

## QIZIL və GÜMÜŞ NANOBORULARIN ELEKTRON QURULUŞUNUN RİYAZİ MODELƏŞDİRİLMƏSİ VƏ XASSƏLƏRİNİN NƏZƏRİ TƏDQIQI

ARZUMAN Q. HƏSƏNOV

*Azərbaycan Respublikası Silahlı Qüvvələrinin Hərbi Akademiyası,*

*E-mail: [gasqhapk@gmail.com](mailto:gasqhapk@gmail.com)*

Diametri 0,54 nm və uzunluğu 1,58 nm olan Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub> nanoborularının vizual modelləri qurulmuş, elektron quruluşunu öyrənmək məqsədi ilə bu modellər əsasında Genişlənmiş Hükkel metodu ilə kompüter hesablamaları aparılmışdır. Nəticələr göstərir ki, Au<sub>48</sub> nanoborusu yumşaq, elektrofil, ensiz zolaqlı yarımqeçirici ( $E_g = 0,06515$  eV) stabil material olub, diaməqnit, şüalanan fotonun dalğa uzunluğu  $\lambda=0,2$  mkm. Debay və ərimə temperaturlarının qiymətləri uyğun olaraq 127,1 K və 793,14 K. Ag<sub>48</sub> nanoborusu isə yumşaq, elektrofil, enli zolaqlı yarımqeçirici ( $E_g = 0,48214$  eV) stabil material olub, diaməqnit, şüalanan fotonun dalğa uzunluğu  $\lambda=2,6$  mkm. Debay və ərimə temperaturlarının qiymətləri uyğun olaraq 123,6K və 372,74 K. Müəyyən mexaniki xassələrinə görə qızıl və gümüş materiallar kimi olmasına baxmayaraq Au<sub>48</sub> nanoborusu adi qızıl materiallardan 5 dəfə, Ag<sub>48</sub> nanoborusu isə 4 dəfə möhkəmdir.

**Açar sözlər:** metal nanoboru, riyazi model, Genişlənmiş Hükkel metodu.

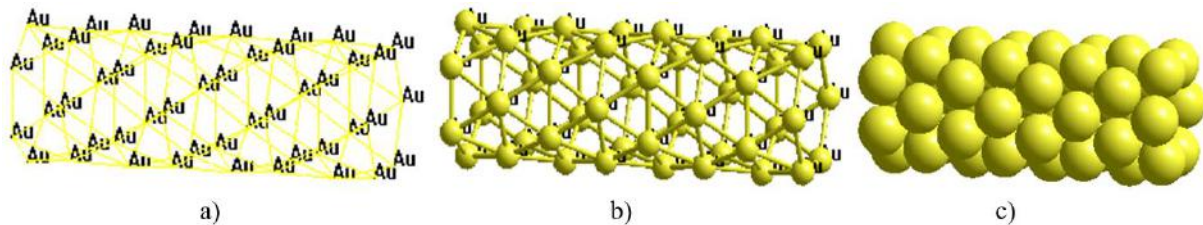
**PACS:** 07.05.Tp; 81.07.-b; 03.67.Lx

### GİRİŞ

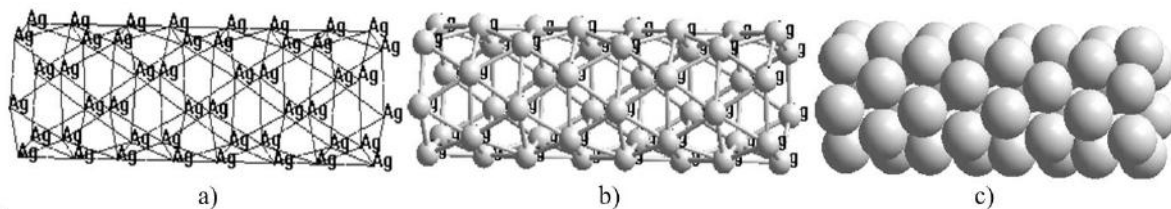
Hal-hazırda metal nanoborularının tibb, sənaye, elektronika və s. sahələrdə tətbiq olunduğunu nəzərə alaraq [1] onların xassələrinin əvvəlcədən kvantmexaniki metodlar ilə nəzəri öyrənilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır. İşdə bir qat (6,3) xırılalı qızıl və gümüş nanoborularının modelləşdirilməsinə və xassələrinin öyrənilməsinə baxılmışdır [2, 3]. Bunun üçün əvvəlcə onların vizual modelləri qurulmuş və nanoboruların aşağıdakı parametrləri: diametral en kəsiyinin sahəsi  $Sd = 6 \frac{\sqrt{3}a^2}{4}$ , en kəsiyinin sahəsi  $S=D \cdot l$ , həcmi  $V=Sd \cdot l$ .

