

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПИНОВОЙ СЕЛЕКТИВНОСТИ  
ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ХИРАЛЬНЫХ ПЛАТИНОВЫХ НАНОТРУБОК© 2023 г. П. Н. Дьячков<sup>а</sup>, \*, Н. А. Ломакин<sup>а</sup><sup>а</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Ленинский пр-т, 31, Москва, 119991 Россия

\*e-mail: p\_dyachkov@rambler.ru

Поступила в редакцию 19.10.2022 г.

После доработки 06.12.2022 г.

Принята к публикации 27.12.2022 г.

С целью изучения электронных и спиновых свойств одностенных платиновых нанотрубок с помощью релятивистского метода симметризованных линеаризованных присоединенных цилиндрических волн рассчитаны два ряда хиральных нанотрубок: Pt(5,  $n_2$ ) с  $1 \leq n_2 \leq 4$  и Pt(10,  $n_2$ ) с  $1 \leq n_2 \leq 9$  радиусами от 2.24 до 7.78 Å. Во всех трубках наблюдается характерное для соединений с полуметаллическим типом зонной структуры пересечение потолка валентной зоны и дна зоны проводимости с уровнем Ферми. Спин-орбитальная связь проявляется как расщепление нерелятивистских дисперсионных кривых, которое может превышать 0.5 эВ для зон вблизи энергий Ферми и убывает при переходе к внутренним состояниям валентной зоны и нанотрубкам большего диаметра. Значения спиновых плотностей состояний для электронов со спином вверх и вниз на уровне Ферми заметно различаются, что можно использовать для создания чисто спиновых токов через нанотрубки с помощью переменного электрического напряжения. Более всего для этого подходят нанотрубки (5, 3) и (10, 7).

**Ключевые слова:** хиральность, цилиндрические волны, спин-орбитальное взаимодействие, спиновые токи, наноэлектроника

DOI: 10.31857/S0044457X2260181X, EDN: FLOVWL

## ВВЕДЕНИЕ

Для получения нанотрубок из благородных металлов разработаны различные методики [1–7]. Так, одностенные платиновые нанотрубки можно получать методом электронно-лучевого утончения платиновых нанопроводов, и они могут обладать отличными механическими и электронными свойствами [8–14].

Геометрически одностенные платиновые нанотрубки имеют вид цилиндрических поверхностей, покрытых правильными шестиугольниками с одним атомом Pt в центре каждого шестиугольника (рис. 1). Нанотрубки могут различаться диаметром и ориентацией шестиугольников относительно цилиндрической оси  $z$ . Геометрия нанотрубок определяется межатомным расстоянием  $d_{\text{Pt-Pt}} = 2.82$  Å и ориентацией гексагональных ячеек относительно оси нанотрубки и описывается двумя целочисленными индексами ( $n_1$ ,  $n_2$ ), где  $n_1 > 0$  и  $0 \leq n_2 \leq n_1$ . Нанотрубки обладают симметрией относительно винтовых трансляций  $S(h, \omega)$ , представляющих собой сдвиги вдоль оси нанотрубки на расстояние  $h$  с одновременными поворотами на угол  $\omega$ :

$$h = n_3^{1/2} d_{\text{Pt-Pt}} / [2(n_1^2 + n_2^2 + n_1 n_2)^{1/2}], \quad (1)$$

$$\omega = 2\pi [p_1 n_1 + p_2 n_2 + 0.5(p_2 n_1 + p_1 n_2)] / (n_1^2 + n_2^2 + n_1 n_2). \quad (2)$$

Целые положительные числа  $p_1$  и  $p_2$  получают из уравнения  $p_2 n_1 - p_1 n_2 = n$ , где  $n$  – наибольший общий делитель чисел  $n_1$  и  $n_2$ . Трубки ( $n$ ,  $n$ ) и ( $n$ , 0) обладают инверсионной симметрией и являются нехиральными. Для других трубок характерна левая или правая винтовая ось, т.е. они хиральные и обладают рядом интересных свойств, которые отсутствуют в нехиральных трубках.

Электронные свойства платиновых нанотрубок могут резко отличаться от аналогичных свойств металлической платины [15–18], поскольку атомы Pt в нанотрубках окружены тремя соседними атомами, а в объемной платине – двенадцатью. Кроме того, большое разнообразие структур нанотрубок должно приводить к вариациям их электронных свойств.

