

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

ALÜMINIUM NANOHISSƏCİYİ VƏ ONUN NANOKOMPOZİSİYALARININ MODELLEŞDİRİLMƏSİ VƏ SIXLIQ FUNKSIONALI NƏZƏRİYYƏSİ METODU İLƏ TƏDQIQI

A.Q.HƏSƏNOV

Bakı Dövlət Universiteti

hasanovarzman@hotmail.com

Alüminium nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının nəzəri vizual modelləri qurulmuşdur. Bu modellər əsasında Sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi (SFN) metodu ilə kompüter hesablamaları aparılmışdır. Atom orbitalları olaraq Al atomlarının 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, 3s-, 3p_x-, 3p_y-, 3p_z-, C və F atomlarının 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, H atomlarının isə 1s- orbitallarından istifadə edilmişdir. Atom orbitalları kimi Gauss funksiyalarından istifadə olunmuşdur. Hesablamalar nəticəsində alüminium nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektron enerjisinin qiymətləri hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, Al₈ nanohissəciyi və onun PP+Al₈, PVDF+Al₈ nanokompozisiyaları yumşaq, elektrofil və stabil keçirici materiallardır. Alüminium nanohissəciyi və onun PP+Al₈, PVDF+Al₈ nanokompozisiyalarına daxil olan atomların effektiv yükləri hesablanmışdır və onların molekulyar diaqramları qurulmuşdur.

Açar sözlər: Nanotexnologiya, kompüter modelləşdirmə, kvantmexaniki hesablama.

1. İsfadə olunan metod

Alüminium nanohissəciklərinin nanoelektronikada, nanofotonokada, nanobiotexnologiyada, tibdə və kosmonavtikada geniş tətbiq sahələri vardır. Buna görə də alüminium nanohissəcikləri və onların nanokompozisiyalarının elektron quruluşunun kvantmexaniki metodla öyrənilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır [1, 3]. Təqdim olunan işdə alüminium nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının elektron quruluşu və xassələri Sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsi (SFN) metodu ilə öyrənilmişdir. SFN metodu daha yüksək hesablama dəqiqliyinə malikdir və obyektin real elektron quruluşunu təsvir etməyə imkan verir. SFT metodunda sistemin halı

$\rho(\vec{r})$ elektron sıxlığı funksionalı vasitəsilə təyin olunur və

$$\rho(\vec{r}) = \int \dots \int |\Phi_e|^2 d\sigma_1 d\sigma_2 \dots d\sigma_N \quad (1)$$

düsturu ilə təyin olunur. Burada Φ_e - sistemin dalğa funksiyası, $d\sigma_i$ i -ci elektronun fəza və spin koordinatları yığıdır. $\rho(\vec{r})$ elektronların fəza və spin koordinatlarının funksiyası olub, sistemə daxil olan elektronlardan hər hansı birinin aşkar olunması ehtimalını göstərir. Sistemin elektron enerjisi

$$E[\rho] = T[\rho] + V_{en}[\rho] + V_{ee}[\rho] \quad (2)$$

düsturu ilə hesablanı bilər. Burada $T[\rho]$ - sistemin kinetik enerjisi, $V_{en}[\rho]$ - elektronların nüvə ilə qarşılıqlı təsir, $V_{ee}[\rho]$ - elektronlar arasındakı qarşılıqlı təsir enerjiləridir. $V_{ee}[\rho]$ potensial enerjisi, $V_{ee}[\rho] = V_{coul}[\rho] + V_{xc}[\rho]$ düsturu ilə hesablanır. Burada $V_{coul}[\rho]$ - elektronların kulon qarşılıqlı təsir, $V_{xc}[\rho]$ mübadilə-korrelyasiya enerjiləridir. $T[\rho]$, $V_{en}[\rho]$ və $V_{coul}[\rho]$ Kon-Şem metodu ilə tapıla bilər. Bu halda $\rho(\vec{r})$ aşağıdakı kimi təyin olunur:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{m=1}^N \left| \psi_m(\vec{r}) \right|^2 \quad (3)$$

