

PP+(PbS)₈+(CdS)₉ NANOKOMPOZİTİNİN ELEKTRON QURULUŞUNUN YARIMEMPİRİK PM3 METODU İLƏ RİYAZİ MODELƏŞDİRİLMƏSİ

MƏHƏMMƏDƏLİ Ə. RAMAZANOV², ARZUMAN Q. HƏSƏNOV¹,
FAİQ H. PAŞAYEV², MİNA R. VAHABOVA²

¹Silahlı Qüvvələrin Hərbi Akademiyası.

Bakı Dövlət Universiteti, Z. Xəlilov küç., 23, AZ-1148

E-mail: hasanovarzuman@hotmail.com

PP+(PbS)₈+(CdS)₉ nanokompozitinin modeli qurulmuş və elektron quruluşu molekulyar orbitallar metodunun variantlarından biri olan yarımempirik PM3 metodu ilə tədqiq olunmuşdur. Molekulyar orbitallar nanokompozitinin atomlarının valent atom orbitallarının xətti kombinasiyaları şəklində axtarılmışdır. Xətti kombinasiyanın naməlum əmsalları molekulyar orbitallar metodunun tənlikləri həll olunaraq tapılmışdır. Hesablamalar nəticəsində PP+(PbS)₈+(CdS)₉ nanokompozitinin orbital enerjilərinin, ionlaşma potensialının, tam elektron enerjisinin qiymətləri və s. hesablanmışdır. Alınmış nəticələr göstərir ki, PP+(PbS)₈+(CdS)₉ nanokompoziti möhkəm, elektrofil, yarımkeçirici və stabil materiallardır.

Açar sözlər: riyazi modelləşdirmə, nanohissəcik, nanokompozit, kvantmexaniki hesablama, yarımempirik metodlar.

PACS:81.07.-b, 07.05.Tp, 03.67.1.x

UOT: 539.19.01

NƏZƏRİ METODOLOGİYA

Nanokompozitlərin müxtəlif xassələrinin riyazi modelləşdirilməsi və kvantmexaniki tədqiqinin böyük əhəmiyyəti vardır. Belə nəzəri hesablamalar, adətən, molekulyar orbitallar metodu ilə aparılır [1, 2, 3]. Məlumdur ki, yarımempirik PM3 metodu molekulyar orbitallar (MO) metodunun sadə yarımempirik variantıdır. MO metodunda hesab olunur ki, molekulda hər bir elektron molekuldakı nüvələrin və digər elektronların yaratdığı müəyyən effektiv sahədə başqa elektronlardan asılı olmadan hərəkət edir. Molekulda elektronun halı molekulyar orbital adlanan birelektronlu dalğa funksiyası ilə təsvir olunur [4, 5, 6]. Bu funksiyalar çoxmərkəzli funksiyalardır. Belə ki, onların ifadəsinə elektronun müxtəlif atom nüvələrindən olan məsafələri daxil olur. Molekulyar orbitalların axtarılmasının müxtəlif variantları mövcuddur. Onlardan biri də U_i molekulyar orbitallarını molekulda daxil olan atomların atom orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində axtarılması metodudur (MO LCAO metodu):

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

Burada c_{qi} - naməlum əmsallar, χ_q - isə bazis funksiyaları kimi seçilən atom orbitallardır. İşdə atom orbitalları olaraq Gauss funksiyalarından istifadə olunmuşdur [7]. c_{qi} - əmsalları aşağıdakı tənliklər sisteminin həllindən tapılır:

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

Burada aşağıdakı kimi işarələmələr daxil edilmişdir:

$$H_{pq} = \int \chi_p^* \hat{H}_{ef} \chi_q dV \quad (3)$$

$$S_{pq} = \int \chi_p^* \chi_q dV \quad (4)$$

S_{pq} - χ_p və χ_q atom orbitalları arasında örtmə inteqrallarıdır. \hat{H}_{ef} molekulda müəyyən effektiv sahədə digər elek-

tronlardan asılı olmadan hərəkət edən bir elektron üçün Hamilton operatorudur:

$$\hat{H}_{ef} = -\frac{1}{2} \nabla^2 + U(r). \quad (5)$$

(2) tənliklər sistemi həll olunaraq ε_i və c_{qi} kəmiyyətlərinin qiymətləri tapılır.

ε_i -lərin qiymətlərindən istifadə edərək nanokompozitlərin tam elektron enerjisinin, ionlaşma potensialının qiymətlərini hesablamaq, mexaniki, elektrik, maqnit xassələrini və s. tədqiq etmək olar. Hesablamalar zamanı Exel, Mathcad və HyperChem 7.5 proqramları (free version) istifadə olunmuşdur.

