

## METAL TƏRKİBLİ BƏZİ NANOHISSƏCİKLƏRİN MEXANİKİ XASSƏLƏRİNİN TƏDQIQI

ARZUMAN Q. HƏSƏNOV

Silahlı Qüvvələrin Hərbi Akademiyası

[gasqhapk@gmail.com](mailto:gasqhapk@gmail.com)

Qızıl, gümüş, alüminium və dəmir nanohissəciklərinin mexaniki xassələri vizual modelləri əsasında Genişlənmiş Hükkel metodu tətbiq etməklə öyrənilmişdir. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, ölçüləri ~1nm tərtibində olan metal nanohissəciklərin mexaniki xassələri, təqribən həcmi metal materialların mexaniki xassələri kimidir.

**Açar sözlər:** nanohissəcik, riyazi model, Genişlənmiş Hükkel metodu.

**PACS:** 81.07.-b; 07.05.Tp; 03.67.Lx

Metal tərkibli nanohissəciklərin mexaniki xassələrinin kvant mexanikası metodları ilə öyrənilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır. İşdə qızıl, gümüş, alüminium və dəmir nanohissəciklərinin mexaniki parametrlərinin - sərtlik əmsalının, Yunq, sürüşmə, həcmi və möhkəmlik modullarının Genişlənmiş Hükkel metodu tətbiq etməklə hesablanmasına baxılmışdır. Atom orbitalları olaraq eksponensial xarakterli Qauss funksiyalarından istifadə olunmuşdur[1]. MO LCAO yaxınlaşmasına əsasən  $U_i$  molekulyar orbitalları seçilən atom orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində axtarılmışdır:

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

Burada  $\chi_q$  - 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 elementləridir və Volfşberq - Helmhols yaxınlaşmaları əsasında qiymətləndirilir.  $S_{pq}$  örtmə integrallarıdır və Qauss funksiyaları bazisində analitik hesablanır. (2) tənlikləri həll olunaraq  $\varepsilon_i$  orbital enerjilərin qiymətləri tapılır. Bu qiymətlər əsasında nanohissəciyin bir sıra xassələri tədqiq oluna bilər.

Nanohissəciyin elektronları ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir və elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı  $\varepsilon_{HOMO}$  və ən aşağı boş  $\varepsilon_{LUMO}$  molekulyar orbitallara uyğun enerjilər müəyyən olunur. Kupmans teoreminə əsasən

nanohissəciyin ionlaşma potensialı  $I_p = -\varepsilon_{HOMO}$  kimi tapılır[1]. Nanohissəciyin tam elektorn enerjisi

$$E_{nh} = \sum_i \varepsilon_i \quad (3)$$

düsturu ilə hesablanıla bilər. Burada  $i$ -yə görə cəm elektronlar olan molekulyar orbitallar üzrə aparılır. Nanohissəciyin qadağan olunmuş zonanın eni  $E_g = \varepsilon_{LUMO} - \varepsilon_{HOMO}$  kimi hesablanıla bilər.

Nanohissəciyin stabilliyi [2-5]

$$\Delta E = E_{nh} - \sum_A E_A \quad (4)$$

düsturu ilə hesablanıla bilər. Burada  $E_{nh}$  nanohissəciyin tam elektron enerjisi,  $E_A$  isə bu nanohissəyə 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

$$Y = \frac{F}{S} = \frac{|\Delta E|}{r \cdot S}, \quad F \approx \frac{|\Delta E|}{r} \quad (5)$$

düsturu vasitəsilə hesablanıla bilər. Burada  $Y$  - Yunq modulu,  $F$  - nanohissəciyi parçalamaq üçün qüvvənin qiyməti,  $\Delta E$  nanohissəciyin stabilləşmə enerjisinin qiyməti,  $S$  - nanohissəciyin en kəsiyinin sahəsidir,  $r$  - atomlar arası rabitənin uzunluğudur. Nanohissəciyin  $k$  sərtlik əmsalının[11],  $G$  sürüşmə,  $K$  həcmi elastiki və  $HN$  möhkəmlik modullarının qiymətlərinin hesablanması üçün isə [2, 6-10] -də verilən

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

düsturlarından istifadə etmək olar. Burada  $\nu$  Puasson əmsalı [6],  $A$  sabit kəmiyyət olub nanohissəciklər üçün müəyyən təcrübi faktlar əsasında təyin olunur.  $A$  -nin qiyməti qızıl nanohissəciyi 0.09796644, qümüş nanohissəciyi üçün 0.14250885, alüminium nanohissəciyi üçün 0.026056 və dəmir nanohissəciyi üçün isə

0.01440001.  $B$  eksponensial parametrlərinin qiyməti bütün nanohissəciklər üçün  $B = 2.204 \cdot 10^{-3}$ ,  $T = 300^\circ \text{K}$ .

