

(Mn_xZn_{1-x}Fe₂O₄)_n, $x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ NANOHISSƏCİKLƏRİNİN RİYAZI MODELLƏŞDİRİLMƏSİ VƏ TƏDQIQI

ARZUMAN Q. HƏSƏNOV

Azərbaycan Respublikası Silahlı Qüvvələrin Hərbi Akademiyası

E-mail: gasqhapk@gmail.com

(Mn_xZn_{1-x}Fe₂O₄)_n, $x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ nanohissəciklərinin mexaniki, elektrik, maqnit və optik parametrlərinin bəzi qiymətləri, qurulmuş vizual modellər əsasında kvantmexaniki metodlar tətbiq etməklə, hesablanmış və xassələri öyrənilmişdir. Nəticələr göstərir ki, yaxın gələcəkdə bu nanohissəciklərdən xərçəng xəstəliyinin müalicəsində istifadə olunması mümkün olacaqdır.

Açar sözlər: riyazi model, kvantmexaniki metod, nanohissəcik, xərçəng xəstəliyi.

PACS: 87.85.Rs; 87.85.Qr.

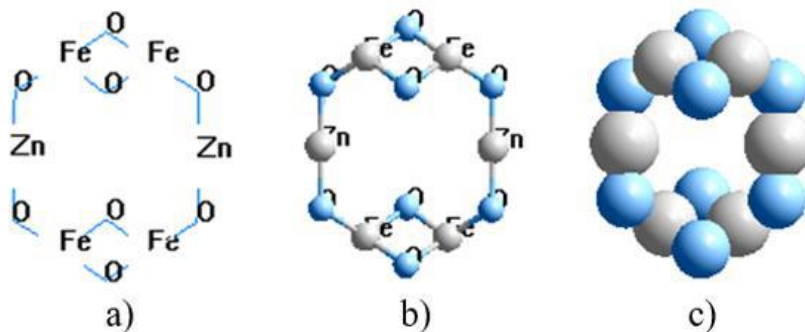
GİRİŞ

Hazırda tibb elminin ən vacib vəzifələrindən biri xərçəng xəstəliyinin müalicəsi və onunla mübarizədir. Həkimlərin istifadə etdikləri bir neçə müalicə metodları sağlam toxumaların fəaliyyətinə mənfi təsirlərə səbəb olur. Çox vaxt müalicə yalnız xərçəng hüceyrələrinə deyil, ətrafdakı sağlam toxumalara, və ya bütün orqanizmə də dağıdıcı təsir göstərir. Belə təsirlərin azaldılması baxımından ümidverici bir üsul maqnit-maye hipertermiyadır. Maqnit nanohissəcikli aktiv maddə maye şiş hüceyrələrə daxil olur və dəyişən maqnit sahəsinin təsirinə məruz qalır. Müəyyən temperatura kimi nanohissəciklərin qızması hesabına həmin şiş hüceyrələri məhv olur. Bu məqsədlə istifadə edilən maddələrin əksəriyyəti zəhərlidir. Bundan əlavə hissəciklərin nisbətən yüksək temperatura qədər qızması davam edir ki, bu da sağlam toxumaların fəaliyyətinə ciddi ziyan vurur və bəzi hallarda onların məhv olmasına səbəb olur. Temperaturdan asılı olaraq maqnit xassələri dəyişən bilən nanohissəciklər bu problemlərin həlli zamanı istifadə oluna bilər.

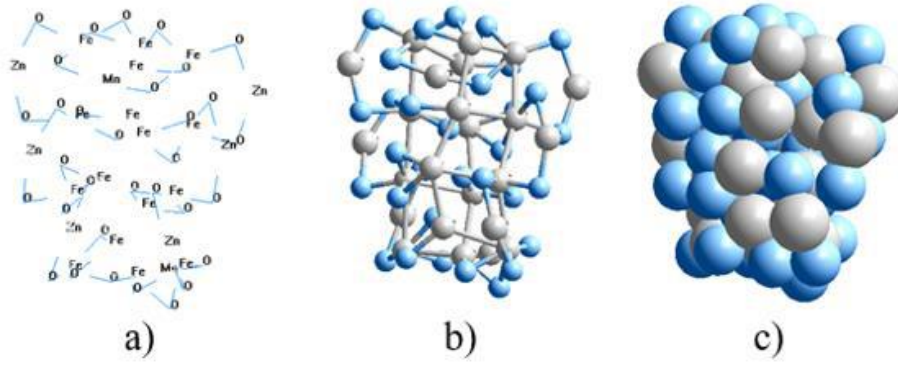
VİZUAL MODELLƏRİN QURULMASI

Küri temperaturu maqnitlənmənin kəskin azalmasının müşahidə olunduğu temperaturdur. Ferromaqnit

