

UOT 539.23; 539.206.D

PACS: 07.05.Tp, 81.07.-b, 03.67.Lx

**QRAFENİN RİYAZİ MODELƏŞDİRİLMƏSİ
VƏ KOMPYUTER TƏDQIQI****A.Q.HƏSƏNOV***Bakı Dövlət Universiteti**hasanovarzuman@hotmail.com*

Qrafenin visual modeli qurulmuş və Ab İnitio metodu ilə kompyuterdə hesablama aparılmışdır. Qrafenin tam enerjisi, orbital enerjiləri, atomların effektiv yüklərinin, ionlaşma potensialının, qadağan olunmuş enerji baryerinin qiymətləri hesablanmış və elektron sıxlığının paylanması qrafiki qurulmuşdur. Qrafenin temperatura davamlılığı NanoEngineer-1 proqramı vasitəsilə molekulyar dinamika metodu ilə tədqiq olunmuşdur. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, qrafen keçirici, temperatura davamlı nanomaterial kimi gələcəkdə müxtəlif elektron qurğularda geniş tətbiq oluna bilər.

Açar sözlər: *Kompyuter modelləşdirmə, nanotexnologiya, kvantmexaniki hesablama.*

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 sxemlərin tərkibində işləməsi imkanları araşdırılır. Bu işə 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 məsaməsi olmayan yarımkeçiricidir. Bununla yanaşı keçirici zona ilə valent zonasının toxunma nöqtələrində sonlu energetik məsamə 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 sadalan maraqlı xassələrini nəzərə alaraq işdə qrafenin vizual modelləşdirilməsi və kvantmexaniki metodlarla öyrənilməsi məsələsinə baxılmışdır.

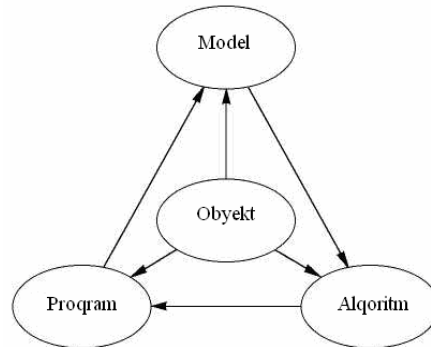
Riyazi modelləşdirmə və kvantmexaniki metodlar

Riyazi modelləşdirmənin metodologiyasının ideyası ondan ibarətdir ki, ilkin obyektin obrazı riyazi modelə əvəz olunur və bu modelin öyrənilməsi və kompüterdə reallaşması hesablama - məntiq alqoritm əsasında hazırlanmış proqram vasitəsilə aparılır. Riyazi model həm nəzəri, həm də təcrübi faktların əsas cəhətlərini özündə birləşdirir. Müasir hesablama və informasiya texnologiyalarının imkanları əsasında obyektin modeli ilə işləməklə onun quruluş və xassələrini, özünü necə aparmasını nəzəri cəhətdən öyrənmək olar. 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 və ya qurulur. Model nəzəri metodlarla tədqiq olunaraq obyekt haqqında əvvəlcədən mühüm biliklər əldə etməyə imkan verir.

İkinci mərhələdə riyazi modelin kompüterdə reallaşması üçün alqoritm işlənib hazırlanır. Hesablama alqoritm modelin əsas quruluş və xassələrini təhrif etməməlidir.



Şək. 1. Riyazi modelləşdirmənin mərhələləri.

Üçüncü mərhələdə hazırlanmış model əsasında yaradılmış alqoritm kompyuter dilinə çevirərək kompyuter proqramı hazırlanır. Kompyuter proqramı öyrənilən obyektin elektron variantı olub kompyuterdə bilavasitə tədqiqat aparmaq üçündür. Model – alqoritm – proqram üçlüyünü yaratdıqdan sonra tədqiqatçı sınaq yoxlamalarını aparır. Model – alqoritm – proqram üçlüyünün ilkin obyektə uyğunluğuna əmin olduqdan sonra, model vasitəsilə müxtəlif hesablamalar apararaq obyektin quruluş və xassələrini ifadə edən kəmiyyət və keyfiyyət parametrləri tapılır.

