UNIVERZA V LJUBLJANI Fakulteta za matematiko in fiziko

Fizika DNA in CNT Sipanje žarkov na atomskih vijačnicah

Avtor: Luka ČUROVIĆ Mentor: Dr.Rudolf Podgornik

Marec 2011

Povzetek

V seminarju bom predstavil, kako sta Watson in Crick s pomočjo uklonske slike, ki prikazuje sipanje X-žarkov na vzorcu B-DNA in teorije CCV predlagala strukturo DNA molekule. Nato bom pokazal kako lahko teorijo uporabimo pri razlagi uklonskih vzorcev, ki nastanejo po sipanju elektronov na ogljikovih nanocevkah (CNT). To lahko storimo, ker gre tako v prvem kot drugem primeru za sipanje žarkov (X oz. elektronskih) na vijačnih strukturah.

1 Uvod

V petdesetih letih 20. stoletja je prišlo do razmaha molekularne biologije pri katerem so vlogo imeli tudi fiziki. Leta 1952 sta James D. Watson in Francis H. C. Crick na podlagi uklonskih slik, ki sta jih posnela Rosalind Franklin in Raymond Gosling ter uklonske teorije CCV predlagala zgradbo DNA.

V prvem delu seminarja predstavim zgradbo DNA, kot sta jo predlagala Watson in Crick. Nato predstavim osnove teorije uklona ravnih valov na vijačnih strukturah v kinematičnem oziroma prvem Bornovem približku (teorija CCV). V drugem delu potem pokažem kako lahko s pomočjo teorije iz uklonske slike izluščmo glavne geometrijske značilnosti DNA. Na koncu povem kako lahko pri sipanju elektronov na CNT uporabimo podobne koncepte in si tako razložimo njihovo zgradbo.

2 Zgradba DNA

DNA je nerazvejan polimer sestavljen iz monomernih enot, ki jim pravimo nukleotidi. Posamezen nukleotid je sestavljen iz sladkorja (deoksiriboze), dušikove baze (Adenin, Citozin, Gvanin ali Timin) in fosfatne (P) skupine. Nukleotidi so med seboj povezani s 3'5' - fosfodiesterskimi vezmi, kjer P-skupina povezuje C₃ atom enega sladkorja s C₅ atomom sosednjega. Nukleotidi se med seboj razlikujejo po N-bazah, njihovo zaporedje pa določa dedni zapis. Pravzaprav je DNA dvojna vijačnica sestavljena iz dveh nukleotidnih verig, ki potekata v nasprotnih smereh (ena poteka v smeri 5' \rightarrow 3', druga v smeri 3' \rightarrow 5') in sta zamaknjeni za 3/8 zavoja. Povezani sta preko baz s H-vezmi, kjer velja pravilo, da se Adenin povezije s Timinom, Citozin pa z Gvaninom (A=T,C≡G). Baze so znotraj verige naložene druga na drugo kot kovanci. P-skupine se nahajajo na zunanji strani vijačnice.



Slika 1: Zgradba DNA

Posamezen zavoj vijačnice meri 3,4 nm in vsebuje 10 baznih parov. Radij vijačnice meri 1 nm. Razdalja med bazami je 0,34 nm.

3 Sipanje žarkov X

X- žarke je leta 1985 odkril Roentgen, njihovo valovno naravo je prikazal von Laue, ko je dokazal, da se žarki sipljejo na atomski rešetki. Uporabo v kristalografiji je potem razvil Braggs. Uklon pomeni koherentno sipanje valovanja na nekem predmetu. Jakost sipanega valovanja lahko zabeležimo na zaslonu v obliki uklonskega vzorca.

3.1 Sipalni presek in atomski sipalni faktor

V kinematičnem približku je diferencialni sipalni presek za elastično sipanje na skupini atomov, katerih jedra so na položajih \mathbf{r}_j , od začetnega \mathbf{k}_i do končnega \mathbf{k}_f kvadrat kompleksne amplitude

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |A(\mathbf{k})|^2 = \left|\sum_j f_j(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}\right|^2,\tag{1}$$

kjer je $\mathbf{k} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j$ sipalni valovni vektor in f_j atomski oblikovni faktor, ki je primeru X-žarkov Fourierova transformacija gostote elektronov j-tega atoma.



