



Math-Net.Ru

All Russian mathematical portal

D. O. Krasnov, È. M. Koltsova, Study of magnetic field generation in chiral copper nanotubess,

Comp. nanotechnol., 2022, Volume 9, Issue 4, 17–21

<https://www.mathnet.ru/eng/cn390>

Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that you have read and agreed to these terms of use

<https://www.mathnet.ru/eng/agreement>

Download details:

IP: 18.97.14.81

May 15, 2025, 13:06:25



Изучение генерации магнитного поля в хиральных медных нанотрубках

Д.О. Краснов^a ©, Э.М. Кольцова^b ©

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
г. Москва, Российская Федерация

^a E-mail: drygodo@gmail.com

^b E-mail: koltsova.e.m@muctr.ru

Аннотация. Рассчитаны магнитные поля, генерируемые хиральными медными нанотрубками. Определены числа каналов баллистического транспорта, низкотемпературные электронные токи и магнитные поля в наносолоноидах на основе медных нанотрубок различной структуры. Результаты свидетельствуют о том, что хиральные нанотрубки могут быть использованы для создания наносолоноидов с заданными характеристиками.

Ключевые слова: моделирование, магнитные свойства, нанотрубки, квантовая химия

Благодарности. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90215.

ССЫЛКА НА СТАТЬЮ: Краснов Д.О., Кольцова Э.М. Изучение генерации магнитного поля в хиральных медных нанотрубках // Computational Nanotechnology. 2022. Т. 9. № 4. С. 17–21. DOI: 10.33693/2313-223X-2022-9-4-17-21

Study of Magnetic Field Generation in Chiral Copper Nanotubes

D.O. Krasnov^a ©, E.M. Koltsova^b ©

Mendeleev University of Chemical Technology of Russia,
Moscow, Russian Federation

^a E-mail: drygodo@gmail.com

^b E-mail: koltsova.e.m@muctr.ru

Abstract. The magnetic fields generated by chiral copper nanotubes are calculated. The number of ballistic transport channels, low-temperature electron currents, and magnetic fields in nanosolenoids based on copper nanotubes of various structures are determined. The results indicate that chiral nanotubes can be used to create nanosolenoids with desired characteristics.

Key words: modeling, magnetic properties, nanotubes, quantum chemistry

Acknowledgments. The reported study was funded by RFBR, project number 20-33-90215.

FOR CITATION: Krasnov D.O., Koltsova E.M. Study of Magnetic Field Generation in Chiral Copper Nanotubes. *Computational Nanotechnology*. 2022. Vol. 9. No. 4. Pp. 17–21. (In Rus.) DOI: 10.33693/2313-223X-2022-9-4-17-21

ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия наноструктуры и нанотрубки из различных материалов вызывают повышенный интерес ученых к их изучению. Этот интерес определяется их миниатюрными размерами, уникальными физико-химическими и электронными свойствами, которые отличаются от свойств объемных материалов [Oshima, Onga, Takayanagi, 2003; Murphy, Sau, Gole, 2005; Kharche, Manjari, Zhou, 2011; Kumar, Kumar, Ahluwalia, 2012]. Благодаря этому нанотрубкам находится применение во многих областях химии, физики и нанoeлектроники [Hsiao, Fong, 2004; Natelson, 2006; Lu, Lieber, 2007], в которой эти отличия очень важны. Развитие технологий привело к тому, что электронные компоненты и устройства уменьшились до наноразмеров и теперь в них доминируют различные квантовые эффекты. Однако если в микроэлектронике они часто мешали, то в нанoeлектронике – лежат в основе устройств, например, туннельный эффект [Landauer, 1970]. В работах [Zhang, Miao, Guo, 2013; James, Long, Manning, 2019] было высказано предположение о том, что в качестве наномасштабных электромагнитов и индукторов могут служить хиральные нанотрубки с металлическим типом проводимости.

Среди всех металлических нанотрубок выделяются трубки из меди за счет ее высокой коррозионной стойкости, тепло- и электропроводности, и низкого удельного сопротивления. В работах [Venkata Kamalakar, Raychaudhuri, 2008; Kaniukov, Kozlovsky, Shlimas, 2016; Kaniukov, Kozlovsky, Shlimas, 2017] были представлены различные способы синтеза медных нанотрубок с регулируемыми свойствами. Результаты расчетов магнитного поля в хиральных медных трубках показали [Krasnov, Zhensa, Koltsova, 2022], что они могут стать отличными наносолеоидами.