Hesablanmışdır (cədvəl 1). Burada  $a$  - qızıl və ya gümüş atomlararası rabitənin uzunluğu,  $D$  - nanoborunun diametri,  $l$  nanoborunun uzunluğu,  $Sd$  - nanoborunun diametral en kəsiyinin sahəsi,  $S$  - nanoborunun en kəsiyinin sahəsi,  $V$  - nanoborunun həcmidir.

Nanoboruların diametral en kəsiyi düzgün altıbucaqlı, en kəsiyi isə eni nanoborunun diametrinə, uzunluğu nanoborunun uzunluğuna bərabər olan düzbucaqlıdır. Səthi bərabərtərəfli üçbucaqlardan ibarətdir. Üçbucaqların tərə nöqtələrində qızıl və ya gümüş atomları yerləşmişdir (şəkil 1, şəkil 2.).



Şəkil 1. Au<sub>48</sub> qızıl nanoborunun vizual modelləri (a - xətlə, b - xətt və kürələrlə, c- kürələrlə)



Şəkil 2. Ag<sub>48</sub> gümüş nanoborunun vizual modelləri (a - xətlə, b - xətt və kürələrlə, c- kürələrlə)

Cədvəl 1.

Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub> nanoborularının parametrlərinin hesablanmış qiymətləri

№	Nanoboru	Rabitə uzunluğu $a$ (nm)	Diametri $D$ (nm)	Uzunluğu $l$ (nm)	Diametral en kəsiyinin sahəsi $Sd$ (m <sup>2</sup> )	En kəsiyinin sahəsi $S$ (m <sup>2</sup> )	Həcmi $V$ (m <sup>3</sup> )
1	Au <sub>48</sub>	0,267830	0,54	1,57873	$1.8637 \cdot 10^{-19}$	$8.5251 \cdot 10^{-19}$	$2.9422 \cdot 10^{-28}$
2	Ag <sub>48</sub>	0,267882	0,54	1,58374	$1.8644 \cdot 10^{-19}$	$8.5522 \cdot 10^{-19}$	$2.9527 \cdot 10^{-28}$

**NƏZƏRİ METODOLOGİYA**

Au<sub>48</sub> qızıl və Ag<sub>48</sub> gümüş nanoborularının qurulmuş modellər əsasında xassələri Genişlənmiş Hükkel metodu tətbiq etməklə öyrənilmişdir. Bu metod molekulyar orbitallar metodunun sadə yarımempirik variantıdır [4]. Valent elektronlar yaxınlaşmasına əsasən  $U_i$  molekulyar orbitalları valent elektronların həm  $\pi$ -, həm

də  $\sigma$  - elektronların atom orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində axtarılır:

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

Burada  $\chi_q$  - atom orbitallarıdır və onlar məlum hesab olunurlar. Atom orbitalları olaraq Qaus funksiyalarından istifadə olunmuşdur [6]:

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

Burada  $\mu$  - variasiya parametridir,  $r, \theta, \varphi$  - elektronun sferik koordinatlarıdır,  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  - kompleks sferik funksiyalardır,  $m$  - bazis funksiyaları kimi seçilən atom orbitallarının sayıdır.  $c_{qi}$  - naməlum əmsallarının qiymətləri molekulyar orbitallar metodunun

$$\sum_q (H_{pq} - \varepsilon_i S_{pq}) c_{qi} = 0 \quad (3)$$

tənlikləri həll olunaraq tapılır. Burada  $H_{pq}$  - effektiv Hamilton operatorunun matris elementləridir və Volfberq - Helmhols yaxınlaşmaları əsasında qiymətləndirilir,  $S_{pq}$  - örtmə inteqrallarıdır və Qaus funksiyaları bazisində hesablanır.

**Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub> NANOBORULARI ÜÇÜN KOMPÜTER HESABLAMALARI**

Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub> nanoboruları üçün qurulmuş vizual

modellər əsasında kompüterdə  $\varepsilon_i$  orbital enerjilərin qiymətləri hesablanmışdır. Bu qiymətlər əsasında nanoborunun bir sıra xassələri tədqiq oluna bilər. Nanoboruların 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, 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  $\eta = \frac{E_g}{2}$ , stabillik parametri  $\Delta E = E_{nb} - \sum_A E_A$  müəyyən olunur. Burada  $E_A$  qızıl və gümüş atomlarının sərbəst halda tam elektron enerjiləridir. Nəticələr cədvəl 2-də verilmişdir.  $\Delta E < 0$  olduğundan Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub> nanoboruları stabil hesab olunur.

Cədvəl 2.

Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub> nanoborularının energetik parametrlərinin kompüterdə hesablanmış qiymətləri

No	Nanoboru	$\varepsilon_{HOMO}$ (eV)	$\varepsilon_{LUMO}$ (eV)	Tam enerji $E$ (a.v.)	Stabillik parametri $\Delta E$ (a.v.)	İonlaşma potensialı $I_p$ (eV)	Qadağan olunmuş zonanın qiyməti $E_g$ (eV)	Möhkəmlik parametri $\eta$ (eV)
1	Au <sub>48</sub>	-10,28122	-10,21606	-288,940168	-3,84785	10,28122	0,06515	0,03258
2	Ag <sub>48</sub>	-6,52910	-6,04696	-239,149614	-1,77260	6,52910	0,48214	0,24107

Mexaniki parametrlərin qiymətlərinin hesablanması.

Nanoboruların mexaniki xassələri öyrənilməsində Yunq və möhkəmlik modullarının qiymətlərinin hesablanması vacib məsələdir. Yunq modulunun qiyməti

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

düsturu vasitəsilə hesablanma bilər. Burada  $Y$  - Yunq modulu,  $F$  - nanoborunu parçalamaq üçün qüvvənin qiyməti,  $E_b$  nanoborunun rabitə enerjisi,  $S$  nanoborunun en kəsiyinin sahəsi,  $r$  - atomlararası rabitənin uzunluğudur. Nanoboruların  $k$  sərtlik əmsalının,  $\sigma$  deformasiya,  $G$  sürüşmə,  $K$  həcmi elastiki və  $HN$  möhkəmlik modullarının qiymətlərinin hesablanması üçün isə [6-9]-də verilən

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

$$K = \frac{Y}{3 \cdot (1 - 2\nu)}, \quad HN = G \cdot A \cdot e^{-B \cdot T} \quad (5)$$

düsturlarından istifadə etmək olar. Burada  $\nu$  Puasson əmsalı,  $A$ -nın qiyməti Au<sub>48</sub> nanoboru üçün 0.09796644, Ag<sub>48</sub> nanoboru üçün isə 0.1437500885,  $B$  eksponensial parametrlərinin qiyməti  $B=2.204 \cdot 10^{-3} 1/K$ ,  $T=300^\circ K$ . Cədvəl 1-dəki qiymətlərə əsasən Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub> nanoborularının mexaniki parametrlərinin -  $k$  sərtlik əmsalının,  $\sigma$  deformasiya,  $Y$  Yunq,  $G$  sürüşmə,  $K$  həcmi elastiki və  $HN$  möhkəmlik modullarının qiymətlərini hesablamaq olar. Bunun üçün nanoborunun rabitə enerjisinin  $E_b$ , atomlararası rabitə uzunluğu  $r$  və diametri  $D$ , uzunluğu  $l$ , diametral en kəsiyinin sahəsi  $s$ , en kəsiyinin sahəsini  $S$ , nanoborunun parçalama qüvvəsi  $F$  (Au<sub>48</sub> üçün  $6.255 \cdot 10^{-8} N$ , Ag<sub>48</sub> üçün  $2.881 \cdot 10^{-8} N$ ), Puasson əmsalı  $\nu$  (Au<sub>48</sub> üçün 0,47, Ag<sub>48</sub> üçün 0,225) və  $A$  sabitinin qiymətlərini (4) - (5) düsturlarında nəzərə alıb onların qiymətlərini hesablamaq olar [10, 11]. Nəticələr cədvəl 3-də verilmişdir.

Cədvəl 3.

Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub> nanoborularının mexaniki parametrlərinin hesablanmış qiymətləri

Nö	Nano-boru	Sərtlilik əmsalı (N/m)	Deformasiya modulu (GPa)	Sürüşmə modulu (GPa)	Həcmi elastiki modul (GPa)	Yunq modulu (GPa)	Möhkəmlik modulu (GPa)
1	Au <sub>48</sub>	39,621	12,45	24,96	407,6	73,37	1,262
2	Ag <sub>48</sub>	18,191	5,70	13,75	20,42	33,69	1,020

Maqnit parametrlərin qiymətlərinin hesablanması.