(a) Odvisnost f od ${\bf k}$

Slika 2: $f(\mathbf{k})$ za elemente B,C,N,O,P

Iz zgornjega grafa vidimo, da oblikovni faktor doseže maksimum pri sipanju v smeri naprej (f(0)), kjer se ujema z atomskim številom elementa Z. To pomeni, da bo sipanje v primeru DNA najmočnejše na fosforjevih (P) atomih.

3.2 Sipanje na linearnih polimerih

Sedaj obravnavamo sipanje na polimeru sestavljenemu iz enakih točkastih sipalcev (atomov) na mestih $z_j = jP$, kjer je j celo število in P ponovitvena perioda polimera (to pomeni, da je razdalja med atomi enaka P). Enačba (1) se preoblikuje v

$$A(\mathbf{k}) = f(\mathbf{k}) \sum_{j} e^{ik_z P} = f(\mathbf{k}) \frac{2\pi}{P} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta\left(k_z - \frac{2\pi l}{P}\right), \qquad (2)$$

kjer smo uporabili identiteto:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i n x} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x-m).$$
(3)

Vidimo, da lahko k_z komponenta zavzame le diskretne vrednosti, ki so večkratnik $2\pi/P$. Na ta način smo množico točk ločenih z razdaljo P, fourierovo transformirali v horizontalne ravnine v recipročnem prostoru, ki so ločene z $2\pi/P$. Enačba ravnine je $k_z = 2\pi l/P$. Za elastično sipanje velja še $|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_f|$. Vektor \mathbf{k} mora tako ležati v presečišču krogle z radijem $|\mathbf{k}_i|$ in ravnine določene s prejšnjo enačbo. Tako dobimo v recipročnem prostoru stožce s skupnim vrhom v izhodišču. Presek stožca z zaslonsko ravnino je hiperbola oz. uklonska črta (layer line). Na zaslonu dobimo vzporedne uklonske črte. Intenziteto črte določa faktor $f(\mathbf{k})$, ki je za točkasti sipalec monotono padajoča funkcija. V splošnem imamo periodičen polimer, katerega monomer ima lahko kakršnokoli 3D strukturo. Tudi v tem primeru dobimo v uklonskem vzorcu vzporedne horizontale uklonske črte, le $f(\mathbf{k})$ moramo zamenjati s $F(\mathbf{k}) = \sum_{\mu} f_{\mu} e^{ikr_{\mu}}$, kjer indeks μ seštevamo po atomih v monomeru. Zopet dobimo uklonske črte, katerih intenziteto sedaj določa $|F(\mathbf{k})|^2$. Vzdolž črte dobimo oscilirajočo jakost, ki odraža interferenco valov, ki se sipljejo na posameznih atomih monomera.

3.3 Sipanje na vijačnicah - CCV formula

CCV teorija je dobila svoje ime po avtorjih (Cochran, Crick in Vand). Gre za analitično teorijo, ki obravnava sipanje žarkov X na atomih, ki so razporejeni v obliki vijačnice. Geometrija vijačnice je seveda cilindrična, zato namesto ravnih valov uporabimo njihov fourierov razvoj po cilindričnih valovih. To naredimo s pomočjo Jacobi-Angerjevega razvoja, ki ga lahko najdemo v matematičnih priročnikih:

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \sum_{n} e^{in(\psi_k + \pi/2)} J_n(k_\perp r) e^{-in\varphi} e^{ik_z z},\tag{4}$$

kjer so (r, φ, z) in (k_{\perp}, ψ_k, k_z) ustrezne cilindrične koordinate **r** in **k** in J_n Besslova funkcija n-tega reda.