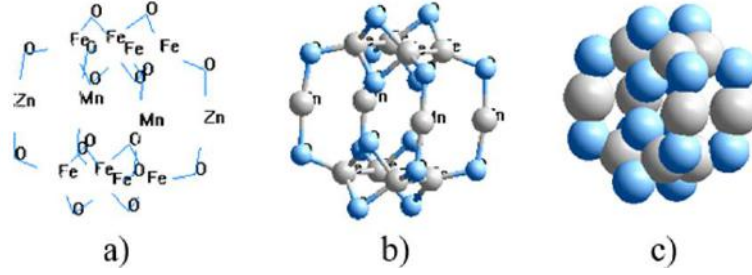
xassəli nanohissəcik bu temperaturda paramaqnit xassəli olur. Bu zaman nanohissəciklər maqnit sahəsinə həssas olmur və onların daha da qızması prosesi dayanır. Belə material olaraq ferritlər - dəmir oksidi Fe₂O₃ və onların digər metalların oksidləri ilə birləşmələri olan (Mn_xZn_{1-x}Fe₂O₄)₂, $x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ nanohissəciklərin istifadə olunması məqsəduyğundur. Onların bədənə zəhərli təsiri yoxdur. Şiş hüceyrələrinin orqanizmə fəsadları hiss olunduqda, maqnit və sinkin nisbətini seçməklə Küri temperaturunun qiymətini 42°C - 45°C diapazonda dəyişdikdə, müalicəvi qızma dərəcəsinə almaq mümkündür. Bu zaman qısa müddətli istilik mübadiləsi sağlam toxumalar üçün nisbətən zərərsizdir və təcrübələr maqnit sahəsinin təsiri altında (Mn_xZn_{1-x}Fe₂O₄)_n nanohissəciklərinin 45°C-dən yuxarı temperaturda istiləşmədiyini (qızmadığını) göstərir. Bu istiqamətdə canlı hüceyrə və heyvanlar üzərində təcrübələr aparılır [1, 2]. Gələcəkdə xərçəngin müalicəsində istifadə oluna bilər. Buna görə də, nanohissəciklərin xassələrinin əvvəlcədən nəzəri metodlar ilə öyrənilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır. Bunun üçün əvvəlcə onun vizual modellərinin qurulmasına baxılmışdır. $x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ qiymətlərindən asılı olaraq (ZnFe₂O₄)₂, (MnZn₃Fe₈O₁₆)₂, (MnZnFe₄O₈)₂, (Mn₃ZnFe₈O₁₆)₂ və (MnFe₂O₄)₂ nanohissəciklərinin vizual modelləri qurulmuşdur (şəkil 1, şəkil 5-də a - xətlə, b - xətt və kürələrlə, c- kürələrlə göstərilmişdir):



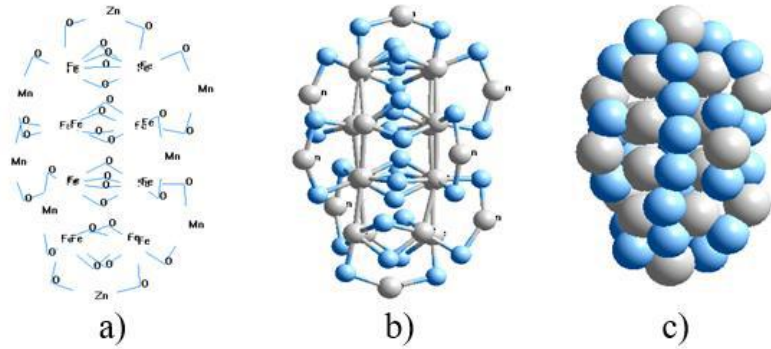
Şəkil 1. (ZnFe₂O₄)₂ vizual modelləri.



