

METAL OKSİD TƏRKİBLİ BƏZİ NANOHISSƏCİKLƏRİN MEXANİKİ XASSƏLƏRİNİN KVANT MEXANİKİ TƏDQIQI

A.Q.HƏSƏNOV

Azərbayca Respublikası, Silahlı Qüvvələrin Hərbi Akademiyası
gasqhapk@gmail.com

Metal oksid nanohissəciklərinin mexaniki xassələri onların vizual modelləri əsasında qeyri-empirik və Genişlənmiş Hükkel metodları tətbiq etməklə öyrənilmişdir. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, ölçüləri ~1 nm tərtibində olan metal oksidi nanohissəciklərin mexaniki xassələri, təqribən həcmi metal oksid materialların mexaniki xassələri kimidir.

Açar sözlər: Nanohissəcik, riyazi model, kvantmexaniki metod.

Alüminium oksid, titan oksid, dəmir oksid, silisium dioksid və sirkonium dioksid tərkibli nanohissəciklərin mexaniki xassələrinin kvant mexanikası metodları ilə öyrənilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır. İşdə alüminium, titan, dəmir, silisium və sirkonium oksid nanohissəciklərinin mexaniki parametrlərinin - sərtlik əmsalının, Yunq, sürüşmə, həcmi və möhkəmlik modullarının qeyri-empirik və Genişlənmiş Hükkel metodları tətbiq etməklə hesablanmasına baxılmışdır. MO LCAO yaxınlaşmasına əsasən nanohissəciyin U_i molekulyar orbitalları bu nanohissəcikdəki atomların seçilən atom orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində axtarılmışdır:

$$U_i = \sum_{q=1}^n c_{qi} \cdot \chi_q \quad (1)$$

Burada χ_q - atom orbitallarıdır və məlum hesab olunur. m - bazis funksiyaları kimi seçilən atom orbitallarının sayıdır, c_{qi} - naməlum əmsallarının qiymətləri molekulyar orbitallar metodunun

$$\sum_q (H_{pq} - \varepsilon_i S_{pq}) c_{qi} = 0 \quad (2)$$

tənlikləri həll olunaraq tapılır. H_{pq} effektiv Hamilton operatorunun matris elementləri, S_{pq} örtmə inteqrallarıdır. Hesablamalar eksponensial xarakterli Qauss funksiyaları bazisində aparılmışdır [1, 2].

$$\begin{aligned} \chi_q &\equiv \chi_{nlm}(\mu, r\theta\varphi) \\ &= \left[\frac{2^{2n}(n-1)!}{(2n-1)!} \sqrt{\frac{(2\mu)^{2n+1}}{\pi}} \right]^{1/2} \cdot r^{n-1} \cdot e^{-\mu r^2} \\ &\cdot Y_{lm}(\theta\varphi) \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} &Y_{lm}(\theta\varphi) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_{l|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi} \end{aligned} \quad (4)$$

$P_{l|m|}(\cos\theta)$ – birləşmiş normallanmış Lejandr funksiyasıdır [3]. μ –variasiya parametridir və enerjinin minimumluq şərtindən tapılır. $r\theta\varphi$ – elektronların sferik koordinatlarıdır. (2) tənliləri həll olunaraq qeyd olunan nanohissəciklərin ε_i orbital enerjilərin qiymətləri tapılmış [12-15] və onların əsasında nanohissəciklərin bir sıra xassələri tədqiq olunmuşdur.

Nanohissəciyin elektronları ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir və elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı ε_{HOMO} və ən aşağı boş ε_{LUMO} molekulyar orbitallara uyğun enerjilər müəyyən olunur. Nanohissəciyin ionlaşma potensialı [1] $I_p = -\varepsilon_{HOMO}$, qadağan olunmuş zonanın eni $E_g = \varepsilon_{LUMO} - \varepsilon_{HOMO}$, tam elektron enerjisi $E_{nh} = \sum_i \varepsilon_i$, i – yə görə cəm elektronlar olan molekulyar orbitallar üzrə aparılır və nanohissəciyin stabilliyi $\Delta E = E_{nh} - \sum_A E_A$ kimi hesablanı bilər. E_A bu nanohissəciyə daxil olan atomun sərbəst halda tam elektron enerjiləridir. $\Delta E > 0$ olduqda material qeyri-stabil, $\Delta E < 0$ olduqda material stabil hesab olunur.

