

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

УДК 539.149

ИЗЛУЧЕНИЕ ХИРАЛЬНЫХ ЗОЛОТЫХ НАНОТРУБОК ПОД ДЕЙСТВИЕМ
ПЕРЕМЕННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА

© 2020 г. П. Н. Дьячков*

Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Ленинский пр-т, 31, Москва, 119991 Россия

*e-mail: p_dyachkov@rambler.ru

Поступила в редакцию 04.05.2020 г.

После доработки 27.05.2020 г.

Принята к публикации 29.05.2020 г.

В хиральных золотых нанотрубках переменный электрический ток генерирует образование электромагнитного поля. В этих условиях нанотрубки становятся излучающими соленоидными наноматрицами. С использованием уравнений Максвелла с учетом геометрии нанотрубок, их зонной структуры и баллистической модели переноса электронов рассчитаны генерированные винтовыми токами переменные аксиальные магнитные и азимутальные электрические поля в хиральных золотых нанотрубках. Показано, что с помощью золотых нанотрубок в нанобъемах могут быть получены очень большие переменные магнитные и электрические поля, и собственные частоты компонент поля лежат в рентгеновском диапазоне.

Ключевые слова: моделирование, золотые нанотрубки, хиральность, наносолоноиды, наноматрицы, электромагнитные поля, излучение

DOI: 10.31857/S0044457X20110045

ВВЕДЕНИЕ

Синтез одностенных золотых нанотрубок [1–5] вызвал большой интерес к их технологическому применению. Хиральные нанотрубки, структура которых образована спиральными атомными цепочками с винтовой периодичностью, интересны как наносолоноиды [6–16]. С помощью вычислений показано, что постоянные токи в золотых трубках бесконечной или конечной длины можно использовать для генерации сильных постоянных магнитных полей в нанобъемах [14–16]. Если пропускать через трубку переменный электрический ток, должны возникать новые эффекты.

Цель настоящей работы – оценить образование электромагнитных полей в нанотрубках под действием переменного тока. При этом нанотрубки становятся излучающими соленоидными наноматрицами. Следует отметить, что макроскопические соленоиды, работающие на переменном токе, широко используются для генерации радиочастотных полей и полей для создания безэлектродных разрядов в газе, спектроскопическом анализе, плазменном химическом синтезе. В работе [13] на примере композитного материала в виде многослойной углеродной нанотрубки с медью был поднят вопрос о свойствах и возможном применении излучающих наноматриц.

МЕТОД РАСЧЕТА

Рассмотрим хиральную трубку с приложенным к ней напряжением $U = U_0 \exp(-i\omega t)$ и током $I = I_0 \exp(-i\omega t)$ с угловой частотой ω (рис. 1). Будем считать трубку достаточно длинной, такой, что концевыми эффектами можно пренебречь. Требуется рассчитать электрические и магнитные поля E и B внутри нанотрубки. Электромагнитные свойства такой системы должны зависеть от геометрии и электропроводности наноматериала. Геометрия золотой трубки характеризуется двумя целочисленными индексами (n_1, n_2) , где $n_1 > 0$ и $0 \leq n_2 \leq n_1$. Если $n_2 > 0$ и $n_2 \neq n_1$, то трубка хиральная и пригодна для создания наносолоноида. В нанотрубках значение $n_1 + n_2$ равно числу золотых атомных цепочек, обвивающих ось трубки. Геометрию хиральных трубок можно также характеризовать радиусом R и числом оборотов ν атомных цепочек вокруг оси z в расчете на единицу длины.

