

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ХИРАЛЬНЫХ ЗОЛОТЫХ НАНОТРУБОК С ПЕРЕМЕННЫМ МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

© 2022 г. П. Н. Дьячков^a, *, Е. П. Дьячков^a

^aИнститут 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 25.07.2021 г.

После доработки 24.08.2021 г.

Принята к публикации 27.08.2021 г.

С использованием закона электромагнитной индукции Фарадея рассчитан отклик электронов золотых хиральных трубок на внешнее переменное магнитное поле. В качестве примера взяты трубки Au ($10, n_2$) с $1 \leq n_2 \leq 9$ и ($20, n_2$) с $1 \leq n_2 \leq 19$ длиной 1000 Å. Рассчитаны зависимости индуцированной электродвижущей силы (ЭДС) и тока от амплитуды и частоты осциллирующего поля, ориентированного вдоль оси трубки. Установлено, что для получения достаточно большой ЭДС (~ 1 В/Тл) требуется переменное электромагнитное поле с частотами $\sim 10^{14}$ Гц, попадающими в рентгеновскую область. В этом случае индуцированные токи лежат в интервале 0.21–2.1 мА/Тл для трубок ($10, n_2$) и в диапазоне 3–39 мА/Тл для трубок ($20, n_2$) большего диаметра. Нанотрубки ведут себя как рамочные нанополоски и могут использоваться для дизайна элементов нанoeлектроники, в которых, например, необходима беспроводная передача рентгеновского излучения. Не исключена возможность их успешного применения в фототермической терапии рака.

Ключевые слова: хиральность, электромагнитные свойства, наносоленоиды, моделирование

DOI: 10.31857/S0044457X22020039

ВВЕДЕНИЕ

Развитие молекулярной электроники вызывает интерес к дизайну наномасштабных соленоидов, в которых винтовые потоки электронов способны генерировать электромагнитные поля, а под действием переменного магнитного поля могут возникать индукционные токи. Предыдущие расчеты показали, что идеальными наносоленоидами могут быть золотые одностенные хиральные нанотрубки [1–4]. Действительно, для создания наносоленоидов требуются материалы с винтовой структурой и высокой проводимостью, а все хиральные золотые нанотрубки удовлетворяют этим требованиям – они образованы спиральными атомными цепочками с винтовой периодичностью и обладают металлическим типом проводимости [1–7]. Благодаря винтовой геометрии хиральной нанотрубки прохождение переменного электрического тока в направлении ее оси сопровождается циклическим вращением электронов вокруг этой оси и, как следствие, образованием переменного электромагнитного поля в области трубки, а сама нанотрубка становится соленоидной нанополоской, излучающей в рентгеновском диапазоне [1–3]. Цель настоящей работы – рассчитать отклик электронов золотых хиральных трубок на внешнее переменное магнитное поле, что актуально с точки зрения

оценки хиральных Au нанотрубок как потенциальных принимающих нанополосок.

Заметим, что обычные макроскопические соленоиды используют и как передающие, и как принимающие магнитные рамочные антенны, а дизайн нанополосок в настоящее время является быстро развивающейся областью экспериментальных и теоретических исследований [6–12]. При этом чаще всего используют именно золотые наночастицы, на которых реализованы передающие и принимающие оптические нанополоски, работа которых основана на поглощении и излучении наночастицами света видимого и ИК-диапазона с возбуждением поверхностных плазмонов. В качестве примеров можно привести нанополоски в виде упорядоченного распределения золотых наноклеец (коротких нанотрубок) и цилиндров на диэлектрической подложке [13, 14], наночастиц полистирола с золотым покрытием, нанополосок, образованных парами связанных золотых треугольников [15], золотых слоев и нанопроводов на подложках и др. [16–19].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим хиральную трубку в присутствии переменного магнитного поля с амплитудой B_0 и угловой частотой ω (рис. 1).