Nanohissəciyin mexaniki xassələrinin öyrənilməsində Yunq və möhkəmlik modullarının qiymətlərinin hesablanması vacib məsələdir. Yunq modulunun qiymətini

$$Y = \frac{F}{S} \quad (5)$$

düsturu vasitəsilə hesablamaq olar. Burada Y - Yunq modulu, F – nanohissəciyi parçalamaq üçün qüvvənin qiyməti olub $F \approx \frac{E_b}{r}$ düsturu ilə hesablanır, $S = \pi \cdot \left(\frac{D}{2}\right)^2$ nanohissəciyin en kəsiyinin sahəsidir, E_b – nanohissəciyi rabitə enerjisinin qiyməti olub $E_b = |\Delta E|$ düsturu ilə ifadə olunur, r - atomlar arası rabitənin uzunluğudur və atomların dekart koordinatları əsasında tapılır.

Nanohissəciyin k sərtlik əmsalının [11], G sürüşmə, K həcmi elastiki və HN möhkəmlik modullarının qiymətlərinin hesablanması üçün isə [2, 6-10] - də verilən

$$k = \frac{Y \cdot S}{D}, \quad G = \frac{Y}{2 \cdot (1 + \nu)}, \quad K = \frac{Y}{3 \cdot (1 - 2\nu)}, \quad HN = G \cdot A \cdot e^{-B \cdot T} \quad (6)$$

düsturlərindən istifadə etmək olar. Burada ν Puasson əmsalı [6], nanohissəciklər üçün müəyyən təcrübi faktlar əsasında təyin olunur. Metal oksid nanohissəciklər üçün A kəmiyyətinin qiyməti $A = 0.0807$ və B eksponensial parametrlərinin qiyməti isə $B = 2.204 \cdot 10^{-3} 1/K$, $T = 300^0 K$.

Kvantmexaniki kompüter hesablamaları

Qurulmuş vizual modellər (şəkil 1-5) əsasında $(Al_2O)_6$, $(TiO_2)_6$, $(Fe_3O_4)_4$, $(SiO_2)_6$ və $(ZrO_2)_6$ üçün energetik parametrlərinin qiymətləri kompüterdə hesablanmışdır [12-15]. Nəticələr cədvəl 1-də verilmişdir.

Cədvəl 1

$(Al_2O)_6$, $(TiO_2)_6$, $(Fe_3O_4)_4$, $(SiO_2)_6$ və $(ZrO_2)_6$ üçün energetik parametrlərinin kompüterdə hesablanmış qiymətləri

N	Nano-hissəcik	Kvantmexaniki metod	\mathcal{E}_{HOMO}	\mathcal{E}_{LUMO}	E (a.v.)	ΔE (a.v.)	I_p (eV)	E_g (eV)
1	$(Al_2O)_6$	Genişlənmiş Hükkel	-7.790344	-7.572039	-44.677468	-0.645	7.79	0.218
2	$(TiO_2)_6$	Qeyri-empirik	-2.199590	1.027713	-5926.0243825	-4.777	2.20	3.227(3.3)
3	$(Fe_3O_4)_4$	Genişlənmiş Hükkel	-11.07594	-10.802278	-404.9349487	-0.514	11.08	0.274
4	$(SiO_2)_6$	Qeyri-empirik	-7.440391	5.449863	-2600.645508	-4.113	7.44	12.890
5	$(ZrO_2)_6$	Qeyri-empirik	-6.538526	3.105533	-32876.58817	-7.393	6.54	9.644

Cədvəl 1-dəki qiymətlərə əsasən $(Al_2O)_6$, $(TiO_2)_6$, $(Fe_3O_4)_4$, $(SiO_2)_6$ və $(ZrO_2)_6$ nanohissəciklərinin mexaniki parametrlərinin - k sərtlilik əmsalının [11], Y Yunq, G sürüşmə, K həcmi elastiki və HN möhkəmlik modullarının [2, 5 - 7] qiymətlərini hesablamaq olar. Bunun üçün hər bir nanohissəcik üçün cədvəl 2-də verilmiş rabitə enerjisinin $E_b = |\Delta E|$, atomlar arası rabitə uzunluğunun r , ölçüsünü D , en kəsiyinin sahəsini S , parçalama qüvvəsini F və Puasson əmsalının ν qiymətlərini (5) - (6) düsturlarında nəzərə alıb hesablamaq olar. Nəticələr cədvəl 3-də verilmişdir. Mötərizə daxilində verilmiş qiymətlər həmin kəmiyyətlərin digər üsullar hesablanmış qiymətləridir. Brijesh K.Pandey və Ratan L.Jaiswal tərəfindən verilmiş metodika[8] ilə ixtiyari ölçülü (D) nanohissəcik üçün mexaniki parametrlərinin qiymətlərini hesablamaq mümkündür deyildir.