Независимо от геометрии золотые нанотрубки обладают металлическим типом зонной структуры [15–21], в них осуществляется баллистический механизм переноса электронов, и при низких температурах ток рассчитывается по уравнению [22, 23]:

$$I = I_0 \exp(-i\omega t) = G_0 N_F U_0 \exp(-i\omega t), \quad (1)$$

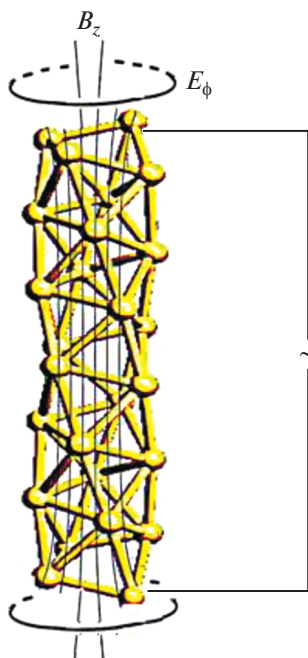


Рис. 1. Антенна на хиральной золотой нанотрубке.

где $G_0 = 7.748 \times 10^{-5} \text{ Ом}^{-1}$ — константа, называемая квантом проводимости, а N_F — число каналов проводимости электронов в нанотрубке. Предыдущие расчеты и экспериментальные данные [14, 15] показали, что каждая цепочка из атомов золота вносит примерно единичный вклад в баллистический электронный транспорт и $N_F \approx n_1 + n_2$.

Под действием постоянного напряжения U_0 и постоянного тока I_0 в золотых наносоленоидах возникает только постоянное магнитное поле в направлении оси трубки z :

$$B_0 = \mu_0 \nu I_0 = \mu_0 \nu (n_1 + n_2) G_0 U_0. \quad (2)$$

Если напряжение и ток осциллируют, должно возникать переменное аксиальное магнитное поле $B_z(r) \exp(-i\omega t)$, индуцирующее, в соответствии с законом Фарадея, образование азимутального электрического поля $E_\phi(r) \exp(-i\omega t)$, которое находится из уравнений [24, 25]:

$$\frac{\partial B_z(r)}{\partial r} = i\mu_0 \varepsilon_0 \omega E_\phi(r), \quad (3)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r E_\phi(r)] = i\omega B_z(r). \quad (4)$$

Аксиальное электрическое поле $E_z(r)$ и азимутальное магнитное поле $B_\phi(r)$ на порядок слабее, и ими можно пренебречь [24]. Здесь $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ Гн/м}$ — магнитная постоянная, а $\varepsilon_0 = c^2/\mu_0$ — электрическая постоянная, которая выражается через скорость света c и μ_0 . Подставляя E_ϕ в уравнение для B_z , по-

лучаем дифференциальное уравнение второго порядка для расчета магнитного поля:

$$\frac{\partial^2 B_z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial B_z}{\partial r} + k^2 B_z = 0, \quad (5)$$

где $k^2 = \mu_0 \varepsilon_0 \omega^2$. Это уравнение Бесселя, решение которого

$$B_z(r) = A_1 J_0(kr), \quad (6)$$

выражается через функцию Бесселя нулевого порядка $J_0(kr)$. Теперь электрическое поле E_ϕ соленоида может быть рассчитано как

$$E_\phi(r) = \frac{i\omega A_1}{k} J_1(kr), \quad (7)$$

где $J_1(kr)$ — функция Бесселя первого порядка $J_1(z) = -J_0'(z)$.

Идеальная проводимость нанотрубки подразумевает равенство нулю электрического поля на нанотрубке и магнитного поля за ее пределами [13, 24]:

$$E_\phi(R) = J_1(kR) = 0, \quad (8)$$

$$B_z(R) = A_1 J_0(kR) = \mu_0 I_0 \nu. \quad (9)$$

Собственные значения волнового вектора k для полей B_z и E_ϕ с минимальной собственной частотой f и энергией определяются из условия: произведение kR совпадает с первым корнем $\delta = 3.832$ функции Бесселя первого порядка $k = \delta/R$. При этом

$$A_1 = \frac{\mu_0 \nu (n_1 + n_2) G_0 U_0}{J_0(kR)}. \quad (10)$$

Окончательно

$$B_z(r) = \frac{J_0(kr) \mu_0 \nu (n_1 + n_2) G_0 U_0}{J_0(kR)}, \quad (11)$$

$$E_\phi(r) = \frac{c J_1(kr) \mu_0 \nu (n_1 + n_2) G_0 U_0}{J_0(kR)}, \quad (12)$$

$$f(B_z) = f(E_\phi) = \frac{\delta c}{2\pi R}. \quad (13)$$

Для получения численных данных для конкретной трубки остается подставить в уравнения (11)–(13) значения ее структурных параметров n_1 , n_2 , ν и R , уравнения для расчета которых приведены в предыдущих публикациях [17–19].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Осудим теперь результаты расчетов магнитных и электрических полей на примере золотых нанотрубок $(5, n_2)$ и $(10, n_2)$, параметры геометрии которых приведены в табл. 1.