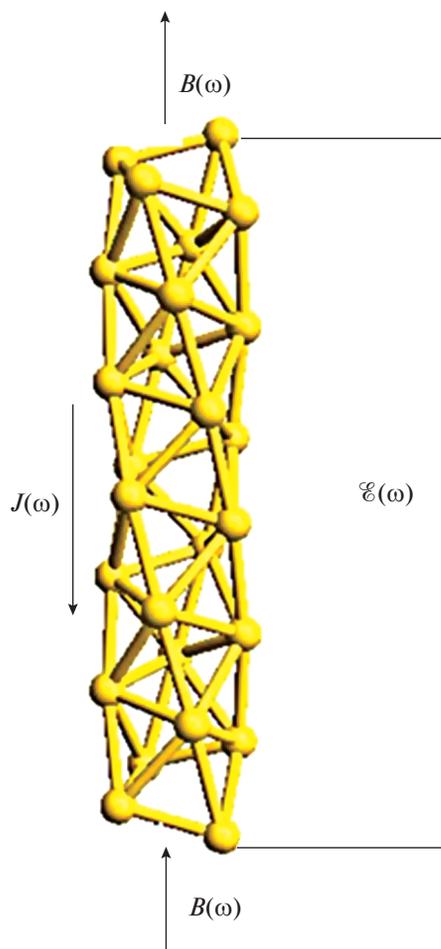


Рис. 1. Образование ЭДС и тока в золотой хиральной нанотрубке под действием переменного магнитного поля.

$$B = B_0 \exp(i\omega t). \quad (1)$$

Будем считать трубку достаточно длинной, такой, что концевыми эффектами можно пренебречь. Требуется рассчитать частотные зависимости индуцированной электродвижущей силы (ЭДС) и тока. Электромагнитные свойства такой системы должны зависеть от геометрии и электропроводности наноматериала.

Идеальная золотая нанотрубка выглядит как цилиндр, поверхность которого выложена правильными шестиугольниками, в центре которых расположены атомы золота (рис. 1). Пространственное расположение атомов Au в трубке определяется длиной связи Au–Au $d = 2.9 \text{ \AA}$ и двумя положительными целыми числами (n_1, n_2) с $n_1 \geq n_2$, которые определяют ее радиус и ориентацию шестиугольников относительно оси трубки. Хиральными являются нанотрубки с $n_1 \neq n_2$ и $n_2 \neq 0$. Трубки обладают вращательной осью симметрии C_n , где n – наибольший общий делитель индексов

n_1 и n_2 . Описание геометрии хиральных нанотрубок резко упрощается при учете их винтовой симметрии, поскольку при этом можно определить минимальную ячейку, содержащую всего один атом Au, а вся структура нанотрубки воспроизводится поворотами этого атома вокруг оси z трубки на угол $2\pi/n$ и винтовыми трансляциями $S(h_z, w)$, которые представляют собой сдвиги вдоль оси z на расстояние h_z с одновременными поворотами на угол w , величины которых определяются индексами n_1 и n_2 [11]. Из-за винтовой симметрии хиральных трубок поворот на угол 2π сопровождается $2\pi/w$ сдвигами на расстояние $h_z(2\pi/w)$. Поэтому число оборотов атомных цепочек вокруг оси в расчете на единицу длины хиральной нанотрубки $\nu = nw/(2\pi h_z)$, где n отражает присутствие n эквивалентных цепочек из атомов Au в трубках с вращательной осью порядка n . Для двух рядов трубок Au $(10, n_2)$ с $1 \leq n_2 \leq 9$ и $(20, n_2)$ с $1 \leq n_2 \leq 19$, взятых в данной работе в качестве примера, значения ν для различных значений n_2 приведены на рис. 2.

Воспользуемся законом электромагнитной индукции Фарадея, который гласит, что для любого контура индуцированная ЭДС равна скорости изменения магнитного потока, проходящего через этот контур, взятой со знаком минус. Откуда при ориентации осциллирующего магнитного поля $B = B_0 \exp(i\omega t)$ в направлении оси z для нанотрубки длиной L с площадью поперечного сечения S ЭДС может быть рассчитана по формуле:

$$\mathcal{E}(\omega) = \nu L S dB/dt = -i\nu L S \omega B_0 \exp(i\omega t). \quad (2)$$

Площадь S относится к свободному внутреннему пространству нанотрубки и оценивается по формуле $S = \pi r^2$, где $r = R - r_{vdw}$, а $r_{vdw} = 2.45 \text{ \AA}$ – ван-дер-вальсов радиус атома золота.

