

UOT 54.06

SİR KONİUM DİOKSİD NANO HİSSƏCİYİ VƏ ONUN NANOKOMPOZİSİYALARININ
MODELLƏŞDİRİLMƏSİ VƏ TƏDQIQI

A.Q.Həsənov

Bakı Dövlət Universiteti

AZ 1148 Bakı, Z.Xəlilov küç., 23; e-mail: hasanovarzuman@hotmail.com

Sirkonium dioksid nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının nəzəri vizual modelləri qurulmuşdur. Bu modellər əsasında Xartri-Fok-Rutan metodu ilə kompüter hesablamaları aparılmışdır. Molekulyar orbitallar nanohissəciyə və onun seçilmiş nanokompozisiyalarına daxil olan atomların atom orbitallarının xətti kombinasiyaları şəklində axtarılmışdır. Atom orbitalları olaraq Zr atomlarının $1s$ -, $2s$ -, $2p_x$ -, $2p_y$ -, $2p_z$ -, $3s$ -, $3p_x$ -, $3p_y$ -, $3p_z$ -, $3dx^2$ -, $3dy^2$ -, $3dz^2$ -, $3dxy$ -, $3dxz$ -, $3dyz$ -, $4s$ -, $4p_x$ -, $4p_y$ -, $4p_z$ -, $4dx^2$ -, $4dy^2$ -, $4dz^2$ -, $4dxy$ -, $4dxz$ -, $4dyz$ -, $5s$ -, $5p_x$ -, $5p_y$ -, $5p_z$ -, C, O və F atomlarının $1s$ -, $2s$ -, $2p_x$ -, $2p_y$ -, $2p_z$ -, H atomlarının isə $1s$ -orbitallarından istifadə edilmişdir. Atom orbitalları kimi Gauss funksiyalarından istifadə olunmuşdur. Naməlum xətti kombinasiya əmsalları XFR tənlikləri həll olunaraq tapılmışdır. Hesablamalar nəticəsində nanohissəciyin və onun nanokompozisiyalarının orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektron enerjisinin qiymətləri, nanohissəciyə və onun nanokompozisiyalarına daxil olan atomların effektiv yükləri hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, sirkonium dioksid nanohissəciyi və onun $PP+(ZrO_2)_n$, $PVDF+(ZrO_2)_n$ nanokompozisiyaları möhkəm, nukleofil və stabil dielektrik materiallardır.

Açar sözlər: nanotexnologiya, kompüter modelləşdirmə, kvantmexaniki hesablama.

PACS: 81.07.-b, 07.05.Tp, 03.67.Lx.

1.İsifadə olunan metod

Sirkonium dioksid nanohissəciklərinin geniş təbii sahələri vardır [1]. Buna görə də sirkonium dioksid nanohissəcikləri və onların nanokompozisiyalarının elektron quruluşunun kvantmexaniki metodlarla öyrənilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır [2,3]. Təqdim olunan işdə sirkonium dioksid nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının elektron quruluşu və xassələri Xartri-Fok-Rutan (XFR) metodu ilə öyrənilmişdir. XFR metoduna görə molekul daxilində elektronun halı U_i -molekulyar orbitalları adlanan birelektronlu dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. U_i -lər molekuldakı atomların χ_q atom orbitallarının xətti kombinasiyaları şəklində axtarılır[2-4]:

$$U_i = \sum_q c_{qi} \chi_q \quad (1)$$

X_q atom orbitalları məlum hesab olunur. C_{qi} naməlum əmsalları XFR tənliklərinin həllindən tapılır. Bu tənlikləri matris formasında aşağıdakı kimi yazmaq olar:

$$FC = ESC \quad (2)$$

Burada E-elektronların orbital enerjiləri, S- χ_p və χ_q atom orbitalları arasında örtmə matris elementləri, C-naməlum əmsallar matrisidir. F-Fok operatorunun matris elementləridir və onlar C naməlum kəmiyyətlərindən asılı olur. Unitar çevrilmə vasitəsi ilə (2) ümumiləşmiş məxsusi qiymətlər tənliyini adi məxsusi qiymətlər tənliyinə gətirmək olar. Hesablamalar aparmaqla ε_i -orbital enerjiləri və C_{qi} əmsallarının qiymətləri tapılır. C_{qi} -əmsallarının qiymətləri əsasında molekulyar orbitalların analitik ifadəsini almaq olar. Bu da nanoobyektlərin bir sıra parametrlərini, məsələn, atomların effektiv yüklərini hesablamağa imkan verir. ε_i -məxsusi qiymətləri əsasında sirkonium dioksid nanohissəciyi və onun $PP+ZrO_2$, $PVDF+ZrO_2$ nanokompozisiyalarının tam enerjisini, ionlaşma potensialının qiymətini, elektrik keçiriciliyini, möhkəmliyini və s. tədqiq etmək olar. Hesablamalar zamanı χ_q atom orbitalları olaraq Zr atomundan $1s$ -, $2s$ -, $2p_x$ -, $2p_y$ -, $2p_z$ -,

3s-, 3p_x-, 3p_y-, 3p_z-, 3dx²-, 3dy²-, 3dz²-, 3dxy-, 3dxz-, 3dyz-, 4s-, 4p_x-, 4p_y-, 4p_z-, 4dx²-, 4dy²-, 4dz²-, 4dxy-, 4dxz-, 4dyz-, 5s-, 5p_x-, 5p_y-, 5p_z-, C, O və F atomlarından 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, H atomundan isə 1s-

orbitalından istifadə edilmişdir. Atom orbitalları kimi Gauss funksiyalarından istifadə olunmuşdur [5]. Hesablamalar zamanı Mathcad, MS Excel və HyperChem proqramları(free) istifadə olunmuşdur.

2. ZrO₂ nanohissəciyi üçün kompüter hesablamaları

Əvvəlcə (ZrO₂)₉ nanohissəciyinə baxılmışdır. Məlumdur ki, nanohissəciklərin quruluşu və xassələri nanohissəcikdə atomların sayı və ölçüsü ilə müəyyən olunur. N sayda ZrO₂ – dən ibarət olan nanohissəciyin ölçüsü

$$D = 2 * r * \sqrt[3]{N} \quad (3)$$

düsturu ilə hesablanabilir. Burada $r = r_1 + 2 * r_2$, r_1 – Zr atomunun, r_2 – O atomunun kovalent radiusu, N – ZrO₂-nin sayıdır. $r_1=0.145\text{nm}$, $r_2=0.073\text{ nm}$ və $N=9$

olduqda sirkonium dioksid nanohissəciyin (3) düsturu ilə hesablanmış ölçüsü $D=1.2\text{nm}$ alınır. Hesablamalar zamanı hər Zr atomundan 29 olmaqla $29*9=261$, O atomundan 5 olmaqla $5*18=90$ atom orbitalından istifadə edilmişdir. (1) düsturu əsasında 351 sayda molekulyar orbital qurulmuşdur. Nanohissəciyin 504 sayda elektronu ən aşağı enerjili 252 enerji səviyyəsini doldurur. Şəkil 1-də (ZrO₂)₉ üçün seçilmiş fəza quruluşu verilmişdir.



Tam enerji = -32876.588165500 (a.v.)

Elektronların kinetik enerjisi = 32503.105788184 (a.v.)

Virial şərti (-V/T) = 2.0115

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları(Ånqstremlə)		
			x	y	z
3	40	0.598598	-5.59789930	-3.25602845	4.57141363
4	40	0.604038	-4.88144756	1.56574038	2.58681135
6	40	0.544658	1.60081672	-1.59456895	1.09249355
9	40	0.555248	0.04365576	0.62811962	0.47349562
12	40	0.557386	-2.57465918	1.91757279	1.08417086
16	40	0.583131	-6.19626588	-0.56023420	3.98748188
21	40	0.597746	1.38482183	-4.15952085	2.59048731
24	40	0.615033	-0.60326842	-5.54230784	3.92755547
27	40	0.554658	-3.41814080	-5.19790998	4.57141363
10	8	-0.305858	-0.91698385	2.46106421	-0.23106174
11	8	-0.219605	-1.60751114	0.10318373	1.77855513
5	8	-0.296791	-4.48567155	1.08005868	0.48934009
13	8	-0.315831	-3.48652865	3.22512073	2.58806797

