

UOT 539.19.01

## NANOHISSƏCİKLƏRİN BƏZİ PARAMETRLƏRİNİN TƏYİNİ HAQQINDA

M.A.Ramazanov, A.Q.Həsənov, F.H.Paşayev, A.T.Mahmood

Bakı Dövlət Universiteti,

AZ1148 Bakı, Z.Xəlilov küç. 23, e-mail: [hasanovarzuman@hotmail.com](mailto:hasanovarzuman@hotmail.com)

*İşdə eyni növ və ya müxtəlif növ atomlardan təşkil olunmuş verilmiş ölçülü nanohissəciklərdəki atomların sayının hesablanması məsələsinə baxılmışdır. Hesablamalar qızıl, gümüş, kadmium sulfid və titan dioksid nanohissəcikləri üçün aparılmışdır. Qeyd olunan nanohissəciklər üçün nəzəri vizual modellər qurulmuş və kvantmexaniki hesablamalar aparılmışdır. Hesablamalar qızıl və kadmium sulfid nanohissəcikləri üçün Sleyter atom orbitalları, gümüş və titan dioksid nanohissəcikləri üçün Gauss atom orbitalları bazisində aparılmışdır.*

**Açar sözlər:** kvantmexaniki hesablamalar, nanohissəciklər, nəzəri vizual modellər

Nanohissəciklərin xassələri onun ölçülərindən və nanohissəcikdəki atomların sayından asılıdır. Elmi ədəbiyyatda [1] eyni növ atomlardan təşkil olunmuş və verilmiş ölçülü nanohissəcikdəki atomların sayını təyin etmək üçün aşağıdakı ifadədən istifadə olunur:

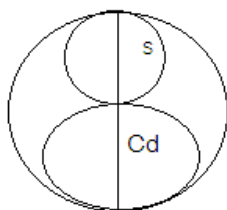
$$N = \frac{\pi \rho D^3 N_A}{6 M} \quad (1)$$

Bu zaman nanohissəcik “kip qablaşdırılmış” sfera formasında qəbul edilir. N – atomların sayı,  $\rho$  – materialın sıxlığı, D – sfera formalı nanohissəciyin diametri,  $N_A$  – Avogadro ədədi, molyar kütlədir.

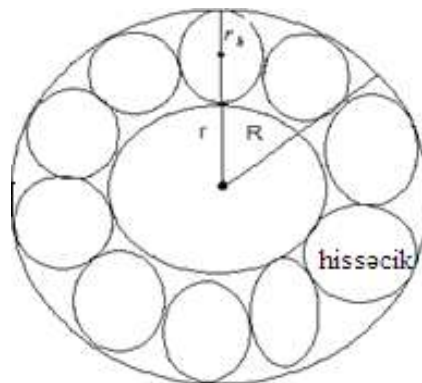
Müxtəlif atomlardan təşkil olunmuş nanoquruluşlar üçün (1) – dən istifadə

etmək mümkün deyil. Ədəbiyyatda belə nanoquruluşların ölçülərini və ondakı atomların sayını tapmaq üçün müxtəlif üsullar təklif olunmuşdur. Bu üsullar mürəkkəbdir və onlarla hesablamalar aparmaq çətindir. İşdə belə nanoquruluşların ölçüləri məlum olduqda ondakı atomların sayını tapmaq üçün üsullar təklif olunur. Nanohissəciklər sfera formasında qəbul edilir.

$(\text{CdS})_n$  nanohissəciyində n-in hesablanmasına baxaq. Sferik formalı CdS birləşməsinin ölçüsü  $r_h = r_{\text{cd}} + r_s$  kimi götürülə bilər (şəkil 1).  $r_{\text{cd}}$  və  $r_s$  kadmium və kükürd atomlarının kovalent radiuslarıdır:  $r_{\text{cd}} = 0.148 \text{ nm}$ ,  $r_s = 0.102 \text{ nm}$ -dir.



Şəkil 1.