KOMPÜTER HESABLAMALARI VƏ NƏTİCƏLƏRİN TƏHLİLİ

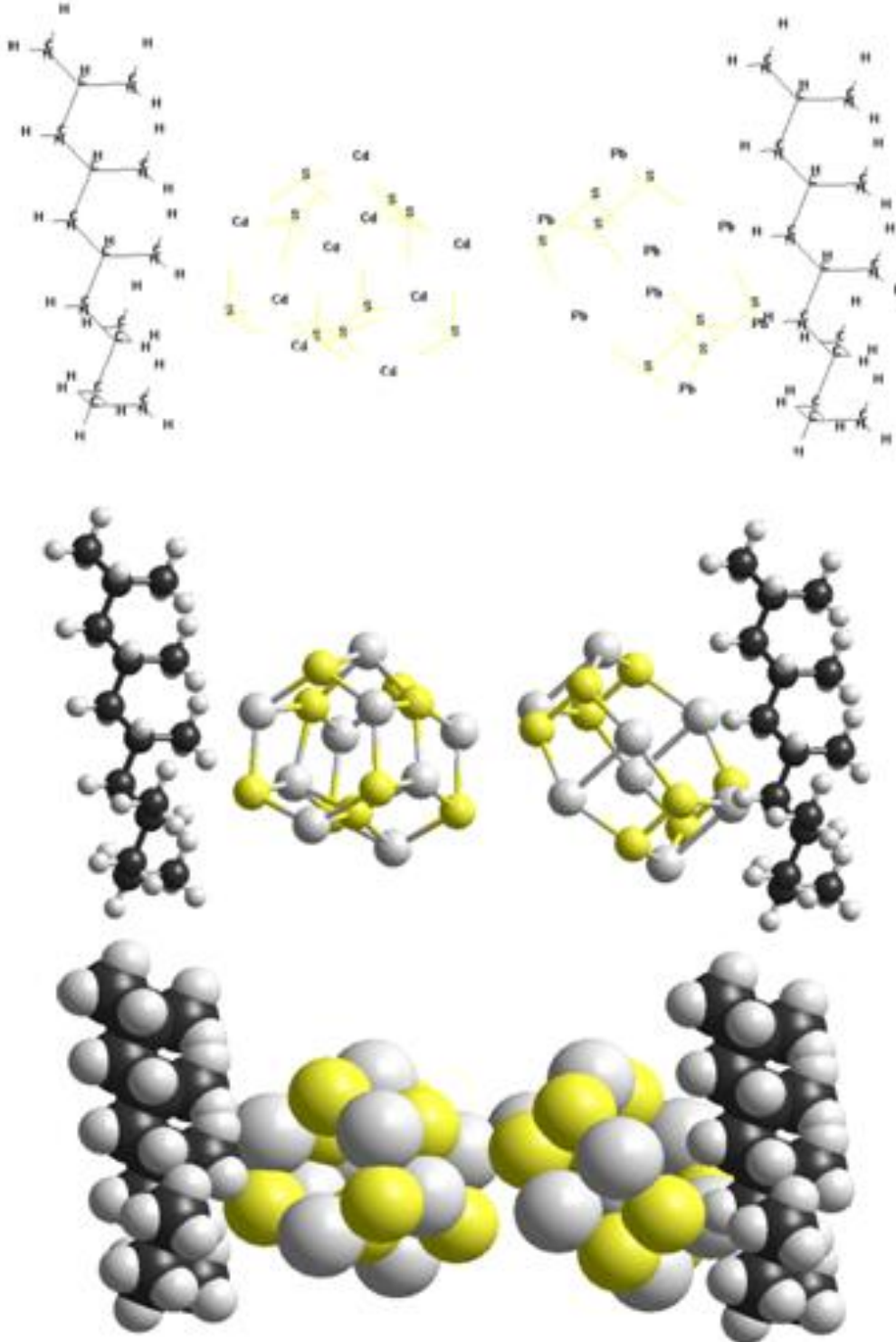
Təqdim olunan işdə polipropilen PP (H(-CH₂-CH(CH₃)-)5-H) polimeri, PP 2(H(-CH₂-CH(CH₃)-)5-H) + (PbS)₈, PP 2(H(-CH₂-CH(CH₃)-)5-H) + (CdS)₉ və PP 2(H(-CH₂-CH(CH₃)-)5-H) + (PbS)₈ + (CdS)₉ nanokompozitlərinin modelləri qurulmuş (şəkil 1) və orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektron enerjisinin qiymətləri yarımempirik PM3 metodu ilə hesablanmışdır. Cədvəl 1-də PP 2(H(-CH₂-CH(CH₃)-)5-H) + (PbS)₈ + (CdS)₉ nanokompoziti üçün ε_i orbital enerjilərin qiymətləri (eV) verilmişdir. Hər bir obyekt üçün elektronlar ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilmişdir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisi ε_{HOMO} və ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi ε_{LUMO} müəyyən edilmişdir. İonlaşma potensialı: $I_p = -\varepsilon_{HOMO}$, qadağan olunmuş zonanın qiyməti $E_g = \varepsilon_{LUMO} - \varepsilon_{HOMO}$ və möhkəmlilik $\eta = \frac{1}{2} E_g$ düsturu ilə hesablanmışdır [8, 9, 10].