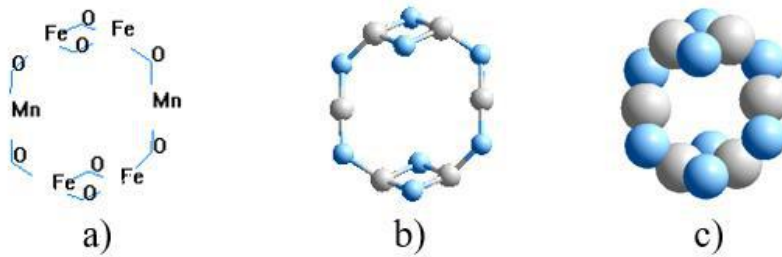
Şəkil 2. $(\text{MnZn}_3\text{Fe}_8\text{O}_{16})_2$ vizual modelləri.



Şəkil 3. $(\text{MnZn}_3\text{Fe}_4\text{O}_8)_2$ vizual modelləri



Şəkil 4. $(\text{Mn}_3\text{ZnFe}_8\text{O}_{16})_2$ vizual modelləri.



Şəkil 5. $(\text{MnFe}_2\text{O}_4)_2$ vizual modelləri.

NƏZƏRİ METODOLOGIYA

$(\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4)_2$, $x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ (nanohissəciklərinin xassələri qurulmuş vizual modellər əsasında kvantmexaniki metodları tətbiq etməklə öyrənilmişdir. Bunun üçün nanohissəcik daxilində elektronun halını təsvir edən dalğa funksiyası U_i molekulyar orbitalları atom orbitallarının χ_q xətti kombinasiyası şəklində axtarılır:

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

Burada U_i i -ci molekulyar orbital $i=1, 2, \dots, m$, m - molekulyar orbitalların sayı, χ_q - atom orbitallarıdır və onlar məlum hesab olunurlar. Atom orbitalları olaraq Qaus funksiyalarından istifadə olunmuşdur [3]:

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

Burada μ - variasiya parametri, r, θ, φ - elektronun sferik koordinatları, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ - kompleks sferik funksiyalar, m - bazis funksiyaları kimi seçilən atom orbitalarının sayıdır.

c_{qi} - naməlum əmsallarının qiymətləri molekulyar orbitalar metodunun $\sum_q (H_{pq} - \varepsilon_i S_{pq}) c_{qi} = 0$ və ya

$$\begin{cases} (H_{11} - \varepsilon S_{11})c_1 + (H_{12} - \varepsilon S_{12})c_2 + \dots + (H_{1m} - \varepsilon S_{1m})c_m = 0 \\ (H_{21} - \varepsilon S_{21})c_1 + (H_{22} - \varepsilon S_{22})c_2 + \dots + (H_{2m} - \varepsilon S_{2m})c_m = 0 \\ \dots \\ (H_{m1} - \varepsilon S_{m1})c_1 + (H_{m2} - \varepsilon S_{m2})c_2 + \dots + (H_{mm} - \varepsilon S_{mm})c_m = 0 \end{cases} \quad (3)$$

tənlikləri həll olunaraq tapılır. Burada H_{pq} - effektiv Hamilton operatorunun matris elementləridir və Volfberg - Helmhols yaxınlaşmaları əsasında qiymətləndirilir, S_{pq} - örtmə inteqrallarıdır və Qaus funksiyaları istifadə etməklə hesablanır. (3) tənlikləri C_{qi} əmsallarına nəzərən xətti bircins tənliklər sistemidir. Belə tənliklərin 0-dan fərqli həllərinin olması üçün məchulların əmsallarından düzəldilmiş determinant 0-a bərabər olmalıdır. Yəni,

$$\begin{vmatrix} H_{11} - \varepsilon S_{11} & H_{12} - \varepsilon S_{12} & \dots & H_{1m} - \varepsilon S_{1m} \\ H_{21} - \varepsilon S_{21} & H_{22} - \varepsilon S_{22} & \dots & H_{2m} - \varepsilon S_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{m1} - \varepsilon S_{m1} & H_{m2} - \varepsilon S_{m2} & \dots & H_{mm} - \varepsilon S_{mm} \end{vmatrix} = 0$$

Bu determinantı açılışı ε kəmiyyətinə nəzərən m dərəcəli tənlik alınır:

$$\varepsilon^m + a_1 \varepsilon^{m-1} + a_2 \varepsilon^{m-2} + \dots + a_0 = 0 \quad (4)$$

burada a_0, a_1 və s. kəmiyyətləri S_{pq} və H_{pq} matris elementləri vasitəsilə təyin olunur.