Burada $\psi_m(\vec{r})$ - Kon-Şem orbitalı olub Xartri-Fok orbitalından $V_{xc}[\rho]$ mübadilə-korrelyasiya potensialının olması ilə fərqlənir. $V_{xc}[\rho]$ mübadilə-korrelyasiya potensialının dəqiq ifadəsi məlum olmadığına görə əlavə yaxınlaşmalardan istifadə olunur. Belə yaxınlaşmalardan biri Lokal sıxlıq yaxınlaşması olub elektronun lokal xassələrindən asılıdır. Bu yaxınlaşmada $V_{xc}[\rho] = \int dr \rho(\vec{r}) E_{xc}(\rho(\vec{r}))$

kimi hesablanır. Burada $E_{xc}(\rho(\vec{r}))$ 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. $V_{xc}[\rho]$ 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. $V_{xc}[\rho]$

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

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2} + V_{eff}(\vec{r}) \right) \psi_m(\vec{r}) = \epsilon_m \psi_m(\vec{r}). \quad (4)$$

Nəticədə ϵ_m -elektronların orbital enerjilərinin qiymətləri və $\psi_m(\vec{r})$ funksiya-

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

Burada $V_{eff}(\vec{r}) = V_{ex}(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) + \int \left(\rho(\vec{r}') \left| \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right| \right) d\vec{r}'$ kimi təyin olunur və $V_{ex}(\vec{r})$ - xarici effektiv sahənin potensialı, $V_{xc}(\vec{r})$ - mübadilə potensialı və

$V_H(\vec{r}) = \int \left(\rho(\vec{r}') \left| \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right| \right) d\vec{r}'$ - Xarici potensialını xarakterizə edir. $V_{eff}(\vec{r})$ isə sistemin effektiv sahəsinin potensialıdır. $V_{eff}(\vec{r})$ məlum olarsa onda elektron sıxlığı

$\rho(\vec{r}) = \gamma \left(\lambda - V_{eff}(\vec{r}) \right)^{3/2}$ olar. Burada $\gamma = \left(\frac{3}{5C} \right)^{3/2}$, $C = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3}$, μ və λ sistemin kim-

yəvi potensialını xarakterizə edir. Beləliklə, sistemin elektron enerjisi və digər fiziki-kimyəvi kəmiyyətlərin qiymətlərini hesablamaq olar:

$$E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i - \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' - \int V_{xc}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} + E_{xc}(\rho(\vec{r})) \quad (5)$$

burada N elektronların sayıdır. ε_i -məxsusi qiymətləri əsasında alüminium nanohissəciyi və onun PP+Al₈, PVDF+Al₈ nanokompozisiyalarının tam enerjisini, ionlaşma potensialının qiymətini, elektrik keçiriciliyini, möhkəmliyini və s. tədqiq etmək olar. Hesablamalar zamanı χ_q 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.

2. 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

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

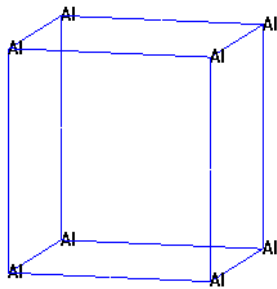
düsturu ilə müəyyən olunur[6]. Burada N – atomların sayı, M-atomun molyar kütləsi, ρ -materialın sıxlığı və N_A -Avaqadro ədədidir. N=8 sayda alüminium atomundan ibarət nanohissəciyin (6) düsturu ilə hesablanmış ölçüsü D=0,63nm alınır. Hesablamalar zamanı hər Al atomundan 9 olmaqla 72 atom orbitalından istifadə edilmişdir. (1) düsturu əsasında 72 sayda molekulyar orbital qurulmuşdur. Nanohissəciyin 13*8=104 sayda elektronu ən aşağı enerjili 52 enerji səviyyəsini doldurur. Şəkil 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