С использованием единиц Тесла для B_0 , \AA для внутреннего радиуса трубки r и ее длины L и \AA^{-1} для ν формула для амплитуды колебаний ЭДС (в Вольтах) принимает следующий вид, который более удобен для наших вычислений:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\omega) &= -i\nu L S \omega B_0 \exp(i\omega t) \times 10^{-20} = \\ &= -i\mathcal{E}_0(\omega) \exp(i\omega t). \end{aligned} \quad (3)$$

В качестве первого примера рассмотрим нанотрубку Au $(10, 1)$ длиной 1000 \AA . В этом случае $\nu = 3.8 \text{ \AA}^{-1}$, $r = 2.41 \text{ \AA}$, $\nu L S = 69 \times 10^3 \text{ \AA}^2$, и для получения достаточно большой ЭДС с отношением $\mathcal{E}_0/B_0 = 1 \text{ В/Тл}$ требуется переменное электромагнитное поле с частотой $f = \omega/2\pi = 2.3 \times 10^{14} \text{ Гц}$, попадающей в рентгеновскую область. На рис. 2 приведены значения \mathcal{E}_0/B_0 в зависимости от n_2 для девяти хиральных трубок $(10, n_2)$ длиной 1000 \AA при частоте магнитного поля $f = 10^{14} \text{ Гц}$. Значения ЭДС лежат в интервале от 0.18 для труб-

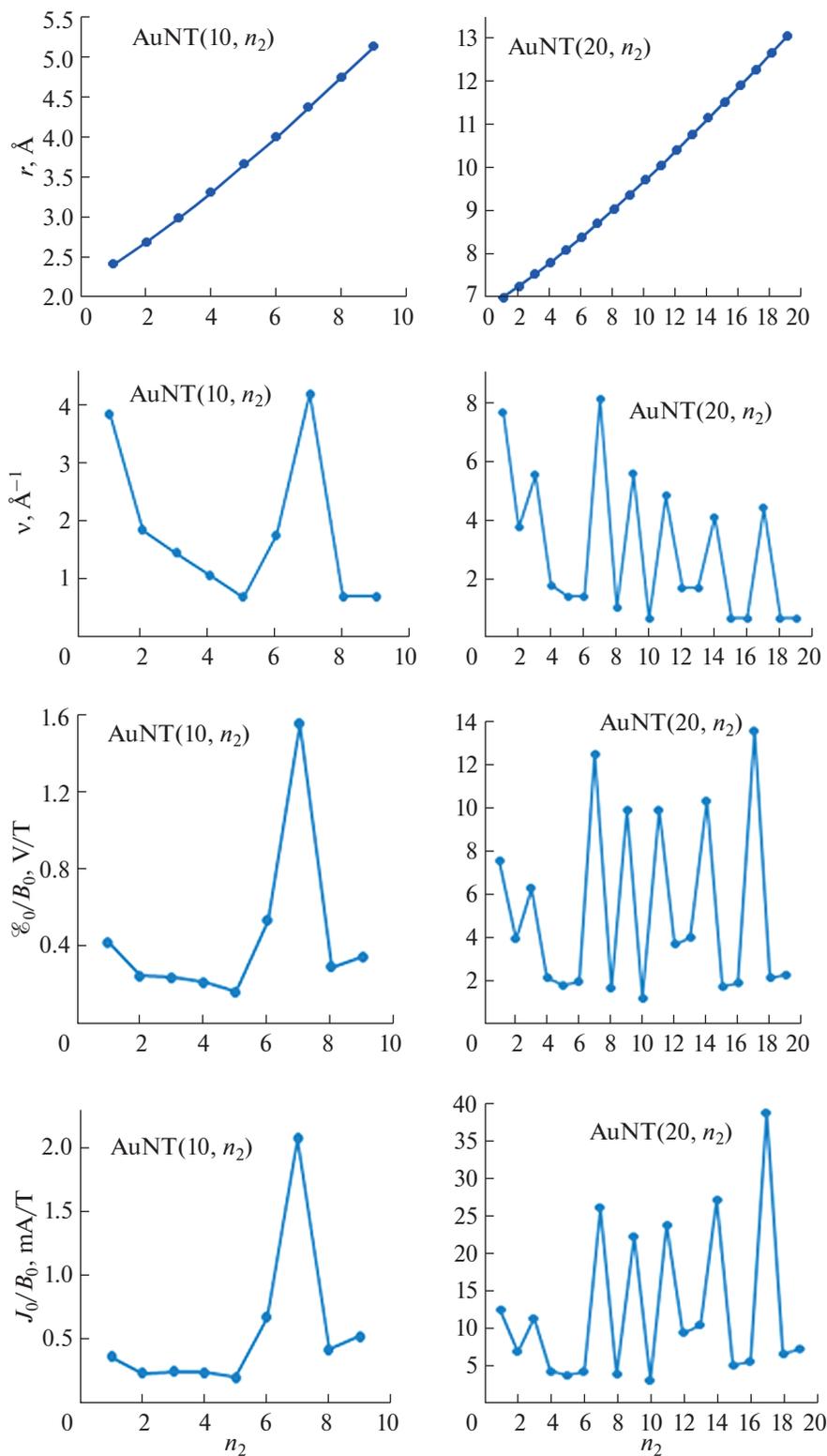


Рис. 2. Радиус внутренней области нанотрубки r , число витков v на единицу длины трубки, амплитуда индуцированной ЭДС \mathcal{E}_0 и тока J_0 при частоте поля $f = 10^{14}$ Гц и длине трубок 1000 Å.