Расчеты электронной зонной структуры платиновых нанотрубок ограничены работами [19–22]. В работе [19] определены дисперсионные кривые нехиральных Pt-нанотрубок (6, 6) и (13, 13). В рабо-

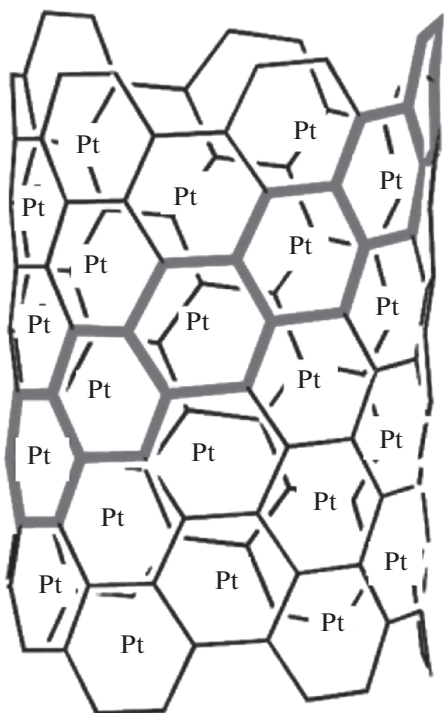


Рис. 1. Структура одностенной платиновой нанотрубки.

те [20] вычислены электронные уровни, магнитные моменты и плотности состояний Pt-нанотрубок конечной длины. С помощью кластерных расчетов и модели сверхъячейки [22] были определены плотности состояний только двух хиральных Pt-нанотрубок: (6, 4) и (5, 3). Следует отметить, что спин-орбитальным взаимодействием в расчетах [19–22] пренебрегали, но платина – тяжелый металл, и для ее соединений спин-орбитальное взаимодействие следует учитывать. Учет спин-орбитальной связи для нанотрубок из благородных металлов [23–26] и даже для соединений легких элементов, например углеродных или кремниевых нанотрубок [27–31], приводит к существенному усложнению их зонной структуры за счет расщепления энергетических зон и образования спин-орбитальных щелей.

В последние годы большой интерес вызывают вопросы спин-орбитального взаимодействия в хиральных квазиодномерных (1D) системах [32–38]. Напомним, что химическое соединение называется хиральным, если оно не может быть совмещено со своим зеркальным изображением, при этом одно из них обладает левовинтовой, а другое – правовинтовой спиральностью. В хиральных соединениях возможно образование спиновых токов, при этом спиновые токи и сами становятся хиральными. Электроны со спинами определенной спиральности перемещаются легче сквозь хиральный материал, если их спиральность сов-

падает со спиральностью самого соединения. Напротив, различие спиральности соединения и электронного спина снижает подвижность электронов. Причина этого в том, что вероятность  $\tau_{\uparrow\uparrow}$  туннелирования электронов сквозь хиральный барьер больше, когда спиральности барьера и спина параллельны, по сравнению с вероятностью  $\tau_{\uparrow\downarrow}$ , когда они антипараллельны ( $\tau_{\uparrow\uparrow} > \tau_{\uparrow\downarrow}$ ). Этот эффект, называемый спиновой селективностью, индуцированной хиральностью, может использоваться для спин-зависимого переноса и туннелирования электронов, фильтрации электронов с разными спинами, для записи и передачи информации в квантовых вычислениях [34–40].

Цель настоящей работы – изучение электронных и спиновых свойств одностенных платиновых нанотрубок как возможных материалов спинтроники. Для этого с помощью релятивистского метода симметризованных линейаризованных присоединенных цилиндрических волн (ЛПЦВ) [32, 33] рассчитаны спин-зависимые зонные структуры и полные и спиновые плотности электронных состояний для двух рядов хиральных нанотрубок ( $n_1, n_2$ ): Pt(5,  $n_2$ ) с  $1 \leq n_2 \leq 4$  и Pt(10,  $n_2$ ) с  $1 \leq n_2 \leq 9$ .