(4) tənliyi həll olunaraq m sayda $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_m$ kökləri tapılır. Bu köklərə molekulyar orbital enerjiləri deyilir. ε_m -in hər biri növbə ilə (3) tənliklər sistemində yazılmaqla naməlum C_{qi} əmsalları tapılmış olur. ε_1 kö-

kü vasitəsilə tapılmış əmsallar I molekulyar orbitalı, ε_2 kökü vasitəsilə tapılmış əmsallar II molekulyar orbitalı və s. müəyyən edir.

KOMPÜTER HESABLAMALARI

(Mn_xZn_{1-x}Fe₂O₄)₂, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1 nanohissəciklərinin qurulmuş vizual modellər əsasında, yarımempirik Genişlənmiş Hükkel(GH), PM3, ZINDO S və qeyri empirik (QE) və s. kvantmexaniki metodlar tətbiq etməklə, kompüter hesablamaları aparılaraq energetik parametrləri hesablanmışdır. Nəticələr cədvəl 1 - də verilmişdir. 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 ε_{HOMO} və ən aşağı boş ε_{LUMO} molekulyar orbitalara uyğun enerjilər, ionlaşma potensialı $I_p = -\varepsilon_{HOMO}$, tam elektron enerjisi $E_{nh} = \sum_i \varepsilon_i$, qadağan olunmuş zonanın eni $E_g = \varepsilon_{LUMO} - \varepsilon_{HOMO}$, möhkəmlik $\eta = \frac{E_g}{2}$ və stabillik parametri $\Delta E = E_{nh} - \sum_A E_A$ a.v müəyyən olunur. Burada E_A atomların sərbəst halda tam elektron enerjiləridir. $\Delta E > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E < 0$ olduqda material stabil hesab olunur.

Cədvəl 1.

(Mn_xZn_{1-x}Fe₂O₄)₂, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1 nanohissəciklərinin yarımempirik Genişlənmiş Hükkel (GH), PM3, PZINDO S və qeyri empirik (QE) metodlarla energetik parametrlərinin hesablanmış qiymətləri

No	Obyekt, metod	ε_{HOMO} (eV)	ε_{LUMO} (eV)	Tam enerji E(a.v.)	Stabillik parametri ΔE (a.v.)	İonlaşma potensialı I_p (eV)	Qadağan olunmuş zonanın qiyməti E_g (eV)	Möhkəmlik parametri η (eV)
1	(ZnFe ₂ O ₄) ₂ , QE	-3,942545	3,241817	-9100,625297	-2,30532085	3,942545	7,184362	3,592181
2	(MnZn ₃ Fe ₈ O ₁₆) ₂ , ZINDO S	-6,736798	-2,99772	-971,2222637	-384,4448937	6,736798	3,739078	1,869539
3	(MnZnFe ₄ O ₈) ₂ , PM3	-10,119992	-6,093446	-358,9212435	-8,204652728	10,119992	4,026546	2,013273
4	(Mn ₃ ZnFe ₈ O ₁₆) ₂ , ZINDO S	-6,115658	-2,503928	-1054,943441	-434,9883435	6,115658	3,61173	1,805865
5	(ZnFe ₂ O ₄) ₂ , QE	-1,983231	0,523955	-7861,196049	-2,1161409	1,983231	2,507186	1,25359

$(\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4)_2, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ nanohissəciklərinin mexaniki parametrlərinin hesablanması.