ки (10, 5) до 1.6 В/Тл для трубки (10, 7). При той же частоте 10^{14} Гц для трубок (20, n_2) такой же длины, но больших диаметров и с несколько большими значениями ν отношения амплитуды ЭДС к амплитуде поля \mathcal{E}_0/B_0 лежат в интервале от 1.27 для трубки (20, 10) до 13.5 В/Тл для (20, 17).

Под действием переменного магнитного поля противоположные концы нанотрубки заряжаются, между ними возникает переменное напряжение U и осциллирует ток J . Если ток не уходит из нанотрубки, разность потенциалов между концами нанотрубки будет равна индуцированной ЭДС $U = \mathcal{E}$. В случае золотых нанотрубок типичная длина нанотрубки меньше, чем длина свободного пробега электронов, и обычно реализуется баллистический механизм переноса электронов, когда электроны туннелируют сквозь наноматериал и ток может быть рассчитан с помощью уравнения Ландауэра:

$$J(\omega) = N_F G_0 \mathcal{E}(\omega), \quad (4)$$

где N_F — количество каналов электронной проводимости в нанотрубке, равное числу точек пересечения дисперсионных кривых с уровнем Ферми наноматериала. Экспериментальные данные и расчеты зонной структуры золотых нанотрубок показали, что $N_F \approx n_1 + n_2$ [2, 3]. Константа $G_0 = 2e^2/h = 7.748 \times 10^{-5} \text{ Ом}^{-1}$ — это квант проводимости. Подставляя уравнение (3) в (4), получаем следующее выражение для амплитуды J_0 индуцированного переменного тока $J(\omega) = -iJ_0(\omega)\exp(i\omega t)$ в зависимости от геометрии нанотрубки, амплитуды и частоты внешнего магнитного поля:

$$J_0(\omega)/B_0 = N_F G_0 \mathcal{E}_0(\omega)/B_0. \quad (5)$$

Мы оценили типичные значения $J_0(\omega)/B_0$ (А/Тл) также на примере золотых трубок (10, n_2) и (20, n_2) длиной 1000 Å под действием магнитного поля с частотой $f = 10^{14}$ Гц. Результаты приведены на рис. 2. В первом случае значения $J_0(\omega)/B_0$ лежат в интервале 0.21–2.1 мА/Тл, а во втором — в диапазоне 3–39 мА/Тл, что, конечно, отражает увеличение площади поперечного сечения трубок, число витков на единицу длины трубки и каналов проводимости при переходе к трубкам (20, n_2).

Согласно уравнениям (3)–(5), амплитуды ЭДС и тока пропорциональны длине трубки L , амплитуде B_0 и частоте ω магнитного поля, поэтому приведенные на рис. 2 величины ЭДС и тока можно легко использовать для расчета отклика трубок (10, n_2) и (20, n_2) любой длины в присутствии магнитных полей любой амплитуды и частоты.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Хиральные золотые нанотрубки в присутствии переменного магнитного поля ведут себя как