Цель данной работы – исследование влияния параметров геометрии нанотрубки на значения магнитного поля, возникающего в хиральных трубках из меди.

МЕТОДЫ

При прохождении постоянного электрического тока через хиральную нанотрубку электронный транспорт вдоль ее оси сопровождается циклическим вращением электронов вокруг нее. Это приводит к появлению магнитного поля в нанотрубке, которое согласно закону Ампера, зависит только от силы тока и количества витков тока в трубке на единицу длины и не зависит от ее диаметра. Снаружи нанотрубки поле нулевое. При этом из-за того, что длина свободного пробега электронов намного больше длины самих трубок наблюдается баллистический механизм электронного транспорта, который описывается формализмом Ландауэра [Landauer, 1970; Zhang, Zhang, 2014].

В статьях [Dyachkov, Dyachkov, 2020] был предложен метод расчета магнитного поля в хиральных нанотрубках неограниченной длины:

$$B = \mu_0 v j = 4\pi \cdot 10^{-7} v j = n v (n_1 + n_2) U,$$

где v – это число витков тока вокруг оси нанотрубки в расчете на единицу длины; n – наибольший общий делитель индексов хиральности трубки n_1 и n_2 ; j – сила тока. Количество круговых токов находится по формуле:

$$v = \frac{n\omega}{2\pi h_z},$$

где ω – угол поворота вокруг оси z ; h_z – величина сдвига вдоль этой оси. При этом

$$\omega = 2\pi \frac{n_1 p_1 + n_2 p_2 + \frac{1}{2}(n_1 p_2 + n_2 p_1)}{n_1^2 + n_2^2 + n_1 n_2};$$

$$h_z = \frac{n\sqrt{3}d}{2(n_1^2 + n_2^2 + n_1 n_2)^{1/2}}.$$

где d – длина связи между атомами меди в нанотрубке. При низких температурах ток можно найти по формуле:

$$j = G_0 N_F U,$$

где G_0 – квант проводимости; N_F – число каналов проводимости. Предыдущие расчеты [Khoroshavin, Krasnov, Dyachkov, 2017; Krasnov, Khoroshavin, Dyachkov, 2019] электронной зонной структуры металлических нанотрубок показали, что в их случае справедливо выражение $N_F \approx n_1 + n_2$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для начала рассмотрим на рис. 1 результаты расчетов магнитного поля B хиральных медных нанотрубок диапазона $(5, n_2) - (21, n_2)$ в зависимости от количества каналов баллистического транспорта N_F в них. Сплошной линией обозначено изменение магнитного поля ряда нанотрубок $(n_1, 1)$. Можно заметить, что самые большие магнитные поля при равенстве числа каналов проводимости генерируют нанотрубки с индексами хиральности $(n_1, 1)$ (табл. 1), так как у них максимальные значения количества круговых токов на единицу длины v и наибольшие размеры. Исключением является только медная нанотрубка $(20, 3)$, обладающая самым большим значением v среди всех рассчитанных трубок. Однако если сравнивать нанотрубки с примерно одинаковым магнитным полем, то трубки ряда $(n_1, 1)$ будут обладать самыми маленькими размерами из всех. В табл. 2 представлены результаты расчета B медных

Краснов Д.О., Кольцова Э.М.

трубок ряда ($n_1, 1$). Можно видеть, что при линейном увеличении числа витков тока на единицу длины и радиуса нанотрубки происходит экспоненциальное увеличения значений магнитного поля. Также магнитное поле внутри таких трубок можно рассчитать по упрощенной формуле

$$B/U = \frac{(n_1 + 1)(2n_1^2 + 1)}{\sqrt{3}d \sqrt{n_1^2 + n_1 + 1}}$$

На рис. 2 изображена зависимость числа витков тока на единицу длины ν и магнитного поля B/U от индекса хиральности n_2 нанотрубок ряда (10, n_2) и (20, n_2). Можно заметить, что магнитное поле большинства нанотрубок сильно коррелируется с значениями числа витков тока на единицу длины. А также отсутствует четкая зависимость между значениями магнитного поля и индексами хиральности нанотрубки.