Na vijačnici z radijem r imamo več atomov, ki se ponavljajo s periodo P vzdolž z-osi, razdalja med sosednjimi atomi vzdolž z pa je p_a , zato za j-ti atom napišemo:

$$r_{j} = \left(r, \varphi_{0} + \frac{2\pi(z_{j} - z_{0})}{P}, z_{0} + jp_{a}\right),$$
(5)

kjer so (r, φ_0, z_0) , koordinate poljubnega izhodiščnega atoma. Koordinate postavimo v enačbo (1), uporabimo razvoj (3) in dobimo formulo CCV:

$$A(\mathbf{k}) = \frac{2\pi}{P} f(\mathbf{k}) e^{ik_z z_0} \sum_{n,m} J_n(k_\perp r) e^{in(\psi_k - \varphi_0 + \pi/2)} \delta\left(k_z - \frac{2\pi n}{P} - \frac{2\pi m}{p_a}\right).$$
 (6)

Ker je $k_z=2\pi l/p_a$, potem za l-touklonsko črto velja:

$$\frac{l}{p_a} = \frac{n}{P} + \frac{m}{p_a},\tag{7}$$

od koder dobimo izbirna pravila za m in n. Če v enačbo (6) vstavimo vrednosti za DNA (P = 3.4 nm in $p_a = 0.34$ nm), dobimo pravilo l = n + 10m. Sedaj lahko naredimo tabelo za prvih 10 uklonskih črt ($l \in [0, 10]$) in zraven vpišemo, besslove funkcije, ki so v vsoti vodilne.

| 1 | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|----|---------------------------------|--------------------|--------------------------------|--------------------------------|-------|----------------------------------|-------------------|--------|--------|--------|--------------------------------|
| n | 0 -10 | 1 -9 | 2 -8 | 3 -7 | 4 -6 | 5, -5 | -4 6 | -37 | -2 8 | -19 | 0 10 |
| m | 0 1 | 0 1 | 0 1 | 0 1 | 0 1 | 0, 1 | 1 0 | 1 0 | 1 0 | 1 0 | 1 0 |
| J, | J ₀ J ₋₁₀ | J ₁ J., | J ₂ J ₋₈ | J ₃ J ₋₇ | J4 J6 | J ₅ , J _{.5} | J₄ J ₆ | J_3 J7 | J_2 J8 | J_1 J9 | J ₀ J ₁₀ |

Ob tem se spomnimo na nekaj lastnosti Besslovih funkcij:

- oscilirajo vzdolž $x = k_{\perp}r$
- $J_n(x)$ je majhna dokler ne doseže $x = k_{\perp}r \simeq n$
- $J_{-n} = (-1)^n J_n$

Torej ko se premikamo navpično gor ali dol od ekvatorialne ravnine do črte l = 5 se prvi in najmočnejši maksimum odmika stran od meridiane ravnine, ker J_n dosegajo vrh vse pozneje. Od pete črte naprej pa se indeks vodilne J_n manjša in maksimum se zopet premika proti meridiani ravnini. Ta igra se potem nadaljuje na vsakih 5 uklonskih črt. Na ta načina nam Besslove funkcije tvorijo križ, ki se ponovi na vsakih 5 uklonskih črt.



(a) Besslove funkcije

Slika 3: Prvih 6 Besslovih funkcij, ki svoj prvi maksimum dosežejo vedno kasneje

Ker imajo Besslove funkcije majhno vrednost, dokler ne dosežejo maksimuma.,
bo sipalna amplituda znotraj križa majhna in bomo v uklonskem vzorcu videli vzorec v obliki igralne karte karo. Prav tako iz kota
 α med rokama križa ocenimo velikost radija po formuli
 $r = (P/2\pi) \cot(\alpha/2)$. Vse povedano lahko tudi shematsko predstavimo. Po sipanju žarkov X na vijačnici pričakujemo naslednjo sliko:



(a) Sipanje žarkov X na vijačnici

Slika 4: Žarki X vpadajo pravokotno na os vijačnice. Na desni vidimo shemo uklonskega vzorca

Na uklonskem vzorcu so predsatvljene glavne značilnosti sipanja žarkov X kot jih predpostavlja CCV forumula:

- vodoravne uklonske črte
- besslove oscilacije vzdolž uklonskih črt
- križ
- vzorec karo
- notranjost križa z malo intenzivnostjo

3.4 Vpliv dodajanja vijačnic na uklonski vzorec

Sedaj naši vijačnici dodamo še eno vijačnico, ki je za del zavoja f premaknjena glede na prvo vijačnico. K sipalni amplitudi na l-ti črti moramo dodati še faktor

$$G(f) = 1 + e^{2i\pi f l}.$$
 (8)

Opazimo, da če je fl = n+1/2 je G(f) = 0. Ko pa je f = 1/2 (ko bosta vijačnici zamaknjeni za polovico periode), bodo izginile vse lihe uklonske črte. Pri DNA sta vijačnici zamaknjeni za f = 3/8 periode, kar pomeni, da do destruktivne interference pride, ko je l = 4 in na sliki ne bi smeli biti 4. uklonske črte. Faktor G(f) je še bolj pomemben pri CNT, ki si jih predstavljamo kot množico parov vijačnic. V splošnem, ko imamo L koaksialnih vijačnic, ki so med seboj oddaljene za faktor P/L dobimo faktor

$$\sum_{n=0}^{L-1} e^{2i\pi nl/L} = \sum_{m}^{L} \delta_{l,mL}.$$

Edine možne črte so potem l = mL oz. tiste, ki so večkratnik števila verig. V limiti, ko imamo veliko vijačnic $(L \to \infty)$ pričakujemo, da izginejo vse črte razen ničte. Sipanje opazimo le vzdolž ekvatorialne ravnine.

4 Sipanje žarkov X na DNA

Ko so CCV razvili svojo teorijo, Gosling in Raymondova še nista objavila svojega posnetka. Pravzaprav so posnetek objavili šele leta 1953 in sicer v isti številki revije Nature, kjer sta tudi Watson in Crick objavila svoj model DNA. Seveda pa sta Watson in Crick videl posnetek že prej, ki je samo potrdil njuno razmišljanje o zgradbi DNA.

Na tem mestu si lahko končno ogledamo posnetek:



(a) Sipanje žarkov X na DNA

Slika 5: Slika ki sta jo posnela Raymond in Gosling in potrjuje, da je DNA vijačnica

Slika je posnetek uklona na B-DNA. To je oblika DNA, ki naj bi se pojavljala v živih celicah, kjer je vsebnost vode precej visoka. Preden sta sipala žarke na DNA, sta jo mogla ustrezno pripraviti in to kar vidimo je sol DNA (Na-DNA) s čimer so izničili negativen naboj P atomov. DNA je bila pripravljena v obliki vlakna, ki je bilo sestavljeno iz dolgih molekul DNA. Na sliki lahko opazimo večino značilnosti, ki jih pričakujemo pri sipanju na vijačnici.

Uklonske črte

Vidimo uklonske črte in predvsem njihove prve maksimume, ki so posledica oscilacij besslove funkcije. Iz razdalje med črtami so določili razdaljo med osnovnimi enotami polimera oz. razdaljo P, ki pomeni višino zavoja. Dobili so P = 3, 4 nm.

Križ sv. Andreja

Najbolj izstopajoča značilnost slike je razporeditev pik v obliki križa, ki je tako značilna za sipalce urejene v vijačnico. Torej čim vidimo X, vemo da imamo opravka z vijačno strukturo. Vrednost kota med rokama križa znaša $\simeq 60^{0}$ in od tu dobimo radij vijačnice, ki znaša $\simeq 1$ nm.

Vzorec karo

Na severni in južni strani vzorca vidimo 2 packi, ki predstavljata vrh 2 karo vzorcev, ki imata skupen vrh v izhodišču. Če potgnemo navpično diagonalo (d) čez vzorec in zmerimo njeno dolžino lahko določimo razdaljo med atomi p_a , kjer je $d = (2\pi)/p_a$. Poleg tega se diagonala razteza čez 10 črt, kar pomeni, da je v enem zavoju 10 sipalcev (P-atomov). Pack na S in J ne razlagamo s CCV teorijo, ampak predvidevamo, da nastanejo zaradi konstruktivne interference valovanja, ki se siplje na dušikovih bazah in igrajo vlogo ekvidistančnih rež.