Materialın şüalandıra biləcəyi fotonun dalğa uzunluğu $\lambda = \frac{c \cdot h}{1,6 \cdot E_g} \cdot 10^{28} \text{ nm}$ düsturu ilə hesablanır

bilər [5-8]. Burada h - Plank sabiti, c işığın vaakumda sürətidir. λ - nı hesablayarkən E_g -nın eV ilə qiymətlərindən istifadə olunur. $\eta < 1$ eV olduqda, material yumşaq, $\eta > 1$ eV isə möhkəm hesab olunur.

Materialın stabilliyi isə $\Delta E = E - \sum_A E_A$ düsturu ilə hesablanır. Burada E - sistemin tam enerjisi, E_A - sistemo

daxil olan A atomunun tam enerjisi və ΔE – sistemin stabilliyini xarakterizə edən parametrdir. $\Delta E > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. Nəticələr cədvəl 2-də verilmişdir.



Şəkil 1. PP 2(H-(-CH₂-CH(CH₃)-)5-H)+(PbS)₈+(CdS)₉ nanokompozitinin nəzəri modelləri (xətlə, xət və kürelərlə və kürelərlə göstərilib)

Cədvəl 1.
PP 2(H-(-CH₂-CH(CH₃)-)5-H)+(PbS)₈+(CdS)₉ nanokompoziti üçün orbital enerjilərin ϵ_i qiymətləri (eV)

$i=1\div 80$	$i=81\div 160$	$i=1161\div 240$	$i=241\div 32$
-45.617014	-14.086415	-7.793479	4.109869
-44.557067	-13.983646	-7.636370	4.120191
-42.034628	-13.902841	-7.625964	4.143814
-40.863583	-13.853727	-7.502072	4.179192
-37.549971	-13.831504	-7.277611	4.197089
-37.186917	-13.773857	-7.146097	4.202053
-34.049929	-13.644633	-6.920311	4.207886
-33.162938	-13.514569	-6.709220	4.231864
-31.979813	-13.482073	-4.276190	4.238310
-31.854620	-13.438964	-3.602338	4.269307
-30.912335	-13.342949	-3.486768	4.290555
-30.758653	-13.319146	-3.438046	4.298801
-30.513011	-13.286237	-3.330850	4.330029
-29.710840	-13.271196	-3.275626	4.357909
-29.072578	-13.178418	-3.111217	4.367048
-28.883760	-13.126597	-3.037961	4.393029
-28.707193	-13.120488	-2.991952	4.418262
-28.551839	-13.021974	-2.866471	4.419931
-28.247233	-12.965835	-2.800592	4.441336
-27.490010	-12.942826	-2.680353	4.488323
-27.363027	-12.868301	-2.546230	4.508915
-26.915431	-12.853890	-2.489469	4.521025
-26.555704	-12.810912	-2.422311	4.521650
-26.121499	-12.689226	-2.251130	4.536790
-26.073715	-12.606144	-2.212915	4.543548
-25.679703	-12.592857	-1.974291	4.558909
-25.264782	-12.512289	-1.646167	4.630399
-25.071426	-12.465299	-1.573308	4.631015
-24.870832	-12.409425	-1.370589	4.643458
-24.716229	-12.346624	-1.346211	4.656118
-24.544814	-12.302405	-1.216434	4.669665
-24.204358	-12.185248	-1.166347	4.746538
-23.863322	-12.158876	-0.994868	4.749991
-23.377661	-12.101117	0.478839	4.755597
-22.999625	-12.092704	0.883918	4.771485
-22.720797	-12.070825	1.164318	4.803049
-22.607206	-12.016216	1.388082	4.821003
-22.396100	-11.952967	1.418750	4.834233
-21.909624	-11.938905	2.170898	4.901410
-21.197522	-11.917342	2.195805	4.933111
-20.888222	-11.878203	2.297903	4.973859
-20.764160	-11.861124	2.761347	5.000368
-20.434900	-11.839065	2.811661	5.006167
-20.333807	-11.695285	3.006841	5.030358
-19.991138	-11.616497	3.043129	5.094499
-19.787880	-11.539601	3.100420	5.110016
-18.901701	-11.376506	3.117440	5.131950
-18.664055	-11.237598	3.225545	5.146798
-17.969900	-11.200860	3.241173	5.324904
-17.744240	-11.179441	3.356034	5.421591
-17.732797	-10.964630	3.415133	5.447323
-17.591676	-10.951438	3.420758	5.563866
-17.202207	-10.666799	3.428678	5.775266
-17.001039	-10.212037	3.460671	21.212251
-16.780428	-10.178488	3.483293	21.296004
-16.566997	-10.144293	3.497010	21.400179
-16.304764	-10.066059	3.530541	21.487869
-16.197495	-10.027144	3.535110	21.565278
-16.089250	-10.004957	3.589273	21.607568
-16.000320	-9.885948	3.614972	21.660236
-15.977249	-9.738472	3.629948	21.676091
-15.755485	-9.454178	3.631709	21.714614
-15.593971	-9.293222	3.668273	21.766807

