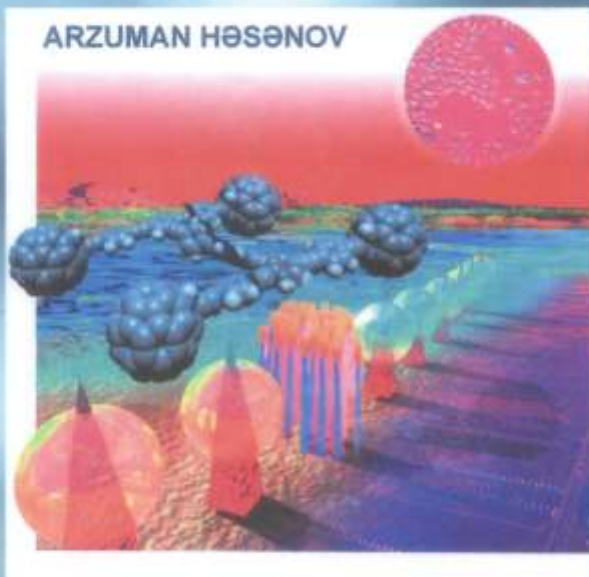


ARZUMAN HƏSƏNOV



# NANOSİSTEMLƏRİN

RIYAZİ MODELLEŞDİRİLMƏSİ  
VƏ  
KOMPÜTER HESABLANMASI

**ARZUMAN HƏSƏNOV**

**NANOSİSTEMLƏRİN  
RİYAZİ MODELLEŞDİRİLMƏSİ VƏ  
KOMPÜTER HESABLANMASI**

**“Ləman nəşriyyat poliqrafiya” MMC  
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, 234 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

<b>ÖN SÖZ</b> .....	6
<b>GİRİŞ</b> .....	8
<b>I FƏSİL. NANOSİSTEMLƏRİN MODELLEŞDİRİLMƏSİ METODLARI</b> .....	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
<b>II FƏSİL. NANOSİSTEMLƏRİN KOMPÜTER PROQRAMLARI</b> .....	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
<b>III FƏSİL. NANOSİSTEMLƏRİN KOMPÜTERDƏ HESABLANMASI VƏ TƏDQIQI</b> .....	113
13. Polietilen (PE), Polipropilen(PP) və Poliviniliden fluorid(PVDF) kompozitlərin modelləşdirilməsi və qeyriempirik metod ilə tədqiqi .....	113

14. Qızıl nanohissəciyi və onun nanokopozisiyalarının modelləşdirilməsi və Genişlənmiş Hükkel metodu ilə tədqiqi .....	118
15. Qızıl nanohissəciyinin yarım-empirik metodla tədqiqi ..	124
16. Gümüş nanohissəciyi və onun nanokopozisiyalarının kvantmexaniki tədqiqi .....	131
17. Dəmir nanohissəciyi və onun nanokopozisiyalarının kvantmexaniki tədqiqi .....	140
18. Həcmə mərkəzləşmiş dəmir nanohissəciyi və onun nanokopozisiyalarının kvantmexaniki tədqiqi .....	146
19. Aliminum nanohissəciyi və onun nanokopozisiyalarının modelləşdirilməsi və sixliq funksionali nəzəriyyəsi metodu ilə tədqiqi .....	154
20. Silisium nanohissəciyinin modelləşdirilməsi və kompüter tədqiqi .....	161
21. Füllərinin modelləşdirilməsi, qeyriempirik və molekulyar dinamika metodu tədqiqi .....	164
22. Qrafənin modelləşdirilməsi, qeyriempirik və molekulyar dinamika metodları ilə tədqiqi .....	168
23. DNT-nin modelləşdirilməsi və tədqiqi .....	178
24. $\text{Fe}_3\text{O}_4$ nanohissəciyin modelləşdirilməsi, qeyriempirik və SFN metodları ilə tədqiqi .....	182
25. ZnS nanohissəciyi və onun nanokopozisiyalarının modelləşdirilməsi və tədqiqi .....	194
26. Sirkonim dioksid nanohissəciyi və onun nanokopozisiyalarının modelləşdirilməsi və tədqiqi ...	199
27. Qızıl sulfid $(\text{Au}_2\text{S})_{22}$ nanohissəciyi və onun $(\text{Au}_2\text{S})_{22} + \text{PP}$ , $(\text{Au}_2\text{S})_{22} + \text{PVDF}$ nanokopozisiyalarının modelləşdirilməsi və tədqiqi .....	208
28. Plumbum sulfid $(\text{PbS})_8$ nanohissəciyi və onun $(\text{PbS})_8 + \text{PP}$ , $(\text{PbS})_8 + \text{PVDF}$ nanokopozisiyalarının modelləşdirilməsi və tədqiqi .....	221
<b>ƏDƏBİYYAT</b> .....	<b>230</b>

## 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 dərslik 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. Dərsliyin 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 sahifə: <http://nanomaterials.bsu.edu.az>

E-mail: [hasanovarzuman@hotmail.com](mailto:hasanovarzuman@hotmail.com), [arzuman@bsu.az](mailto:arzuman@bsu.az)

Skype: hasanovarzuman