Hal-hazırda nanotexnologiyada riyazi modelləşdirmənin vizual, hesablama və mühəndis kompyuter modelləşdirməsi istifadə olunur.

Kvant səviyyəsində nanosistemlərin öyrənilməsi üçün istifadə olunan qeyri-empirik metodlardan biri Xartri-Fok-Rutan (XFR) metodudur. Bu metodun əsas ideyası ondan ibarətdir ki, sistemə daxil olan hər bir obyektin digər obyektlərlə qarşılıqlı təsiri, hər hansı $V\left(\vec{r}\right)$ potensialı ilə əvəz olunur. XFR metodunda molekul daxilə elektronun halını təsvir edən dalğa funksiyası U_i molekulyar orbitalları, molekula daxil olan atomların χ_q atom orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində axtarılır:

$$U_i = \sum_q c_{qi} \chi_q \quad (1)$$

χ_q atom orbitalları məlum hesab edilir. Naməlum əmsalları c_{qi} üçün XFR tənlikləri alınır. XFR tənliklər sistemini matris formasında aşağıdakı kimi yazmaq olar:

$$FC = ESC \quad (2)$$

burada, E -elektronların orbital enerjiləri vektoru, S –örmə və C - naməlum əmsallar matrisi, F – Fok matrisi olub C - naməlum əmsallar matrisinin elementlərindən asılıdır. (2) ümumiləşmiş məxsusi qiymətlər tənliyi olub Rutan tənliyi adlanır. Unitar çevirmə vasitəsilə (2) ümumiləşmiş məxsusi qiymətlər tənliyini adi məxsusi qiymətlər tənliyinə gətirmək olar:

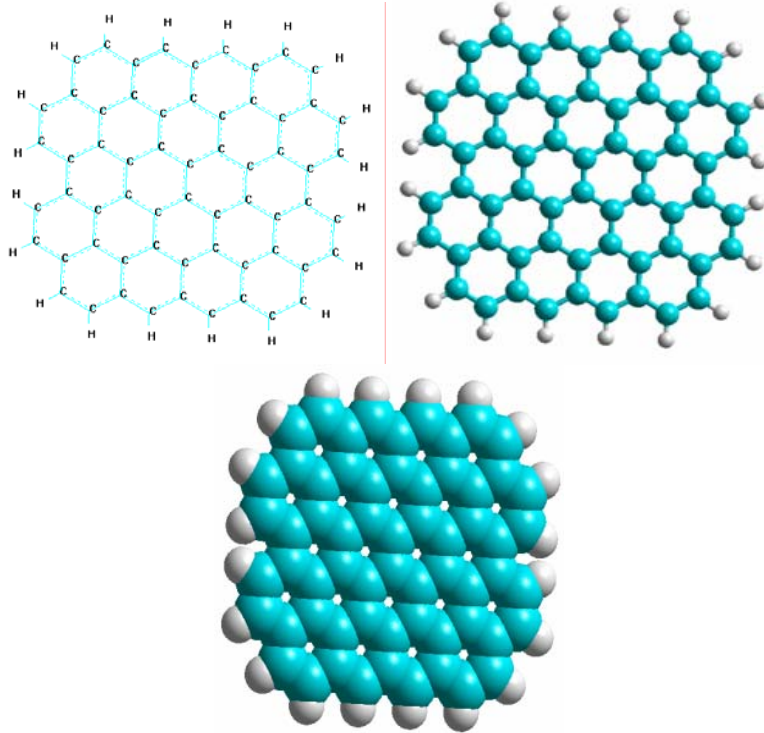
$$F'X = EX \quad (3)$$

adi məxsusi qiymətlər tənliyi alınır. (3) tənliyini həll etmək üçün F' – Fok matrisinin diaqonallaşdırılması üsulundan istifadə olunur. Hesablama apararaq ε_i -orbital enerjilərinin və c_{qi} -əmsallarının qiymətləri tapılır, ε_i və c_{qi} kəmiyyətlərinin hesablanmış qiymətləri sistemin tam elektron enerjisini, ionlaşma potensialını, atomların effektiv yüklərini və s. hesablamağa imkan verir.