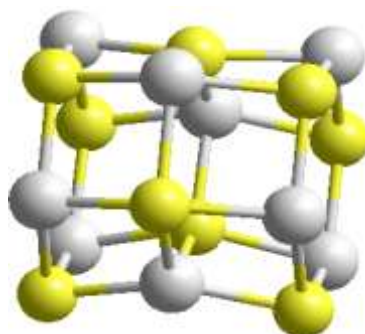
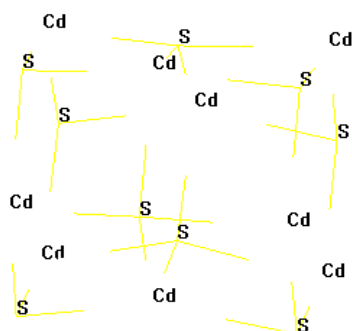
Şəkil 2.



Hesab olunur ki, CdS molekulları  $r$  radiuslu boş sferanın səthində yerləşmişlər (Şəkil 2). Onda verilmiş  $R$  – radiuslu nanohissəcik üçün

$$n = \frac{R^3 - r_h^3}{r_h^3} \quad (2)$$

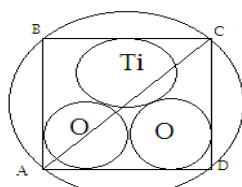
kimi hesablanı bilər. Burada  $r = R - 2r_h$ .



Şəkil 3.  $(\text{CdS})_9$  nanohissəciyinin nəzəri vizual modeli

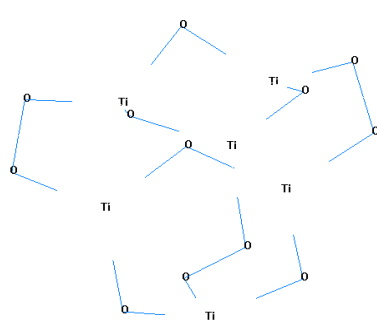
$(\text{TiO}_2)_n$  nanohissəciyinə baxaq.  $\text{TiO}_2$  birləşməsinin forması Şəkil 4-dəki kimi qəbul edilir. Onda sferik formalı  $\text{TiO}_2$  birləşməsinin radiusu

$$r_h = \frac{AC}{2} = \frac{\sqrt{AD^2 + DC^2}}{2} \quad \text{kimi təyin oluna bilər.}$$



Şəkil 4.

$AD = 4 \cdot r_0$  və  $DC = 2 \cdot (r_0 + r_{Ti})$ ,  $r_0 = 0,073 \text{ nm}$ ,  $r_{Ti} = 0,132 \text{ nm}$  oksigen və titan atomlarının kovalent radiuslarıdır.  $\text{TiO}_2$  birləşmələri də boş sferanın səthində yerləşmiş hesab olunur (Şəkil 2).  $(\text{TiO}_2)_n$  nanohissəciyi üçün də  $n$  (2) düsturu ilə hesablanı bilər.  $R = 0,46 \text{ nm}$  olduqda  $n \approx 6$  alınır. Atomların ümumi sayı  $N=18$  olar.  $(\text{TiO}_2)_6$  nanohissəciyinin nəzəri vizual modeli qurulmuş (Şəkil 5) və kvantmexaniki hesablamalar aparılmışdır.

