

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦЫ ДЛЯ ОБНАРУЖЕНИЯ РАКА ПОДЖЕЛУДОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ НА РАННЕЙ СТАДИИ

*Е. Тамулене, Р. Вайшнорас**

*Вильнюсский университет, Институт теоретической
физики и астрономии*

**Литовский эдукологический университет*

Наноалмазы - одна из аллотропных форм углерода - отличаются от других полупроводниковых материалов тем, что они могут быть использованы при высоких температурах и в условиях ускоряющих коррозию [1]. Это материалы, которые из-за их исключительных механических и оптических свойств, можно легко использовать в электронике, биоанализе, биомедицине и так далее. Однако, наноалмазы, произведенные с помощью детонации, диамагнетики, что ограничивает их широкое использование [2]. Недавно были синтезированы наноалмазы, поверхность которых покрыта атомами водорода. Такие наноалмазы называют наноалмазоноидами (*nanodiamondoid*). Они имеют определенную структуру, термостабильны, твердые и имеют исключительные электронные свойства [3]. Еще одним важным шагом в улучшении свойств наноалмазов а также наноалмазоноидов, является синтез этих материалов с дефектами или же с полимерными соединениями. Один из дефектов наноалмазов - это внедрение в структуру атомов азота. Последние теоретические исследования показали, что положение дефекта (атома азота) не влияет на термическую стабильность, но влияет на химическую стабильность наноалмазоноидов [4]. В настоящее время мы выполняем теоретические исследования магнитных свойств наноалмазов с целью выявления причин, по которым указанные характеристики могут измениться. Исследования, проведены применяя функционал плотности B3LYP / 6-311G.

На основании предыдущих исследований был смоделирован наноалмазоноид, состоящий более чем из трех примитивных решеток алмаза. В этой структуре один из атомов углерода был заменен атомом азота. Таким образом, было изготовлено 19 различных структур. Наиболее стабильная структура приведена на рис 1. Также была рассчитана магнитная чувствительность исследуемых структур и установлено, что дефект существенно не влияет на магнитные свойства этих материалов. Эти исследования также показали, что исследуемые наноалмазоноиды с дефектами - диамагнетики. Вероятно, что неподеленная пара электронов азота локализована на вакансии, возникающей из-за того, что атом углерода заменен атомом азота, и поэтому, непарных носителей заряда в наноалмазоноидах с дефектами нет.

Эти результаты противоречат экспериментальным измерениям, выполненным в магнитных и электрических полях. По этой причине было сделано предположение, что магнитные свойства наноалмазоноидов проявляются только в электрических и магнитных полях.

Полученная зависимость магнитной восприимчивости от напряженности электрического поля приведены на рис 2.

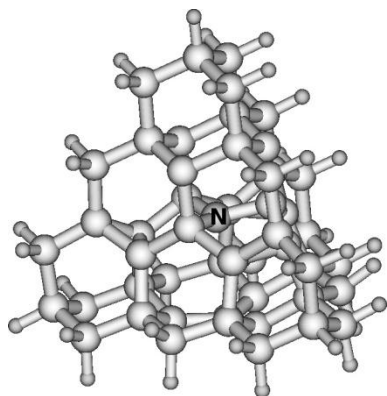


Рис.1. Наиболее стабильная структура наноалмазоноидов с дефектами

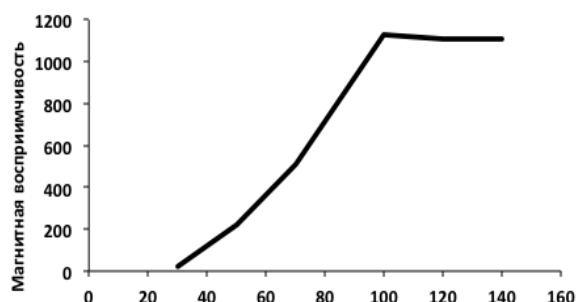


Рис.2 Зависимость магнитной восприимчивости от напряженности электрического поля.

Примечательно, что даже в слабых электрических полях исследуемые наноалмазоноиды с дефектами - парамагнетики. Очевидно, что существует определенная напряженность электрического поля, при которой магнитная восприимчивость наноалмазоноидов с дефектами достигает максимального значения, и не изменяется при увеличении напряженности электрического поля. Это свойство наноалмазоноидов можно использовать при обнаружении труднодоступных раковых опухолей.

Литература

- [1] S. Han, L.S. Pan and D. R. Kania, Free carrier dynamics in diamond Diamond: Electronic Properties and Applications, ed. L S Pan and D R Kania (Kluwer International Series in Engineering and Computer Science) pp 241–78 (1995)
- [2] N.R. Greiner, D.S. Phillips, J. D. Johnson, F. Volk, Nature 333, 440 (1988).
- [3] D.V. Korolkov, O.V. Sizova Int. J. Quantum Chem., 88 , 606 (2002).
- [4] A. Šliogeris, J. Tamulienė, R. Vaišnoras. Mat. Phys. Mech. 12, 2, 186 (2011).