

ОБМЕННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПОСРЕДСТВОМ ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ В УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ С ФЕРРОМАГНИТНЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ

Зайцев В.А.

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

Данилюк А.Л. – канд. физ.-мат. наук

В данной работе, на основе полученных ранее микроскопических параметров нанокompозитов на основе углеродных нанотрубок исследовано дальнедействующее косвенное обменное взаимодействие между ферромагнитными наночастицами, встроенными внутрь нанотрубок. Используется модельный гамильтониан, учитывающий диаметр, хиральность, химический потенциал и спин-орбитальное взаимодействие в системе.

Ферромагнитные наночастицы (ФМНЧ), локализованные внутри углеродных нанотрубок (УНТ), представляют особый класс нанокompозитов, в которых магнитные свойства определяются не только размером и магнитными свойствами ФМНЧ, но их локализацией относительно многостенных УНТ (снаружи, внутри или между стенок) и природой связи ФМНЧ через УНТ [1]. При этом электронные свойства УНТ оказывают существенное влияние на магнитные параметры нанокompозита. Для определения этого влияния необходимо выявить связи между макроскопическими и микроскопическими магнитными параметрами системы. В наноструктурированных ферромагнетиках такие связи описываются в рамках модели случайной намагниченности [2,3]. В ряде работ, на основе анализа закона выхода на насыщение нанокompозитов с ФМНЧ цементита, локализованными строго внутри УНТ, были получены такие параметры, как обменное поле и поле магнитной анизотропии, эффективная константа магнитной анизотропии, константы Блоха и обменная [1,4]. ФМНЧ имели диаметр 30 нм, т.е. являлись однодоменными. Были также вычислены корреляционные функции осей магнитной анизотропии. Эти исследования были проведены для разной концентрации ФМНЧ [1,4,5]. Было получено, что для малой концентрации ФМНЧ, когда они все локализованы только внутри УНТ, поле обменного взаимодействия составляет $H_{ex} \approx 4$ кЭ [4]. Также из анализа закона выхода намагниченности на насыщение получена длина когерентности осей магнитной анизотропии, величина которой составила 200 нм, т.е. порядка среднего расстояния между ФМНЧ в УНТ [4]. Наиболее вероятной причиной обнаруженного в работе [5] дальнедействующего магнитного порядка является косвенное обменное взаимодействие между ФМНЧ через проводящие электроны УНТ [5]. Это взаимодействие типа РККИ и обуславливается p -электронами внутренней углеродной стенки.

В данной работе исследована возможность возникновения дальнедействующего РККИ взаимодействия в полупроводниковых УНТ как механизма дальнедействующих корреляций осей магнитной анизотропии ФМНЧ в УНТ. Получены результаты моделирования РККИ взаимодействия в УНТ в зависимости от диаметра, хиральности, величины химического потенциала E_F и константы спин-орбитального взаимодействия (COB), Δ_{so} . В качестве базовой использовалась модель Клиновой-Лосса для одностенных УНТ [6,7]. Среднее расстояние между ближайшими ФМНЧ составляет 150-200 нм.

Рассматривается полупроводниковая УНТ с внутренним диаметром D и индексами хиральности внутренней УНТ (m, n) . Ось Z направлена вдоль оси УНТ. РККИ взаимодействие описывается статической спиновой восприимчивостью свободных электронов χ . Учитывается также вклад COB, которое может быть на порядок больше, чем у графена за счет разных факторов, таких как кривизна УНТ, дефекты или примесные состояния УНТ, наличие самих ФМНЧ. Для расчета спиновой восприимчивости p -электронов вдоль оси Z в присутствии COB используем уравнение [6]