На рис. 2 приведены частоты низкоэнергетических собственных колебаний электромагнитного поля в зависимости от радиуса трубок. Видно, что золотые наноантенны излучают в рентгеновском диапазоне $f = (2-8) \times 10^{17}$ Гц, и уменьшение радиуса трубки сопровождается ростом частоты поля. Собственные частоты $(5, n_2)$ нанотрубок смещены в высокочастотную область относительно частот $(10, n_2)$.

На рис. 3 и 4 изображены радиальные зависимости компонент магнитного и электрического полей для этих нанотрубок. На границе нанотрубок магнитное поле B_z совпадает с полем B_0 , возникающим при прохождении постоянного тока. Максимальное по абсолютной величине магнитное поле – в центре трубки при $r = 0$. С увеличением r магнитное поле ослабевает, принимает нулевое значение, меняет знак и возрастает, как это следует из оценки $B_z(r) \sim J_0(kr)$ и изменения функции Бесселя нулевого порядка $J_0(kr)$ в зависимости от r .

Электрическое поле $E_\phi(r)$ обнуляется в центре нанотрубки и на ее поверхности. При переходе от центра соленоида к поверхности трубки поле по абсолютной величине сначала возрастает, а затем падает. Радиальные вариации электрического поля $E_\phi(r)$ отражают изменения функции Бесселя первого порядка, так как $E_\phi(r) \sim J_1(kr)$. Различия между полями трубок $(10, n_2)$ и $(5, n_2)$ AuNT только количественные. Наиболее сильные поля предсказаны для нанотрубок $(5, 3)$ и $(10, 7)$ с самыми большими значениями $\nu = 4.15$ и 1.73 в рядах $(10, n_2)$ и $(5, n_2)$ соответственно.

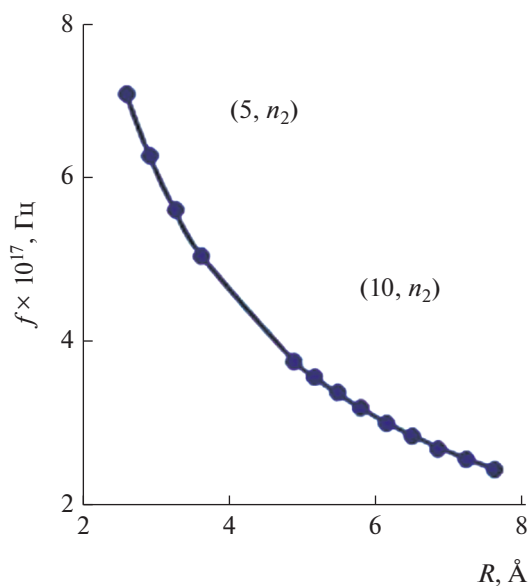


Рис. 2. Собственные частоты колебаний электромагнитного поля в золотых нанотрубках $(5, n_2)$ и $(10, n_2)$.

Таблица 1. Параметры геометрии нанотрубок $(5, n_2)$ и $(10, n_2)$

(n_1, n_2)	(5, 1)	(5, 2)	(5, 3)	(5, 4)
R	2.57	2.88	3.23	3.61
ν	1.82	1.05	1.73	0.688
(n_1, n_2)	(10, 1)	(10, 2)	(10, 3)	(10, 4)
R	4.86	5.14	5.44	5.77
ν	3.80	0.912	1.44	0.524
(n_1, n_2)	(10, 5)	(10, 6)	(10, 7)	(10, 8)
R	6.11	6.46	6.83	7.21
ν	0.135	0.876	4.15	0.344
(n_1, n_2)	(10, 9)			
R	7.60			
ν	0.689			

