların kimyəvi fizikası”
kafedrasının müdiri
f.r.e.n, dosent

Ramazanov M.Ə.