$(Al_2O)_6$, $(TiO_2)_6$, $(Fe_3O_4)_4$, $(SiO_2)_6$ və $(ZrO_2)_6$
 üçün bəzi kəmiyyətlərin kompüterdə hesablanmış qiymətləri

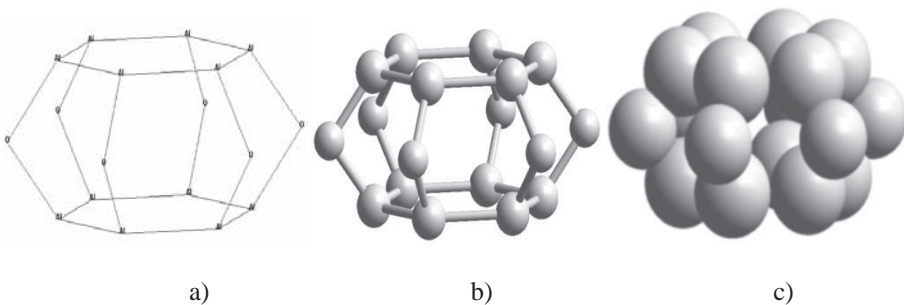
N-si	Nano-hissəcik	E_b (J)	r (m)	D (m)	S (m^2)	F (N)	ν
1	$(Al_2O)_6$	$2.807 \cdot 10^{-18}$	$0.214 \cdot 10^{-9}$	$1.11 \cdot 10^{-9}$	$9.677 \cdot 10^{-19}$	$1.315 \cdot 10^{-8}$	0.27
2	$(TiO_2)_6$	$1.984 \cdot 10^{-17}$	$0.174 \cdot 10^{-9}$	$0.92 \cdot 10^{-9}$	$6.648 \cdot 10^{-17}$	$1.195 \cdot 10^{-7}$	0.35
3	$(Fe_3O_4)_4$	$1.984 \cdot 10^{-17}$	$0.190 \cdot 10^{-9}$	$1.44 \cdot 10^{-9}$	$5.807 \cdot 10^{-19}$	$1.182 \cdot 10^{-8}$	0.336
4	$(SiO_2)_6$	$1.791 \cdot 10^{-17}$	$0.186 \cdot 10^{-9}$	$0.854 \cdot 10^{-9}$	$5.728 \cdot 10^{-19}$	$9.629 \cdot 10^{-8}$	0.26
5	$(ZrO_2)_6$	$3.219 \cdot 10^{-17}$	$0.219 \cdot 10^{-9}$	$1.100 \cdot 10^{-9}$	$9.503 \cdot 10^{-19}$	$2.499 \cdot 10^{-7}$	0.19

$(Al_2O)_6$, $(TiO_2)_6$, $(Fe_3O_4)_4$, $(SiO_2)_6$ və $(ZrO_2)_9$
 üçün mexaniki parametrlərinin hesablanmış qiymətləri

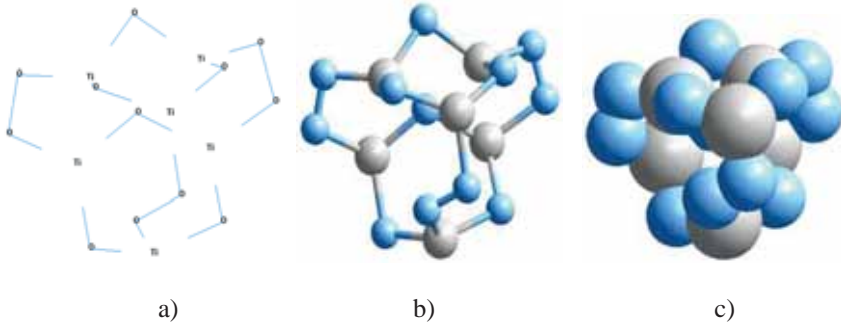
Nö sıra nömrəsi	Nano-hissəcik	Sərtlik əmsalı k N/m	Sürüşmə modulu G (GPa)	Həcmi elastiki modul K (GPa)	Yunq modulu Y (GPa)	Möhkəmlik modulu HN (GPa)
1	$(Al_2O)_6$	11.85	5.35	9.849	13.59	0.223
2	$(TiO_2)_6$	129.93	66.60	199.8	179.8	2.774
3	$(Fe_3O_4)_4$	13.54	7.42	20.14	19.82	0.310
4	$(SiO_2)_6$	112.75	66.7	116.7	168.1	2.779
5	$(ZrO_2)_9$	133.819	65.09	83.22	154.9 (171-186)	2.712

