

**РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ И АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ
(5,5)CNT И (5,5)BNNT, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С ПОВЕРХНОСТЬЮ
МЕТАЛЛА (МЕТАЛЛ – Co, Ni)**

Игнатова Н.Ю., Куклин А.В.

Научный руководитель канд. ф-м. наук Кузубов А.А.

Сибирский федеральный университет

Исследования спинзависимого транспорта в твердом теле важны с научной точки зрения и направлены на разработку новых методов активного управления спинами электронов и создание эффективно работающих элементов спинтроники. Одним из способов управления спин-поляризованным током может быть создание контакта проводящего магнитного материала с диамагнитным проводником, либо с материалом, проявляющим диэлектрические свойства. Аналогом подобного контакта можно считать интерфейс металлической поверхности с нанотрубкой.

Можно отметить, что контакт трубки с металлической подложкой появляется во многих экспериментах, проводимых с нанотрубками. Данный факт также подчеркивает важность исследования данных контактов. Кроме того, возможно создание электронных устройств на основе подобных низкоразмерных контактов.

В ранее выполненных работах [1-3] сообщается о структурных и электронных особенностях одностенных нанотрубок, адсорбированных на поверхности металлов (Cu, Ag, и Au, Al, Rh, Pd, Ir, и Pt), которые наиболее часто используются как электроды и основания для подложек в экспериментах. Сообщения в литературе о подобных интерфейсах BNNT с Me на данный момент отсутствуют, что указывает на актуальность проведения исследований в данной области.

В настоящей работе квантово-химическими методами проведены расчеты атомной и электронной структуры для (5,5)CNT/Me slab и (5,5)BNNT/Me slab (Me = Co, Ni) интерфейсов. Расчеты проводились в рамках формализма функционала локальной плотности (DFT LDA) [4], с использованием пакета программ VASP [5,6].

В данных структурах пластинка металла должна выступать в качестве источника электронов. Для исследований были выбраны пластины кобальта с поверхностью (001) и никеля с поверхностью (111). Пластины данных металлов обладают магнитными свойствами. Так же для исследований подобного интерфейса были выбраны CNTs и BNNTs структуры (5,5). В данных структурах параметр решетки вдоль оси трубки практически совпадает с одним из параметров пластинки металла (Co, Ni). Для интерфейсов h-BN/Me slab рассматривались два варианта структур: с атомами азота и бора расположенными в положении «top».

Для всех моделируемых интерфейсов были рассчитаны энергии и оценены длины связей атомов нанотрубки с атомами пластинки, значения которых представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Энергии и длины связей исследуемых структур NT/Me slab
(отрицательная величина ΔE указывает на выгодность образования интерфейса)

NT/Me slab	N “top”			B “top”			C “top”		
	ΔE , eV	z_{Me-N} , Å	z_{B-N} , Å	ΔE , eV	z_{Me-B} , Å	z_{B-N} , Å	ΔE , eV	z_{Me-C} , Å	z_{C-C} , Å
Me = Co	-0,594	2,455	–	0,481	2,036	1,446	-1,493	1,995	1,430
Me = Ni	-0,915	2,150	–	-0,099	1,996	1,443	-1,822	1,975	1,445

Согласно полученным результатам, (5,5) CNTs могут образовывать выгодные интерфейсы с пластинками как Co, так и Ni. Энергии связи в случае (5,5) CNTs/Ni имеют более отрицательные значения, по сравнению с адсорбцией данной нанотрубки на поверхности кобальта.

Адсорбция нанотрубок (5,5)BNNTs на поверхности выбранных металлов возможна, в случае расположения атомов N в положении «top», относительно атомов поверхности металла. При оптимизации интерфейсов с атомами B в положении «top» происходит смещение атомов из заданных положений, которое является результатом отталкивания и притяжения атомов бора и азота с пластинкой металла. При этом в подобном интерфейсе не происходит взаимодействие между трубкой и металлом, на что указывают положительные значения энергии связи.

Величина энергий выгодных систем позволяет отнести взаимодействие исследуемых нанотрубок с поверхностями металлических пластинок к химическому типу адсорбции.

Для получения детальной информации о переносе заряда с поверхности металла на атомы нанотрубки были построены полные и парциальные спиновые плотности состояний для всех исследуемых интерфейсов. По данным зависимостям был сделан вывод о переносе заряда с пластинки металла на атомы нанотрубки и о возможности прохождения спинового тока через трубку.

Согласно графикам плотностей состояния атомов углерода, принадлежащих (5,5)CNT/Co slab и (5,5)CNT/Ni slab появляются новые уширенные пики, которые позволяют судить о взаимодействии нанотрубки с пластинкой металла. Появление дополнительной плотности вблизи уровня ферми для атомов углерода, расположенных вблизи пластинки, свидетельствует о смещении энергетических уровней. Данное смещение является следствием гибридизации d-орбиталей металла и π -орбиталей углерода, расположенных вблизи пластинки. Появляется небольшое спиновое расщепление, однако, оно должно практически полностью компенсироваться.

В системах (5,5)BNNT/Co slab и (5,5)BNNT/Ni slab инжекция электронов с поверхности металла в трубку не происходит. Электронная плотность, внесенная с пластинки распределяется на атомах азота, расположенных вблизи поверхности. В целом BNNT, расположенная на поверхности металла не переносит заряд, то есть остается изолятором.

Можно отметить, что плотность состояний расположенная на уровне ферми в случае системы (5, 5)BNNT/Ni slab незначительно больше. Это можно объяснить большим количеством электронов, расположенных на d-орбиталях никеля, и как следствие большей вероятностью перекрывания между орбиталями азота и металла.

В общем, анализируя полученные результаты, можно сделать вывод, что в случае контакта CNT(5,5)/Me происходит инжекция тока в трубку, однако перенос спинового тока не происходит. В случае взаимодействия BNNT/Me трубка остается диэлектриком.

Список литературы

1. Masayuki Hasegawa, Kazume Nishidate, Phys. Rev. B. 83, 155435 (2011).
2. Yoshiteru Takagi, Susumu Okada, Phys. Status Solidi C., 8, 564 (2011).
3. Susumu Okada, Atsushi Oshiyama, Phys.Rev. Lett., 95, 206804 (2005).
4. W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. B. 140, 1133 (1965).
5. G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B. 47, 558 (1993).

6. G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B. 48, 13115 (1993).