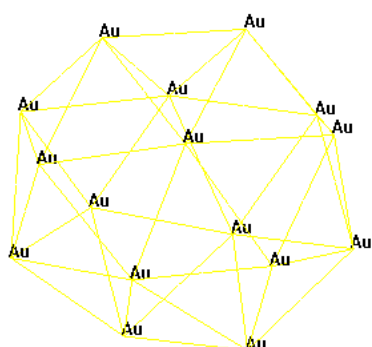


Şəkil 5.  $(\text{TiO}_2)_6$  nanohissəciyinin nəzəri vizual modeli

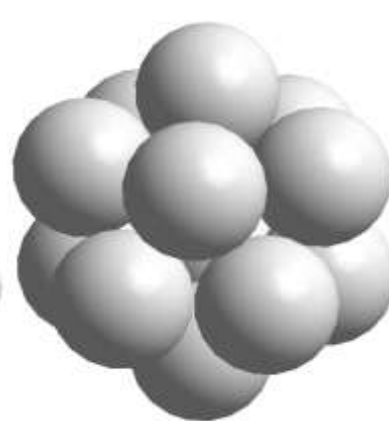
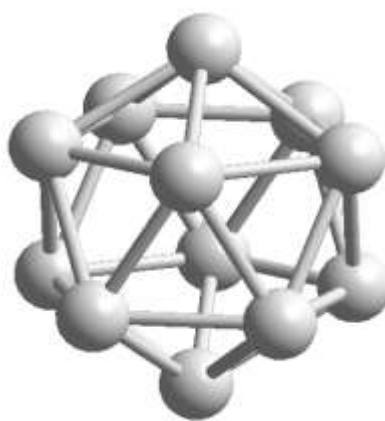
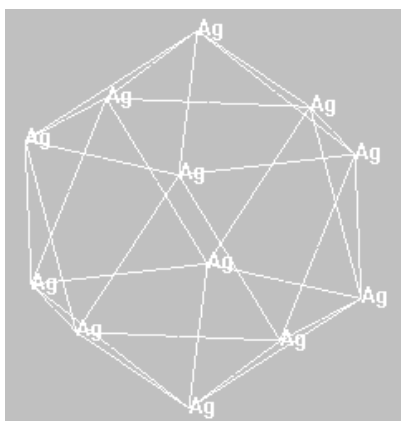


Hesablamalar nəticəsində  $D \approx 0,8 \text{ nm}$  ölçülü qızıl və gümüş nanohissəcikləri üçün, uyğun olaraq,  $N=16$  və  $N=12$  alınmışdır.  $\text{Au}_{16}$  və  $\text{Ag}_{12}$  nanohissəciklərinin

nəzəri vizual (Şəkil 6 və 7) modellər qurulmuş [2-3] və bu modellər əsasında kvantmexaniki hesablamalar aparılmışdır.



Şəkil 6.  $\text{Au}_{16}$  nanohissəciyinin nəzəri vizual modeli



Şəkil 7.  $\text{Ag}_{12}$  nanohissəciyinin nəzəri vizual modeli

$\text{Ag}_{12}$  və  $(\text{TiO}_2)_6$  nanohissəcikləri üçün hesablamalar Xartri – Fok – Rutan (XFR) metodu ilə aparılmışdır. Bazis atom orbitalları kimi gümüş atomlarının  $1s$ -,  $2s$ -,  $2p_x$ -,  $2p_y$ -,  $2p_z$ -,  $3s$ -,  $3p_x$ -,  $3p_y$ -,  $3p_z$ -,  $3d_{x^2-y^2}$ -,  $3d_{y^2-z^2}$ -,  $3d_{xy}$ -,  $3d_{xz}$ -,  $3d_{yz}$ -,  $4s$ -,  $4p_x$ -,  $4p_y$ -,  $4p_z$ -,  $4d_{x^2-y^2}$ -,  $4d_{y^2-z^2}$ -,  $4d_{xy}$ -,  $4d_{xz}$ -,  $4d_{yz}$ -,  $5s$ -,  $5p_x$ -,  $5p_y$ -,  $5p_z$ -, titan atomlarının  $1s$ -,  $2s$ -,  $2p_x$ -,  $2p_y$ -,  $2p_z$ -,  $3s$ -,  $3p_x$ -,  $3p_y$ -,  $3p_z$ -,  $3d_{x^2-y^2}$ -,  $3d_{y^2-z^2}$ -,  $3d_{xy}$ -,  $3d_{xz}$ -,  $3d_{yz}$ -,  $4s$ -,  $4p_x$ -,  $4p_y$ -,  $4p_z$ -, oksigen atomlarının  $1s$ -,  $2s$ -,  $2p_x$ -,  $2p_y$ -,  $2p_z$ - atom orbitallarından istifadə edilmişdir. Atom

orbitalları olaraq Gauss funksiyalarından istifadə olunmuşdur. Molekulyar orbitallar qeyd olunan atom orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində axtarılmışdır [4]. Hesablamalar zamanı Mathcad, MS Excel və HyperChem proqramları (Free) istifadə olunmuşdur.