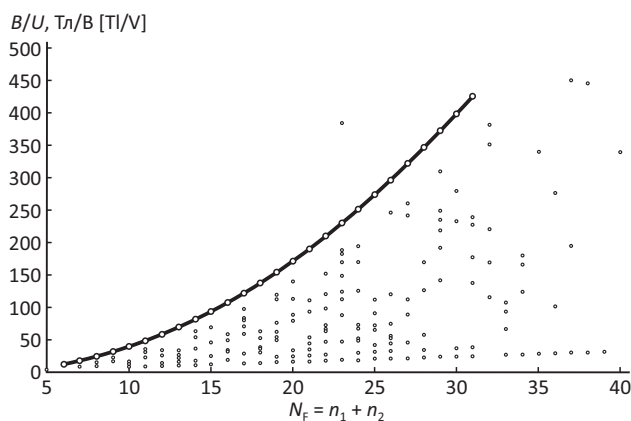


Рис. 1. Зависимость магнитного поля от числа каналов баллистического транспорта в хиральных медных нанотрубках диапазона (5, n_2) – (21, n_2)

Fig. 1. Dependence of the magnetic field on the number of ballistic transport channels in chiral copper nanotubes in the range (5, n_2) – (21, n_2)

Таблица 1

Структурные параметры и магнитное поле хиральных нанотрубок из меди при $N_F = 15$ и 23
[Structural parameters and magnetic field of chiral copper nanotubes at $N_F = 15$ and 23]

n_1, n_2	N_F	$\nu, 1/\text{Å}$	$R, \text{Å}$	$B/U, \text{Tl/V [Tl/V]}$
(10, 5)	15	0,158	5,13	11,88
(9, 6)	15	0,267	5,16	12,02
(12, 3)	15	0,559	5,22	25,15
(8, 7)	15	0,806	5,31	12,09
(13, 2)	15	3,053	5,43	45,80
(11, 4)	15	4,586	5,57	68,78
(14, 1)	15	6,299	5,73	94,48
(12, 11)	23	0,806	7,86	18,54
(14, 9)	23	2,029	7,92	46,68
(18, 5)	23	3,811	8,27	87,66
(21, 2)	23	4,905	8,71	112,82
(16, 7)	23	5,370	8,06	123,50
(13, 10)	23	6,468	7,88	148,77
(19, 4)	23	7,318	8,40	168,30
(17, 6)	23	7,943	8,16	182,68
(15, 8)	23	8,185	7,98	188,25
(22, 1)	23	10,019	9,28	230,43
(20, 3)	23	16,651	8,55	382,98

Структурные параметры и магнитное поле хиральных нанотрубок из меди ряда $(n_1, 1)$
[Structural parameters and magnetic field of chiral copper nanotubes of the series $(n_1, 1)$]

n_1, n_2	N_F	$v, 1/\text{Å}$	$R, \text{Å}$	$B/U, \text{Тл/В [Тл/В]}$
(5, 1)	6	2,132	2,20	12,79
(6, 1)	7	2,592	2,59	18,14
(7, 1)	8	3,053	2,98	24,42
(8, 1)	9	3,515	3,37	31,63
(9, 1)	10	3,978	3,77	39,78
(10, 1)	11	4,441	4,16	48,86
(11, 1)	12	4,905	4,55	58,86
(12, 1)	13	5,370	4,95	69,80
(13, 1)	14	5,834	5,34	81,68
(14, 1)	15	6,299	5,73	94,48
(15, 1)	16	6,763	6,13	108,21
(16, 1)	17	7,228	6,52	122,88
(17, 1)	18	7,693	6,92	138,47
(18, 1)	19	8,158	7,31	155,00
(19, 1)	20	8,623	7,70	172,46
(20, 1)	21	9,088	8,10	190,85
(21, 1)	22	9,553	8,49	210,17