14	8	-0.224028	-4.14695010	0.11949550	4.04116552
15	8	-0.319458	-6.93123559	1.38531135	3.30737646
1	8	-0.316416	-5.59789930	-5.43916095	4.57141363
17	8	-0.320228	-6.87699465	-1.84109068	5.63233928
18	8	-0.286939	-5.91718841	-2.25867702	2.65584037
19	8	-0.148577	-0.07703159	-2.85112231	1.67176557
20	8	-0.284285	3.06128100	-3.14055177	1.62732641
7	8	-0.296105	1.65449015	0.43363490	1.92340257
22	8	-0.443416	0.90946610	-6.28998514	2.54842251
23	8	-0.403699	0.67817118	-3.91265932	4.62562702
8	8	-0.288813	0.88542916	-0.90666249	-0.83773203
25	8	-0.162045	-2.31290783	-4.89681121	2.72929060
26	8	-0.288281	-1.89728567	-6.57080457	5.35210902
2	8	-0.290117	-3.55974123	-3.17068555	5.34401980

ZrO₂ nanohissəciyi üçün alınmış nəticələrin interpretasiyası.

(ZrO₂)₉ nanohissəciyinin 504 elektronu ən aşağı enerji səviyyəsindən başlayaraq iki-iki səviyyələrdə yerləşdirilir. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisi $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{252} = -6.538526\text{eV}$, ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi isə $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{253} = 3.105533\text{eV}$. Onda ionlaşma potensialın qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{YTMO} = 6.538526\text{eV}$ [3]. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti $\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO} = 9.644059\text{eV}$. Bu isə (ZrO₂)₉ nanohissəciyinin dielektrik material olduğunu göstərir. Möhkəmlik $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanırsa və $\eta = 4.8220295\text{eV}$. $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan (ZrO₂)₉ nanohissəciyi möhkəm material hesab

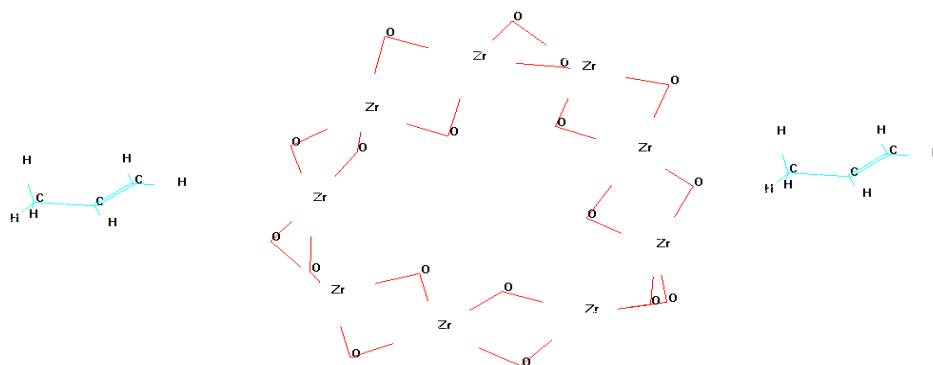
olunur. ε_{ABMO} müsbət işarəli olduğuna görə (ZrO₂)₉ nanohissəciyinin nuklefidir. (ZrO₂)₉ nanohissəciyinin stabilliyi

