

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

**GÜMÜŞ NANOHISSƏCİYİ VƏ ONUN NANOKOMPOZİSİYALARININ
KVANTMEXANİKİ TƏDQIQI****F.H.PAŞAYEV, A.Q.HƏSƏNOV**
hasanovarzuman@hotmail.com

Gümüş nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının nəzəri visual modelləri qurulmuşdur. Bu modellər Xartri-Fok-Rutan (XFR) metodu ilə tədqiq olunmuşdur. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, gümüş nanohissəciyi və onun PP+Ag₅, PVDF+Ag₅ nanokompozisiyaları möhkəm, nüklefil və stabil dielektrik materiallardır. Atomların effektiv yükləri hesablanmış və bu nanostrukturaların molekulyar diaqramları qurulmuşdur.

Açar sözlər: Kvantmexaniki hesablama, nanotexnologiya, kompüter modelləşdirmə.

İstifadə olunan metod

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 [1, 5]. Təqdim olunan işdə gümüş nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının elektron quruluşu və xassələri Xartri-Fok-Rutan (XFR) metodu ilə öyrənilmişdir. XFR metoduna görə molekul daxilində elektronun halı U_i -molekulyar orbitalları adlanan birelektronlu dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. U_i -lər molekuldakı atomların χ_q atom orbitallarının xətti kombinasiyaları şəklində axtarılır [2, 3, 6]:

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

X_q atom orbitalları məlum hesab olunur. C_{qi} naməlum əmsalları XFR tənliklərinin həllindən tapılır. Bu tənlikləri matris formasında aşağıdakı kimi yazmaq olar:

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

Burada E-elektronların orbital enerjiləri, S- χ_p və χ_q atom orbitalları arasında örtmə matris elementləri, C-naməlum əmsallar matrisidir. F-Fok operatorunun matris elementləridir və onlar C naməlum kəmiyyətlərindən asılı olurlar. Unitar çevrilmə vasitəsilə (2) ümumiləşmiş məxsusi qiymətlər tənliyini adi məxsusi qiymətlər tənliyinə gətirmək olar. Hesablamalar aparmaqla ε_i -orbital enerjiləri və C_{qi} əmsallarının qiymətləri tapılır. C_{qi} -əmsallarının qiymətləri əsasında

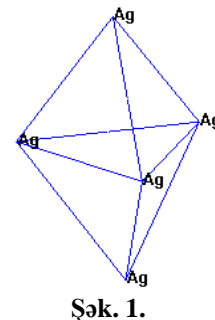
molekulyar orbitalların analitik ifadəsini almaq olar. Bu da nanoobyektlərin bir sıra parametrlərini, məsələn, atomların effektiv yüklərini hesablamğa imkan verir. ε_i - məxsusi qiymətləri əsasında Gümüş nanohissəciyi və onun PP+Ag₅, PVDF+Ag₅ nanokompozisiyalarının tam enerjisini, ionlaşma potensialının 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

Əvvəlcə 5 Ag atomundan ibarət nanohissəciyə baxılmışdır. Məlumdur ki, nanohissəciklərin quruluşu və xassələri nanohissəcikdə atomların sayı və ölçüsü ilə müəyyən olunur. N sayda atomundan ibarət olan nanohissəciyin ölçüsü

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

düsturu ilə müəyyən olunur [7]. Burada N – atomların sayı, M-atomun kütləsi, ρ -materialın sıxlığı və N_A -Avaqadro ədədidir. N=5 sayda gümüş atomundan ibarət nanohissəciyin (3) düsturu ilə hesablanmış ölçüsü D=0,55nm alınır. Hər Ag atomundan 29 olmaqla 145 atom orbitalından istifadə edilmişdir. (1) düsturu əsasında 145 sayda molekulyar orbital qurulmuşdur. Nanohissəciyin $47 * 5 = 235$ sayda elektronu ən aşağı enerjili 118 enerji səviyyəsini doldurur (118-ci səviyyədə bir elektron yerləşir). Şəkil 1-də Ag₅ üçün seçilmiş fəza quruluşu verilmişdir.



Tam enerji = -25748.64856971 (a.v.)

Elektronların kinetik enerjisi = 25379.65592531 (a.v.)