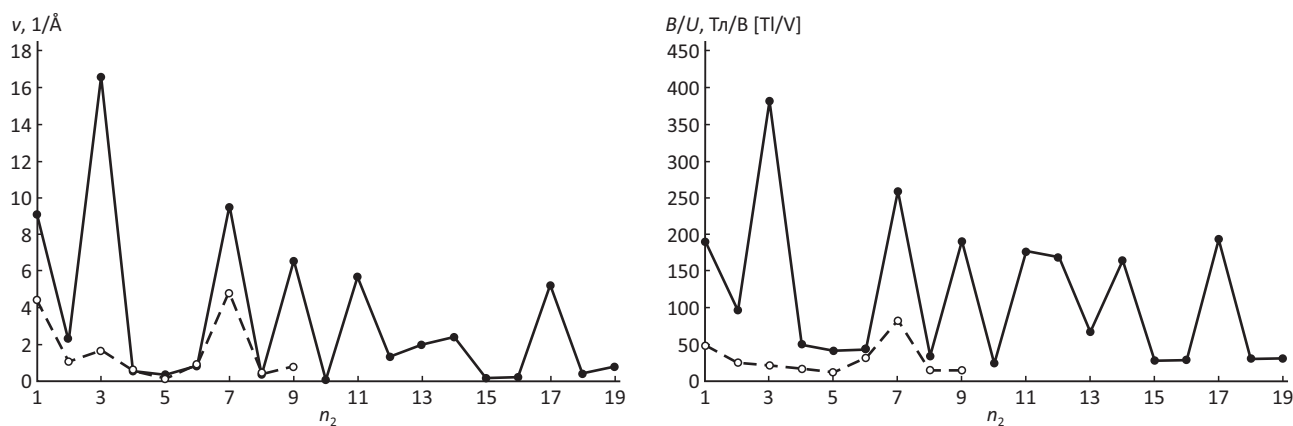


Рис. 2. Зависимость v и B/U от n_2 для хиральных медных нанотрубок $(10, n_2)$ и $(20, n_2)$

Fig. 2. Dependence of v and B/U on n_2 for chiral copper nanotubes $(10, n_2)$ and $(20, n_2)$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассчитаны магнитные поля в хиральных нанотрубках из меди. Установлены зависимости между геометрией, баллистическим электронным транспортом и магнитными полями, генерируемые наносолеоидами на основе медных трубок при прохождении через них постоянного электрического тока. Выяснено, что нанотрубки ряда $(n_1, 1)$ генерируют наиболь-

шее значение магнитного поля при меньших размерах по сравнению с трубками, обладающими таким же количеством каналов баллистического транспорта. А благодаря линейному увеличению всех параметров нанотрубки при переходе к следующим трубкам этого ряда и экспоненциальной зависимости магнитных полей можно легко подобрать наносолеоид с требуемыми характеристиками.

Краснов Д.О., Кольцова Э.М.