$\Delta E((ZrO_2)_9) = E_{(ZrO_2)_9} - 4.5 \cdot E_{Zr_2} - 9E_{O_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\Delta E((ZrO_2)_9)$ (ZrO₂)₉ nanohissəciyinin stabilliyini müəyyən edən parametrdir. $\Delta E((ZrO_2)_9) > 0$ olduqda material qeyri stabil, $\Delta E((ZrO_2)_9) < 0$ olduqda material stabil hesab olunur. $E_{(ZrO_2)_9} - (ZrO_2)_9$ nanohissəciyinin, $E_{Zr_2} - Zr_2$ -nin hesablanmış tam enerjisidir. $E_{(ZrO_2)_9} = -32876.58817\text{a.v.}$, $E_{Zr_2} = -7009.498508\text{a.v.}$, $E_{O_2} = -147.0186422\text{a.v.}$ olduğundan $\Delta E((ZrO_2)_9) = -10.67709958\text{a.v.}$ $\Delta E((ZrO_2)_9) < 0$ olduğundan (ZrO₂)₉ nanohissəciyi stabildir.

3. PP+(ZrO₂)₉ nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları

PP+(ZrO₂)₉ nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki C₃H₆ polimeri arasında yerləşdirilmiş (ZrO₂)₉ nanohissəciyinə baxılmışdır. Hesablamalar zamanı hər C və O atomundan 5, H atomundan bir, Zr atomundan 29 olmaqla

393 bazis funksiyalarından istifadə edilmişdir. Nanokompozitin 552 sayda elektronu ən aşağı enerjili 276 enerji səviyyəsini doldurur. Şəkil 2-də PP+ZrO₂ nanokompoziti üçün seçilmiş nəzəri modelin fəza quruluşu verilmişdir.

Şəkil 2. PP+(ZrO₂)₉ nanokompoziti

Tam enerji = -33108.030802107 (a.v.)

Elektronların kinetik enerjisi = 32733.222157158 (a.v.)

Virial şərti (-V/T) = 2.0115

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z Atomu	Yükü	Koordinatları(Anqstremlə)			
		x	y	z	
3	40	0.630620	-5.11733838	-3.11664840	5.57830621
4	40	0.629024	-5.19863361	1.04397802	2.11111875
6	40	0.620954	1.38380247	-1.53491604	0.60372870
9	40	0.629322	-0.37856323	0.41566167	-0.29362379
12	40	0.621285	-3.02182250	1.46774231	0.32813261
16	40	0.623773	-6.02207405	-0.71709204	4.17277707
21	40	0.631756	1.39395580	-3.76509782	2.54960869
24	40	0.632975	-0.31447251	-5.14107968	4.26974221
27	40	0.622636	-2.97011268	-4.87776322	5.57830621
10	8	-0.326982	-1.71992453	1.72795796	-1.40994106
11	8	-0.294469	-1.36486567	0.87982317	1.59566024
5	8	-0.303597	-4.34866774	-0.23360799	0.55673787
13	8	-0.323662	-4.50767023	2.86090010	1.12230064
14	8	-0.305895	-4.36919528	0.68978354	4.10126045
15	8	-0.324104	-7.19654586	0.43972706	2.73649177
1	8	-0.320251	-5.11733838	-5.29132671	5.57830621
17	8	-0.327317	-6.71181973	-1.68779062	6.00960645
18	8	-0.292871	-5.04591676	-2.52343748	3.48126676
19	8	-0.287712	0.27301375	-1.90168488	2.42600552
20	8	-0.329566	2.86671677	-3.06798760	1.09543231
7	8	-0.320372	1.76279253	0.54657000	0.05742369
22	8	-0.317375	0.32542311	-5.65251125	2.25991949
23	8	-0.317313	1.51347431	-4.01990971	4.70181639
8	8	-0.313165	-0.28636587	-1.71636275	-0.77192554
25	8	-0.286570	-2.12113395	-4.03544569	3.77185902
26	8	-0.329889	-1.34714605	-6.33218978	5.78374709
2	8	-0.314399	-3.21354622	-3.00415997	6.64848321
28	6	-0.142106	2.36873888	-10.81423945	1.13218479
29	6	-0.049198	2.36873888	-9.47423945	1.13218479
30	6	-0.186712	1.05238026	-8.71423945	1.13218479
37	6	-0.145012	-9.64067087	2.89765291	2.83169842
38	6	-0.051022	-9.64067087	4.23765291	2.83169842
39	6	-0.183894	-10.95702949	4.99765291	2.83169842
34	1	0.056446	3.30404631	-8.93423945	1.13218479