Virial şərti (-V/T) = 2.0145

ORBİTAL ENERJİLƏR (eV)

-24628.305961	-24628.268141	-24628.261681	-24626.198610	-24626.117922
-3633.397217	-3633.152153	-3633.140730	-3631.266523	-3631.184302
-3401.488250	-3401.469295	-3401.197342	-3401.153153	-3401.151698
-3401.146343	-3401.145783	-3401.133014	-3401.132363	-3399.355666
-3399.330078	-3399.275571	-3399.246448	-3399.100748	-3399.020684
-689.061565	-688.829736	-688.814978	-687.034446	-686.954867
-597.387036	-597.326512	-597.017617	-597.014432	-596.999011
-596.996358	-596.617031	-596.530235	-596.526300	-595.339596
-595.266907	-595.264720	-595.182674	-594.670112	-594.593970

-388.523387	-388.215050	-388.079944	-388.068424	-387.837411
-387.801789	-387.715901	-387.657773	-387.651812	-387.640860
-387.627140	-387.534845	-387.526992	-387.000014	-387.000008
-386.399837	-386.315992	-386.172454	-386.091781	-385.860439
-385.828425	-385.783418	-385.748810	-385.698689	-385.623142
-107.906138	-106.181870	-106.112180	-105.542898	-105.518964
-75.196230	-75.039357	-73.517744	-73.465452	-73.366517
-73.280242	-73.200986	-72.721660	-72.590798	-71.782926
-71.710665	-71.208533	-71.185413	-71.132981	-71.122411
-14.140931	-13.607894	-13.473920	-13.170184	-13.109149
-12.763732	-12.524641	-12.244746	-12.239229	-11.766389
-11.654627	-11.552005	-11.212959	-11.139402	-10.936489
-10.778443	-10.744476	-10.703343	-10.628543	-10.576078
-10.556859	-10.501391	-10.253556	-10.148774	-6.428032
-4.617168	-4.377313	-3.450312	2.815121	3.351223
3.458251	3.657226	4.062581	4.125019	7.724355
7.798701	7.942088	8.036548	10.091094	12.033410
12.333803	13.749934	14.505452	14.533822	15.846963
54.863063	56.376420	57.060418	57.290502	58.960694
5589.064891	5589.892075	5590.798990	5591.999551	5593.968490

Atomların effektiv yükləri və koordinatları

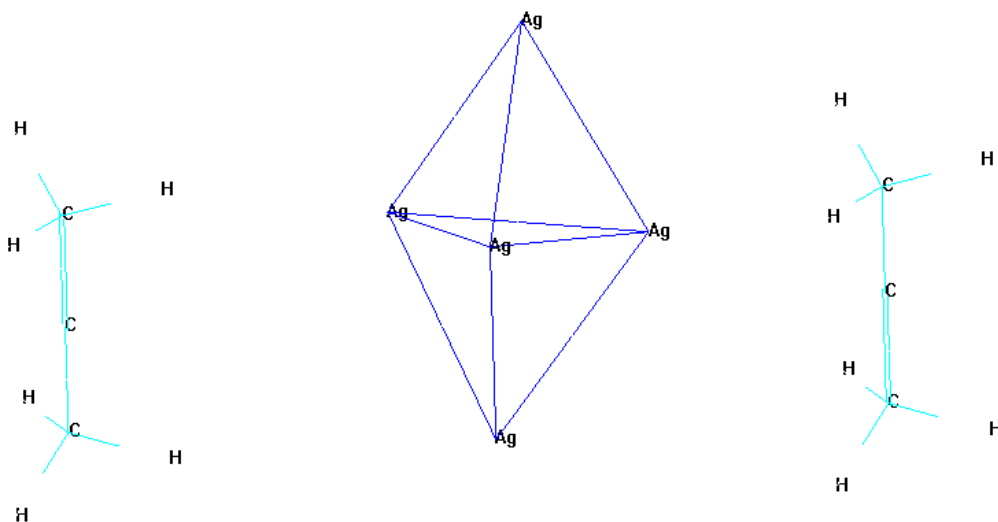
Z Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)		
		x	y	z
1 47	0.077299	-1.03129183	-1.75593834	-0.73399966
2 47	0.076664	1.03129110	1.75593846	0.73399967
3 47	0.049193	1.29925865	-0.45625694	-0.73399966
4 47	-0.101458	-0.26796737	-0.45625705	1.46799981
5 47	-0.101698	-1.03129183	0.91251386	-0.73399966