## МЕТОД РАСЧЕТА

Метод ЛПЦВ представляет собой распространение на соединения с цилиндрической геометрией хорошо известного в теории кристаллов метода линейаризованных присоединенных плоских волн. Расчеты основаны на двухкомпонентном релятивистском гамильтониане:

$$H = -\Delta + V + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} [(\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p})], \quad (3)$$

где первые два слагаемых – нерелятивистская часть оператора, третье – оператор спин-орбитального взаимодействия. Используются атомные единицы Ридберга,  $c$  – скорость света,  $\boldsymbol{\sigma}$  – матрица Паули. Для электронного потенциала  $V(\mathbf{r})$  в области атомов берется его сферически симметричная часть  $V(r)$  и с помощью слейтеровского потенциала  $\rho^{1/3}$  рассчитывается обменное взаимодействие. В пространстве между атомами вплоть до двух непроницаемых барьеров (внешнего и внутреннего) потенциал  $V$  считается постоянным и выбирается за начало отсчета энергии ( $V = 0$ ). Расстояние между потенциальными барьерами (5.8 Å) выбрано равным полусумме ковалентного и ван-дер-ваальсового диаметров атома платины.

В качестве исходной информации используется геометрия нанотрубки. Хиральные нанотрубки могут обладать очень большими (в пределе бесконечными) трансляционными ячейками, но учет винтовой и вращательной симметрии трубок поз-

воляет свести минимальную ячейку любой Pt-трубки к одному атому, что делает возможным применение метода к любой одностенной платиновой трубке. Для этого выбирается один атом на цилиндрической поверхности, а затем с помощью операторов винтовой ( $S(h, \omega)$ ) и вращательной ( $C_n$ ) симметрии определяется расположение остальных атомов нанотрубки. Свойства симметрии используются при записи базисных функций и расчете матричных элементов гамильтониана (3), как это подробно описано в [32]. В результате расчетов собственные электронные состояния определяются двумя квантовыми числами, а именно: волновым вектором  $-\pi/h \leq k \leq \pi/h$ , соответствующим винтовым трансляциям, и вращательным квантовым числом  $L = 0, 1, \dots, n - 1$ , если  $n \neq 1$ .

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В качестве примера на рис. 2 представлены результаты расчетов зонной структуры и плотности спиновых состояний нанотрубки Pt(5, 3). В соответствии с электронной конфигурацией атома Pt  $5d^9 6s^1$  с десятью валентными электронами и одним атомом в ячейке результаты представляются в очень простом виде — десятью спин-зависимыми дисперсионными кривыми валентной зоны, выше которых расположены состояния зоны проводимости. Уровень Ферми четко разделяет кривые валентной зоны и зоны проводимости. Граничные дисперсионные кривые этих зон не пересекаются, но наблюдается перекрытие потолка валентной зоны и дна зоны проводимости с уровнем Ферми, характерное для соединений с полуметаллическим типом зонной структуры.

Заметим, что дисперсионные кривые асимметричны относительно замены  $k$  на  $-k$ :

$$E_\alpha(k) = E_\beta(-k), \quad (4)$$

т.е. при изменении знака волнового вектора  $k$  энергия электронов сохраняется, но поляризация спина меняется на противоположную. Импульсы электронов для состояний  $E_\alpha(k)$  и  $E_\beta(-k)$  совпадают по абсолютной величине, но имеют противоположное направление:

$$dE_\alpha(k)/dk = -dE_\beta(-k)/dk. \quad (5)$$

Спин-орбитальная связь проявляется как сильное расщепление нерелятивистских дисперсионных кривых, которое может достигать 0.5 эВ для зон вблизи энергии Ферми. При переходе к внутренним состояниям валентной зоны спин-орбитальное расщепление зон ослабевает до ~0.1 эВ. Спиновые поляризации для расщепленных пар зон противоположны. Для положительных значений волнового вектора  $k$  спин вверх ( $\alpha$ ) соответствует случаю совпадения (правовинтовых) спиральностей нанотрубки и спина, а для спина вниз ( $\beta$ ) с левовинтовой спиральностью они противопо-

ложны. Напротив, для отрицательных значений волнового вектора  $k$  спиральность нанотрубки совпадает со спиральностью  $\beta$ -электронов, но противоположна для  $\alpha$ -электронов.