$\text{Au}_{16}$  və  $(\text{CdS})_9$  nanohissəcikləri üçün hesablamalar valent elektronları yaxınlaşmasında aparılmışdır və molekulyar orbitallar valent elektronların atom orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində axtarılmışdır. Atom orbitalları kimi Sleyter



funksiyalarından istifadə olunmuşdur. Məlumdur ki, Sleyter funksiyaları valent oblastda elektronun halını daha yaxşı təsvir edir [5] və son zamanlar aparılan kvantmexaniki hesablamalarda əsasən Sleyter funksiyalarından istifadə edilir. İşdə  $Au_{16}$  və  $(CdS)_9$  nanohissəcikləri üçün hesablamalar Volfberq - Helmhols (VH) metodu ilə müəlliflərin tərtib etdikləri kompüter proqramı əsasında aparılmışdır.

VH metodu ilə hesablamalar zamanı effektiv Hamilton operatorunun matris elementlərini və Sleyter atom orbitalları daxil olan örtmə integrallarını hesablamaq

lazım gəlir. Hamilton operatorunun matris elementləri atomların ionlaşma potensialından və örtmə integrallarından istifadə etməklə qiymətləndirilir [6-8]. Sleyter atom orbitallı örtmə integrallarını hesablamaq üçün ədəbiyyatdan məlum olan analitik ifadələrdən istifadə olunmuşdur [9]. Hesablamalar zamanı atom orbitalları kimi Au atomlarının  $6s$ -,  $6p_x$ -,  $6p_y$  və  $6p_z$ , Cd atomlarının  $5s$ -,  $5p_x$ -,  $5p_y$ - və  $5p_z$ , S atomlarının isə  $3s$ -,  $3p_x$ -,  $p_y$ - və  $5p_z$ , - Sleyter funksiyalarından istifadə olunmuşdur.

### KOMPÜTER HESABLAMALARI

Kvantmexaniki hesablamalar nəticəsində  $Au_{16}$ ,  $Ag_{12}$ ,  $(CdS)_9$  və  $(TiO_2)_6$  nanohissəciklərinin molekulyar orbitallarının analitik ifadələri tapılmış,  $E$  – tam və  $\varepsilon$  – orbital enerjiləri hesablanmışdır. Nanohissəciyin  $I_p$  – ionlaşma potensialının qiyməti əks işarə ilə elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisinə bərabər götürülmüşdür:  $I_p = -\varepsilon_{YMO}$ .  $\Delta E = E_{(AB)_n} - n \cdot E_{AB}$  düsturu ilə nanohissəciklərin stabillik

parametrlərinin qiyməti tapılmışdır.  $\Delta E < 0$  olduqda material stabil hesab olunur.

Qadağan olunmuş zonanın eni  $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO}$  kimi hesablanır. Burada  $\varepsilon_{ABMO}$  – ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisidir. Nanohissəciyin şüalandıra biləcəyi fotonun dalğa uzunluğu

$$\lambda = \frac{c \cdot h}{(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO}) \times 1,6 \times 10^{-19}} \times 10^9 \text{ nm}$$

düsturu ilə hesablanı bilər. Hesablamaların nəticələri cədvəldə verilmişdir:

**Cədvəl .** Kompüter hesablamalarının nəticələri

N	Nano-particles	E (a.u.)	$\Delta E$ ( a.u.)	$I_p$ (eV)	$\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YMO}$ (eV)	$\lambda$ (nm)
1	$Au_{16}$	-6.339366	-0.26367	3.703389914	0.4675225	2,7
2	$Ag_{12}$	-61797.168985	-2.26925	2.464504	4.194947	0,3
3	$(CdS)_9$	-39.103686	-0.650808	9.858220	0.099839	12,4
4	$(TiO_2)_6$	-5926.024383	-4.557863	2.199590	3.227303	0,39

### NƏTİCƏLƏR

Hesablamaların nəticəsinə əsasən  $Au_{16}$  nanohissəciyinin keçirici,  $(CdS)_9$  - yarı keçirici,  $Ag_{12}$  – geniş zolaqlı

yarımkeçirici material,  $(TiO_2)_6$  – geniş zolaqlı yarı keçirici stabil materiallar olduğu müəyyən edilmişdir.