-15.485982	-9.234285	3.676927	21.830406
-15.425288	-9.177479	3.716665	21.873538
-15.238569	-9.107710	3.722028	21.925853
-15.191666	-8.981597	3.756458	21.954969
-15.099541	-8.941593	3.790101	22.007568
-14.962069	-8.776536	3.796020	22.025937
-14.911293	-8.711975	3.812357	22.077194
-14.828144	-8.625953	3.812986	22.258922
-14.591291	-8.545660	3.858219	22.281301
-14.549212	-8.448739	3.864626	22.298916
-14.509000	-8.426886	3.919674	22.358237
-14.463178	-8.202931	3.956243	22.408032
-14.362189	-8.161530	3.999825	22.505288
-14.216800	-8.136331	4.003949	22.538171
-14.198017	-8.022206	4.011289	22.589026
-14.128033	-7.961449	4.080272	22.592814
-14.122498	-7.856641	4.093372	22.688444

Cədvəl 2.

PP polimeri, PP +(PbS)₈, PP+(CdS)₉ və PP+(PbS)₈+(CdS)₉ nanokompozitləri üçün alınmış nəticələr

N	Obyekt	ϵ_{HOMO}	ϵ_{LUMO}	Tam enerji E(a.v.)	Stabilitet parametri ΔE (a.v.)	İonlaşma potensialı I_p (eV)	Qadağan olunmuş zonanın qiyməti E_g (eV)	Möhkəmlik parametri η (eV)	Şüalanın fotonun dalğa uzunluğu λ (nm)
1	PP	-9.576915	3.260113	-83.3852346	-7.526493683	9.576915	12.837028	6.418514	96.839
2	PP+(PbS) ₈	-8.012347	-4.585331	-243.4246584	-92.97340998	8.012347	3.427016	1.713508	362.743
3	PP+(CdS) ₉	-6.798062	-1.596711	-236.472384	-93.50205923	6.798062	5.201351	2.600676	239
4	PP+(PbS) ₈ +(CdS) ₉	-6.70922	-4.27619	-312.3345588	-94.7717266	6.70922	2.43303	1.216515	510.937

NƏTİCƏ

PP 2(H-(-CH₂-CH(CH₃))-5-H)+(PbS)₈+(CdS)₉ nanokompozitinin elektron quruluşu yarımempirik PM3 metod ilə öyrənilmişdir. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, PP 2(H-(-CH₂-CH(CH₃))-5-H)+(PbS)₈+(CdS)₉ möhkəm, elektrofil, yarımkeçirici materiallardır. Şüalandıracağı fotonun dalğa uzunluğu $\lambda \approx 511$ nm bərabərdir. Cədvəl 2-dən görüldüyü kimi nanohissəciyin kütləsi və ölçüləri artıqca, enerji səviyyələri arasında fərq azalır və qadağan

olunmuş zonanın qiyməti kiçilir. Bu səbəbdən PP 2(H-(-CH₂-CH(CH₃))-5-H)+(PbS)₈+(CdS)₉ nanokompozitinin enerji səviyyələri arasında fərq azalır və qadağan olunmuş zonanın qiyməti də, PP 2(H-(-CH₂-CH(CH₃))-5-H)+(PbS)₈ və PP 2(H-(-CH₂-CH(CH₃))-5-H)+(CdS)₉ nanokompozitləri üçün hesablanmış qadağan olunmuş zonanın qiymətlərindən kiçik alınır. Bu dakvantmexaniki təsəvvürlərə uyğun gəlir. Bu materiallar müxtəlif sahələrdə istifadə oluna bilər.