Qurulmuş vizual modellər əsasında (2) tənlikləri həll olunmuş və  $\text{Au}_{16}$ ,  $\text{Ag}_{16}$ ,  $\text{Al}_{20}$  və  $\text{Fe}_{13}$  üçün energetik parametrlərin qiymətləri kompüterdə hesablanmışdır. Nəticələr cədvəl 1-də verilmişdir.

Au<sub>16</sub>, Ag<sub>16</sub>, Al<sub>20</sub> və Fe<sub>13</sub> üçün energetik parametrlərin kompüterdə hesablanmış qiymətləri

N	Nanohissəcik	$\epsilon_{HOMO}$	$\epsilon_{LUMO}$	$E(a.v.)$	$\Delta E (a.v.)$	$I_p(eV)$	$E_g(eV)$
1	Au <sub>16</sub>	-10,526821	-10,101949	-96,224832	-1,1940589	10,526821	0,4249
2	Ag <sub>16</sub>	-7,04011	-6,702026	-79,662147	-0,5364766	7,04011	0,3381
3	Al <sub>20</sub>	-6,800642	-6,800268	-24,54855	-1,6904780	6,800642	0,0004
4	Fe <sub>13</sub>	-11,353132	-11,339492	-50,272706	-2,0017533	11,35313	0,0136

Cədvəl 1-dəki qiymətlərə əsasən Au<sub>16</sub>, Ag<sub>16</sub>, Al<sub>20</sub> və Fe<sub>13</sub> nanohissəciklərinin mexaniki parametrlərinin -  $k$  sərtlik əmsalının [8],  $Y$  Yunq,  $G$  sürüşmə,  $K$  həcmi elastiki və  $HN$  möhkəmlik modullarının [2, 6, 7] qiymətlərini hesablamaq olar.

Au<sub>16</sub> üçün stabilləşmə enerjisinin  $|\Delta E|=1.194a.v.=5.198761 \cdot 10^{-18}j$ , atomlararası rabitə uzunluğunun  $r=0.275376 \cdot 10^{-9}m$  və ölçüsünü  $D=0.8 \cdot 10^{-9}m$  (şəkil 1), en kəsiyinin sahəsi  $S = \pi \cdot \left(\frac{D}{2}\right)^2 = 5.02655 \cdot 10^{-19}m^2$  və  $F=1.888 \cdot 10^{-9}N$  parçalanma qüvvəsini,  $\nu=0.47$  Puasson əmsalının və  $A=0.09796644$  qiymətlərini (5)-(6) düsturlarında nəzərə alıb onların qiymətlərini hesablamaq olar. Nəticələr cədvəl 2-də verilmişdir.

Ag<sub>16</sub> üçün stabilləşmə enerjisinin  $|\Delta E|=0.536477a.v.=2.33574 \cdot 10^{-18}j$ , atomlararası rabitə uzunluğunun  $r = 0.26312 \cdot 10^{-9}m$  və ölçüsünü  $D=0.81 \cdot 10^{-9}m$  (şəkil 2), en kəsiyinin sahəsi  $S = \pi \cdot \left(\frac{D}{2}\right)^2 = 5.152997 \cdot 10^{-19}m^2$  və  $F=8.877 \cdot 10^{-9}N$  parçalanma qüvvəsini,  $\nu = 0.225$  Puasson əmsalının  $A=0.14375009$  qiymətlərini (5)-(6) düsturlarında nəzərə alıb onların qiymətlərini hesablamaq olar. Nəticələr cədvəl 2-də verilmişdir.