Ag nanohissəciyi üçün alınmış nəticələrin interpretasiyası. Ag₅ 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 orbitalin enerjisi, ε_{YTMO} - elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalin enerjisidir. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{119} = 2.815121\text{eV}$. $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{118} = -3.450312\text{eV}$. 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 orbitalin enerjisi müsbət işarəli olduğuna görə Ag nanohissəciyinin

nuklefilidir. Ag nanohissəciyinin stabilliyi $\mu(Ag_5) = E_{Ag_5} - \frac{5}{2} \cdot E_{Ag_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\mu(Ag_5)$ Ag nanohissəciyinin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\mu(Ag_5) > 0$ olduqda material qeyri-stabil, $\mu(Ag_5) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. E_{Ag_5} - Ag nanohissəciyinin, E_{Ag_2} - Ag₂ molekulu-nun tam enerjisidir. $E_{Ag_5} = -25748.64857$ a.v., $E_{Ag_2} = -10299.14996$ a.v. olduğundan $\mu(Ag_5) = -0.773681079$ a.v. $\mu(Ag_5) < 0$ olduğundan Ag₅ nanohissəciyi stabildir.

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.



Şəkil 2. PP+Ag₅ nanokompoziti

Tam enerji = -25979.786473298 (a.v.)

Elektronların kinetik enerjisi = 25610.683136688 (a.v.)

Virial şərti (-V/T) = 2.0144

ORBİTAL ENERJİLƏR (eV)

-24628.072685	-24627.622442	-24627.035982	-24627.030710	-24620.960645
-3633.149382	-3632.714015	-3631.917800	-3631.909669	-3625.838663
-3401.266533	-3401.179120	-3400.951457	-3400.828815	-3400.770602
-3400.516610	-3399.932843	-3399.923336	-3399.915254	-3399.911066

-3399.896621	-3399.895678	-3393.855739	-3393.849535	-3393.840721
-688.786526	-688.361182	-687.665947	-687.656734	-681.812269
-597.187054	-596.950851	-596.747194	-596.581337	-596.355847
-595.955880	-595.924892	-595.894203	-595.804390	-595.764004
-595.346731	-595.345924	-589.902709	-589.896505	-589.814365
-388.242285	-387.932621	-387.841826	-387.616806	-387.532155
-387.496189	-387.428150	-387.184821	-387.096197	-387.016697
-386.921582	-386.917643	-386.541902	-386.499382	-386.436554
-386.394423	-386.321446	-386.302968	-385.852084	-385.839244
-380.765949	-380.725904	-380.693114	-380.675428	-380.657551
-301.784096	-301.725505	-300.631565	-300.563776	-297.707766
-297.306121	-107.609022	-107.169047	-104.626362	-104.589083
-101.038234	-75.116160	-74.606009	-74.527315	-74.209656
-73.134335	-72.625937	-71.670176	-71.632849	-70.545316
-70.312643	-70.206481	-70.156056	-67.855849	-67.756488
-67.663143	-27.157545	-26.721880	-25.781931	-24.630624
-19.165143	-16.959762	-15.646723	-15.522264	-15.473925
-15.410169	-15.087977	-14.936262	-14.282234	-14.254011
-13.909110	-13.796913	-13.488604	-13.092100	-12.959950
-12.861724	-12.614632	-12.549856	-12.403267	-12.122016
-11.511409	-11.373051	-11.277131	-11.172949	-10.960394
-10.321517	-10.198184	-10.152827	-9.955683	-9.682288
-9.643258	-7.421202	-7.242704	-7.186904	-7.162472
-7.045006	-6.627367	-6.567862	-5.316923	-3.948853
-3.644808	-3.072905	3.400135	3.557322	4.084674
4.285290	4.573386	4.812585	7.446630	8.071168
8.554850	8.840160	9.271216	9.921345	12.056848
12.614268	12.872964	13.138383	14.191032	14.340686
15.425698	15.936802	16.573099	18.406478	18.842222
19.225234	19.388870	19.844922	20.028807	20.093539
20.192563	20.279837	20.370337	20.829763	21.408749
26.968182	26.983257	55.733093	57.212225	57.735586
59.114117	61.428332	5589.37391	5590.834366	5591.338602
5593.352452	5597.227995			