Обратимся теперь к приведенным на рис. 2г спин-зависимым плотностям состояний для электронов со спином вверх  $N(\alpha)|_{k>0}$  и спином вниз  $N(\beta)|_{k>0}$  для положительных значений волнового вектора  $k > 0$ , что отвечает перемещению электронов в направлении оси  $z$ , а также к рис. 2в с аналогичными плотностями спиновых состояний  $N(\alpha)|_{k<0}$  и  $N(\beta)|_{k<0}$  для случая  $k < 0$ , соответствующего перемещению электронов со спинами  $\alpha$  и  $\beta$  против оси  $z$  нанотрубки. Можно видеть, что для противоположного направления  $N(\alpha)|_{k<0}$  и  $N(\beta)|_{k<0}$  удовлетворяют соотношениям:

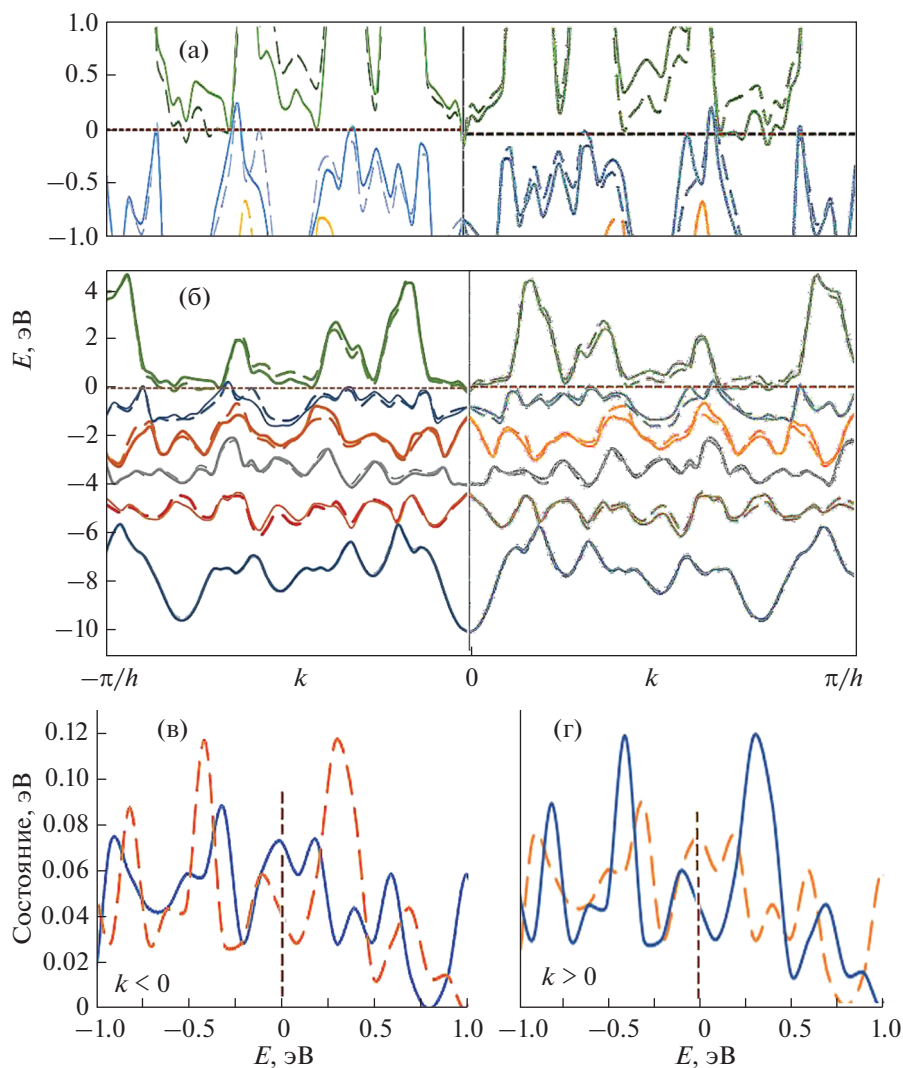
$$N(\alpha)|_{k<0} = N(\beta)|_{k>0}, \quad N(\beta)|_{k<0} = N(\alpha)|_{k>0}, \quad (6)$$

согласно которым спиновая плотность состояний не меняется при одновременном изменении направления движения электронов и их спинов.