Nanoboruların maqnit xassəsini müəyyənəndirmək üçün əvvəlcə onun maqnit doyması qiymətini bilmək lazımdır. Nanoboruların 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 [12]. Burada  $M_{sb}$  həcmi materialın maqnit doymasını xarakterizə edir və ölçü vahidi A/m-dir.  $D$  - nanoborunun diametri,  $d$  - səth qabığının qalınlığı olub qızıl və gümüş atomları kovalent radiusları ilə  $d \leq 2 \cdot 0.134 \text{ nm}$  təyin oluna bilər.  $M_s$  - nanoborunun maqnit doyması olub ölçü vahidi A/m. Nanoboruların 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  $T$  - nanoborunun temperaturu,  $T_c$  - qızıl və gümüş materialların Kuri temperaturudur.  $T_c$  maqnit materiallar üçün keçid temperaturudur,  $M_{sp}$  - nanoborunun öz-özünə maqnitlənməsi olub ölçü vahidi A/m-dir.  $T_c$  temperaturunun böyük qiymətlərində nizamlı maqnit domenlər əmələ gəlmədiyinə görə, öz-özünə maqnitlənmə əmələ gəlmir. Digər əhəmiyyətli maqnit kəmiyyətlərdən biri  $\chi$  maqnit qabiliyyətidir. Bu, adsız kəmiyyət olub materialın fundamental xassəsini və maqnit sahəsində necə maqnitlənməsini xarakterizə edir. Nanoboruların maqnit qabiliyyəti aşağıdakı kimi təyin oluna bilər [12]:

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

Burada  $\chi$  - nanoborunun maqnit qabiliyyəti,  $V$  - nanoborunun həcmi,  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ N/A}^2$  vakuumda materialın maqnit nüfuzluğu,  $k_0 = 1.38065 \cdot 10^{-23} \text{ K}$  Bolsman sabitidir. Nanoboruların maqnit xassəsindən asılı olaraq  $\chi$  maqnit qavrayıcılığının ala biləcəyi qiymətlər cədvəl 4-də verilmişdir:

Cədvəl 4.

$\chi$  maqnit qavrayıcılığının qiymətləri

№	Maqnit qabiliyyəti	Maqnit xassəsi olmayan		Maqnit xassəli	
		Diamaqnit	Paramaqnit	Super paramaqnit	Ferromaqnit
1	$\chi$	$-10^{-3} \div -10^{-6}$	$10^{-6} \div 10^{-3}$	5000	$10^3 \div 10^6$

$M_s$  nanoborunun maqnit doyması və  $\chi$  maqnit qabiliyyətinin qiymətləri məlum olduqda, onun maqnit momentini  $m_0$  (ölçü vahidi A·m<sup>2</sup>) və nüfuzluğunu  $\mu$  (ölçü vahidi N/A<sup>2</sup>) hesablamaq olar:

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

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

Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub> nanoborularının maqnit parametrlərinin -  $M_s$  maqnit doyması,  $M_{sp}$  öz-özünə maqnitlənmə,

$\chi$  maqnit qabiliyyəti,  $m_0$  maqnit momentinin və  $\mu$  maqnit nüfuzluğunun qiymətlərini hesablamaq olar.

Au<sub>48</sub> üçün  $T_c=300\text{K}$ ,  $T=4,2 \text{ K}$ ,  $M_{sb}=0,0298872 \text{ emu/g} = 237,835 \text{ A/m}$ ,  $d = 0,268 \cdot 10^{-9} \text{ m}$  və Ag<sub>48</sub> üçün  $T_c=685\text{K}$ ,  $T=300\text{K}$ ,  $M_{sb}=1,303 \text{ emu/g} = 10,445 \cdot 10^3 \text{ A/m}$ ,  $d = 0,268 \cdot 10^{-9} \text{ m}$  qiymətləri (6) - (10) düsturlarında nəzərə alıb onların qiymətlərini hesablamaq olar. Nəticələr cədvəl 5-də verilmişdir.

Cədvəl 5.

Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub> nanoborularının maqnit parametrlərinin hesablanmış qiymətləri

Nö	Nano-boru	Maqnit doyması $M_s$ (A/m)	Öz-özünə maqnitlənmə $M_{sp}$ (A/m)	Maqnit momenti (A·m <sup>2</sup> )	Maqnit nüfuzluğu (N/A <sup>2</sup> )	Maqnit qabiliyyəti $\chi$
1	Au <sub>48</sub>	0.0000967	0.0000965	$2.8442 \cdot 10^{-32}$	$1.257 \cdot 10^{-6}$	$1.979 \cdot 10^{-20}$
2	Ag <sub>48</sub>	0,00424533	0,00377245	$1.2535 \cdot 10^{-30}$	$1.257 \cdot 10^{-6}$	$4,250 \cdot 10^{-19}$

Optik parametrlərin qiymətlərinin hesablanması.

Cədvəl 2-də hesablanmış qadağan olunmuş zonanın qiymətlərindən istifadə edərək Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub>

nanoborularının optik parametrlərini, şüalanan fotonun dalğa uzunluğunu

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

fotonun rəqslərinin sayını

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

fotonun kütləsini

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

fotonun impulsunu

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

hesablamaq olar. Burada  $c=3 \cdot 10^8 \text{ m/san}$  işığın vakuumda yayılma sürəti,  $h=6.6260693 \cdot 10^{-34} \text{ C} \cdot \text{san}$  Plank sabiti,  $E_g$  nanoborunun qadağan olunmuş zonasının qiymətidir. Nəticələr cədvəl 6-da verilmişdir.

Cədvəl 6.

Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub> nanoborularının optik parametrlərinin hesablanmış qiymətləri

Nö	Nanoboru	Şüalanan fotonun dalğa uzunluğu $\lambda$ (mkm)	Fotonun rəqslərinin sayı $v$ (1/san)	Fotonun kütləsi $m$ (kq)	Fotonun impulsu $p$ (kq·m/san)
1	Au <sub>48</sub>	0,2	$1.573 \cdot 10^{-13}$	$1.15822222 \cdot 10^{-37}$	$3.47466667 \cdot 10^{-29}$
2	Ag <sub>48</sub>	2,6	$1.164 \cdot 10^{-14}$	$8.57134222 \cdot 10^{-37}$	$2.57140267 \cdot 10^{-28}$

Debay və ərimə temperaturlarının qiymətlərinin hesablanması.

Nanoborunun termodinamik xassəsini müəyyən-ləşdirmək üçün onun Debay və ərimə temperaturlarının qiymətlərini parametrlərin cədvəl 3 və cədvəl 8- də hesablanmış qiymətlərindən və aşağıdakı düsturlardan istifadə etməklə hesablamaq olar [13, 14]:

$$\theta_D = \frac{h}{k_B} \left[ \frac{3n}{4\pi} \left( \frac{N_A \rho}{M} \right) \right]^{\frac{1}{3}} V_m K \quad (15)$$

Burada  $\theta_D$  -nanoborunun Debay temperaturu,  $h$  - Plank sabiti,  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ,  $k_B$  -Bolsman sabiti,  $n$  -atomların sayı,  $\rho$  -kütlə sıxlığı,  $M$ - molekulyar kütlə,  $V_m$  -orta səs sürəti olub aşağıdakı düsturla hesablanır [16]:

$$V_m = \left[ \frac{1}{3} \left( \frac{2}{V_t^3} + \frac{1}{V_l^3} \right) \right]^{-1/3} \text{ m/san} \quad (16)$$

burada  $V_t$  və  $V_l$  müvafiq olaraq eninə və uzununa elastik dalğanın sürətləridir. Onlar Navier tənliklərindən tapıla bilər [15]:

$$V_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \text{ m/san}; \quad V_l = \sqrt{\frac{3K+4G}{3\rho}} \text{ m/san}. \quad (17)$$

Mexaniki parametrlərin və Debay temperaturunun hesablanmış qiymətinə görə nanoborunun ərimə temperaturunu [16]-də verilmiş düsturdan istifadə edərək hesablamaq olar:

$$T_m = T_{mb} \frac{\theta_D^2}{\theta_{Db}^2} \text{ K}. \quad (18)$$

Burada  $T_m$  nanoborunun ərimə temperaturu,  $T_{mb}$  qızıl və ya gümüş materialların ərimə temperaturu,  $\theta_D$  - nanoborunun Debay temperaturu,  $\theta_{Db}$  - qızıl və ya gümüş materialların Debay temperaturudur. Nəticələr cədvəl 9-da verilmişdir.

