

SİLİSİUM DİOKSİD $(\text{SiO}_2)_{10}$ NANOHISSƏCİYİNİN SAO bazisində energetik parametrlərinin hesablanması

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

Bakı Dövlət Universiteti

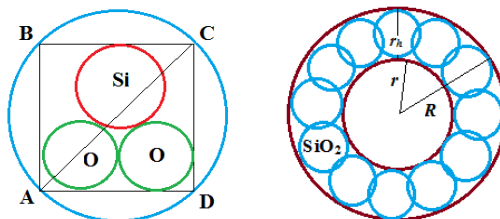
ilaheqasimova00@gmail.com

Silisium dioksid nanohissəcikləri müxtəlif elektron sxemlərin, möhkəm örtüklərin hazırlanmasında və s. geniş istifadə oluna bilər.[1] İşdə Volfberq – Helmhols metodu ilə $(\text{SiO}_2)_{10}$ nanohissəciklərin elektron quruluşu tədqiq edilmişdir. Molekulyar orbitallar nanohissəciklərin valent atom orbitallarının xətti kombinasiyası kimi təqdim olunmuşdur. Sleyter funksiyaları bazisində nanohissəciyin orbital enerjiləri, ionlaşma potensialı, tam elektron enerjisi hesablanmışdır. Si və O atomlarının kovalent radiuslarının qiymətlərini bilərək ($r_{\text{Si}}=0,111\text{nm}$, $r_{\text{O}}=0,073\text{nm}$) - bir Si və iki O atomlarınınin təqribi olaraq yerləşdiyi kürənin radiusunun qiyməti $r_h \approx 0,235\text{ nm}$ tapılmışdır (şəkil 1) SiO_2 molekullarının sayı isə $n = \left(\frac{R}{r_h}\right)^3$ düsturu ilə hesablanmışdır. Burada R kürə formalı hesab olan $(\text{SiO}_2)_{10}$ nanohissəciyinin radiusudur. $R = 0,51\text{nm}$ olduqda

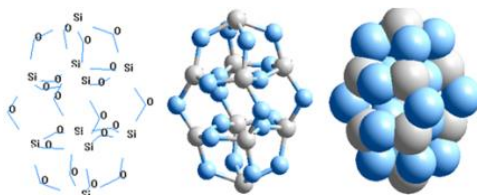
$n = 10$ alınır. Elektronlar tərəfindən tutulmuş ən yuxarı molekulyar orbitalın enerjisi $\varepsilon_{HOMO} = \varepsilon_{80} = -0,267485$ a.v. və ən aşağı boş molekulyar orbitalın enerjisi $\varepsilon_{LUMO} = \varepsilon_{81} = -0,251584$ a.v. müəyyən edilmişdir. Nanohissəciyin ion-

laşma potensialı: $I_p = -\varepsilon_{HOMO} = -0,267485$ a.v. qadağan olunmuş zonanın qiyməti $E_g = \varepsilon_{LUMO} - \varepsilon_{HOMO} = -0,251584 - (-0,267485) = 0,015901$ a.v. $= 0,43266483$ eV alınmışdır. Bu isə $(\text{SiO}_2)_{10}$ -nanohissəciyinin yarımkecirici material olduğunu göstərir. $(\text{SiO}_2)_{10}$ -nanohissəciyinin stabilliy[2], $\Delta E((\text{SiO}_2)_{10}) = E_{(\text{SiO}_2)_{10}} - n \cdot$

$(E_{\text{Si}} + 2E_{\text{O}})$ tam elektron enerjisi $E = E_{(\text{SiO}_2)_{10}} = \sum_i \varepsilon_i$ kimi hesablanır. i üzrə cəm elektron olan orbitallar üzrə aparılır. $\Delta E((\text{SiO}_2)_{10}) > 0$ olduqda material qeyri-stabil, $\Delta E((\text{SiO}_2)_{10}) < 0$ olduqda isə material stabil hesab olunur (cədvəl 1). Beləliklə, $(\text{SiO}_2)_{10}$ nanohissəciyinin elektron quruluşu Volfserq -Helmhols metodu ilə öyrənilmişdir[2]. Qadağan olunmuş zonanın qiyməti $E_g = 0,432665$ eV $< 3,5$ eV, ε_{LUMO} mənfi işarəli $\Delta E < 0$ oldu-ğuna görə $(\text{SiO}_2)_{10}$ yarımkeçirici, elektrofil və stabil nanomaterialdir.



Şəkil 1. SiO_2 molekulunun və $(\text{SiO}_2)_{10}$ nanohissəciyinin nəzəri modelləri



Şəkil 2. $(\text{SiO}_2)_{10}$ nanohissəciyinin vizual modelləri

Cədvəl 1

$(\text{SiO}_2)_{10}$ nanohissəciyinin energetik parametrlərinin hesablanmış qiymətləri

ε_{HOMO} (eV)	ε_{LUMO} (eV)	E (a.v.)	ΔE (a.v.)	I_p (eV)	E_g (eV)
-7,2787	-6,8460	-72,4218	-12,9839	7,2787	0,4326

Ədəbiyyat:

1. Номоев А.В. Синтез и свойства полых наночастиц диоксида кремния // Письма в ЖТФ, 2012, том 38, в. 10, 35-42 с.
2. Ramazanov M.A., Pashaev F.G., Gasanov A.G., Maharramov A.M., Mahmood A.T. The quantum mechanical study of cadmium sulfur nanoparticles in basis of STO's // Chalcogenide Letters, V11(7), 359-364. (2014).