- [1] C.K. Игнатов. Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности Часть 1. Нижегородский государственный университет. Нижний Новгород 2006, 82с.
- [2] Г.З. Виктор. Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем. Институт материаловедения ХИЦ ДВО РАН, 2006, 137с.
- [3] M.Ə.Ramazanov, A.A.Şirinzađa, A.Q.Həsənov, F.H. Paşayev, N.F. Kazımov. Plumbum sulfid (PbS)₈ nanohissəciyi və onun (PbS)₈+PP, (PbS)₈+PVDF nanokompozisiyalarının model-ləşdirilməsi və tədqiqi. AMAKA-nın xəbərləri, Bakı, 2015, cild 18№, 1(18), s.59-65.
- [4] A.S. Fedorov, P.B. Sorokin etc. Modeling of the properties of the electronic structure of some carbon and non-carbon nanoclusters and their interaction with light elements. Novosibirsk, 2006.
- [5] A.M. Magerramov, R.A. Alieva, F.G. Pashaev, A.G. Gasanov etc. Journal of Dyes and Pigments, 2010, vol. 85, Issues 1-2, 1, pp.1-6.
- [6] R.A. Alieva, F.G. Pashaev, A.G. Gasanov, K.T. Mahmudov. Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2009, vol. 54, n. 9, pp. 1407-1411.
- [7] V.I. Minkin, B.Y. Simkin, R.M. Minyaev. Theory of structure of molecule. Rostov at Don, Feniks, 2010.
- [8] A.M. Maharramov, M.A. Ramazanov, A.G. Gasanov, F.G. Pashaev. Physical Science International Journal. 2016, 10(3): 1-6.
- [9] M.A. Ramazanov, F.G. Pashaev, A.G. Gasanov, A.M. Maharramov, A.T.Mahmood. Chalcogenide Letters, 2014, V11(7), 359-364.
- [10] F.G. Pashaev, A.G.Gasanov and A.T. Mahmood. J. Nano. Adv. Mat., 2914, vol. 2(1), 35-41.

Mahammadali A. Ramazanov, Arzuman G. Gasanov, Faig G. Pashayev, Mina R. Vahabova

**MATHEMATICAL MODELING OF THE ELEKTRON STRUCTURE OF
PP+(PbS)₈+(CdS)₉ NANOKOMPOSITE BY SEMIEMPIRICAL PM3 METHOD**

The electronic structure of the PP 2(H-(-CH₂-CH(CH₃)-)5-H)+(PbS)₈+(CdS)₉ nanocomposite were investigated by semi-empirical PM3 method. This method is a variant of the molecular orbitals method. Molecular orbitals are represented as a linear combination of valence atomic orbital's of the atoms of the nanocomposite. The numerical values of the unknown coefficients of the linear combination are found by solution of equations of molecular orbitals. The orbital energies, potential ionization, the total electronic energy of PP+(PbS)₈+(CdS)₉ nanocomposite were calculated. The results show that the PP+(PbS)₈+(CdS)₉ nanocomposite are hard, electrophile, semi-conductive and stabile materials.

Махаммадали А. Рамазанов, Арзуман Г. Гасанов, Фаиг Г. Пашаев, Мина Р. Вагабова

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ НАНОКОМПОЗИТА
PP+(PbS)₈+(CdS)₉ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИМ PM3 МЕТОДОМ**

Электронная структура нанокompозита PP 2(H-(-CH₂-CH(CH₃)-)5-H)+(PbS)₈+(CdS)₉ исследована полуэмпирическим методом PM3. Этот метод является одним из вариантов метода молекулярных орбиталей (МО ЛКАО). Молекулярные орбитали представлены в виде линейной комбинации валентных атомных орбиталей атомов нанокompозита. Численные значения неизвестных коэффициентов линейной комбинации найдены решением уравнений метода молекулярных орбиталей. В результате расчетов найдены орбитальные энергии, потенциал ионизации, полная электронная энергия нанокompозита PP+(PbS)₈+(CdS)₉. Результаты расчетов показывают, что нанокompозита PP+(PbS)₈+(CdS)₉ являются твердыми, электрофильными полупроводниками и устойчивыми материалами.

Qəbul olunma tarixi: 03.07.2017