Cədvəl 8.

Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub> nanoborular üçün bəzi parametrlərin hesablanmış qiymətləri

Nö	Nano-boru	Molyar kütləsi $M$ (kq/mol)	Atom kütləsi $m$ (kq)	Sıxlığı $\rho$ (kq/m <sup>3</sup> )	Həcmi materialın Debay temperaturu $\theta_{Db}$ (K)	Həcmi materialın ərimə temperaturu $T_{mb}$ (K)
1	Au <sub>48</sub>	$9454.92 \cdot 10^{-3}$	$1.57003 \cdot 10^{-23}$	53361.584	165	1337.33
2	Ag <sub>48</sub>	$5177.76 \cdot 10^{-3}$	$8.59787 \cdot 10^{-24}$	29118.441	225	1235.1

Cədvəl 9.

Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub> nanoborularının Debay və ərimə temperaturlarının qiymətlərinin hesablanmış qiymətləri

Nö	Nano-boru	Debay temperaturu $\theta_D$ (K)	Ərimə temperaturu $T_m$ (K)
1	Au <sub>48</sub>	127,1	793,14
2	Ag <sub>48</sub>	123,6	372,74

**Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub> NANOBORULAR ÜÇÜN NƏTİCƏ**

Diametri 0,54 nm, uzunluğu 1,58 nm olan Au<sub>48</sub> və Ag<sub>48</sub> nanoborularının vizual modelləri qurulmuş, elektron quruluşu Genişlənmiş Hückel metodu ilə öyrənilmişdir. Bu modellər əsasında kompüter hesablamaları aparılmışdır. Nanoboruların orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektron enerjisinin qiymətləri, mexaniki, termodinamiki, elektrik, maqnit və optik parametrlərinin bəzi qiymətləri hesablanmışdır. Nəticələr göstərir ki, Au<sub>48</sub> nanoborusu yumşaq, elektrofil, ensiz zolaqlı yarımkəçirici ( $E_g = 0,06515$  eV) stabil material olub, diamagnit, şüalanan fotonun dalğa uzunluğu  $\lambda=0.2$ mkm. Debay və ərimə temperaturlarının qiymət-

ləri uyğun olaraq 127,1 K və 793,14K. Ag<sub>48</sub> nanoborusu isə yumşaq, elektrofil, enli zolaqlı yarımkəçirici ( $E_g = 0,48214$  eV) stabil material olub, diamagnit, şüalanan fotonun dalğa uzunluğu  $\lambda=2.6$  mkm. Debay və ərimə temperaturlarının qiymətləri uyğun olaraq 123,6K və 372,74K-dir. Müəyyən mexaniki xassələrinə görə qızıl və gümüş materiallar kimi olmasına baxmayaraq Au<sub>48</sub> nanoborusu adi qızıl materiallardan 5 dəfə, Ag<sub>48</sub> nanoborusu isə 4 dəfə möhkəmdir. Termodinamiki parametrlərin qiymətləri nanoborunun ölçülərindən asılıdır və nanoboruların ərimə temperaturunun qiymətləri qızıl və gümüş materialların ərimə temperaturlarının qiymətlərindən xeyli kiçikdir.