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

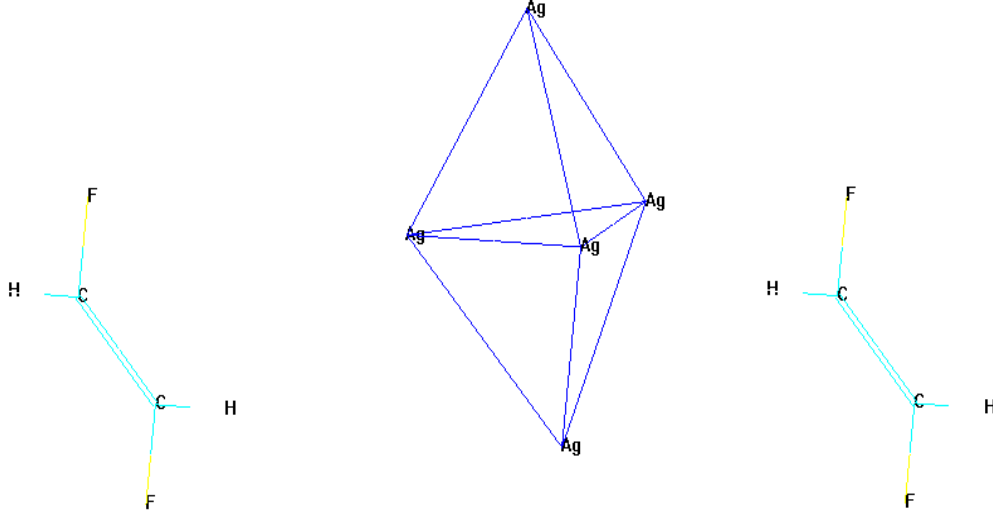
15	6	-0.043657	-2.08541708	-0.63475976	3.25002700
16	6	-0.182438	-2.08541708	0.82524024	3.25002700
17	6	-0.161516	-2.08541708	-2.17475976	3.25002700
12	1	0.067489	2.66248227	-2.56099443	-4.30138305
13	1	0.071864	1.12099579	-2.56099443	-3.41139572
14	1	0.066956	1.12098459	-2.56100235	-5.19136069
9	1	0.067814	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

PP+Ag₅ nanokompoziti üçün alınmış 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. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{143} = 3.400135\text{eV}$. $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{142} = -3.072905\text{eV}$. 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 $\mu(PP + Ag_5) = E_{PP+Ag_5} - \frac{5}{2} \cdot E_{Ag_2} - 3E_{C_2} - 6E_{H_2}$ düsturu ilə hesablanır. E_{PP+Ag_5} - PP+Ag₅ nanokompozitinin, E_{Ag_2} - Ag₂ molekulunun, E_{C_2} - C₂ molekulunun, E_{H_2} - H₂ molekulunun tam enerjisidir. $E_{Ag_5} = -25979.78647\text{a.v.}$, $E_{Ag_2} = -10299.14996\text{a.v.}$, $E_{C_2} = -74.31543142\text{a.v.}$, $E_{H_2} = -1.111298185\text{a.v.}$ olduğundan $\mu(PP + Ag_5) = -2.297501299\text{a.v.}$, $\mu(PP + Ag_5) < 0$ olduğundan PP+Ag₅ nanokompoziti stabildir.

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 3-də verilmişdir.



Şək. 3. PVDF+Ag₅ nanokompoziti

Tam enerji = -26292.600749293 (a.v.)

Elektronların kinetik enerjisi = 25918.525839869 (a.v.)