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Хиральные золотые нанотрубки – это наносолоноиды, в которых возможно образование больших винтовых электрических токов. Электромагнитные поля, создаваемые переменным напряжением и током в золотых наносолоноидах, рассчитаны с использованием уравнений Макс-

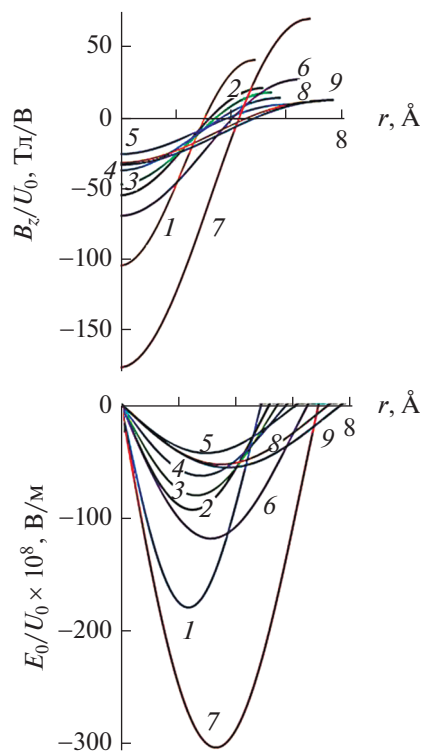


Рис. 3. Радиальные зависимости компонент магнитного и электрического полей золотых $(10, n_2)$ наноантенн. Здесь и на рис. 4 номера у кривых соответствуют значениям n_2 .

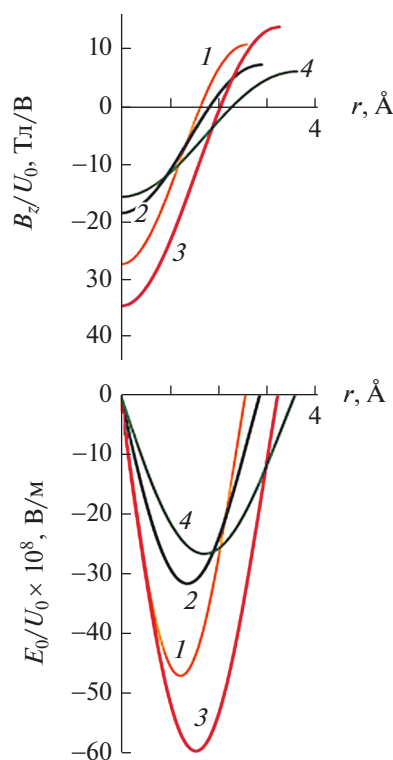


Рис. 4. Радиальные зависимости компонент магнитного и электрического полей золотых (5, n_2) наноантенн.