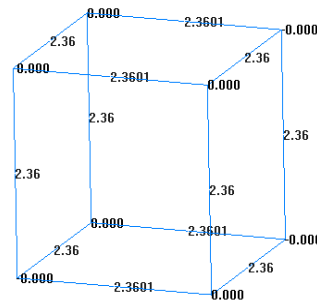
ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)		
		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

Al₈ nanohissəciyi üçün alınmış 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: $I_p = -\varepsilon_{52} = 3.715706\text{eV}$ [4]. 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 elektrofilidir. 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, $\Delta E(\text{Al}_8) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. E_{Al_8} - Al₈ nanohissəciyinin, E_{Al_2} - Al₂-nin hesablanmış tam enerjisidir. $E_{\text{Al}_8} = -1928.9872926$ a.v., $E_{\text{Al}_2} = -482.1626203$ a.v. olduğundan $\Delta E(\text{Al}_8) = -0.3368114$ a.v. $\Delta E(\text{Al}_8) < 0$ olduğundan Al₈ nanohissəciyi stabildir.



Şək. 1. Al₈ nanohissəciyi



Şək. 2. Al₈ nanohissəciyinin molekulyar diaqramı

3. PP+Al₈ nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları

PP+Al₈ nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki C₃H₆ polimeri arasın-

da 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 2-də PP+ Al_8 nanokompoziti üçün seçilmiş nəzəri modelin fəza quruluşu şəkil 3-də verilmişdir.

Tam enerji = -2452.4876064 (a.v.), Elektronların kinetik enerjisi = 2126.285389224 (a.v.)

Karelyasiya enerji = -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

PP+ Al_8 nanokompoziti üçün alınmış nəticələrin interpretasiyası.

$\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{77} = -102.463501\text{eV}$. $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{76} = -103.912029\text{eV}$. PP+ Al_8 nanokompozitinin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{76} = -103.912029\text{eV}$.

Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO} = 1.448528\text{eV}$. Bu isə

PP+ Al_8 nanokompozitinin keçirici material olduğunu göstərir.

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

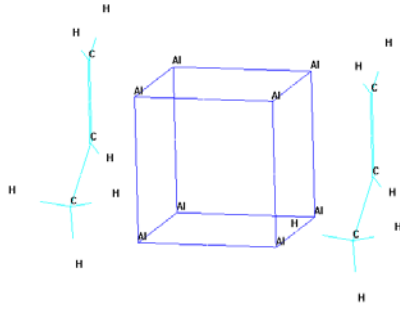
$\eta = 0.724264\text{a.v.}$ $\eta < 1\text{eV}$ olduğundan PP+ Al_8 nanokompoziti yumşaq material

hesab olunur. ε_{ABMO} mənfi işarəli olduğuna görə PP+ Al_8 nanokompoziti

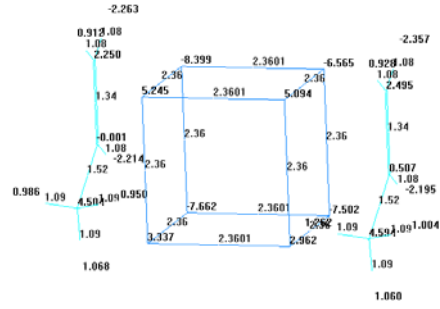
elektrofiledir. PP+Al₈ nanokompozitinin stabilliyi

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

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. $E_{PP+Al_8} = -2452.487606$ a.v., $E_{Al_2} = -482.1626203$ a.v., $E_{C_2} = -76.0153893$ a.v., $E_{H_2} = -1.1770491$ a.v., olduğundan $\Delta E(PP + Al_8) = -288.7286627$ a.v. $\Delta E(PP + Al_8) < 0$ olduğundan PP+Al₈ nanokompoziti stabildir.