Virial şərti (-V/T) = 2.0144

ORBİTAL ENERJİLƏR (eV)

-24627.717423	-24627.457727	-24627.203789	-24627.021108	-24622.061645
-3632.601602	-3632.331678	-3632.300942	-3632.120468	-3626.918590
-3400.610139	-3400.597594	-3400.580140	-3400.409594	-3400.371214
-3400.346103	-3400.325578	-3400.318080	-3400.238730	-3400.181214
-3400.106195	-3399.931749	-3394.933449	-3394.929635	-3394.912219
-710.098210	-708.283777	-706.595110	-706.554753	-688.296898
-688.025066	-688.008288	-687.823460	-682.853673	-596.584301
-596.379087	-596.360062	-596.295990	-596.275519	-596.200592
-596.101423	-596.059033	-596.005953	-595.731742	-595.571504
-595.395426	-590.963781	-590.917046	-590.848496	-387.527460
-387.500709	-387.289920	-387.252855	-387.211181	-387.190943
-387.030979	-386.978337	-386.973300	-386.923666	-386.809207
-386.785695	-386.756538	-386.698162	-386.647696	-386.636603
-386.558224	-386.487497	-386.462981	-386.222605	-381.815411
-381.767735	-381.727759	-381.719183	-381.669891	-303.917274
-303.436081	-301.958297	-301.480744	-107.033698	-106.805053
-105.100552	-104.815017	-102.022147	-74.405387	-74.243675
-74.173846	-73.853606	-72.479997	-72.283755	-72.098376
-71.809768	-71.092226	-70.762297	-70.536886	-70.344682
-68.953792	-68.681835	-68.628882	-44.262642	-42.695489
-41.456881	-41.184004	-28.346892	-26.336667	-22.804738
-20.422297	-19.347370	-19.070146	-18.357552	-17.150140

-16.948002	-16.536992	-15.722875	-15.511786	-15.436377
-14.512444	-13.911901	-13.467198	-13.405309	-13.126568
-12.991484	-12.835118	-12.478799	-12.435075	-12.137230
-11.816183	-11.754214	-11.688634	-11.409698	-11.380997
-11.237074	-11.121748	-11.088460	-10.720887	-10.448361
-10.366861	-10.255323	-10.082489	-9.982720	-9.725862
-8.193801	-7.965505	-7.800011	-7.688021	-7.557580
-7.378640	-5.616983	-4.056856	-3.642379	-3.362369
3.207996	3.370104	4.111053	4.362741	4.833453
6.564572	7.576972	7.680889	7.916256	8.075199
8.615431	9.327883	11.562289	12.411403	12.695355
13.919826	14.257945	15.025159	15.202301	15.940055
16.479596	16.710315	17.520796	18.089040	19.162994
23.884215	25.103758	25.283799	25.931639	54.930456
57.034291	57.741077	58.702869	61.903111	5590.372198
5591.024198	5591.575925	5592.752212	5595.641535	

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

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

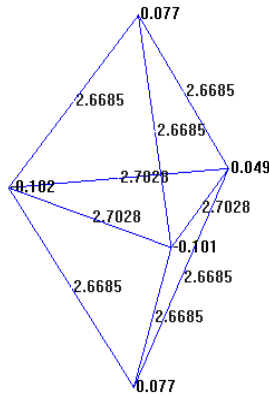
PVDF+Ag₅ nanokompozit üçün alınmış nəticələrin interpretasiyası.

PVDF+Ag₅ nanokompozitin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{150} = -3.362369\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{151} - \varepsilon_{150} = 6.570365\text{eV}$. Bu işə nanokompozitin dielektrik material olduğunu göstərir. Nanokompozitin möhkəmliyi $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO}) = 3..2851825\text{a.v.}$, burada $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{151} = 3.207996\text{eV}$ $\varepsilon_{YMO} = \varepsilon_{150} = -3.362369\text{eV}$. $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan PVDF+Ag₅ nanokompoziti

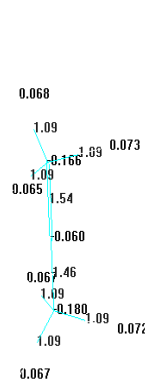
möhkəm material hesab olunur. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{151} = 3.207996\text{eV}$ ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi müsbət işarəli olduğuna görə PVDF+Ag₅ nanokompoziti nuklefidir. Nanokompozitinin stabilliyi