Библиография/References

- Murphy C.J., Sau T.K., Gole A.M. Anisotropic metal nanoparticles: Synthesis, assembly, and optical applications. *Journal of Physical Chemistry B*. 2005. Vol. 109. Pp. 13857–13870. URL: <https://doi.org/10.1021/jp0516846>
- Oshima Y., Onga A., Takayanagi K. Helical gold nanotube synthesized at 150 K. *Physical Review Letters*. 2003. Vol. 91. P. 205503. URL: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.205503>
- Kharche N., Manjari S.R., Zhou Y. et al. A comparative study of quantum transport properties of silver and copper nanowires using first principles calculations. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2011. Vol. 23. P. 085501. URL: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/23/8/085501>
- Kumar A., Kumar A., Ahluwalia P.K. Ab initio study of structural, electronic and dielectric properties of free standing ultrathin nanowires of noble metals. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2012. Vol. 46. Pp. 259–269. URL: <https://doi.org/10.1016/j.physe.2012.09.032>
- Hsiao J.C., Fong K. Making big money from small technology. *Nature*. 2004. Vol. 428. Pp. 218–220. URL: <https://doi.org/10.1038/428218a>
- Lu W., Lieber C.M. Nanoelectronics from the bottom up. *Nature Materials*. 2007. Vol. 6. Pp. 841–850. URL: <https://doi.org/10.1038/nmat2028>
- Natelson D. Best of both worlds. *Nature Materials*. 2006. Vol. 5. Pp. 853–854. URL: <https://doi.org/10.1038/nmat1769>
- Landauer R. Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. *Philosophical Magazine*. 1970. Vol. 21. Pp. 863–867. URL: <https://doi.org/10.1080/14786437008238472>
- Zhang Z.Y., Miao C., Guo W. Nano-solenoid: Helicoid carbon–boron nitride hetero-nanotube. *Nanoscale*. 2013. Vol. 5. Pp. 11902–11909. URL: <https://doi.org/10.1039/C3NR02914J>
- James C.R., Long J.E., Manning D.E. Significant multi Tesla fields within a solenoid encircled by nanostructure windings. *Scientific Reports*. 2019. Vol. 9. Pp. 1–11. URL: <https://doi.org/10.1038/s41598-018-38306-8>
- Kaniukov E.Y., Kozlovsky A.L., Shlimas D.I. et al. Electrochemically deposited copper nanotubes. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2017. Vol. 11. Pp. 270–275. URL: <https://doi.org/10.1134/S1027451017010281>
- Venkata Kamalakar M., Raychaudhuri A.K. A novel method of synthesis of dense arrays of aligned single crystalline copper nanotubes using electrodeposition in the presence of a rotating electric field. *Advanced Materials*. 2008. Vol. 20. Pp. 149–154. URL: <https://doi.org/10.1002/adma.200700430>
- Kaniukov E.Y., Kozlovsky A.L., Shlimas D.I. et al. Tunable synthesis of copper nanotubes. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. – IOP Publishing. 2016. Vol. 110. P. 012013. URL: <https://doi.org/10.1088/1757-899X/110/1/012013>
- Krasnov D.O., Zhensa A.V., Koltsova E.M. Magnetic properties of chiral copper nanotubes. *Nanotechnology and Nanomaterials*. 2022. Vol. 9. No. 3. Pp. 68–72. URL: <https://doi.org/10.33693/2313-223X-2022-9-3-68-72>
- Zhang K., Zhang H. Plasmon coupling in gold nanotube assemblies: Insight from a time-dependent density functional theory (TDDFT) calculation. *Journal of Physical Chemistry C*. 2014. Vol. 118. No. 1. Pp. 635–641. URL: <https://doi.org/10.1021/jp410056u>
- Dyachkov P.N., Dyachkov E.P. Magnetic properties of chiral gold nanotubes. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2020. Vol. 65. Pp. 1196–1203. (In Rus.) URL: <https://doi.org/10.1134/S0036023620070074>
- Dyachkov P.N., Dyachkov E.P. Modeling of nanoscale electromagnets based on gold finite nanosolenoids. *ACS Omega*. 2020. Vol. 5. Pp. 5529–5533. URL: <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c00167>
- Khoroshavin L.O., Krasnov D.O., Dyachkov P.N. et al. Electronic properties of achiral and chiral gold nanotubes. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2017. Vol. 62, Pp. 783–789. URL: <https://doi.org/10.1134/S0036023619010145>
- Krasnov D.O., Khoroshavin L.O., Dyachkov P.N. Spin-orbit coupling in single-walled gold nanotubes. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2019. Vol. 64. Pp. 108–113. (In Rus.) URL: <https://doi.org/10.1134/S0036023619010145>

Статья проверена программой Антиплагиат. Оригинальность – 98,77%

Р е ц е н з и я: Матасов А.В., доктор технических наук; начальник управления информатизации Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева

Статья поступила в редакцию 19.10.2022, принята к публикации 26.11.2022

The article was received on 19.10.2022, accepted for publication 26.11.2022

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Краснов Дмитрий Олегович, эксперт отдела эксплуатации автоматизированных информационных систем Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева. Москва, Российская Федерация. Author ID: 908416; E-mail: drygodo@gmail.com

Кольцова Элеонора Моисеевна, доктор технических наук, профессор; заведующая кафедрой информационных компьютерных технологий Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева. Москва, Российская Федерация. Author ID: 8352; E-mail: koltsova.e.m@muctr.ru

ABOUT THE AUTHORS

Dmitry O. Krasnov, expert at the Department of Operation of Automated Information Systems of the Mendeleev University of Chemical Technology of Russia. Moscow, Russian Federation. Author ID: 908416; E-mail: drygodo@gmail.com

Eleonora M. Koltsova, Dr. Sci. (Eng.), Professor; Head at the Department of Information Computer Technologies of the Mendeleev University of Chemical Technology of Russia. Moscow, Russian Federation. Author ID: 8352; E-mail: koltsova.e.m@muctr.ru