NƏTİCƏ

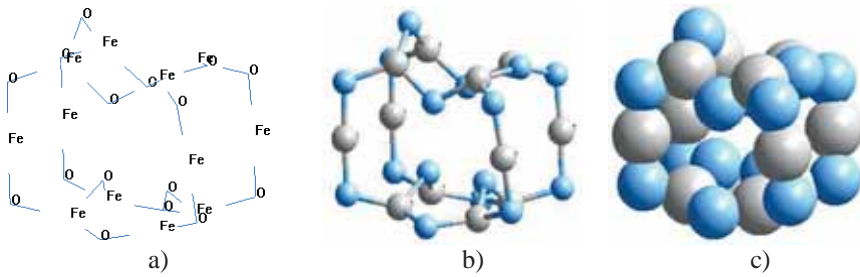
Alüminium oksid, titan oksid, dəmir oksid, silisium dioksid və sirkonium dioksid nanohissəciklərinin mexaniki xassələri qeyri-empirik və genişlənməmiş Hükkel metodları istifadə etməklə öyrənilmişdir. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, ölçülüləri $\sim 1 \text{ nm}$ tərtibində olan metal oksid nanohissəciklərin mexaniki xassələri, təqribən həcmi metal oksid materialların mexaniki xassələri kimidir.



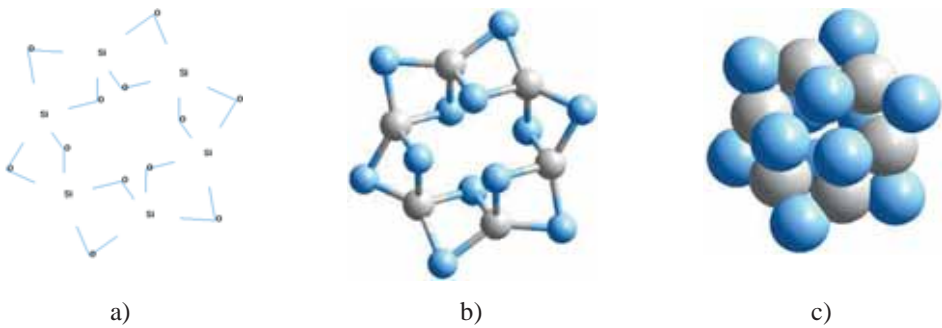
a) b) c)
Şək. 1. $(Al_2O)_6$ nanohissəciyinin vizual modelləri
 (a - xətlə, xətt və kürələrlə, c- kürələrlə göstərilib)



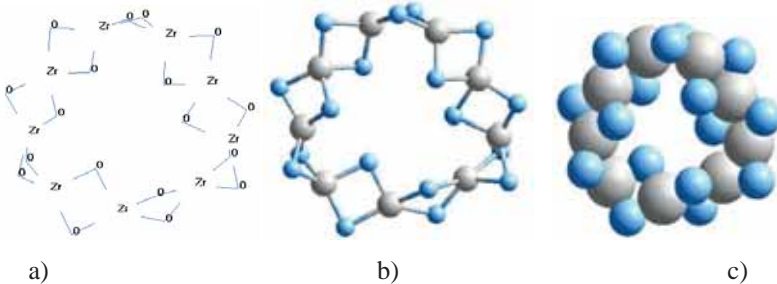
Şəkl. 2. $(TiO_2)_6$ nanohissəciyinin vizual modelləri (a - xətlə, xətt və kürələrlə, c- kürələrlə göstərilib)



Şəkl. 3. $(Fe_3O_4)_4$ nanohissəciyinin vizual modelləri (a - xətlə, xətt və kürələrlə, c- kürələrlə göstərilib)



Şəkl. 4. $(SiO_2)_6$ nanohissəciyinin vizual modelləri (a - xətlə, xətt və kürələrlə, c- kürələrlə göstərilib)