Al<sub>20</sub> üçün rabitə enerjisinin  $|\Delta E|=1.690478296 a.v. = \cdot 10^{-18}j$  atomlararası rabitə uzunluğunun  $r = 0.236004 \cdot 10^{-9}m$  və ölçüsünü  $D=0.86 \cdot 10^{-9}m$  (şəkil 3), en kəsiyinin sahəsi  $S = \pi \cdot \left(\frac{D}{2}\right)^2 = 5.8088048 \cdot 10^{-19}m^2$  və  $F=3.119 \cdot 10^{-8}N$  parçalanma qüvvəsini,  $\nu = 0.345$  Puasson əmsalının və  $A=0.026056$  qiymətlərini (5)-(6) düsturlarında nəzərə alıb onların qiymətlərini hesablamaq olar. Nəticələr cədvəl 2-də verilmişdir.

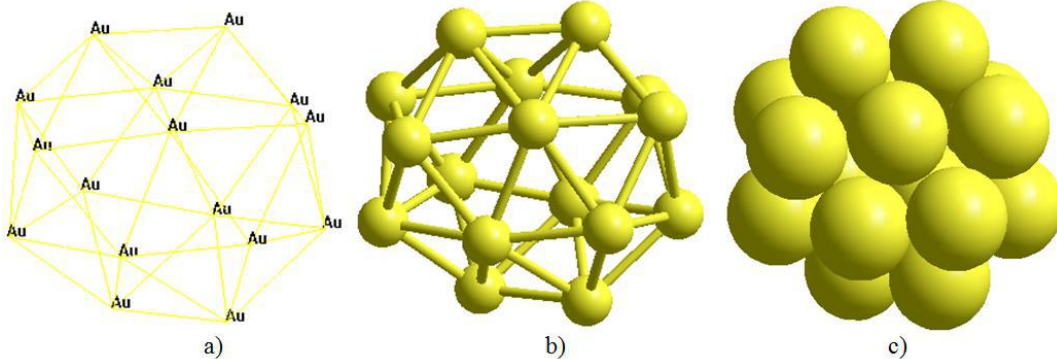
Fe<sub>13</sub> üçün rabitə enerjisinin  $|\Delta E|=2.001753307a.v.= \cdot 10^{-18}j$ , atomlararası rabitə uzunluğunun  $r = 0.242873 \cdot 10^{-9}m$  və ölçüsünü  $D=0.665 \cdot 10^{-9}m$  (şəkil 4), en kəsiyinin sahəsi  $S = \pi \cdot \left(\frac{D}{2}\right)^2 = 3.47323 \cdot 10^{-19}m^2$  və  $F=3.588 \cdot 10^{-8}N$  parçalanma qüvvəsini,  $\nu=0.29$  Puasson əmsalının və  $A=0.01440001$  qiymətlərini (5)-(6) düsturlarında nəzərə alıb onların qiymətlərini hesablamaq olar. Nəticələr cədvəl 2-də verilmişdir.

Mötarizə daxilində verilmiş qiymətlər həmin kəmiyyətlərin digər üsulla hesablanmış qiymətləridir. Brijesh K. Pandey və Ratan L. Jaiswal tərəfindən verilmiş metodika [8] ilə ixtiyari ölçülü ( $D$ ) nanohissəcik üçün mexaniki parametrlərin qiymətlərini hesablamaq mümkün deyildir.

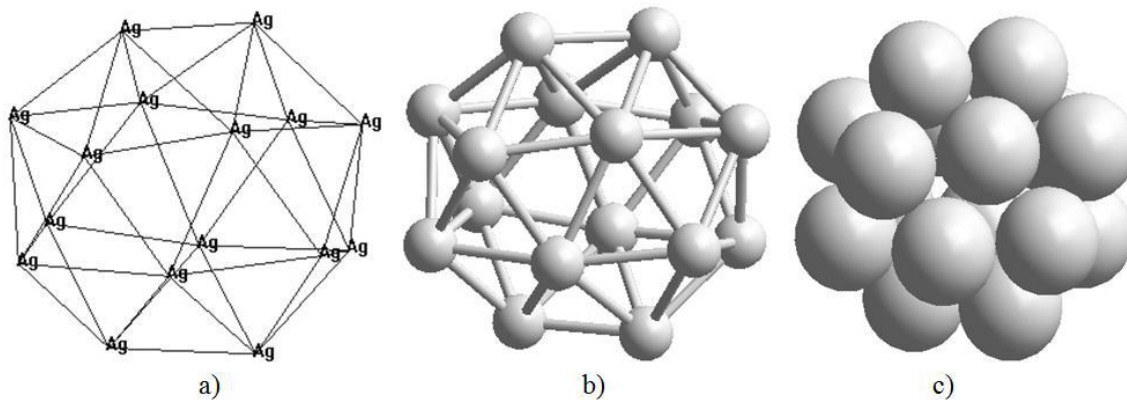
Cədvəl 2.