Şək. 3. PP+Al₈ nanokompoziti



Şək. 4. PP+Al₈ nanokompozitinin molekulyar diaqramı

4. 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 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 KOORDİNLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları (Anqstremlə)		
			x	y	z
1	13	5.228847	-1.23378679	-0.66354639	-1.09908805
2	13	-10.462091	1.12625007	-0.66354673	-1.09908805
3	13	9.149839	-1.23378679	1.69649002	-1.09908805
4	13	-7.589187	1.12625007	1.69649002	-1.09908805
5	13	-8.800412	1.12625007	1.69649002	1.26096705
6	13	3.392129	-1.23378735	1.69649002	1.26096705
7	13	3.220107	-1.23378735	-0.66354704	1.26096705
8	13	-9.078213	1.12625007	-0.66354724	1.26096705
9	6	2.891050	-0.38036534	-0.38397900	2.63470800
10	6	3.442811	-0.38036534	0.95602100	2.63470800
13	9	5.671773	-1.53217913	-1.04897900	2.63470800

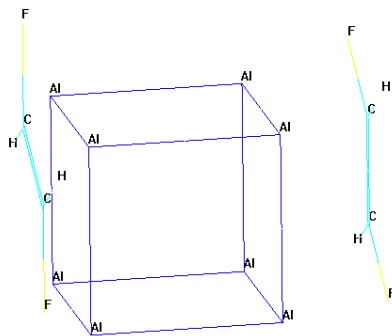
14	9	-0.637222	0.77144844	1.62102100	2.63470800
15	9	4.369657	-0.08480901	-1.94663401	-1.66198900
16	6	3.647599	-0.08480901	-0.61663401	-1.66198900
17	6	-2.948064	1.07566503	0.05336599	-1.66198900
20	9	0.676586	1.07566503	1.38336599	-1.66198900
11	1	-1.413917	0.55494209	-0.92397900	2.63470800
18	1	-2.736886	2.01097247	-0.48663401	-1.66198900
19	1	0.992459	-1.02011645	-0.07663401	-1.66198900
12	1	0.982912	-1.31567278	1.49602100	2.63470800

PVDF+Al₈ nanokompoziti üçün alınmış nəticələrin interpretasiyası.

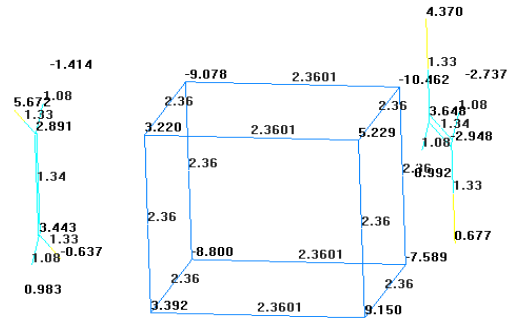
$\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{85} = -91.042701\text{eV}$ $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{84} = -91.562537\text{eV}$. PVDF+Al₈ nanokompozitin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = \varepsilon_{YTMO} = 91.562537\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO} = 0.519836\text{eV}$. Bu isə nanokompozitin keçirici material olduğunu göstərir. Nanokompozitin möhkəmliyi $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO}) = 0.259918\text{a.v.}$ düsturu ilə hesablanır. $\eta < 1\text{eV}$ olduğundan PVDF+Al₈ nanokompoziti yumşaq material hesab olunur. ε_{ABMO} mənfi işarəli olduğuna görə PVDF+Al₈ nanokompoziti elektrofildir.

Nanokompozitin stabilliyi $\Delta E(PVDF + Al_8) = E_{PVDF+Al_8} - 4 \cdot E_{Al_2} - 2E_{C_2} - 2E_{H_2} - 2E_{F_2}$ düsturu ilə hesablanır. $E_{PVDF+Al_8}$ - PVDF+Al₈ nanokompozitinin, E_{Al_2} - Al₂-nin, E_{C_2} - C₂-nin, E_{H_2} - H₂ molekulunun və E_{F_2} - F₂-nin tam enerjisidir. $E_{PVDF+Al_8} = -2711.6071413$ a.v., $E_{Al_2} = -482.1626203$ a.v., $E_{C_2} = -76.0153893$ a.v., $E_{H_2} = -1.1770491$ a.v., $E_{F_2} = -198.7541458$ a.v. olduğundan $\Delta E(PVDF + Al_8) = -231.0634917$ a.v. $\Delta E(PVDF + Al_8) < 0$ olduğundan PVDF+Al₈ nanokompoziti stabildir.