принимающие рамочные антенны. В них возникают осцилляции ЭДС и тока, что может использоваться для дизайна элементов нанoeлектроники. Заметим также, что в последнее время золотые нанотрубки и нанокольца используют в фототермической терапии рака [20–25]. Этот способ лечения применяется, например, при лучевой терапии рака кожи, когда наночастицы золота внедряют в клетки опухоли и выжигают пораженные ткани с помощью тепла, выделяемого при облучении частиц золота фотонными пучками. Используемое обычно в качестве источника энергии лазерное излучение видимой или ИК-области иногда обладает недостаточной глубиной проникновения в ткани и малой энергией. Можно ожидать, что использование в качестве источника энергии переменного магнитного поля и хиральных золотых нанотрубок как приемников этого излучения может оказаться новым полезным приемом в такой терапии. Оптимальную для фототермической терапии частоту и энергию магнитного поля можно регулировать с помощью выбора длины, диаметра и хиральности нанотрубок.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках государственного задания ИОНХ РАН в области фундаментальных научных исследований.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *D'yachkov P.N., D'yachkov E.P.* // Russ. J. Inorg. Chem. 2020. V. 65. № 8. P. 1196. [*Дьячков П.Н., Дьячков Е.П.* // Журн. неорганической химии. 2020. Т. 65. № 8. С. 1073.] <https://doi.org/10.1134/S0036023620070074>
2. *D'yachkov P.N.* // Russ. J. Inorg. Chem. 2020. V. 65. № 11. P. 1735. [*Дьячков П.Н.* // Журн. неорганической химии. 2020. Т. 65. № 11. С. 1522.] <https://doi.org/10.1134/S0036023620110042>
3. *D'yachkov E.P., D'yachkov P.N.* // J. Phys. Chem. C. 2019. V. 123. № 42. P. 26005. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b07610>
4. *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. неорганической химии. 2017. Т. 62. № 6. С. 800.] <https://doi.org/10.1134/S0036023617060110>
5. *Oshima Y., Onga A., Takayanagi K.* // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91. P. 205503. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.205503>

6. *Novotny L., van Hulst N.* // Nat. Photonics. 2011. V. 5. P. 83.
<https://doi.org/10.1038/nphoton.2010.237>
7. *Shamraiz U., Raza B., Hussain H. et al.* // Intern. Mater. Rev. 2018. P. 1743.
<https://doi.org/10.1080/09506608.2018.1554991>
8. *Drachev V.P., Kildishev A.V. et al.* // Sci. Reports. 2018. V. 8. P. 780.
<https://doi.org/10.1038/s41598-017-19066-3>
9. *Kausar A.S., Reza A.W., Latef T.A. et al.* // Sensors. 2015. V. 15. P. 8787.
<https://doi.org/10.3390/s150408787>
10. *Lameirinhas R.A.M., Torres J.P.N., Baptista A.* // Appl. Sci. 2020. V. 10. P. 6837.
<https://doi.org/10.3390/app10196837>
11. *Shkoldin V.A., Permyakov D.V., Golubok A.O. et al.* // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1410. P. 012141.
<https://doi.org/10.1088/1742-6596/1410/1/012141>
12. *Fischer U.C., Pohl D.W.* // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62. P. 458.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.62.458>
13. *Lorente-Crespo M., Li Wang, Ortuño R. et al.* // Nano Lett. 2013. V. 13. P. 2654.
<https://doi.org/10.1021/nl400798s>
14. *Schröter U., Dereux A.* // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 125420.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.64.125420>
15. *Grosjean T., Mivelle M., Baida F.I. et al.* // Nano Lett. 2011. V. 11. P. 1009.
<https://doi.org/10.1021/nl103817f>
16. *Huck C., Toma A., Neubrech F. et al.* // ACS Photonics. 2015. V. 2. № 4. P. 497.
<https://doi.org/10.1021/ph500374r>
17. *Kabashin A.V., Evans P., Pastkovsky S.* // Nat. Mater. 2009 V. 8. P. 867.
<https://doi.org/10.1038/nmat2546>
18. *Yang J., Zhang J., Wu X. et al.* // Opt. Express. 2007. V. 15. № 25. P. 16853.
<https://doi.org/10.1364/oe.15.016852>
19. *Zhou L., Wang Q.-J., Wu S. et al.* // J. Opt. Soc. Am. B. 2011. V. 28. № 3. P. 591.
<https://doi.org/10.1364/JOSAB.28.000587>
20. *Siddique S., Chow J.C.L.* // Appl. Sci. 2020. V. 10. P. 3824.
<https://doi.org/10.3390/app10113824>
21. *Bai X., Wang Y., Son Z. et al.* // Int. J. Mol. Sci. 2020. V. 21. 2480.
<https://doi.org/10.3390/ijms21072480>
22. *Chen W., Zhan S., Yu Y. et al.* // Adv. Mater. 2016. V. 28. P. 8567.
<https://doi.org/10.1002/adma.201602080>
23. *Wang J., Wu X., She P. et al.* // Int. J. Nanomed. 2020. V. 15. P. 1903.
24. *Zhao N., Pan Y., Cheng Z. et al.* // J. Innov. Opt. Health Sci. 2016. V. 9. P. 163000.
<https://doi.org/10.1142/S17935458163000444>
25. *Ye S., Marston G., McLaughlan J.R. et al.* // Adv. Funct. Mater. 2015. V. 25. № 14. P. 2117.
<https://doi.org/10.1002/adfm.201404358>