Nanohissəciyin E_b rabitə enerjisi, S - diametral en kəsiyinin sahəsi, r - atomlararası rabitənin uzunluğunun qiymətlərini bilərək Yunq modulunun qiymətini hesablanmaq olar:

$$Y = \frac{F}{S} = \frac{E_b}{r \cdot S}, \quad F \approx \frac{E_b}{r}, \quad E_b = [\Delta E] \quad (4)$$

Yunq modulunun qiymətinə görə nanohissəciyin k sərtlik əmsalının, σ deformasiya, G sürüşmə, K həcmi elastiki və HN möhkəmlik modullarının qiymətlərini hesablanması üçün isə [4-7] - də verilən

$$k = \frac{Y \cdot S}{D}, \quad \sigma = Y \cdot \frac{r}{D}, \quad G = \frac{Y}{2 \cdot (1+\nu)} \quad (5)$$

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

düsturlarından istifadə etmək olar. Burada ν Puasson əmsalı, $A = 0.0807$, B eksponensial parametrlərinin qiyməti $B = 2.204 \cdot 10^{-3} 1/K$, $T = 300^{\circ}K$. Cədvəl 1 və cədvəl 2-dəki qiymətləri (4) və (5) düsturlarında nəzərə alaraq $(\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4)_2, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ nanohissəciklərinin mexaniki parametrlərinin k sərtlik əmsalının, σ deformasiya, Y Yunq, G sürüşmə, K həcmi elastiki və HN möhkəmlik modullarının qiymətlərini hesablamaq olar. Nəticələr cədvəl 3-də verilmişdir.

Cədvəl 2.

$(\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4)_2, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ nanohissəciklərinin mexaniki parametrlərinin hesablanması üçün bəzi kəmiyyətlərin qiymətləri

No	Nanohissəcik	Nanohissəciyin ölçüsü D (nm)	Atomlararası rabitə uzunluğu r(nm)	Diametral en kəsiyinin sahəsi S (m ²)	Rabitə enerjisi E _b (a.v.)	Nanohissəciyi parçalama qüvvəsi F (N)	Puasson əmsalı
1	(ZnFe ₂ O ₄) ₂	0.831	0.191	0.542·10 ⁻¹⁸	2.305321	5.251·10 ⁻⁸	0.207
2	(MnZn ₃ Fe ₈ O ₁₆) ₂	2.082	0.201	3.404·10 ⁻¹⁸	34.07319	7.371·10 ⁻⁷	0.324
3	(MnZnFe ₄ O ₈) ₂	1.860	0.200	2.717·10 ⁻¹⁸	8.204653	1.787·10 ⁻⁷	0.324
4	(Mn ₃ ZnFe ₈ O ₁₆) ₂	2.140	0.204	3.583·10 ⁻¹⁸	15.68499	1.672·10 ⁻⁷	0.324
5	(MnFe ₂ O ₄) ₂	1.670	0.187	2.183·10 ⁻¹⁸	2.116141	4.938·10 ⁻⁸	0.320

Cədvəl 3.

$(\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4)_2, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ nanohissəciklərinin mexaniki parametrlərinin hesablanmış qiymətləri

No	Nanohissəcik	Sərtlik əmsalı N/m	Deformasiya modulu (GPa)	Sürüşmə modulu (GPa)	Həcmi elastiki modul (GPa)	Yunq modulu (GPa)	Möhkəmlik modulu (GPa)
1	(MnFe ₂ O ₄) ₂	063.19	22.27	40.11	055.07	096.81	1.671
2	(MnZn ₃ Fe ₈ O ₁₆) ₂	354.03	20.93	81.78	204.64	216.51	3.407
3	(MnZnFe ₄ O ₈) ₂	096.08	07.07	24.84	062.16	065.77	1.035
4	(Mn ₃ ZnFe ₈ O ₁₆) ₂	157.03	08.92	35.36	088.47	093.60	1.473
5	(MnFe ₂ O ₄) ₂	029.62	02.53	08.57	020.95	022.63	0.357

$(\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4)_2, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ NANOHISSƏCİKLƏRİNİN MAQNİT PARAMETRLƏRİNİN HESABLANMASI.