35	1	0.057283	3.30404631	-11.35423945	1.13218479
36	1	0.057409	1.43343144	-11.35423945	1.13218479
31	1	0.072952	1.25155942	-7.64259228	1.13218479
32	1	0.067634	0.48081618	-8.97755874	0.24219746
33	1	0.063452	0.48080373	-8.97756447	2.02216243
40	1	0.062008	-10.75785033	6.06930009	2.83169842
41	1	0.067556	-11.52859357	4.73433363	1.94171108
42	1	0.067273	-11.52860602	4.73432789	3.72167605
43	1	0.065548	-8.70536344	2.35765291	2.83169842
44	1	0.057145	-10.57597831	2.35765291	2.83169842
45	1	0.056401	-8.70536344	4.77765291	2.83169842

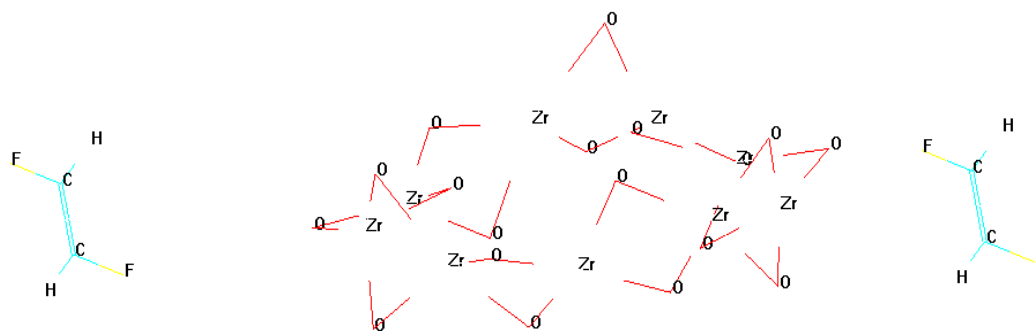
PP+(ZrO₂)₉ nanokompoziti üçün alınmış nəticələrin interpretasiyası. PP+(ZrO₂)₉ nanokompozitinin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{276} = 7.261014\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{277} - \varepsilon_{276} = 10.393691\text{eV}$. Bu isə PP+(ZrO₂)₉ nanokompozitinin dielektrik material olduğunu göstərir. Nanokompozitin möhkəmliyi $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO})$ düsturu ilə hesablanır. $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{277} = 3.132677\text{eV}$. $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{276} = -7.261014\text{eV}$. Beləliklə $\eta = 5.1968455\text{a.v.}$ $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan PP+(ZrO₂)₉ nanokompoziti möhkəm material hesab olunur. ε_{ABMO} müsbət işarəli olduğuna

görə PP+ZrO₂ nanokompoziti nuklefidir. PP+(ZrO₂)₉ nanokompozitinin stabilliyi $\Delta E(PP+(ZrO_2)_9) = E_{PP+(ZrO_2)_9} - 4.5 \cdot E_{Zr_2} - 9E_{O_2} - 3E_{C_2} - 6E_{H_2}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $E_{PP+(ZrO_2)_9}$, PP+(ZrO₂)₉ nanokompozitinin, E_{Zr_2} -Zr₂-nin, E_{O_2} -O₂-nin, E_{C_2} -C₂-nin, E_{H_2} -H₂-nin tam enerjisidir. $E_{PP+ZrO_2} = -33108.0308$ a.v., $E_{Zr_2} = -7009.498508$ a.v., $E_{O_2} = -147.0186422$ a.v., $E_{C_2} = -74.31543142$ a.v., $E_{H_2} = -1.111298185$ a.v., olduğundan $\Delta E(PP+ZrO_2) = -12.50565282$ a.v. $\Delta E(PP+(ZrO_2)_9) < 0$ olduğundan PP+(ZrO₂)₉ nanokompoziti stabildir.