Atomların hesablanmış effektiv yükləri əsasında Al₈ nanohissəciyinin, PP+Al₈ və PVDF+Al₈ nanokompozitlərinin molekulyar diaqramları qurulmuşdur. Diaqramlarda rabitə uzunluqların qiymətləri Anqstremlərlə verilmişdir (şəkil 2, 4, 6).



Şəkil 5. PVDF+Al₈ nanokompoziti



Şəkil 6. PVDF+Al₈ nanokompozitinin molekulyar diaqramı

5. Nəticə

Alüminium nanohissəciyi və onun PP+Al₈, PVDF+Al₈ nanokompozisiyaları SFN metodu ilə kompüterdə tədqiq olunmuşdur. Alüminium 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, alüminium nanohissəciyi və onun PP+Al₈, PVDF+Al₈ nanokompozisiyaları yumşaq, elektrofil və stabil keçirici materiallardır.

ƏDƏBİYYAT

1. Заводинский В.Г. Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем. Институт материаловедения ХИЦ ДВО РАН, 2012, 137 с.
2. Həsənov A.Q. Qrafenin riyazi modelləşdirilməsi və kompüter tədqiqi. BDU-nun xəbərləri, №2, 2011, s.171-179.
3. 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, М.: ОАО «Можайский полиграфический комбинат» 2011, 152 с.
4. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул, Ростов на/Д: Феникс, 2010, 560 с.
5. Brian J. Bellott. Synthesis, characterization, and reactivity of volatile compounds for materials applications. Doctor dissertation, University of Illinois at Urbana-Champaign, 2010, 199 p.
6. 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.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦЫ АЛЮМИНИУМА И ЕГО НАНОКОМПОЗИЦИЙ С МЕТОДОМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

А.Г.ГАСАНОВ

РЕЗЮМЕ

Построена теоретическая визуальная модель наночастицы алюминия и его наноконпозиций. На основе этих моделей проведены компьютерные вычисления методом Теории Функционала плотности (ТФП). В качестве атомных орбиталей использованы 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, 3s-, 3p_x-, 3p_y-, 3p_z-, орбитали атомов Al, 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z- орбитали атомов C и F, 1s- орбитали атомов H типа функций Гаусса. В результате расчетов вычислены орбитальные энергии, потенциал ионизации, полная электронная энергия. Результаты расчетов показывают, что наночастицы алюминия и его наноконпозиции PP+Al₈, PVDF+Al₈ являются мягкими, электрофильными и устойчивыми проводящими материалами. Вычислены эффективные заряды атомов и построены молекулярные диаграммы наночастицы алюминия и его наноконпозиций.

Ключевые слова: нанотехнология, компьютерное моделирование, квантовомеханическое вычисление

MODELING AND INVESTIGATION OF ALUMINIUM NANOPARTICLES AND ITS NANOCOMPOSITES BY THE METHOD OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY

A.G.HASANOV

SUMMARY

The theoretical visual model was constructed for aluminium nanoparticles and their nanocomposites. These models have been studied by Density Functional Theory (DFT) method 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, 3s-, 3p_x-, 3p_y-, 3p_z-, atomic orbitals of Al, 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z- atomic orbitals of C and F, and 1s- atomic orbitals of the type H used as atomic orbitals. As atomic orbitals were used Gauss functions. The orbital energies, potential ionization, the total electronic energy were calculated. The results of calculations show that aluminium nanoparticles and PP+Al₈ PVDF+Al₈ nanocomposites are soft, electrophile and stable conductive materials. The partial charge of atoms has been calculated and the molecular diagrams for aluminium nanoparticles and nanocomposites have been constructed.

Key words: Nanotechnology, computer modeling, quantum mechanical calculation.

Redaksiyaya daxil oldu: 23.05.2013-cü il

Çapa imzalandı: 17.10.2013-cü il