Manjkajoča četrta uklonska črta

Na sliki je očitno, da manjka četrta črta, kar je pomenilo, da imamo opravka z dvema vijačnicama, ki sta zamaknjeni za 3/8 zavoja.

S pomočjo uklonske teorije in slike so lahko določili glavne geometrijske značilnosti DNA molekule (radij, P, p_a in število baznih parov na zavoj). Vendar nam to še ne pojasni kako so v molekuli med seboj povezane baze. Pri izgradnji modela so se za 2 vijačnici v resnici odločili zaradi stereokemijskih razlogov in ne zaradi manjkajoče črte, vendar pa tudi ta lepo potrdi teorijo. Še nekaj časa so porabili, da so ugotovili da sta vijačnici orientirani v nasprotnih smereh, kar na sipanje ne vpliva, ker so glavni sipalci fosforjevi atomi.

5 Fizika CNT in sipanje elektronov na CNT

V tem delu skušamo kvantitativno obravnavati sipanje elektronov na ravnih CNT, ki so sestavljene le iz ene plasti (SWNT = single walled nanotube). Analitična obravnava je precej podobna obravnavi sipanja žarkov X na bioloških vijačnicah (npr. DNA), ki jo obravnavamo v okviru teorije CCV, ker na CNT lahko gledamo kot na skupino vijačnic, ki so zavite okoli skupne osi. Najprej pa bom predstavil glavne morfološke značilnosti CNT, ki precej vplivajo na sipalne vzorce in tudi na lastnosti CNT.

5.1 Morfologija CNT

CNT so ogljikovi polimeri z vijačno strukturo. Njihova velikost je primerljiva z velikostjo DNA, le da je zgradba CNT preprostejša. So alotropska modifikacija ogljika, kjer so C-atomi povezani med seboj s sp² vezmi, tako da ima vsak C-atom 3 sosede. Na CNT gledamo, kot na plast grafena, ki se zavije v cevko (tubul). Če je tubul le iz ene plasti mu rečemo SWNT, če je iz večih pa MWNT(= multi walled nanotube). Cevke so zanimive predvsem zaradi svojih lastnosti, ki pa so povezane z njihovo zgradbo, ki jo lahko preučujemo s pomočjo sipanja elektronov.

 ${\rm V}$ splošnem lahko grafensko ravnino zavijemo v tubul na tri načine. V povezavi s tem lahko CNT delimo na:

- vzporedne ali zig-zag akiralne cevke,
- pravokotne ali arm-chair akiralne cevke in na
- kiralne cevke

Kot smo že zasledili ločimo cevke glede na njihovo kiralnost. Cevko lahko opišemo s kiralnim vektorjem $\mathbf{C} = (L, M)$, kar pomeni:

$$\vec{C} = L\vec{a}_1 + M\vec{a}_2,\tag{9}$$

kjer sta \mathbf{a}_1 in \mathbf{a}_2 , vektorja primitivne celice.

Kiralni vektor nam pove kako je grafenska ravnina zavita. Ravnino zvijemo tako, da vzamemo vozlišče (0,0) in ga zavijemo tako, da prekrije vozlišče (L,M). Če je:

- L=M je to pravokotna cevka
- M=0, L \neq 0 gre za vzporedno cevko
- $M \neq L \neq 0$ je cevka kiralna.

Kiralni vektor nam pri tem poda tudi premer (d) cevke kot:

$$d = \frac{a}{\pi}\sqrt{L^2 + LM + M^2}; \quad a = 0.246nm.$$
(10)

Definiramo pa še kiralni kot α kot
kot med vektorjema (L,0) in (L,M) in ga izračunamo:

$$\alpha = \arctan M\sqrt{3}(2L+M),\tag{11}$$

ki je pri (L,L) pravokotni obliki enak $\pm 30^{0}$, pri (L,0) vzporedni obliki znaša 0^{0} in pri kiralni zavzame vrednosti $-30^{0} < 0^{0} < 30^{0}$. Tako lahko cevko opišemo s parom števil (L,M) ali pa s parom (d, α).

