

Ферромагнитные наногелицыны тригональной морфологии: квантово-химическое исследование

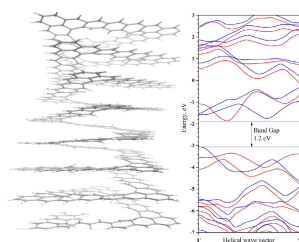
Порсев В.В.¹, Куруч Д.Д.¹, Эварестов Р.А.¹

v.porsev@spbu.ru

¹ СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

Наногелицыны (графеновые спирали) представляют собой графеновую ленту особой морфологии, приводящую к закручиванию вокруг винтовой оси [1]. «Пружинная» топология наногелицынов делает возможным большой диапазон обратимых аксиальных и торсионных деформаций, что, наряду с сопряженной π -системой, приводит к уникальным электро- и магнитомеханическим свойствам наногелицынов. Свойства наногелицынов в значительной мере определяются морфологией граней, терминацией и шириной графеновой наноленты, а также диаметром «шахты» (внутренней области наногелицына). В частности, ранее было показано существование диамагнитных и антиферромагнитных наногелицынов гексагональной морфологии и терминации граней «зиг-заг» или «кресло» [2]. Наногелицыны представляют собой типичный пример наносистем, в которых существует только винтовая периодичность [3] (трансляционная периодичность отсутствует). Анализ электронных состояний в этом случае возможно проводить только в «винтовой» зоне Бриллюэна, ВЗБ, построенной на трансляционной части операции винтового поворота [4]. ВЗБ позволяет непрерывным образом проследить эволюцию электронных состояний при аксиальных или торсионных деформациях, а также при их комбинации [5].

В данной работе представлены результаты квантово-химического исследования класса тригональных наногелицынов с терминацией ленты типа «зиг-заг» с последовательно увеличивающейся шириной ленты и шахты. Показано, что наногелицыны с «зиг-заг» терминацией являются ферромагнитными полупроводниками. Распределение спиновых моментов вокруг винтовой оси делает эти структуры гелимагнетиками. Следует отметить, что электронная структура наногелицынов в значительной степени меняется при торсионных и аксиальных деформациях. Таким образом, тригональные наногелицыны являются уникальным классом наноструктур, являющихся гелимагнетиками, которыми можно управлять с помощью обратимых механических деформаций (торсионных и/или аксиальных).



Пример наногелицына тригональной морфологии и его электронной структуры в винтовой зоне Бриллюэна. Синий и красный: α - и β -проекция спина.

Ссылки

1. V.V. Porsev, A.V. Bandura, S.I. Lukyanov, R.A. Evarestov, Carbon (2019) **152**, 755.
2. V.V. Porsev, R.A. Evarestov, Nanomaterials (2023) **13**, 2295.
3. V.V. Porsev, A.V. Bandura, R.A. Evarestov, Comp.Mat.Sci. (2022) **203**, 111063.
4. M. Damnjanović, I. Milošević, Line Groups in Physics. Theory and Applications to Nanotubes and Polymers. Lecture Notes in Physics, Vol. 801. (Springer, Berlin/Heidelberg, Germany, 2010), p. 48.
5. В.В. Порсев, Р.А. Эварестов, Физ.Тв.Тела (2022) **64**, 1843.