4. PVDF+(ZrO₂)₉ nanokompoziti üçün kompüter hesablamaları

PVDF+(ZrO₂)₉ nanokompozitinin nəzəri modeli kimi iki C₂H₂F₂ polimeri arasında yerləşdirilmiş (ZrO₂)₉ nanohissəciyinə baxılmışdır. Hesablamalar zamanı hər C, O və F atomlarından 5, H atomundan bir, Zr atomundan 29 olmaqla 395 sayda bazis

funksiyalarından istifadə edilmiş və 395 sayda molekulyar orbital qurulmuşdur. Nanokompozitin 568 sayda elektronu ən aşağı enerjili 284 enerji səviyyəsini doldurur. PVDF+(ZrO₂)₉ nanokompoziti üçün seçilmiş nəzəri modelin fəza quruluşu Şəkil 3-də verilmişdir.



Şəkil 3. PVDF+ZrO₂ nanokompoziti

Tam enerji = -33420.315552295 (a.v.)

Elektronların kinetik enerjisi = 33042.025937857 (a.v.)

Virial şərti (-V/T) = 2.0114

ATOMLARIN EFFEKTİV YÜKLƏRİ VƏ KOORDİNATLARI

Z	Atomu	Yükü	Koordinatları (Ångströmlə)		
			x	y	z
3	40	0.728652	-2.70703131	-0.06666558	-0.81600220
4	40	0.631350	-4.57188493	1.74313904	3.65941109
6	40	0.649717	-1.57707908	-4.80446015	5.62678184
9	40	0.718785	-2.60397821	-2.25179120	6.94945200
12	40	0.590683	-4.19172849	0.03390851	5.84390659
16	40	0.590557	-3.93263000	2.11478104	1.07165100
21	40	0.650982	-0.48841303	-5.30658316	3.08136677
24	40	0.464143	0.22736622	-4.85550295	0.43625392
27	40	0.640047	-0.34558945	-2.78837955	-0.81600220
10	8	-0.331236	-4.36570081	-1.09749104	7.64945357
11	8	-0.299715	-2.23823895	-0.81298562	5.36646213
5	8	-0.314076	-4.63486179	2.17055050	5.70282406
13	8	-0.295425	-5.12785732	-0.41936391	3.89299198
14	8	-0.320676	-3.24650283	3.31223493	2.73276052
15	8	-0.312334	-5.85478147	2.10159245	2.01952148
1	8	-0.329415	-2.70703131	-2.34426078	-0.81600220
17	8	-0.307670	-2.60289789	0.35114025	1.30882563
18	8	-0.348749	-3.76069100	1.90139928	-1.08831444
19	8	-0.272986	-2.39764760	-4.47614013	3.60561004
20	8	-0.321849	-0.01956655	-6.18636940	5.00544529
7	8	-0.328293	-3.27483834	-4.31085846	6.83039074
22	8	-0.302763	-0.45914915	-3.34614129	1.97635877
23	8	-0.309801	-0.07562624	-6.58692122	1.40737696
8	8	-0.330573	-0.71615502	-3.31995814	6.89632676
25	8	-0.289886	-0.26648679	-4.88918238	-1.66433562
26	8	-0.327937	1.77261919	-3.58636883	-0.03457365
2	8	-0.338328	-0.94284377	-1.03146546	-1.83760484
28	9	-0.121458	-1.33022781	-9.45156900	8.36695600
29	6	0.048361	-1.33022781	-8.12156900	8.36695600
30	6	0.051394	-0.16975377	-7.45156900	8.36695600
33	9	-0.125101	-0.16975377	-6.12156900	8.36695600
34	9	-0.127995	-5.75462204	5.68222700	-2.04903700
35	6	0.049189	-4.59414800	7.68222700	-2.04903700
36	6	0.048838	-5.75462204	7.01222700	-2.04903700
39	9	-0.126806	-4.59414800	9.01222700	-2.04903700
32	1	0.087407	0.76555366	-7.99156900	8.36695600
37	1	0.077453	-3.65884056	7.14222700	-2.04903700
38	1	0.079324	-6.68992947	7.55222700	-2.04903700
31	1	0.076188	-2.26553525	-7.58156900	8.36695600