İstifadə olunan proqramlar

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 kompyuter proqramları hazırlanmışdır və istifadə olunur. Modelləşdirmə üçün elm və təhsildə istifadə olunan HeperChem Profesional və NanoEngineer-1 proqramları daha münasibdir. Hesablamlar bu proqramlar (demo və free versiyaları istifadə olunmuşdur) tətbiq olunmaqla aparılmışdır. Qrafenin şəkil 2-dəki vizual modelləri qurulmuşdur:



Şək. 2. Qrafenin visual modelləri.

Alınmış nəticələr və təhlil

Proqram vasitəsilə 62 C karbon atomundan təşkil olunmuş qrafen üçün aşağıdakı nəticələr alınmışdır. Nəticələrin dəqiqliyi Virial şərti ilə müəyyən edilir.

Total Energy = -1367577.5422499 (kcal/mol), Total Energy = -2179.373268204 (a.u.)

The Virial (-V/T) = 1.9438

\mathcal{E}_i eigenvalues(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

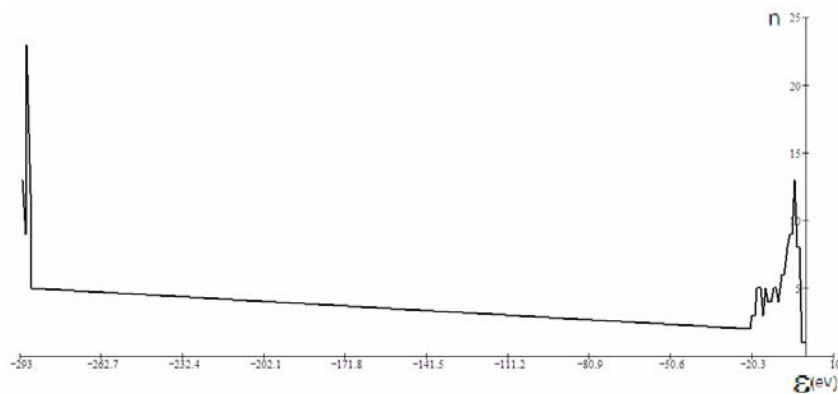
-289.013672 -288.976238 -288.971293 -288.964596 -288.849206 -288.819615 -21.212922
-21.075359 -20.797792 -20.684934 -20.009939 -19.803156 -19.582007 -19.046662
-18.985473 -18.872503 -18.643819 -18.296089 -18.192875 -17.756457 -17.412327
-17.263154 -17.252593 -17.085644 -16.654695 -16.516442 -16.193579 -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

NET CHARGES Charge (Mulliken)

-0.059702 -0.127621 -0.003749 -0.017751 0.116607 0.085909 -0.019748 -0.062147
-0.119864 0.047712 -0.196298 0.028606 -0.183188 0.047254 -0.111376 -0.063169 0.053538
0.047248 -0.009541 0.017272 -0.023389 0.011457 -0.008894 0.042784 0.056040 -0.020489 -
0.024268 0.072948 0.111713 0.044313 0.045774 0.059268 0.076446 0.081148 -0.025853
0.102514 0.088407 0.073026 0.057026 0.042245 0.076169 0.042174 0.123194 0.050683 -
0.057870 -0.027359 -0.016415 0.047733 0.049236 -0.012240 0.017359 0.025232 -0.016523
0.006770 -0.133870 0.051537
-0.218093 0.030098 -0.204272 0.030953 -0.112741 -0.057212 -0.004190 -0.007049
-0.006113 -0.004976 -0.001639 -0.019109 -0.000443 -0.000270 -0.019061 -0.001377
-0.005061 -0.005738 -0.004367 0.000884 0.003077 0.057822 0.011065 -0.018031
-0.001556 -0.000623

