

# МОДЕЛИРОВАНИЕ СПИНОВЫХ СВОЙСТВ УЛЬТРАКОРОТКИХ ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК (0, 9).

Глушков Г. И., Тучин А. В.

Воронежский государственный университет, Россия, 394006, Воронеж,  
Университетская пл. д.1, 8(4732)2281160,  
green5708@yandex.ru

В настоящее время спиновым процессам в низкоразмерных системах посвящено все большее число теоретических и экспериментальных работ [1]. Относительно слабое спин-орбитальное взаимодействие и баллистический транспорт носителей заряда в углеродных нанотрубках (УНТ) обеспечивают большое время спиновой когерентности [2,3].

Целью работы является исследование размернозависимой перестройки электронной структуры чистых ук-ОУНТ симметрии  $D_{3h}$ ,  $D_{3d}$  и  $D_3$  в спинсинглетном и спинтриплетном состояниях.

Неограниченным методом DFT в кластерном приближении проводились расчеты полной энергии, потенциала ионизации, сродства к электрону, работы выхода, зазора между граничными орбиталями. В качестве обменного функционала выбран LSDA. В качестве базисного набора выбран валентно-расщепленный базис 3-21G(dp). Расчеты проводились в программном комплексе Gaussian03.

Изучение энергетических характеристик переходов между синглетным и триплетным состояниями проводилось сравнением значений полных энергий ук-ОУНТ в двух спиновых состояниях. В исследуемом интервале длин энергии перехода положительна и лежит в диапазоне 0.5–1.3 эВ, что соответствует ИК-диапазону. Таким образом, возможно переключение между спиновыми состояниями ук-ОУНТ оптическими методами.

Анализ плотности свободных и занятых состояний для возбужденного спинтриплетного состояния показывает сильную зависимость величины спиновой поляризации носителей от симметрии нанотрубки. Для симметрии  $D_3$  спиновая поляризация обоих каналов идентична, для симметрии  $D_{3h}/D_{3d}$  разница составляет порядка 3-5%. Проведено изучение перераспределения плотности заряда внутри нанотрубок при возбуждении в спинтриплетное состояние. Установлено, что спиновая плотность в закрытых ОУНТ равномерно локализована на кольцевых сегментах трубки в отличие от открытых ОУНТ, где плотность локализована на концах трубки.

Полученные результаты подтверждают перспективность применения нелегированных ук-ОУНТ для создания элементной базы спинтроники и наноэлектроники.

## Литература

1. [1] Bhattacharya S., et al. // Chem. Comm. 50, 6626 (2014).
2. [2] Yang L., et al. // J. Chem, Phys. 142 (2015);
3. [3] Wu J., et al. // Phys. Rev. B 81 155407 (2010).