Večplastna CNT je sestavljena iz večih koaksialnih cevk, med katerimi je razdalja 0,34 nm. Vse povedano je seveda lažje predstaviti s sliko:



Slika 6: Tubuli so po vrsti: pravokotni, vzporedni, kiralni

5.2 Sipanje elektronov na CNT

Eletroni imajo naboj in se sipajo tako na jedrih, kot na elektronskem oblaku okoli jedra. Zaradi močnega sipanja uklona elektronov načeloma ne bi smeli obravnavati v okviru kinematičnega približka. Vendar je ta najmočnejši člen pri izračunu sipalnega faktorja, če je konstanta fine strukture $(Ze^2/\hbar/v)$ manjša od 1. V primeru C-atomov je Z = 6 in za energijo elektronov 300 keV, konstanta zanaša 0.07, kar je veliko manjše od 1.

Če hočemo sipanje na CNT obravnavati v okviru teorije CCV, moramo na tubule gledati kot na skupino koaksialnih vijačnic. To naredimo tako, da vzamemo neko skupino atomov, ki tvorijo cik-cak verigo. Verigo izberemo tako, da ta tvori neničelni kot β glede na kiralni vektor. Na ta način pravzaprav dobimo dve vijačnici, ki sta med seboj povezani z vijačno operacijo (z_1, φ_1) , ki je sestavljena iz rotacije in translacije. Dva para verig sta potem povezana s cevkino simetrično operacijo (z_0, φ_0) . Celotno cevko potem opišemo z L vijačnimi pari. Skupna sipalna amplituda $A(\mathbf{k})$, je vsota amplitud vseh L parov, ki jih moramo pomnožiti še z faznim faktorjem G. V vsoti zaradi tega dobimo geometrijsko vrsto (glej poglavje 3.4).



Slika 7: Izbrana cik cak veriga tvori dve vijačnici, ki sta povezani z vijačno operacijo.

Sipanje na kiralni cevki

Za obravnavo si vzamemo vzporedni tubul (L,0). Par vijačnic je povezan s čisto translacijo ($z_1 = d, \varphi_1 = 0$) vzdolž z-osi. Par nam da sipalno amplitudo:

$$A_{par} = \sum_{j} f_{j} e^{ikR_{j}} \left(1 + e^{ik_{z}z_{1}} \right), \tag{12}$$

kjer je $z_1 = d = 0.14$ nm (dolžina C-C vezi). Par vijačnic, potem še L-1 krat premaknemo za vektor ($z_0 = 3d, \varphi_0 = 0$) in seštejemo amplitude za vsak par. $A(\mathbf{k})$ se tako pomnoži z geometrijsko vrsto:

$$A_{tubul} = \sum_{j} e^{ikR_{j}} (1 + e^{lk_{z}z_{1}}) \frac{1 - e^{iLk_{z}z_{0}}}{1 - e^{ik_{z}z_{0}}}.$$
(13)

Prvi faktor pomeni amplitudo ene vijačnice, drugi faktor nam pove, da imamo opravka s parom vijačnic, tretji člen nam da interferenco med vsemi pari v tubulu. Zadnji člen se da zapisati tudi kot $L\delta_{l,mL}$ in tako izgubimo vse uklonske črte razen tistih, kjer velja l = mL, kjer je m celo število. Dobimo samo črte, ki so večkratnik števila vijačnic v tubulu. Vzdolž črte je jakost vzorca seveda odvisna od Besslovih funkcij.