Nanohissəciyin maqnit xassəsini müəyyənəndirmək üçün əvvəlcə onun maqnit doyması qiymətini bilmək lazımdır. Nanohissəciyin maqnit doymasını təyin etmək üçün

$$M_s = M_{sb} \cdot \left(1 - \frac{2 \cdot d}{D}\right)^3 \quad (6)$$

düsturundan istifadə etmək olar [8]. Burada M_{sb} həcmi materialın maqnit doymasını xarakterizə edir və ölçü vahidi $\frac{A}{m}$ dir. D - kürə formalı təsəvvür edilən nanohissəciyin ölçüsü, d - səth qabığına qalınlığıdır. d olaraq həmin nanohissəciyi təşkil edən atomların yerləşdiyi kürənin r_h radiusu ilə təyin oluna bilər. $d < 2 \cdot r_h$, $M_s - d < 2 \cdot r_h$ nanohissəciyin maqnit doyması olub ölçü vahidi $\frac{A}{m}$ dir. Nanohissəciyin maqnit doyması məlum olduqda, onun öz-özünə maqnitlənməsini hesablamaq üçün

$$M_{sp} = M_s \cdot \left(1 - 0.3 \cdot \left(\frac{T}{T_c}\right)^{1.2}\right) \quad (7)$$

düsturundan istifadə etmək olar. Burada T - nanohissəciyin temperaturu, T_c - həcmi materialın Kuri temperaturu, M_{sp} - nanohissəciyin öz-özünə maqnitlənməsi, ölçü vahidi A/m . T_c temperaturundan böyük qiymətlərdə nizamlı maqnit domenlər əmələ gəlmədiyinə görə, öz-özünə maqnitlənmə əmələ gəlmir. Nanohissəcik üçün digər əhəmiyyətli maqnit kəmiyyətlərdən biri maqnit qavrayıcılığıdır. Bu, adsız kəmiyyət olub materialın fundamental maqnit xassəsini, materialın maqnit sahəsində necə maqnitlənməsini xarakterizə edir. Nanohissəciyin maqnit qavrayıcılığı onun V həcmdən, T temperaturdan, həmçinin M_{sp} öz-özünə maqnitlənməsindən asılı olaraq aşağıdakı kimi təyin oluna bilər [8]:

$$\chi = M_{sp}^2 \cdot \left(\frac{\mu_0 \cdot V}{3 \cdot k_0 \cdot T}\right) \quad (8)$$

Burada χ - nanohissəciyin maqnit qavrayıcılığı, V - nanohissəciyin həcmi, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} N/A^2$ vakuumda maqnit nüfuzluğu, $k_0 = 1.38065\pi \cdot 10^{-23} C/K$ Bolsman sabitidir.

(Mn_xZn_{1-x}Fe₂O₄)₂, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1 NANOHISSƏCİKLƏRİNİN RİYAZI MODELƏSDİRİLMƏSİ VƏ TƏDQIQI

M_S nanohissəciyin maqnit doyması və χ maqnit qavrayıcılığının qiymətləri məlum olduqda, onun maqnit momentini m₀ (ölçü vahidi A·m²) və nüfuzluğunu μ (ölçü vahidi N/A²) hesablamak olar:

$$m_0 = M_s \cdot V \quad (9)$$

$$\mu = \mu_0 \cdot (1 + \chi) \quad (10)$$

Beləliklə, T_C=318K, T=300 K, d=0.33·10⁻⁹m; 0.83·10⁻⁹m; 0.74·10⁻⁹m; 0.85·10⁻⁹m; 0.66·10⁻⁹m qiymətləri və cədvəl 4-dəki qiymətləri (6) - (10) düsturlarında nəzərə alıb (Mn_xZn_{1-x}Fe₂O₄)₂, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1 nanohissəciklərinin maqnit parametrlərinin - M_S maqnit doyması, M_{sp} öz-özünə maqnitlənmə, χ maqnit qavra-

yıcılığı, m₀ maqnit momentinin və μ maqnit nüfuzluğunun qiymətlərini hesablamaq olar [8]. Nəticələr cədvəl 5-də verilmişdir.

Cədvəl 4.

(Mn_xZn_{1-x}Fe₂O₄)₂, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1 nanohissəciklərinin maqnit parametrlərinin hesablanması üçün bəzi parametrlərin hesablanmış qiymətləri

№	Nanohissəcik	Həcmi materialın maqnit doyması M _{sb} (emu/g)	Nanohissəciyin həcmi (m ³)
1	(MnFe ₂ O ₄) ₂	22.36	3.005 · 10 ⁻²⁸
2	(MnZn ₃ Fe ₈ O ₁₆) ₂	18.91	4.725 · 10 ⁻²⁷
3	(MnZnFe ₄ O ₈) ₂	41.69	3.369 · 10 ⁻²⁷
4	(Mn ₃ ZnFe ₈ O ₁₆) ₂	74.31	5.103 · 10 ⁻²⁷
5	(MnFe ₂ O ₄) ₂	94.84	2.426 · 10 ⁻²⁷

Cədvəl 5.

