

(SiO₂)_n-NANOHISSƏCİYİNİN PARAMETRLƏRİNİN TƏYİNİ VƏ VİZUAL MODELİNİN QURULMASI

Paşayev F.H., Həsənov A.Q., Qasimova İ.R.

Bakı Dövlət Universiteti, Fizika fakültəsi

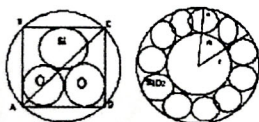
ilaheqasimova00@gmail.com

(SiO₂)_n-nanohissəciyinin modelini qurarkən onu təşkil edən elementlərin valentliyini nəzərə almaq əsas şərtidir. Bildiyimiz kimi silisium dəyişkən valentli olub 2 və ya 4 valentlik göstərir. Oksigen isə sabit valentli elementdir və 2 valentlik göstərir. (SiO₂)_n-nanohissəciyinin verilmiş kürəciyin səthi boyu paylandığını fərz edək. Kürənin dairələr toplusu olduğunu bilərək (SiO₂)_n-nanohissəciyinin səth boyu atomların paylandığı qanunauyğunluğunu tapa bilirik və atomların sayı məlum olduqda asanlıqla modelini qura bilirik.

(SiO₂)_n-nanohissəciyinin parametrlərini təyin edək. Fərz edək ki, onun ölçüsü $D_{SiO_2} = 1.08 \text{ nm}$ olarsa, onda $R_{SiO_2} = \frac{D}{2} = 0.505 \text{ nm}$ olar. Müxtəlif atomlardan təşkil olunmuş nanohissəcikdəki SiO₂ birləşmələrinin sayını $n = \left(\frac{R}{r_n}\right)^3$ düsturu ilə hesablamaq olar. Burada R kürə formada təsəvvür olunan nanohissəciyin radiusu, r_n SiO₂ molekulunu daxilində saxlayan kürənin radiusudur. Məlumdur ki, Si və O atomlarının kovalent radiuslarının uzunluqları $r_1 = 0.111$ və $r_2 = 0.073$ -dir. Əgər (SiO₂)_n nanohissəciyinin ölçüsü $D = 1.01 \text{ nm}$ olarsa, onda n -i hesablamaq olar. Şəkil 1-dən alırıq:

$$AD = 4 \cdot r_2 = 0.292, CD = 2 \cdot (r_1 + r_2) = 0.368 \quad (1)$$

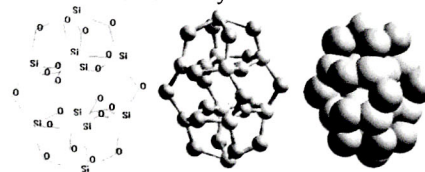
$$r_h = \frac{\sqrt{AD^2 + CD^2}}{2} = 0.235, n = \left(\frac{R}{r_h}\right)^3, n = 9.938 \quad (2)$$



Şəkil 1. Nanohissəciyin nəzəri modeli

SiO₂ birləşmələrinin sayı $n \approx 10$ olur və beləliklə nanohissəciyin vizual modelini qura bilirik (şəkil 2). Vizual modeli qurulduqdan sonra nanohissəciyə daxil olan atomların nüvələrinin Dekart koordinatları

məlum olur və kvantmexaniki hesablamalar nəticəsində nanohissəciyin energetik parametrlərinin qiymətlərini hesablamaq, onun stabilliyini müəyyənəşdirmək və xassələrini öyrənmək olar.



Şəkil 2. (SiO₂)_n nanohissəciyin vizual modeli

Ədəbiyyat:

1. Həsənov.A.Q., Nanosistemlərin riyazi modelləşdirməsi və komputer hesablaması. / A.Q.Həsənov.-Bakı: "Ləman nəşriyyat poliqrafiya" MMC-2013.-234s