PVDF+_{(ZrO₂)₉} nanokompoziti üçün alınmış nəticələrin interpretasiyası. PVDF+_{(ZrO₂)₉} nanokompozitin ionlaşma potensialının qiyməti: $I_p = -\varepsilon_{284} = 5.626206\text{eV}$. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti: $\varepsilon_{285} - \varepsilon_{284} = 8.162517\text{eV}$. Bu isə nanokompozitin dielektrik material olduğunu

göstərir. Nanokompozitin möhkəmliyi $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ABMO} - \varepsilon_{YTMO}) = 4.0812585\text{a.v.}$ düsturu ilə hesablanır. Burada $\varepsilon_{ABMO} = \varepsilon_{285} = 2.536311\text{eV}$, $\varepsilon_{YTMO} = \varepsilon_{284} = -5.626206\text{eV}$. $\eta > 1\text{eV}$ olduğundan PVDF+_{(ZrO₂)₉} nanokompoziti möhkəm material hesab

olunur. ε_{ABMO} müsbət işarəli olduğuna görə PVDF+(ZrO₂)₉ nanokompoziti nukleofildir. Nanokompozitin stabilliyi $\Delta E(PVDF + (ZrO_2)_9) = E_{PVDF+(ZrO_2)_9} - 4,5 \cdot E_{Zr_2} - 9E_{O_2} - 2E_{F_2} - \frac{2E_{H_2}}{2} - 2E_{F_2}$ düsturu ilə hesablanır. $E_{PVDF+ZrO_2}$ - PVDF+(ZrO₂)₉ nanokompozitinin, E_{Zr_2} -Zr₂-nin, E_{O_2} -O₂-nin, E_{C_2} -C₂-nin, E_{H_2} -H₂-nin və E_{F_2} - F₂-nin tam enerjisidir. $E_{PVDF+(ZrO_2)_9} = -$

33420.315552295a.v., $E_{Zr_2} = -7009.498508a.v.$, $E_{O_2} = -147.0186422a.v.$, $E_{C_2} = -74.31543142$ a.v., $E_{H_2} = -1.111298185a.v.$, $E_{F_2} = -193.9593201a.v.$ olduğundan $\Delta E(PVDF + (ZrO_2)_9) = -11.63238688a.v.$ olduğundan $\Delta E(PVDF + (ZrO_2)_9) < 0$ olduğundan PVDF+(ZrO₂)₉ nanokompoziti stabildir.

5. Nəticə

Sirkonium dioksid nanohissəciyi və onun PP+(ZrO₂)₉, PVDF+(ZrO₂)₉ nanokompozisiyalarının nəzəri vizual modelləri qurulmuşdur. Bu modellər əsasında XFR metodu ilə kompüterdə hesablamalar aparılmışdır. Sirkonium dioksid nanohissəciyi və onun nanokompozisiyalarının orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektron enerjisinin

qiymətləri, nanohissəciyə və onun nanokompozisiyalarına daxil olan atomların effektiv yükləri hesablanmışdır[4]. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, sirkonium dioksid nanohissəciyi və onun PP+(ZrO₂)₉, PVDF+(ZrO₂)₉ nanokompozisiyaları möhkəm, nukleofil və stabil dielektrik materiallardır.

ƏDƏBİYYAT

1. Clifford Y. Tai, Bor-Yuan Hsiao, Hsien-Yi Chiu. Preparation of spherical hydrous-zirconia nanoparticles by low temperature hydrolysis in a reverse microemulsion. Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects. 237 (2004). 105–111.
2. Вьюрков В.В., Орликовский А.А., Семенихин И.А. и др. Математическое и компьютерное моделирование наносистем. Учеб. Пособие. Москва Изд., ОАО «Можайский полиграфический комбинат» 2011. 152с.

3. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов на/Д: Феникс. 2010. 560 с.
4. Нəсəнов А.Қ. Qrafenin riyazi modelləşdirilməsi və kompüter tədqiqi. BDU-nun xəbərləri. №2. 2011. s.171-179.
5. Дегтяренко Н.Н. Специальные разделы квантово-механических методов расчетов свойств кластеров и наноматериалов: Учебное пособие. М.: МИФИ. 2008. 156 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦЫ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ И ЕЕ НАНОКОМПОЗИЦИЙ

А.Г.Гасанов

Построена теоретическая визуальная модель наночастицы диоксида циркония и ее наноконпозиций. На основе этих моделей проведены компьютерные вычисления методом Хартри-Фока-Рутана(ХФР). Молекулярные орбитали представлены в виде линейной комбинации атомных орбиталей атомов наночастицы и её наноконпозиций. В качестве атомных орбиталей использованы 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z-, 3s-, 3p_x-, 3p_y-, 3p_z-, 3dx²-, 3dy²-, 3dz²-, 3dx_y-, 3dx_z-, 3dy_z-, 4s-, 4p_x-, 4p_y-, 4p_z-, 4dx²-, 4dy²-, 4dz²-, 4dx_y-, 4dx_z-, 4dy_z-, 5s-, 5p_x-, 5p_y-, 5p_z-орбитали атомов Zr, 1s-, 2s-, 2p_x-, 2p_y-, 2p_z- орбитали атомов С, О вə F, 1s-орбитали атомов Н типа функций Гаусса. Численные значения неизвестных коэффициентов линейной комбинации найдены решением уравнений ХФР. В результате

расчетов вычислены орбитальные энергии, потенциал ионизации, полная электронная энергия, эффективные заряды атомов наночастицы диоксида циркония и ее нанокмпозиций. Результаты расчетов показывают, что наночастицы диоксида циркония и ее нанокмпозиции $PP+(ZrO_2)_n$, $PVDF+(ZrO_2)_n$ являются жесткими, нуклеофильными и устойчивыми диэлектрическими материалами.

Ключевые слова: нанотехнология, компьютерное моделирование. квантовомеханическое вычисление

PACS: 81.07.-b, 07.05.Tp, 03.67.Lx

MODELING AND RESEARCH INTO ZIRCONIUM DIOXIDE NANOPARTICLE AND ITS NANOCOMPOSITES

A.G.Hasanov

A theoretical visual model was constructed for zirconium dioxide nanoparticle and its nanocomposites. Computer calculations have been conducted on the basis of these models through Hartree - Fock - Roothan (HFR) method. Molecular orbitals are represented as a linear combination of atomic orbitals of nanoparticle atoms and its nanocomposites. As atomic orbitals there have been used $1s$ -, $2s$ -, $2p_x$ -, $2p_y$ -, $2p_z$ -, $3s$ -, $3p_x$ -, $3p_y$ -, $3p_z$ -, $3dx^2$ -, $3dy^2$ -, $3dz^2$ -, $3dxy$ -, $3dxz$ -, $3dyz$ -, $4s$ -, $4p_x$ -, $4p_y$ -, $4p_z$ -, $4dx^2$ -, $4dy^2$ -, $4dz^2$ -, $4dxy$ -, $4dxz$ -, $4dyz$ -, $5s$ -, $5p_x$ -, $5p_y$ -, $5p_z$ - atomic orbitals of Zr, $1s$ -, $2s$ -, $2p_x$ -, $2p_y$ -, $2p_z$ - atomic orbitals of C, O and F, $1s$ - atomic orbitals H. As atomic orbitals of Gauss functions type. Numerical values of unknown coefficients of linear combination have been identified through solving HFR equations. Calculations revealed orbital energies, ionization potential, total electronic energy, effective charges of zirconium dioxide nanoparticle atoms of and its nanocomposites. Results of calculations showed that zirconium dioxide nanoparticle and its $PP+(ZrO_2)_n$, $PVDF+(ZrO_2)_n$ nanocomposites are tough, nucleophile and stable dielectric materials.

Keywords: nanotechnology, computer modeling, quantum mechanical calculation.

PACS: 81.07.-b, 07.05.Tp, 03.67.Lx.

Redaksiyaya daxil olub 28.08.2013.