Важно, что на уровне Ферми резко различаются значения плотностей спиновых состояний  $N_F(\alpha)$  и  $N_F(\beta)$ , и эти различия можно использовать для создания чисто спинового тока через нанотрубку, под которым понимают пространственное перемещение электронов с конечной спиновой поляризацией, но с нулевым переносимым зарядом [36, 40]. Более всего для этого подходят нанотрубки с большей и, как показано ниже, положительной спиновой поляризуемостью на уровне Ферми:

$$\begin{aligned} P_F &= N_F(\alpha)|_{k>0} - N_F(\beta)|_{k>0} = \\ &= N_F(\beta)|_{k<0} - N_F(\alpha)|_{k<0}. \end{aligned} \quad (7)$$

Нанотрубка (5, 3) с  $N_F(\alpha)|_{k>0} = 0.075$ ,  $N_F(\beta)|_{k>0} = 0.04$  и  $P_F = 0.035$  состояний/эВ удовлетворяет этим условиям. В этом случае для положительного направления оси  $z$  концентрация подвижных электронов со спином  $\alpha$  почти в два раза больше, чем со спином  $\beta$ , а для противоположного направления, согласно соотношениям (6), во столько же раз больше концентрация подвижных электронов со спином  $\beta$ , чем со спином  $\alpha$ . Величины спиновых токов в положительном направлении оси  $z > 0$  для электронов со спинами  $\alpha$  и  $\beta$  должны быть пропорциональны вероятностям туннелирования электронов сквозь хиральные потенциальные барьеры и концентрации электронов с данным спином на уровне Ферми:  $I(\alpha)_{z>0} \sim \tau_{\uparrow\uparrow} N(\alpha)|_{k>0}$  и  $I(\beta)_{z>0} \sim \tau_{\downarrow\downarrow} N(\beta)|_{k>0}$  (спиральности нанотрубки и  $\alpha$ -спина параллельны, для  $\beta$ -спина они антипараллельны). Поскольку  $\tau_{\uparrow\uparrow} > \tau_{\downarrow\downarrow}$  и  $N(\alpha)|_{k>0} > N(\beta)|_{k>0}$ , имеем  $I(\alpha)_{z>0} > I(\beta)_{z>0}$ , т.е. в направлении  $z > 0$  нанотрубки (5, 3) будут перемещаться преимущественно электроны со спином  $\alpha$ . В противоположном направлении совпадают



**Рис. 2.** Электронное строение хиральной нанотрубки (5, 3). Зонная структура (а, б) и плотности электронных состояний  $N(\alpha)$  и  $N(\beta)$  для спинов вверх и вниз и волновых векторов  $k < 0$  (в) и  $k > 0$  (г). Сплошные и штриховые линии соответствуют состояниям со спинами  $\alpha$  и  $\beta$ . Дисперсионные кривые в области энергии Ферми представлены также в увеличенном масштабе по энергетической шкале (а).

спиральности барьера и  $\beta$ -спина, поэтому  $I(\alpha)_{z < 0} \sim \tau_{\uparrow\downarrow} N(\alpha)|_{k < 0}$  и  $I(\beta)_{z < 0} \sim \tau_{\uparrow\uparrow} N(\beta)|_{k < 0}$ . Здесь, согласно (6),  $N(\beta)|_{k < 0}$  больше, чем  $N(\alpha)|_{k < 0}$ , а значит  $I(\beta)_{z < 0}$  больше, чем  $I(\alpha)_{z < 0}$ , и в направлении  $z < 0$  будет преобладать транспорт  $\beta$ -электронов. Если теперь эту нанотрубку разместить между двумя контактами и подать переменное напряжение  $U$  так, чтобы под действием электрического поля в течение времени  $t$  от нуля до  $T$  электроны перемещались в направлении  $z$ , а затем на время от  $T$  до  $2T$  заменить напряжение на противоположное ( $-U$ ), то в системе будет нулевой суммарный перенос заряда за время  $2T$  [39]. Однако в течение первого интервала времени в направлении  $z$  будут перемещаться электроны преимущественно со спином  $\alpha$ , а во второй интервал — в обратном на-

правлении и со спином  $\beta$ . Таким образом, с помощью переменного электрического поля можно осуществлять транспорт электронов с разными спинами в противоположных направлениях без суммарного переноса заряда [40].