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

где $\chi_0 = a^2 k_G / h v_F$, v_F – скорость Ферми, $k_G \approx 2N/3D$ ($N = (m-n) \bmod 3$) квантованный импульс в циркулярном направлении, a – постоянная решетки, h – постоянная Планка, \mathbf{K} – точка Дирака в спектре УНТ, \mathbf{R} расстояние между локализованными магнитными моментами (его проекция на ось Z), θ – угол хиральности, z – расстояние вдоль оси Z , интеграл синуса определяется как функция $\text{si}(x) = \int_0^x \frac{\sin t}{t} dt - \frac{\pi}{2}$. Используя параметры [6] $k_{+,+} = 2k_+(E_F)$, $k_{-,-} = 0$, $k_{-,+} = k_-(E_F)$ и принимая во внимание постоянство высокочастотного периода осцилляция $\chi(z)$, который задается членом $\cos(\mathbf{K} \cdot \mathbf{R})$ в уравнении (1) и равен 0,2–0,5 нм, рассмотрим только низкочастотную огибающую осцилляций. В этом случае получаем следующее выражение

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

где волновые векторы $k_{\pm} = \text{Re} \left\{ \sqrt{\frac{2k_G}{h v_F} \delta_{\pm}} \right\}$. Здесь $\delta_{\pm} = E_F - \hbar v_F k_G \mp \beta_{\pm}$ а параметр $\beta_{\pm} = \alpha + \beta$ характеризует вклад COB, α и β – коэффициенты спин-орбитального взаимодействия в гамильтониане исследуемой системы. Для УНТ они определяются как

$\beta = -\frac{\sqrt{3}\Delta_{SO}V_{pp}^{\pi}\cos(3\theta)}{3(V_{pp}^{\pi}-V_{pp}^{\sigma})(D/2a)}$, $\alpha = \frac{\sqrt{3}\Delta_{SO}(V_{pp}^{\pi}+V_{pp}^{\sigma})}{18(V_{sp})^2(D/2a)}$. Использовались следующие фундаментальные прыжковые амплитуды $V_{pp}^{\pi} = -3,0$ эВ, $V_{pp}^{\sigma} = 5,0$ эВ, $V_{sp} = 5,6$ эВ [7].

В рамках используемой модели рассчитывались значения χ как функции от E_F , Δ_{SO} и индексов хиральности (m, n), которые определяют значения D , θ и k_G . Расчеты χ проводились в зависимости от параметра δ_{\pm} , величину которого можно задать через химпотенциал E_F . Если $\delta_{+} < 0$ и $\delta_{-} < 0$ величина $k_{\pm} = 0$, что означает отсутствие обменного взаимодействия, т.е. $\chi(z) = 0$. При $\delta_{+} > 0$ и $\delta_{-} > 0$ наблюдается относительно быстрое затухание χ вдоль z . Наиболее важный случай дальнедействующего РККИ взаимодействия возникает, когда значение E_F такое, что $\delta_{+} > 0$ и $\delta_{-} < 0$, что соответствует внутри щели, открытой СОВ [6]. На рис. 1а приведены зависимости $\chi(z)$ при $(m,n) = (235, 129)$, при этом $D = 25$ нм, $\theta = 20,45^{\circ}$, $k_G = 0,027$ нм⁻¹, $\Delta_{so} = 6$ мэВ. Сплошными линиями показаны зависимости спиновой восприимчивости в случае, когда E_F в точности попадает в щель, открытую СОВ, $E_F = 18$ мэВ. Пунктирными линиями приведены зависимости, когда E_F находится выше щели СОВ, $E_F = 30$ мэВ. В последнем случае спиновая восприимчивость затухает гораздо быстрее вдоль оси УНТ.

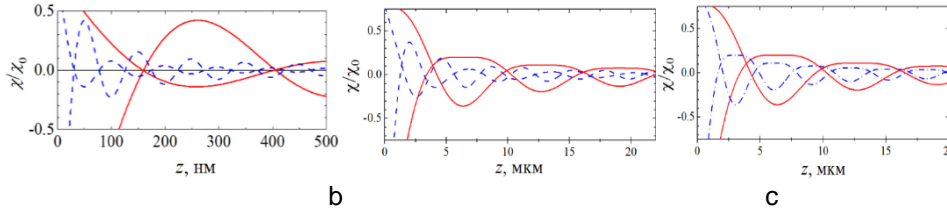


Рис. 1. Зависимость $\chi(z)$ для $E_F = 18$ мэВ (сплошные линии) и $E_F = 30$ мэВ (пунктирные линии) – (а); Зависимость $\chi(z)$ для $E_F = 14,62$ мэВ (сплошные линии) и $E_F = 14,63$ мэВ (пунктирные линии) – (б); Зависимость $\chi(z)$ для $\Delta_{SO} = 6$ мэВ (сплошные линии) и $\Delta_{SO} = 20$ мэВ (штрих-пунктирные линии) – (с)