Au<sub>16</sub>, Ag<sub>16</sub>, Al<sub>20</sub> və Fe<sub>13</sub> üçün mexaniki parametrlərinin hesablanmış qiymətləri

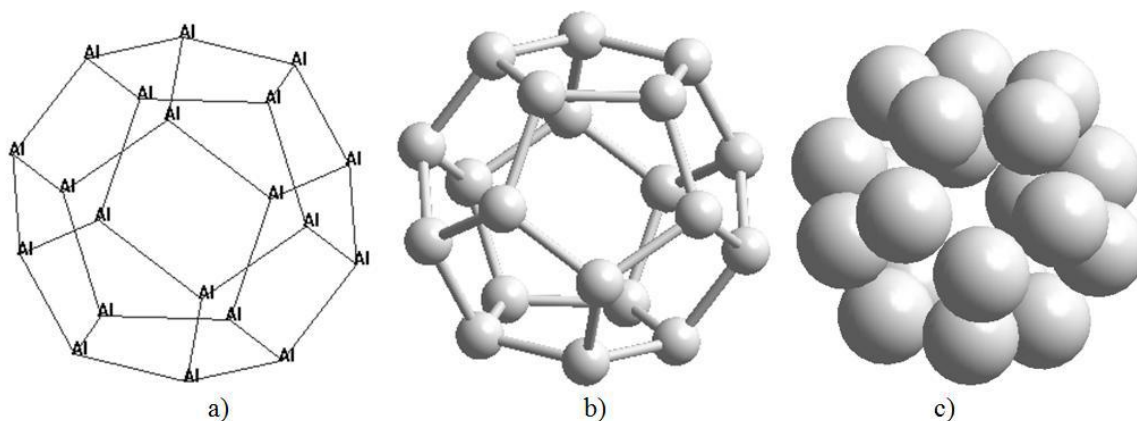
Nö sıra nömrəsi	Nano-hissəcik	Sərtlik əmsalı N/m	Sürüşmə modulu (GPa)	Həcmi elastiki modul (GPa)	Yunq modulu (GPa)	Möhkəmlik modulu(GPa)
1	Au <sub>16</sub>	23.598	12.77	208.7	37.56 (8.19)	0.6461
2	Ag <sub>16</sub>	10.959	7.031	10.44	17.23 (11.272)	0.5218
3	Al <sub>20</sub>	36.263	19.96	57.73	53.69	0.2685
4	Fe <sub>13</sub>	53.961	40.05	82	103.3	0.2977



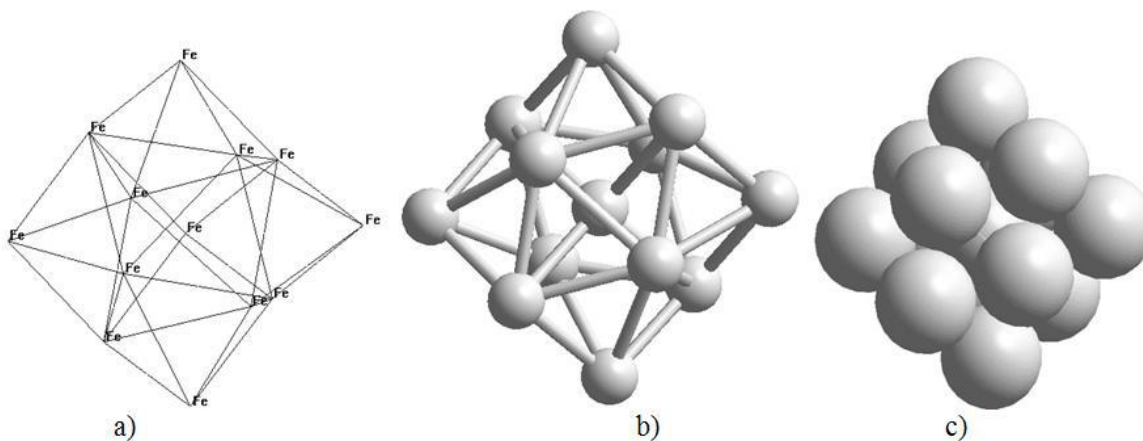
Şəkil 1. Qızıl nanohissəciyinin vizual modelləri: (a - xətt, b - xətt və kürələrlə, c- kürələrlə).