$\mu(PVDF + Ag_5) = E_{PVDF+Ag_5} - \frac{5}{2} \cdot E_{Ag_2} - 2E_{C_2} - 2E_{H_2} - 2E_{F_2}$ düsturu ilə hesablanır. $E_{PVDF+Ag_5}$ -PVDF+Ag₅ nanokompozitinin, E_{Ag_2} -Ag₂ molekulinun, E_{C_2} -C₂ molekulinun, E_{H_2} - H₂ molekulinun və E_{F_2} - F₂ molekulinun tam enerjisidir. $E_{Ag_5} = -26292.60075\text{a.v.}$, $E_{Ag_2} = -10299.14996\text{a.v.}$, $E_{C_2} = -74.31543142\text{a.v.}$, $E_{H_2} = -1.111298185\text{a.v.}$, $E_{F_2} = -195.9593201\text{a.v.}$ olduğundan $\mu(PVDF + Ag_5) = -1.953761166\text{a.v.}$ $\mu(PVDF + Ag_5) < 0$ olduğundan PVDF+Ag₅ nanokompoziti stabildir.

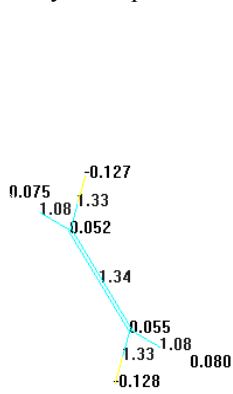
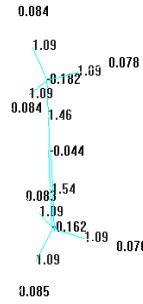
Atomların hesablanmış effektiv yükləri əsasında Ag₅ nanohissəciyinin, PP+Ag₅ və PVDF+Ag₅ nanokompozitlərinin molekulyar diaqramları qurulmuşdur. Diaqramlarda rabitə uzunluqların qiymətləri Anqstremlərlə verilmişdir.



Şək. 4. Ag₅ nanohissəciyinin molekulyar diaqramı



Şək. 5. PP+Ag₅ nanokompozitinin molekulyar diaqramı



Şək. 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 daxil olan atomların effektiv yükləri hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, gümüş nanohissəciyi və onun PP+Ag₅, PVDF+Ag₅ nanokompozisiyaları möhkəm, nüklefil və stabil dielektrik materiallardır.

ƏDƏBİYYAT

1. 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.
2. Həsənov A.Q. Qrafenin riyazi modelləşdirilməsi və kompüter tədqiqi. BDU-nun xəbərləri, №2, 2011, s.171-179.
3. Бьюрков В.В., Орликовский А.А., Семенихин И.А., Негров Д.В., Озерин А.Ю., Свинцов Д.А. Математическое и компьютерное моделирование наносистем. Учеб. пособие, М., 2011, 152 с.
4. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов на/Д: Феникс, 2010, 560 с.
5. 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, p. 3990-3994(5).
6. Игнатов С.К. Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности. Часть 1, Нижний Новгород, 2006, 82 с.
7. 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.

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦЫ СЕРЕБРА И ЕГО НАНОКОМПОЗИЦИЙ

Ф.Г.ПАШАЕВ, А.Г.ГАСАНОВ

РЕЗЮМЕ

Построена теоретическая визуальная модель наночастицы серебра и его наноконпозиций. Эти модели исследованы методом Хартри-Фока-Рутана. Результаты расчетов показывают, что наночастицы серебра и его наноконпозиций PP+ Ag₅, PVDF+ Ag₅ являются жесткими, нуклеофильными и устойчивыми диэлектрическими материалами. Вычислены эффективные заряды атомов и построены молекулярные диаграммы этих наноструктур.

Ключевые слова: квантово-механическое вычисление, нанотехнология, компьютерное моделирование.

QUANTUM MECHANICAL INVESTIGATION OF THE SILVER NANOPARTICLES AND THEIR NANOCOMPOSITES

F.G.PASHAYEV, A.G.HASANOV

SUMMARY

The theoretical visual model was constructed for the silver nanoparticles and their nanocomposites. These models were investigated by Hartree-Fock-Roothan method. The results of the calculations show that the silver nanoparticles and their PP+ Ag₅ and PVDF+ Ag₅ nanocomposites are tough, nucleophile and stable dielectric materials. The partial charge of atoms is calculated and the molecular diagrams of these nanostuctures are constructed.

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

Redaksiyaya daxil oldu: 30.01.2013-cü il

Çapa imzalandı: 06.03.2013-cü il