Как показывает рис. 3, с помощью механического воздействия на нанотрубку Pt(5, 3) можно управлять плотностями состояний на уровне Ферми. Плотность электронных состояний для подвижных электронов с разными спинами на уровне Ферми существенно возмущается под действием крутильных деформаций. Кручение нанотрубки (5, 3) при положительных и отрицательных значениях  $\Delta\omega$  соответствует увеличению и уменьшению хиральности. Изменение  $\omega$  примерно на  $\pm 1^\circ$  приводит к выравниванию концентрации подвижных  $\alpha$ - и  $\beta$ -электронов. Напротив,

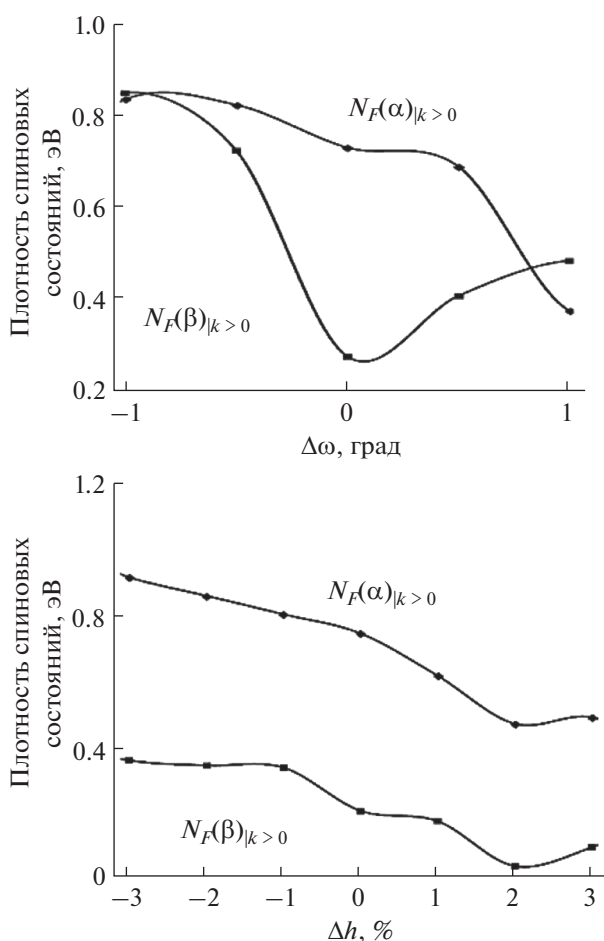


Рис. 3. Плотности спиновых состояний на уровне Ферми нанотрубки (5, 3) в зависимости от амплитуды крутильной и аксиальной деформаций.

Таблица 1. Значения спиновой поляризуемости на уровне Ферми в хиральных платиновых нанотрубках

Нанотрубка	$P_F$ , состояний/эВ
(5, 1)	-0.010
(5, 2)	-0.045
(5, 3)	0.035
(5, 4)	-0.045
(10, 1)	0.0
(10, 2)	0.03
(10, 3)	0.01
(10, 4)	0.01
(10, 5)	-0.05
(10, 6)	0.02
(10, 7)	0.06
(10, 8)	-0.01
(10, 9)	-0.015

одноосное сжатие или растяжение нанотрубки (5, 3) не приводит к изменению ее хиральности и сопровождается только монотонным увеличением или уменьшением плотности спиновых  $\alpha$ - и  $\beta$ -состояний с сохранением преобладания  $\alpha$ -электронов на уровне Ферми.

Нехиральные нанотрубки (5, 0) и (5, 5) также являются полуметаллическими с непересекающимися дисперсионными кривыми валентной зоны и зоны проводимости, но из-за наличия в них инверсионной симметрии электронный транспорт не зависит от спина подвижных электронов.

