

## Дальнодействующее обменное взаимодействие в углеродных нанотрубках с наночастицами железа

*М. В. Шарейко*

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
г. Минск, Республика Беларусь

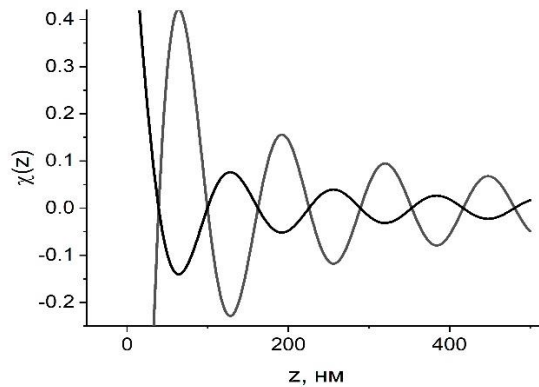
В данной работе приводятся результаты моделирования дальнодействующего обменного взаимодействия в массиве углеродных нанотрубок (УНТ), содержащих наночастицы железа. Используется модельный гамильтониан, учитывающий диаметр, хиральность, химический потенциал и спин-орбитальное взаимодействие (СОВ) системы. Рассчитана спиновая восприимчивость вдоль оси УНТ и показано, что при условии попадания химического потенциала в щель, открываемую СОВ, реализуется дальнодействующий косвенный обмен типа РККИ, который проявляется на расстояниях в сотни нанометров. Получена также оценка энергии обменного взаимодействия между наночастицами железа внутри УНТ.

**Ключевые слова:** углеродные нанотрубки, ферромагнитные наночастицы, косвенное обменное взаимодействие, модельный гамильтониан, спин-орбитальное взаимодействие.

Исследование магнитных свойств УНТ с наночастицами ферромагнитных металлов актуально для разработки углеродной спинтроники. В работе рассматривается полупроводниковая УНТ с внутренним диаметром  $D$  и индексами хиральности  $(m, n)$ , причем  $m > n > 0$ . Координата  $z$  направлена вдоль оси УНТ. Косвенное обменное взаимодействие типа РККИ описывается статической спиновой восприимчивостью свободных электронов  $\chi$ , которая входит в модельный обменный гамильтониан [1]. Рассматриваются только электроны проводимости внутренней стенки. Учитывается также вклад СОВ, которое может быть на порядки больше, чем у графена за счет разных факторов, таких как кривизна УНТ, дефекты или примесные состояния УНТ, наличие магнитных наночастиц. Чтобы определить эволюцию спиновой восприимчивости  $p$ -электронов проводимости вдоль оси УНТ в присутствии СОВ мы будем рассматривать только низкочастотную огибающую осцилляций  $\chi(z)$ . В этом случае [1]

$$\chi(z) = \chi_0 [\text{si}(2k_+|z|) + 2\text{si}(2k_-|z|)], \quad (1)$$

где  $\chi_0 = a^2 k_G / \hbar v_F$ ,  $v_F$  – скорость Ферми,  $k_G \approx 2N/3D$  ( $N = (m-n) \bmod 3$ ) квантованный импульс в циркулярном направлении,  $a$  – постоянная решетки,  $\hbar$  – постоянная Планка, волновые векторы  $k_{\pm} = \text{Re}[(2k_G \delta_{\pm} / \hbar v_F)^{1/2}]$ . Здесь  $\delta_{\pm} = E_F - \hbar v_F k_G \mp \beta_{\pm}$  а параметр  $\beta_{\pm} = \alpha + \beta$  характеризует вклад СОВ,  $\alpha$  и  $\beta$  – коэффициенты спин-орбитального взаимодействия в гамильтониане исследуемой системы, зависящие от  $\Delta_{SO}$  – константа СОВ, функция  $\text{si}(x) = \int_0^x \frac{\sin t}{t} dt - \frac{\pi}{2}$ . Использовались следующие фундаментальные прыжковые амплитуды в присутствии  $sp^2$  гибридизации:  $V_{pp}^{\pi} = -3,0$  эВ,  $V_{pp}^{\sigma} = 5,0$  эВ,  $V_{sp} = 5,6$  эВ. В рамках модели (1) рассчитывались значения  $\chi$  как функции от  $E_F$ ,  $\Delta_{SO}$  и индексов хиральности  $(m, n)$ , которые определяют значения  $D$ ,  $\theta$  и  $k_G$ . Расчеты  $\chi$  проводились в зависимости от параметра  $\delta_{\pm}$ , величину которого можно легко подстраивать через энергию Ферми  $E_F$  [2]. Наиболее важный случай дальнодействующего РККИ взаимодействия происходит, когда положение  $E_F$  такое, что  $\delta_+ > 0$  и  $\delta_- < 0$ , т.е. когда она находится внутри щели, открытой СОВ. На рис. 1 приведена зависимость  $\chi(z)$  для УНТ со следующими параметрами:  $(m, n) = (235, 129)$  ( $D = 25$  нм,  $\theta = 20.45^\circ$ ,  $k_G = 0,027$  нм<sup>-1</sup>),  $\Delta_{SO} = 6$  мэВ. Видно, что спиновая восприимчивость затухает на расстоянии более 500 нм.