## ƏDƏBİYYAT

1. Liu X., Atwater M., Wang J., & Huo Q. Extinction coefficient of gold nanoparticles with different sizes and different capping ligands. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*. 2007 Jul 1;58(1):3-7.
2. Gasanov A.G. Mathematical modeling and computer calculations of nanosystems. Baku, 2013, "Laman nashriyyat poligrafiya", 234p.
3. Вьюрков В.В., Орликовский А.А., Семенихин И.А. и др. Математическое и компьютерное моделирование наносистем. Учеб. пособие, Москва. 2011, 152с. V'jurkov V.V., Orlikovskij A.A., Semenihin I.A. i dr. *Matematicheskoe i komp'yuternoe modelirovanie nanosistem. Ucheb. posobie, Moskva. 2011, 152s.*
4. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов на/Д: Феникс, 2010, 560 с. Minkin V.I., Simkin B.Ja., Minjaev R.M. *Teorija stroenija molekul. Rostov na/D: Feniks, 2010, 560 s.*
5. Guseinov I.I. Comment on "Evaluation of Two-Center Overlap and Nuclear-Attraction Integrals over Slater-Type Orbitals with Integer and Noninteger Principal Quantum Numbers". // *Int. J. Quantum Chem.*, **91**, 62, (2003).
6. Ramazanov M.A., Pashaev F.G., Gasanov A.G. et al. The quantum mechanical study of cadmium sulfur nanoparticles in basis of STO's. // *Chalcogenide Letters*, Vol. 11, No. 7, July 2014, p. 359 – 364.
7. Pashaev F.G., Gasanov A.G. and Mahmood A.T. The Study of Gold Nanoparticles in basis of Slater Functions. // *J. Nano. Adv. Mat.* 2, No. 1, 35-41 (2014).
8. Paşayev F.H., Həsənov A.Q., Mahmood A.T., Quliyeva V.F. Fenol və ozonlaşmış fenol molekullarının elektron quruluşunun kvant-mexaniki tədqiqi. // *Kimya problemləri jurnalı*, N3, 2013, s.325-330.
9. Pashaev F.G. // *J. Math. Chem.*, **45**, 884 (2009).

## ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ НЕКОТОРЫХ ПАРАМЕТРОВ НАНОЧАСТИЦ

**М.А.Рамазанов, А.Г.Гасанов, Ф.Г.Пашаев, А.Т.Махмуд**

Бакинский Государственный Университет

AZ 1148, Баку, ул.З.Халилова, 23; e-mail: [hasanovarzuman@hotmail.com](mailto:hasanovarzuman@hotmail.com)

В работе рассмотрены способы определения числа атомов наночастиц в зависимости от их размеров. Вычисления проводились для наночастиц золота, серебра, сульфида кадмия и диоксида титана. Построены теоретические визуальные модели и проведены квантовомеханические расчеты. Для наночастиц золота и сульфида кадмия расчеты проводились на базе Слейтеровских атомных орбиталей, а для наночастиц серебра и диоксида титана - на базе Гауссовских атомных орбиталей.

**Ключевые слова:** квантовомеханические вычисления, наночастицы, теоретические визуальные модели.

## ON DETERMINATION OF SOME PARAMETERS OF NANOPARTICLES

**M.A.Ramazanov, A.G.Gasanov, F.G.Pashaev, A.T.Mahmood**

Baku State University,

Z.Xalilov str., 23, Baku AZ 1148, Azerbaijan Republic, e-mail: [hasanovarzuman@hotmail.com](mailto:hasanovarzuman@hotmail.com)

The work deals with some methods for determination of the number of atoms of nanoparticles depending upon their size. Calculations were made conformably to gold, silver, cadmium sulfide and titan dioxide. Theoretical visual models built and quantum mechanical calculations made. Calculations for gold and cadmium sulfide nanoparticles have been carried out on the basis of Slater functions and calculations for silver and titan dioxide nanoparticles carried out on the basis of Gauss functions.

**Keywords:** quantum mechanical calculations, nanoparticles, theoretical visual models.

Redaksiyaya daxil olub 19.09.2014.