Расчеты показали, что в хиральных нанотрубках (5, 1), (5, 2) и (5, 4)  $N_F(\beta)|_{k>0} > N_F(\alpha)|_{k>0}$ , а значит  $P_F < 0$ , т.е. для положительного направления винтовой оси концентрация подвижных электронов со спином  $\beta$  больше, чем со спином  $\alpha$ . Однако при  $z > 0$  вероятность прохождения электронов сквозь хиральный барьер больше для  $\alpha$ -спинов ( $\tau_{\uparrow\uparrow}$ ), чем для  $\beta$ -спинов ( $\tau_{\uparrow\downarrow}$ ). Эти два фактора (концентрация подвижных электронов с разны-

ми спинами и вероятность их прохождения сквозь барьер) оказывают противоположное влияние на величины спиновых токов  $I(\beta)$  и  $I(\alpha)$  как для положительных, так и для отрицательных направлений оси  $z$ . Поэтому эти нанотрубки менее пригодны для генерации больших спиновых токов, чем нанотрубка Pt(5, 3).

В случае трубок (10,  $n_2$ ) аналогичные рассуждения вместе с данными табл. 1 свидетельствуют о том, что для создания противоположно направленных спиновых токов, судя по величинам спиновой поляризуемости на уровне Ферми, более всего подходит нанотрубка (10, 7), для которой  $N_F(\alpha)_{k>0} = 0.07$  состояний/эВ в 7 раз больше, чем  $N_F(\beta)_{k>0} = 0.01$  состояний/эВ, и  $P_F = 0.06$  состояний/эВ. Нанотрубки (10, 5), (10, 8) и (10, 9) с отрицательными величинами  $P_F$  не подходят для получения разнонаправленных больших спиновых токов. Отметим, что для нанотрубок (10, 1), (10, 2), (10, 3) и (10, 4) ряда (10,  $n_2$ ) выполняется необходимое требование  $P_F > 0$  (6) для спиновой поляризации, и для окончательного выбора между этими нанотрубками требуется определение численных значений  $\tau_{\uparrow\uparrow}$  и  $\tau_{\uparrow\downarrow}$ , что выходит за рамки зонных расчетов.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Однослойные платиновые нанотрубки представляют собой соединения с полуметаллическим типом зонной структуры и энергиями спин-орбитального расщепления до  $\sim 0.5$  эВ. Они обладают спин-зависимой проводимостью и могут быть использованы для дизайна элементов молекулярной электроники и спинтроники.

## ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-00154, <https://rscf.ru/project/22-23-00154/>

## КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Oshima Y., Koizumi H., Mouri K. et al. // Phys. Rev. B. 2002. V. 65. P. 121401(R). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.121401>
- Oshima Y., Onga A., Takayanagi K. // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91. P. 205503. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.205503>
- Huang Z., Raciti D., Yu S. et al. // J. Am. Chem. Soc. 2016. V. 138. P. 6332. <https://doi.org/10.1021/jacs.6b01328>
- Bi Y., Lu G. // Electrochem. Commun. 2009. V. 11. P. 45. <https://doi.org/10.1016/j.elecom.2008.10.023>
- Lou X.W., Archer L.A., Yang Z. // Adv. Mater. 2008. V. 20. P. 3987. <https://doi.org/10.1002/adma.200800854>
- Zhang G., Sun S., Cai M. et al. // Scient. Rep. 2013. V. 3. P. 1526. <https://doi.org/10.1038/srep01526>
- Hendren W.R., Murphy A., Evans P. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2008. V. 20. P. 362203. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/20/36/362203>
- Oshima Y., Mouri K., Hirayama H. et al. // J. Phys. Soc. Jpn. 2006. V. 75. P. 053705. <https://doi.org/10.1143/jpsj.75.053705>
- Del Valle M., Tejedor C., Cuniberti G. // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. P. 045408. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.045408>
- Rajalaa T., Kronberga R., Backhouse R. // Appl. Catal. B: Environ. 2020. V. 265. P. 118582. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2019.118582>
- Ono T., Hirose K. // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94. P. 206806. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.206806>
- Zhang K., Zhang H. // J. Phys. Chem. C. 2014. V. 118. P. 635. <https://doi.org/10.1021/jp410056u>
- Shimada T., Ishii Y., Kitamura T. // Phys. Rev. B. 2011. V. 84. P. 165452. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.165452>
- Manrique D.Zs., Cserti J., Lambert C.J. // Phys. Rev. B. 2010. V. 81. P. 073103. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.073103>
- Andersen O.K. // Phys. Rev. B. 1970. V. 2. P. 883. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.2.883>
- Bordoloi A.K., Auluck S. // J. Phys. F: Met. Phys. 1983. V. 13. P. 2101. <https://doi.org/10.1088/0305-4608/13/10/019>
- Wern H., Courths R., Leschik G. et al. // Z. Phys. B: Condens. Matter. 1985. V. 60. P. 293. <https://doi.org/10.1007/BF01304449>
- Herrera-Suárez H.J., Rubio-Ponce A., Olguín D. // Revista Mexicana de Física. 2012. V. 58. P. 46. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1311.5929>
- Matanović I., Kent P.R.C., Garzon F.H. et al. // J. Electrochem. Soc. 2013. V. 160. P. F548. <https://doi.org/10.1149/2.047306jes>
- Xiao L., Wang L. // Chem. Phys. Lett. 2006. V. 430. P. 319. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2006.09.032>
- Hui L., Pederiva F., Guanghou W. et al. // Chem. Phys. Lett. 2003. V. 381. P. 94. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2003.08.110>
- Konar S., Gupta B.C. // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 235414. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.235414>
- Дьячков П.Н., Дьячков Е.П. // Журн. неорган. химии. 2020. Т. 65. № 8. С. 1073. <https://doi.org/10.31857/S0044457X20070077>