Şəkil 2.  $Ag_{16}$  gümüş nanohissəciyinin vizual modelləri: (a - xətt, b - xətt və kürələrlə, c- kürələrlə).



Şəkil 3.  $Al_{20}$  nanohissəciyinin vizual modelləri: (a - xətt, b - xətt və kürələrlə, c- kürələrlə).



Şəkil 4.  $Fe_{13}$  nanohissəciyinin vizual modelləri: (a - xətt, b - xətt və kürələrlə, c- kürələrlə)

## NƏTİCƏ.

Qızıl, gümüş, alüminium və dəmir nanohissəciklərinin mexaniki xassələri genişlənməmiş Hükkel metodu istifadə etməklə öyrənilmişdir. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, ölçüləri  $\sim 1\text{nm}$  tərtibində olan metal

nanohissəciklərin mexaniki xassələri, təqribən həcmi metal materialların mexaniki xassələri kimidir. Alınmış nəticələr kvant mexaniki təsəvvürlərə uyğundur. Belə ki, nanohissəciklərin ölçülərinin kiçillməsi nəticəsində atomlar arasındakı itələmə qüvvələri, cəzbəmə qüvvələrinə nəzərən üstünlük təşkil edir.

[1] В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Теория строения молекул, Ростов – на Дону, Феникс, 2010, 560с.

[2] A.G. Gasanov, A.A. Bairamov. Physics of the Solid State, 2019, Vol. 61, No. 1, pp. 208-213.

- [3] *A.M.Maharramov, M.A. Ramazanov, A.G. Gasanov, F.G. Pashaev.* Physical Science International Journal, 2016, 10(3).
- [4] *F.G. Pashaev, A.G. Gasanov, A.T. Mahmood.* J. Nano. Adv., 2014, Mat. 2(1), 35.
- [5] *L.A. Openov and A.I. Podlivaev.* Physics of the Solid State 59, 2017, 1267.
- [6] *J.-W. Jiang, H.S. Park.* Nano Lett., 2016, 16, 2657.
- [7] *Dan Guo, Guoxin Xie and Jianbin Luo.* Mechanical properties of nanoparticles: basics and applications. J. Phys. D: Appl. Phys., 2014, 47, 013001, 25pp.
- [8] *Brijesh K. Pandey, Ratan L. Jaiswal.* International Journal of Materials Science, 2017, vol. 12, N 1.
- [9] *Т.П. Черняева, В.М. Грицина, Е.А. Михайлов, А.В. Остапо.* 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] *M. Wolfsberg, L. Helmholtz.* J. Chem. Phys. 1952, 20, 837.
- [11] Упругие и прочностные характеристики материалов - Доктор Лом. 07.06.2018, <http://doctorlom.com/item318.html>

**Arzuman G. Gasanov**

**STUDY OF MECHANICAL PROPERTIES OF SOME METAL -CONTAINING NANOPARTICLES**

Mechanical properties have been studied using the Extended Hukkel method based on the visual models of gold, silver, aluminum and iron nanoparticles. The results show that the mechanical properties of smal (~ 1 nm) metal nanoparticles are the same as the mechanical properties of metal materials.

**Арзуман Г. Гасанов**

**ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НЕКОТОРЫХ МЕТАЛЛОСОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦ**

Механические свойства были изучены с использованием расширенного метода Хуккеля, основанного на визуальных моделях наночастиц золота, серебра, алюминия и железа. Результаты показывают, что механические свойства мелких (~ 1 нм) металлических наночастиц почти совпадают с механическими свойствами металлических материалов.

*Qəbul olunma tarixi: 18.07.2019*