- 
- [1] *Umair Shamraiz, Bareera Raza, Hidayat Hussain, Amin Badshah, Ivan R. Green, Farwa Ahmad Kiani & Ahmed Al-Harrasi.* Gold nanotubes and nanorings: promising candidates for multidisciplinary fields. *International Materials Reviews*, 2018, <https://doi.org/10.1080/09506608.2018.1554991>.
- [2] *A. Q. Həsənov.* AJP FİZİKA, 2019, Series: Az, vol. XXV, N03, s.43-46.
- [3] *X. Liu.* Extinction coefficient of gold nanoparticles with different sizes and different capping ligands. *X. Liu, M. Atwater, J. Wang, O. Huo.* *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 2007, v.58, № 1, p. 3-7.
- [4] *Г.А. Щембелов и др.* Квантовохимические методы расчета молекул. М., Химия, 1980, 255 с.
- [5] *В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев.* Теория строения молекул, Ростов-на –Дону: Феникс, 2010, 560с.
- [6] Упругие и прочностные характеристики материалов. Доктор Лом. 07.06.2018, <http://doctorlom.com/item318.html>
- [7] *A.G. Gasanov, A.A. Bairamov.* *Physics of the Solid State*, -2019. vol. 61, No. 1, -p. 208–213.
- [8] *Dan Guo, Guoxin Xie and Jianbin Luo.* *J. Phys. D: Appl. Phys.* 47 (2014) 013001 (25pp).
- [9] *Т.П. Черняева, В.М. Грицина, Е.А. Михайлов, А.В. Остапо.* Вопросы атомной науки и техники. 2009. №4-2. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение (94), с. 206-217.
- [10] *A.Q. Həsənov.* AJP FIZIKA, 2020. Section: Az, vol. XXVI, N 2, s. 8-12.
- [11] *M. Ramos,* Hardness and elastic modulus on six-fold symmetry gold nanoparticles. *Manuel Ramos, Luis Ortiz-Jordan, Abel Hurtado-Macias [et al.] Materials*, 6, 2013, p.198-205.
- [12] *Kai Wu.* *Magnetic Nanoparticles in Nanomedicine.* *Kai Wu, Diqing Su, Jinming Liu. et al.* University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455, USA, November 4, 2018. 67 p.
- [13] *O.L. Anderson.* *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol.24, 1963, p. 909-917.
- [14] *B.K. Pandey.* *International Journal of Nanotechnology and Applications*, 2017, vol. 11, № 1, p. 81-90.
- [15] *A. Bouhemadou.* Structural, elastic, electronic, optical and thermal properties of c-SiGe<sub>2</sub>N<sub>4</sub>. *A.Bouhemadou, Y. Al-Douri, R. Khenata et al.* *The European Physical Journal B*, 71, 2009, p.185-194.
- [16] *S.K.Gupta, M. Talati, P.K. Jha.* Shape and Size Dependent Melting Point Temperature of Nanoparticles. *Materials Science Forum*, 2008, vol. 570, pp. 132-137, <http://www.scientific.net>.

---

**Arzuman G. Gasanov**

**MATHEMATICAL MODELING AND THEORETICAL STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF GOLD AND SILVER NANOTUBES**

Visual models of Au<sub>48</sub> gold and Ag<sub>48</sub> silver nanotubes with a diameter of 0.54 nm and a length of 1.58 nm have been constructed. Based on these models, computer calculations of the electronic structure were performed using the extended Hückel method. It was found that the Au<sub>48</sub> nanotube is a soft, electrophilic, narrow-band semiconductor ( $E_g = 0.06515$  eV) stable, diamagnetic material, the wavelength of the emitted photons is  $\lambda = 0.2$   $\mu$ m. Debye and melting points are 127.1 K and 793.14 K, respectively. The Ag<sub>48</sub> nanotube is a soft, electrophilic, broadband, semiconductor ( $E_g = 0.48214$  eV) stable, diamagnetic material, the wavelength of the emitted photons is  $\lambda = 2.6$   $\mu$ m. Debye and melting points are 123.6 K and 372.74K, respectively. Au<sub>48</sub> gold nanotubes are 5 times stronger than conventional gold materials, and Ag<sub>48</sub> silver nanotubes are 4 times stronger.

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ЗОЛОТЫХ И СЕРЕБРЯНЫХ НАНОТРУБОК**

Построены визуальные модели нанотрубок золота Au<sub>48</sub> и серебра Ag<sub>48</sub> диаметром 0,54 нм и длиной 1,58 нм. На основе этих моделей были выполнены компьютерные расчеты электронной структур по расширенному методу Хюккеля. Установлено, что нанотрубка Au<sub>48</sub> представляет собой мягкий, электрофильный, узкополосный полупроводниковый ( $E_g = 0,06515$  эВ) стабильный, диамагнитный материал, длина волны излучаемых фотонов  $\lambda = 0,2$  мкм. Температуры Дебая и плавления 127,1 К и 793,14 К соответственно. Нанотрубка Ag<sub>48</sub> - это мягкий, электрофильный, широкополосный полупроводниковый ( $E_g = 0,48214$  эВ) стабильный материал, диамагнитный, длина волны излучаемых фотонов  $\lambda = 2,6$  мкм. Температуры Дебая и плавления 123,6 К и 372,74 К соответственно. Au<sub>48</sub> золотые нанотрубки в 5 раз прочнее обычных золотых материалов, а Ag<sub>48</sub> серебряные нанотрубки - в 4 раза прочнее.

*Qəbul olunma tarixi: 05.04.2021*