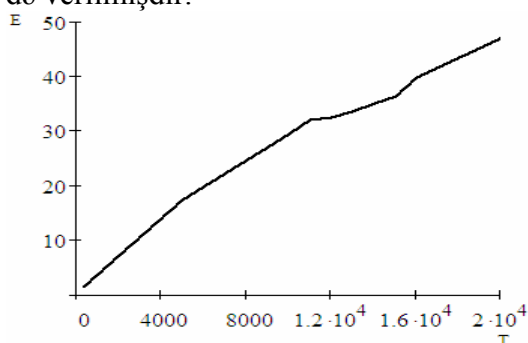
Qrafenin 392 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı səviyyənin enerjisi əks işarə ilə ionlaşma potensialının qiymətinə bərabərdir: $I_p = -\varepsilon_{186} = 0,738170$ eV. Qadağan olunmuş zonanın qiymətini hesablamaq üçün mənfi işarəli ən yuxarı orbital enerji ilə $\varepsilon_{192} = -0.007091$, müsbət işarəli ən aşağı orbital enerjinin $\varepsilon_{193} = 0,369195$ fərqi tapılır: $\varepsilon_{193} - \varepsilon_{192} = 0,376286$ eV. Bu isə onun elektrik keçiriciliyinə malik olmasını təsdiq edir. Qrafenin 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 tutulmuş molekulyar orbitalın enerjisidir. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{187} = -0,706683$ eV. $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{186} = -0,738170$ eV. Beləliklə, $\eta = 0,015744$ eV. $\eta < 1eV$ olduğundan

qrafen yumşaq material hesab olunur. Elektron sıxlığının paylanması isə aşağıdakı kimidir:

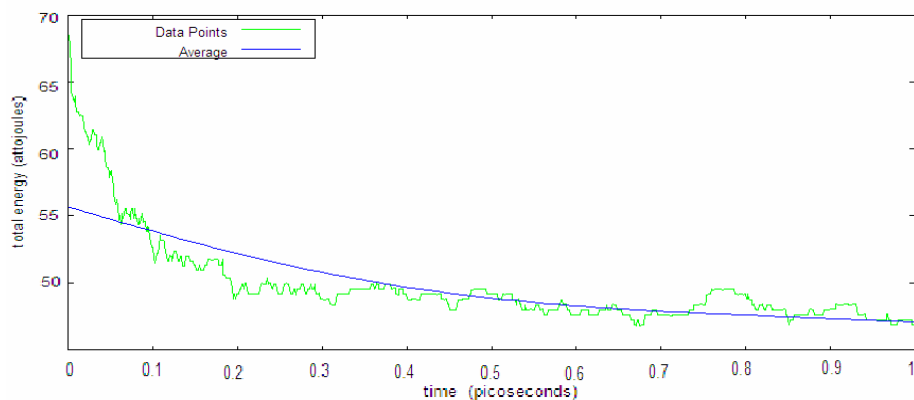


Şəkil 3. Qrafenin elektron sıxlığının paylanması.

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 kompyuter hesablamaları aparılmışdır. Alınmış nəticələr əsasında qrafenin tam enerjisinin attocoul vahidi ilə verilmiş qiymətlərinin temperaturdan asılılıq qrafiki (şəkil 4) qurulmuşdur. Aparılmış kompyuter 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 olunmuş, bu hala uyğun qrafenin tam enerjisinin zamandan asılılıq qrafiki qurulmuşdur (şəkil 5). Göründüyü kimi tam enerji zamandan asılı olaraq dəyişir. Stabil quruluşlarda isə tam enerjinin qiyməti zamandan asılı olaraq, demək olar ki, dəyişmir. Şəkil 6-da $T=2000\text{K}$ temperaturdakı stabil quruluşun tam enerjisinin zamandan asılılığı verilmişdir. Nəticələr cədvəl 1-də verilmişdir.



Şəkil 4. Qrafenin tam enerjisinin temperaturdan asılılıq qrafiki.