24. *Krasnov D.O., Khoroshavin L.O., D'yachkov P.N.* // Russ. J. Inorg. Chem. 2019. V. 64. P. 108.  
<https://doi.org/10.1134/S0036023619010145>
25. *D'yachkov E.P., D'yachkov P.N.* // J. Phys. Chem. C. 2019. V. 123. P. 26005.  
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b07610>
26. *D'yachkov P.N., Krasnov D.O.* // Chem. Phys. Lett. 2019. V. 720. P. 15.  
<https://doi.org/10.1016/j.cplett.2019.02.006>
27. *Ando T.* // J. Phys. Soc. Jpn. 2000. V. 69. P. 1757.  
<https://doi.org/10.1143/JPSJ.74.777>
28. *Minot E.D., Yaish Y., Sazonova V. et al.* // Nature. 2004. V. 428. P. 536.  
<https://doi.org/10.1038/nature02425>
29. *Kuemmeth F., Ilani S., Ralph D.C. et al.* // Nature. 2008. V. 452. P. 448.  
<https://doi.org/10.1038/nature06822>
30. *Дьячков П.Н.* // Журн. неорган. химии. 2022. Т. 67. № 10. С. 1441.  
<https://doi.org/10.31857/S0044457X22100385>
31. *D'yachkov P.N.* Quantum Chemistry of Nanotubes: Electronic Cylindrical Waves; CRC Press. London: Taylor and Francis, 2019. 212 p.
32. *D'yachkov P.N., Makaev D.V.* // Int. J. Quantum Chem. 2016. V. 116. P. 316.  
<https://doi.org/10.1002/qua.25030>
33. *Banerjee-Ghosh K., Dor O.B., Tassinari F. et al.* // Science. 2018. V. 360. P. 1331.  
<https://doi.org/10.1126/science.aar4265>
34. *Naaman R., Waldeck D.H.* // Annu. Rev. Phys. Chem. 2015. V. 66. P. 263.  
<https://doi.org/10.1146/annurev-physchem-040214-121554>
35. *Gutierrez R., Díaz E., Gaul C. et al.* // J. Phys. Chem. C. 2013. V. 117. P. 22276.  
<https://doi.org/10.1021/jp401705x>
36. *Yang S.H.* // Appl. Phys. Lett. 2021. V. 16. P. 120502.  
<https://doi.org/10.1063/5.0039147>
37. *Yang S.H., Naaman R., Paltiel Y. et al.* // Nat. Rev. Phys. 2021. V. 3. P. 328.  
<https://doi.org/10.1038/s42254-021-00302-9>
38. *Michaeli K., Kantor-Uriel N., Naaman R. et al.* // Chem. Soc. Rev. 2016. V. 45. P. 6478.  
<https://doi.org/10.1039/C6CS00369A>
39. *Bercioux D., Lucignano P.* // Rep. Prog. Phys. V. 78. P. 106001.  
<https://doi.org/10.1088/0034-4885/78/10/106001>
40. *Manchon A., Koo H.C., Nitta J. et al.* // Nat. Mater. 2015. V. 14. P. 871.  
<https://doi.org/10.1038/nmat4360>