Şəkl. 5. $(ZrO_2)_9$ nanohissəciyinin vizual modelləri (a - xətlə, xətt və kürələrlə, c- kürələrlə göstərilib)

ƏDƏBİYYAT

1. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов - на Дону: Феникс, 2010, 560 с.
2. Gasanov A. G. and Bairamov A. A. Simulation of the Electronic Structure of Graphene – Polyvinylidene Fluoride Composite Material // Physics of the Solid State, 2019, Vol. 61, No. 1, pp. 208–213, impact factor 0.95
3. Paşayev F.H., Həsənov A.Q. Atom və molekul fizikasında riyazi metodlar. Dərs vəsəti, Bakı: Müəllim, 2013, 124 s.
4. Grandshteyn I.S. and Ryzhik I.M. Tables of integrals, sums, series and products. New York: Academic Press, 2000, 720 p.
5. Openov L. A. and Podlivaev A. I. Physics of the Solid State, 59, 1267 (2017).
6. J.-W. Jiang, H.S. Park. Nano Lett. 16, 2657 (2016).
7. Dan Guo, Guoxin Xie and Jianbin Luo. Mechanical properties of nanoparticles: basics and applications. J. Phys. D: Appl. Phys. 47 (2014) 013001 (25pp).
8. Brijesh K. Pandey, Ratan L. Jaiswal. Prediction of elastic moduli of metallic nanoparticles. International Journal of Materials Science, Volume 12, Number 1(2017)
9. Черняева Т.П., Грицина В.М., Михайлов Е.А., Остапо А.В. Корреляция между упругостью и другими свойствами циркония. Вопросы атомной науки и техники. 2009. №4-2.Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение (94), с. 206-217.
10. Wolfsberg M, Helmholz L. J. Chem. Phys., 1952; 20: 837.
11. Упругие и прочностные характеристики материалов - Доктор Лом. 07.06.2018, <http://doctorlom.com/item318.html>
12. Həsənov A.Q. Sirkonim dioksid nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının modelləşdirilməsi və tədqiqi // Kimya problemləri, 2013, N 3, s.317-324
13. Ramazanov M.Ə., Paşayev F.H., Həsənov A.Q. və b. Titan dioksid nanohissəciyinin modelləşdirilməsi və tədqiqi // BDU-nun xəbərləri, fiz.-riy., elmləri seriyası, 2014, №3, s.86-92
14. Gasanov A.G., Bayramov A.A., Hashimov E.G. Mathematical modeling of the electron structure of SiO₂ nanoparticle // AJP FİZİKA 2017, volume XXIII, Number 1, Section: En, s.34-39
15. Paşayev F.H., Həsənov A.Q., Vahabova M.R. və b. (Al₂O)₆ nanohissəciklərinin riyazi modelləşdirilməsi və energetik parametrlərinin təyini // AzTU, Elmi əsərləri, texniki elmlər, 2017, № 4, s.133-137

ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НЕКОТОРЫХ МЕТАЛ СУЛФИД СОДЕРЖАЩИЙ НАНОЧАСТИЦ С КВАНТОМЕХАНИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

А.Г.ГАСАНОВ

РЕЗЮМЕ

Механические свойства наночастиц алюминия оксид, титан оксид, феррум оксид, силициум диоксид и сирконий диоксида были изучены с использованием, неэмпирический и расширенного метода Хьюккеля. Расчеты проводились на основе визуальных моделях этих наночастиц. Результаты показывают, что механические свойства мелких (~ 1 нм) металл оксид наночастиц почти совпадают с механическими свойствами металл оксид материалов.

Ключевые слова: наночастицы, математическая модель, квантовомеханический метод

STUDING MECHANICAL PROPERTIES SOME METAL OKSIDE CONTAINING NANOPARTICLES BY QUANTUM METHODS

A.G.GASANOV

SUMMARY

Mechanical properties of aliminum okside, titanium diokside, ferrium okside, silisium diokside and sirconium diokside have been studied using the non empirical and the Extended Hukkel methods. The calculations was carried out on the base visual models of these nanoparticles. The results show that the mechanical properties of smal (~ 1 nm) metal okside nanoparticles are the same as the mechanical properties of bulk metal okside materials.

Key words: Nanoparticles, mathematical model, quantum mechanical method.

Redaksiyaya daxil oldu: 25.02.2020-ci il

Çapa imzalandı: 22.10.2020-ci il