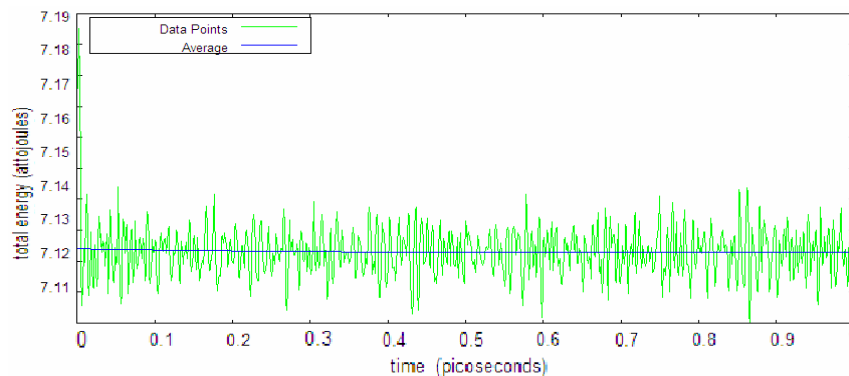


Şək. 5. Qrafenin tam enerjisinin zamandan asılılıq qrafiki (T=20000K).

Cədvəl 1

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

Sıra N-si	Qrafenin vizual modelləri
1	<p>T=300K T=1000K T=2000K T=5000K</p>
2	<p>T= 10000K T=11000K T=12000K T=13000K</p>
3	<p>T=14000K T=15000K T=16000K T=20000K</p>



Şəк. 6. Qrafenin tam enerjisinin zamandan asılılıq qrafiki (T=2000K).

ƏDƏBİYYAT

1. D.A.Abanin, S.V.Morozov, L.A.Ponomarenko, R.V.Gorbachev, A.S.Mayorov, M.I.Katsnelson, K. Watanabe, T.Taniguchi, K.S.Novoselov, L.S.Levitov, and A.K.Geim. Giant Nonlocality Near the Dirac Point in Graphene. *Science*, 15 April, 2011, v. 332, №6027, p. 328–330; DOI: 10.1126/science.1199595.
2. 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).
3. Трубочкина Н.К. Компьютерное моделирование наноструктур и наносистем. М.: 2011, 70 с.
4. Kazu Suenaga & Masanori Koshino. Atom-by-atom spectroscopy at graphene edge. – *Nature* (2010) doi:10.1038/nature09664; Published online 15 December 2010.
5. Венер М.В., Цирельсон В.Г. Компьютерное моделирование супрамолекулярных систем и наноструктур. М.: РХТУ, 2008, 128 с.
6. Учебное методическое пособие. Математическое моделирование структуры соединений с помощью пакета программ HyperChem 7.5. Воронеж: 2006, 44 с.
7. 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, 223 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГРАФЕНА

А.Г.ГАСАНОВ

РЕЗЮМЕ

Построена визуальная модель и с помощью метода Ab Initio проведен компьютерный расчет графена. Вычислены полная энергия, орбитальные энергии электронов, эффективный заряд атомов, потенциал ионизации и построен график распределения электронной плотности, вычислено значение энергетического барьера графена. На основе метода молекулярной динамики с помощью программы NanoEngineer-1 была исследована температурная устойчивость графена. Результаты расчетов показывают, что графен как проводящий наноматериал в будущем может быть широко использован в различных электронных устройствах.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, нанотехнология, квантовомеханическое вычисление.

MATHEMATICAL MODELLING AND COMPUTER RESEARCH OF GRAPHENE

A.G.HASANOV

SUMMARY

The visual model is constructed and by the method of Ab Initio the computer calculation of graphene is carried out. Total and orbital energies of electrons, the effective charge of atoms, ionization potential are calculated and the graphics of distribution of electronic density is constructed, the value of energetic barrier of grapheme is calculated. On the basis of molecular dynamics method temperature stability of graphene has been investigated by means of program NanoEngineer-1. Results of calculations show that graphene as a spending nanomaterial can be widely used in various electronic devices in the future.

Key words: computer modeling, nanotechnology, quantum mechanical calculations.

Redaksiyaya daxil olub: 20.04.2011-ci il

Çapa imzalanıb: 17.06.2011-ci il.