Рисунок 1 - Зависимость  $\chi(z)$  для  $E_F = 50$  мэВ и  $\Delta_{SO} = 6$  мэВ

Было установлено, что поведение спиновой восприимчивости вдоль оси УНТ весьма чувствительно к положению энергии Ферми. Важным параметром, который оказывает влияние на спиновую восприимчивость, является константа СОВ  $\Delta_{SO}$ . По мере роста  $\Delta_{SO}$  щель СОВ увеличивается. Для УНТ диаметром  $D = 30,6$  нм,  $(m,n)=(222,221)$ ,  $\theta = 29,93^\circ$ ,  $k_G = 0,022$  нм<sup>-1</sup> и  $\Delta_{SO} = 20$  мэВ дальнедействующий порядок РККИ обмена обеспечивается, если энергия Ферми находится в интервале  $14,62 \pm 0,2$  мэВ. Обменную энергию можно выразить как  $E_{ex} = J^2 \chi(z)$  где  $J$  – константа обменной связи, определяющая взаимодействие между  $d$ -электронами ферромагнитной наночастицы и проводящими  $p$ -электронами УНТ. Для Fe  $J \approx 0,8 - 1,5$  эВ. В результате получено, что  $E_{ex} \sim (1-2) \times 10^{-5}$  эВ, что соответствует обменному полю  $H_{ex} = (2-4)$  кЭ.

Таким образом, в работе установлено, что в УНТ диаметром в несколько десятков нанометров косвенное обменное взаимодействие РККИ-типа может распространяться на расстояния порядка сотен нм вдоль оси нанотрубки. Необходимое условие для этого – энергия Ферми должна находиться внутри энергетической щели, открываемой СОВ. Влияние параметров УНТ на дальнедействующий характер обменной связи между ферромагнитными наночастицами посредством взаимодействия РККИ-типа является самосогласованным. Это связано с тем, что такие параметры УНТ, как индексы хиральности, энергия Ферми и угол хиральности, должны быть соотнесены с константой СОВ, чтобы обеспечить условие нахождения энергии Ферми внутри энергетической щели, открытой СОВ. Увеличение индексов хиральности, которое вызывает увеличение диаметра УНТ, приводит к уменьшению сдвига энергии Ферми до диапазона 10 мкэВ. Точная регулировка положения уровня Ферми в энергетической щели, создаваемой СОВ, позволяет усилить косвенный обмен и обеспечить его дальнедействующий характер. Таким образом, обменное взаимодействие РККИ-типа может эффективно контролироваться электрическим полем. Точная регулировка положения энергии Ферми в энергетической щели, создаваемой СОВ, позволяет усилить косвенный обмен и обеспечить его дальнедействующий характер, до сотен нм. Оценка энергии косвенного обменного взаимодействия посредством электронов проводимости УНТ между наночастицами Fe показала, что ее значение хорошо коррелирует с полем обмена, получаемым из анализа магнитных характеристик УНТ.

#### Список источников

- [1] **Klinovaja J., Loss D.** *RKKY interaction in carbon nanotubes and graphene nanoribbons.* Phys. Rev. B. 2013;87(4);045422.
- [2] **Klinovaja J., Schmidt M.J., Braunecker B., Loss D.** *Helical modes in carbon nanotubes generated by strong electric fields.* Phys. Rev. Lett. 2011;106(15);156809.