(Mn_xZn_{1-x}Fe₂O₄)₂, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1 nanohissəciklərinin maqnit parametrlərinin hesablanmış qiymətləri

№	Nanohissəcik	Maqnit doyması M _s (emu/g)	Öz-özünə maqnitlənmə M _s (emu/g)	Maqnit momenti (A·m ²) 4.732·10 ⁻²⁵	Maqnit nüfuzluğu (N/A ²)	Maqnit qavrayıcılığı χ
1	(MnFe ₂ O ₄) ₂	0.198	0.143	4.732·10 ⁻²⁵	1.257·10 ⁻⁶	3.909·10 ⁻⁸
2	(MnZn ₃ Fe ₈ O ₁₆) ₂	0.166	0.120	6.256·10 ⁻²⁴	1.257·10 ⁻⁶	4.345·10 ⁻⁷
3	(MnZnFe ₄ O ₈) ₂	0.359	0.259	9.626·10 ⁻²⁴	1.257·10 ⁻⁶	1.443·10 ⁻⁶
4	(Mn ₃ ZnFe ₈ O ₁₆) ₂	0.654	0.471	2.654·10 ⁻²³	1.257·10 ⁻⁶	7.241·10 ⁻⁶
5	(MnFe ₂ O ₄) ₂	83	60	1.602·10 ⁻²¹	1.326·10 ⁻⁶	5.6·10 ⁻²

(Mn_xZn_{1-x}Fe₂O₄)₂, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1 NANOHISSƏCİYİNİN OPTİK PARAMETRLƏRİNİN HESABLANMSI

Nanohissəciyin optik parametrlərinin qiymətlərini hesablamaq üçün aşağıdakı düsturlardan istifadə etmək olar: şüalanan fotonun dalğa uzunluğu

$$\lambda = \frac{c \cdot h}{1,6 \cdot E_g} 10^{28} \text{ nm} \quad (11)$$

fotonun rəqslərinin sayı

$$\nu = \frac{c}{\lambda} 1/\text{san} \quad (12)$$

fotonun kütləsi

$$m = \frac{h}{\lambda \cdot c} kq \quad (13)$$

fotonun impulsu

$$p = \frac{h}{\lambda} kq \cdot m/\text{san} \quad (14)$$

Bunun üçün qadağan olunmuş zonanın cədvəl 1-də hesablanmış qiymətlərindən və (11) - (12) düsturlarından istifadə edərək (Mn_xZn_{1-x}Fe₂O₄)₂, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1 nanohissəciklərinin optik parametrlərinin – şüalanan fotonun dalğa uzunluğu λ, rəqslərin sayı ν, kütləsi m və impulsunun p qiymətlərini hesablamaq olar. Nəticələr cədvəl 6-da verilmişdir.

Cədvəl 6.

(Mn_xZn_{1-x}Fe₂O₄)₂, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1 nanohissəciklərinin optik parametrlərinin hesablanmış qiymətləri

№	Obyekt (metod)	Şüalanan fotonun dalğa uzunluğu λ (mkm)	Fotonun rəqslərinin sayı ν (1/san)	Fotonun kütləsi m(kq)	Fotonun impulsu p(kq · m/san)
1	(ZnFe ₂ O ₄) ₂ , QE	0,173	1.734·10 ¹⁵	1.27646318·10 ⁻³⁵	3.82938954·10 ⁻²⁷
2	(MnZn ₃ Fe ₈ O ₁₆) ₂ , ZINDO S	0,332	9.023·10 ¹⁴	6.64331535·10 ⁻³⁶	1.99299460·10 ⁻²⁷
3	(MnZnFe ₄ O ₈) ₂ , PM3	0,309	9.717·10 ¹⁴	7.15406815·10 ⁻³⁶	2.14622044·10 ⁻²⁷
4	(Mn ₃ ZnFe ₈ O ₁₆) ₂ , ZINDO S	0,344	8.716·10 ¹⁴	6.41704683·10 ⁻³⁶	1.92511405·10 ⁻²⁷
5	(MnFe ₂ O ₄) ₂ , QE	0,496	6.051·10 ¹⁴	4.45457524·10 ⁻³⁶	1.33637257·10 ⁻²⁷