Установлено, что зависимость спиновой восприимчивости вдоль оси УНТ весьма чувствительно к положению химпотенциала. Например, рис.1б, при незначительном изменении положения E_F с 14,62 мэВ на 14,63 мэВ и использовании для расчетов следующих параметров УНТ: $(m,n) = (222,221)$, $D = 30,06$ нм, $\theta = 29,93^{\circ}$, $k_G = 0,022$ нм⁻¹, $\Delta_{SO} = 6$ мэВ щель СОВ открывается в диапазоне 14,6164 – 14,6269 мэВ. Таким образом, в первом случае уровень Ферми находится строго в щели, открываемой СОВ, а во втором – он лежит вне ее и выше по энергии. Однако, основное падение амплитуды осцилляций $\chi(z)$ происходит на расстояниях, превышающих микроны. В то же время среднее расстояние между ФМНЧ внутри УНТ не превышает 300 нм. На нанометровой шкале расстояний малые изменения E_F не приводят к заметным снижениям амплитуды осцилляций $\chi(z)$.

Снизить чувствительность спиновой восприимчивости к сдвигу E_F можно путём уменьшения диаметра УНТ и, соответственно встроенных в нее ФМНЧ. Это можно реализовать вариацией параметров синтеза УНТ, что поднимет значения E_F и снизит точность его настройки в щель. Так, при диаметре УНТ 10 нм даже на расстоянии 1 мкм точность настройки E_F может достигать 10 % без существенного изменения амплитуды осцилляций $\chi(z)$.

Еще один параметр, который оказывает влияние на спиновую восприимчивость, это константа СОВ Δ_{SO} . По мере роста Δ_{SO} щель СОВ увеличивается. Рассмотрим УНТ диаметром $D = 30,6$ нм, $(m, n) = (222,221)$, $\theta = 29,93^{\circ}$, $k_G = 0,022$ нм⁻¹, $\Delta_{SO} = 6$ и 20 мэВ. В этом случае, для обеспечения дальнедействующего порядка РККИ взаимодействия, химпотенциал должен находиться в интервале от 14,6041 мэВ до 14,6391 мэВ. При $E_F = 14,62$ мэВ частота осцилляций возрастает, рис.1с.

В работе установлено, что в УНТ диаметром в несколько десятков нанометров косвенное обменное взаимодействие РККИ-типа может распространяться на расстояния, большие чем 1 мкм вдоль оси нанотрубки. Необходимое условие для этого – химпотенциал должен находиться внутри энергетической щели, открываемой СОВ. Точная регулировка положения химпотенциала в энергетической щели, создаваемой СОВ, позволяет усилить РККИ обмен и обеспечить его дальнедействующий характер, до нескольких десятков микрометров.

Список использованных источников:

1. Interplay between exchange interaction and magnetic anisotropy for iron based nanoparticles in aligned carbon nanotube arrays / A. Danilyuk [et al.] // Carbon, 2014. – P. 337-345.
2. Magnetic properties of amorphous ferromagnets / M. Chudnovsky // J. Appl. Phys, 1988. – P. 5770-5775.
3. Ordering in ferromagnets with random anisotropy / M. Chudnovsky [et al.] // Phys. Rev. B, 1986. – P. 251-261.
4. Manifestation of coherent magnetic anisotropy in a carbon nanotube matrix with low ferromagnetic nanoparticle content / A. Danilyuk [et al.] // New J. Phys, 2015. – 17(2):023073.
5. Impact of CNT medium on the interaction between ferromagnetic nanoparticles / A. Danilyuk [et al.] // Europhys. Lett, 2017. – 117(2)27007.
6. RKKY interaction in carbon nanotubes and graphene nanoribbons / J. Klinovaja [et al.] // Phys. Rev. B, 2013. – 87(4):045422.
7. Helical modes in carbon nanotubes generated by strong electric fields / J. Klinovaja [et al.] // Phys. Rev. Lett, 2011. – 106(15):156809.