Sipanje na akiralni cevki

Tubul označimo s parom (L,M). Amplitudo lahko zapišemo kot:

$$A_{tub} = f(\mathbf{k}) \sum_{n} J_n(k \perp r) e^{in(\psi_k + \pi/2)} A_n(L, M) B_n(L, M).$$
(14)

 A_n je prispevek zaradi para vijačnic, B_n pa je povezan z vsoto po L
 parih, ki tvorijo tubul in se z nekaj truda reducira v
 $B_n=L\sum s\delta_{n+m,sL}$. Zaradi

Kroneckerjeve δ -funkcije izgubimo v vzorcu vse črte, ki bi jih dobili z 1 vijačnico, razen črt, ki v končnem vzorcu tvorijo 2 šestkotnika. Ta dva sta med seboj zarotirana za kot $\pm \alpha$ (α je seveda kiralni kot).



(a) Sipanje e $^-$ na CNT

Slika 8: Slika prikazuje računalniško simulacijo sipanja na SWNT.

V primeru a) gre za pravokotno cevko, pri b) za vzporedno in pri c) gre za akiralno cevko. Vidimo, da je centralni heksagon zarotiran za 30^0 od pravokotne do vzporedne cevke, medtem ko je kot med šestkotnikoma pri kiralni cevki enak dvakratniku kiralnega kota.

Sipanje na MWNT

Večplastne cevke lahko predstavimo kot skupino koaksialnih nanocevk, ki so med seboj razmaknjene za 0.34 nm. Vsako plast označimo z (L,M). Pri računanju sipalne amplitude moramo upoštevati tudi interferenco med plastmi.



Slika 9: Uklonska slika sipanja e $^-$ na 7 plastni nanocevki

Slika prikazuje sipanje elektronov na večplasni nanocevki. Na prvi sliki vidimo dejansko sliko sipanja, na desni je slika, ki jo dobimo s pomočjo računalnika. Za računalniško simulacijo so uporabili 7 enoplastnih tubulov označenimi z vektorji (29,0),(38,0),(47,0),(48,13),(55,16),(63,17),(70,20) in formulo,ki jo lahko izpeljemo s pomočjo teorije CCV. Podobnost je očitna.

6 Zaključek

V seminarju sem povzel glavne značilnosti sipanja žarkov (X in elektronskih) na vijačnih strukturah. Sipanje sem obravnaval s pomočjo uklonske teorije CCV. Teorija nam je lahko v pomoč, ko skušamo na podlagi uklonskih slik spoznati strukturo vijačnih struktur. Prav zanimivo je kako sta lahko Watson in Crick na podlagi meritev Franklinove in Goslinga in CCV formule lahko podala strukturo DNA. To je bil obenem tudi začetek razcveta molekularne biologije in genske tehnologije. Šele z odkritjem DNA smo lahko spoznali strukturo genov, medtem ko danes poznamo že skoraj celotni človeški genom.

Po drugi strani pa lahko s CCV teorijo opišemo sipanje elektronov na ogljikovih nancevkah in tako odkrivamo njihovo strukturo ter z njo povezane lastnosti CNT. Lepota teorije je tudi v tem, da je tako dobro podprta tudi z ekspirimentalnimi podatki.

Literatura

- [1] Watson J.D, Crick F.H.C., Nature 171, 737 (1953)
- [2] Franklin R.E., Gosling R.G., Nature 171, 740 (1953)
- [3] A.A. Lucas, V. Bruyninckx, Ph. Lambin, D. Bernaerts, S. Amelinckx, J. Van Landuyt and G. Van Tendeloo, Scanning Microscopy 12, 415 (1997)
- [4] M.Viršek, Določitev strukture DNK z uklonom rentgenskih žarkov Seminar, (2005)
- [5] Amand A Lucas and Philippe Lambin, Rep. Prog. Phys. 68, 1181, (2005)
- [6] Amand A Lucas, International Journal of Quantum Chemistry, 90, 1491 (2002)
- [7] Cochran W., Crick F. H. C. and Vand V., Acta Crysallogr. 5, 581, 1952
- [8] M. Viršek, Electron diffraction on carbon nanotubes predstavitev
- [9] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, Solid State Physics (Hartcourt College Publishers, 1976)
- [10] C. Kittel, Introdiction to Solid State Physics (John Wiley and Sons, Inc, New York, 1996)