велла и баллистической модели для переноса электронов в нанотрубках. Показано, что очень большие поля могут быть реализованы в нанобъемах с помощью наноантенн из золотых хиральных нанотрубок. Собственные частоты компонентов поля лежат в рентгеновском диапазоне.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках государственного задания ИОНХ РАН в области фундаментальных научных исследований и при финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-43-340005).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Oshima Y., Onga A., Takayanagi K. // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91. P. 205503. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.205503>
- Bridges C.R., DiCarmine P.M., Fokina A. et al. // J. Mater. Chem. A. 2013. V. 1. P. 1127. <https://doi.org/10.1039/C2TA00729K>
- Bridges C.R., DiCarmine P.M., Seferos D.S. // Chem. Mater. 2012. V. 24. P. 963. <https://doi.org/10.1021/cm203184d>
- Hendren W.R., Murph A., Evans P. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2008. V. 20. P. 362203. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/20/36/362203>
- Shamraiz U., Raza B., Hussain H. et al. // Intern. Mater. Rev. 2018. P. 1743. <https://doi.org/10.1080/09506608.2018.1554991>
- Zhang Z.Y., Miao C., Guo W. // Nanoscale. 2013. V. 23. P. 11902. <https://doi.org/10.1039/c3nr02914>
- Xu F., Sadrzadeh A., Xu Z., Yakobson B.I. // Comput. Mater. Sci. 2014. V. 83. P. 426. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2013.11.043>
- Xu F., Yu H., Sadrzadeh A., Yakobson B.I. // Nano Lett. 2016. V. 16. P. 34. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b01822>
- Mitran T.L., Nemnes G.A. // RSC Adv. 2017. V. 7. P. 49041. <https://doi.org/10.1039/c7ra08247a>
- Avdoshenko S.M., Koskinen P., Sevinçli H. et al. // Sci. Rep. 2013. V. 3. P. 1632. <https://doi.org/10.1038/srep01632>
- Popović Z.P., Vuković T., Nikolić B. et al. // Contemp. Mater. 2017. V. 8. № 2. P. 122. <https://doi.org/10.7251/comen1702121p>
- Браже П.А., Савин А.Ф. // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2015. Т. 18. № 1. С. 50. <https://journals.ssau.ru/index.php/pwp/article/viewFile/7211/7072>
- James (Bob) C.R., Long J.E., Manning D.E. // Sci. Rep. 2019. V. 9. P. 143. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-38306-8>
- D'yachkov P.N., D'yachkov E.P. // Russ. J. Inorg. Chem. 2020. V. 65. № 8. <https://doi.org/10.31857/S0044457X->

- 20070077 [Дьячков П.Н., Дьячков Е.П. // Журн. неорган. химии. 2020. Т. 65. № 8. С. 1073.]
15. *D'yachkov E.P., D'yachkov P.N.* // *J. Phys. Chem. C.* 2019. V. 123. P. 26005.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b07610>
16. *D'yachkov P.N., D'yachkov E.P.* // *ACS Omega.* 2020. V. 5. № 10. P. 5529.
<https://doi.org/10.1021/acsomega.0c00167>
17. *D'yachkov P.N.* // *Russ. J. Inorg. Chem.* 2018. V. 63. № 1. P. 55. [Дьячков П.Н. // Журн. неорган. химии. 2018. Т. 63. № 1. С. 60.]
<https://doi.org/10.1134/S0036023618010072>
18. *Khoroshavin L.O., Krasnov D.O., D'yachkov P.N., Kol'tsova E.M.* // *Russ. J. Inorg. Chem.* 2017. V. 62. № 6. P. 783. [Хорошавин Л.О., Краснов Д.О., Дьячков П.Н., Кольцова Э.М. // Журн. неорган. химии. 2017. Т. 62. № 6. С. 800.]
<https://doi.org/10.1134/S0036023617060110>
19. *Krasnov D.O., Khoroshavin L.O., D'yachkov P.N.* // *Russ. J. Inorg. Chem.* 2019. V. 64. P. 108.
<https://doi.org/10.1134/S0036023619010145>
20. *Mironov G.I.* // *Russ. J. Inorg. Chem.* 2019. V. 64. № 10. P. 1257. [Миронов Г.И. // Журн. неорган. химии. 2019. Т. 64. № 10. С. 1064.]
<https://doi.org/10.1134/S0036023619100097>
21. *Mironov G.I.* // *Russ. J. Inorg. Chem.* 2018. V. 63. № 1. P. 66. [Миронов Г.И. // Журн. неорган. химии. 2018. Т. 63. № 1. С. 72.]
<https://doi.org/10.1134/S0036023618010114>
22. *Landauer R.* // *Phil. Mag.* 1972. V. 21. P. 863.
<https://doi.org/10.1080/14786437008238472>
23. *Chen A.-B.* // *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology* / Eds. Rieth M., Schommers W. California: American Scientific Publ., 2006. V. 1. P. 311.
24. *Harmon G.S.* // *J. Appl. Phys.* 1991. V. 69. № 11. P. 7400.
<https://doi.org/10.1063/1.347553>
25. *Henjes K.* // *J. Appl. Phys.* 1996. V. 79. № 1. P. 21.
<https://doi.org/10.1063/1.360949>