NƏTİCƏ

(Mn_xZn_{1-x}Fe₂O₄)₂, x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1 nanohissəciklərinin elektron quruluşu kvantmexaniki metodlar istifadə etməklə öyrənilmişdir. Qurulmuş vizual

modellər əsasında kompüter hesablamaları aparılmışdır. Nanohissəciklərin orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektron enerjisinin qiymətləri, mexaniki,

elektrik, maqnit və optik parametrlərinin bəzi qiymətləri hesablanmışdır. Nəticələr göstərir ki, bu nanohissəciklər stabildir. $T_C=45^\circ\text{C}$ və $T = 300\text{K}$ -də maqnit parametrlərinin hesablanmış qiymətlərinə əsasən

$(\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4)_2$, $x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ nanohissəcikləri özlərini paramaqnit materiallar kimi aparır. Yaxın gələcəkdə bu nanohissəciklərdən xərçəng xəstəliyinin müalicəsində istifadə olunması mümkün olacaqdır.

- [1] V.A. *Balanov*. Synthesis of $(\text{Mn}_{(1-x)}\text{Zn}_x)\text{Fe}_2\text{O}_4$ nanoparticles for magnetocaloric applications: (Elektron resurs). V.A. *Balanov*, A.P. *Kiseleva*, E.F. *Krivoshapkina et al.* Journal of Sol-Gel Science and Technology, 2020, <https://doi.org/10.1007/s10971-020-05237-8>.
- [2] V.A. *Rodionov*, V.A. *Zhuravlev*. Study the spin configuration and the saturation magnetization of manganese-zinc ferrite nanoparticles by the Monte Carlo method: (Elektron resurs), XII International Conference Radiation-thermal Effects and Processes in Inorganic Materials IOP Publishing, IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering 168, 2017, 012080 doi:10.1088/1757-899X/168/1/012080
- [3] В.И. *Минкин*. Теория строения молекул. В.И. *Минкин*, Б.Я. *Симкин*, Р.М. *Миняев*. Ростов на Д: Феникс, 2010, 560 с.
- [4] Упругие и прочностные характеристики материалов. Доктор Лом: (Elektron resurs) 07.06.2018, <http://doctorlom.com/item318.html>
- [5] A.G. *Gasanov*, A.A. *Bairamov*. Simulation of the Electronic Structure of Graphene – Polyvinylidene Fluoride Composite Material. SankPeterburg: Physics of the Solid State, 2019. vol. 61, № 1, p. 208-213.
- [6] D.*Guo*, G. *Xie*, J. *Luo*. J. Phys. D: Appl. Phys. 47, 2014, 013001, pp.25.
- [7] Т.П. *Черняева*. Корреляция между упругостью и другими свойствами циркония. Т.П. *Черняева*, В.М. *Грицина*, Е.А. *Михайлов и др.* Вопросы атомной науки и техники. 2009. №4-2. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение 94, с. 206-217.
- [8] W. *Kai*. Magnetic Nanoparticles in Nanomedicine . Kai Wu, Diqing Su, Jinning Liu et al. University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455, USA, November 4, 2018. 67 p.

Gasanov Arzuman G.

MATHEMATICAL MODELING AND RESEARCH OF NANOPARTICLES $(\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4)_2$, $x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$

Some mechanical, electrical, magnetic and optical parameters of nano-particles $(\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4)_2$, $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ are calculated and its properties are investigated using the quantum mechanical method based on the visual models. The results show that these nanoparticles can be used for treatment of cancer.

Гасанов Арзуман Г.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИСЛЕДОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ $(\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4)_2$, $x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$

Вычислены некоторые механические, электрические, магнитные и оптические параметры $(\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4)_2$, $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ нано-частиц и теоретически изучены их свойства с использованием квантовомеханических методов, основанных на визуальных моделях. Результаты показывают, что эти наночастицы могут быть использованы для лечения раковых болезней.

Qəbul olunma tarixi: 05.02.20210