

УДК 539.149

СПИНОВЫЕ СВОЙСТВА КРЕМНИЙ-ГЕРМАНИЕВЫХ НАНОТРУБОК

© 2024 г. Е. П. Дьячков^a, В. Б. Меринов^{b,c}, П. Н. Дьячков^{a,*}^aИнститут общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Ленинский пр-т, 31, Москва, 119991 Россия^bНациональный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Каширское ш., 31, Москва, 115409 Россия

*e-mail: p_dyachkov@rambler.ru

Поступила в редакцию 20.01.2024 г.

После доработки 28.01.2024 г.

Принята к публикации 01.02.2024 г.

Методом цилиндрических волн изучены зависимости электронного строения от хиральности одностенных SiGe-нанотрубок. Установлено, что все нанотрубки обладают полупроводниковым типом зонной структуры с шириной запрещенной зоны $E_g \sim 0.35$ эВ, что отличает их от углеродных, кремниевых или германиевых аналогов, которые в зависимости от хиральности обладают полупроводниковыми, полуметаллическими или металлическими свойствами. Это различие обусловлено полярностью химической связи Si–Ge и, как следствие, влиянием антисимметричной компоненты электронного потенциала на зонную структуру соединений. Валентная зона шириной ~ 12 эВ включает в себя внутреннюю полосу преимущественно *s*-электронов шириной 2 эВ и расположенную выше полосу *p*-электронов шириной 8 эВ. Энергии спин-орбитальных щелей краев валентной зоны и зоны проводимости существенно различаются: для нехиральных нанотрубок они равны нескольким десяткам мэВ, а хиральных — нескольким мэВ. С помощью механического воздействия, например скручивания нанотрубки вокруг ее оси или одноосной деформации, можно управлять энергией спин-орбитальных щелей, что может найти применение в спинтронике для управления спиновым транспортом в нанотрубках.

Ключевые слова: нанотрубки SiGe, электронное строение, спиновые свойства, моделирование

DOI: 10.31857/S0044457X24050145, EDN: YENDVL

ВВЕДЕНИЕ

Кремний и германий играют исключительно важную роль в создании элементов микроэлектроники. По-видимому, и наноструктуры из этих элементов будут иметь большое прикладное значение в нанoeлектронике. В композитных кремний-германиевых материалах могут сочетаться и усиливаться некоторые преимущества составляющих их компонентов, поэтому исследование свойств кремний-германиевых наноматериалов вызывает заметный интерес. С помощью одностадийной твердофазной реакции в работе [1] синтезирован нанокомпозит Si/Ge в виде взаимопроникающих наночастиц Si и Ge и отмечены его высокие электрохимические характеристики. Получены массивы наностержней SiGe и установлена возможность их использования как материалов для электродов литий-ионных аккумуляторов [2]. Для аналогичного применения в литиевых аккумуляторах разработан материал в виде германиевых нанопроводов с кремниевыми ответвлениями [3]. По данным работы [4], благодаря уникальным структурным особенностям и оптимальному составу улучшенные характеристики

хранения лития демонстрируют кристаллические нанотрубки SiGe и полые частицы сплава SiGe, синтезированные электролитическим методом в расплавленных солях.

В последнее время с помощью кластерных и зонных моделей в рамках классической молекулярной динамики и квантово-химических *ab initio* расчетов методом сильной связи и теории функционала плотности исследовано строение, стабильность и электронные свойства кремниевых, германиевых и SiGe-нанотрубок. Зонные расчеты неограниченных по длине нанотрубок Si и Ge, выполненные из первых принципов методом сильной связи и функционала плотности с оптимизацией структуры нанотрубок, показали, что определенные трубчатые наноструктуры, образованные этими элементами стабильны, а их электронные свойства чувствительны к геометрии нанотрубок [5, 6]. С помощью аналогичных расчетов в работе [7] определены кривые поглощения, плотности состояний, электронные дисперсионные кривые, геометрия и энергии образования нанотрубок SiGe нескольких типов: “кресло”, “зигзаг” и хиральных. Показано, что они являются полупроводниковыми матери-

алами с прямой или непрямо́й запрещенной зоной в зависимости от размера, структуры и диаметра трубок и потенциально возможно их успешное применение в термоэлектрике, фотовольтаике и наноэлектронике.

В работе [8] существование и стабильность одностенных SiGe-нанотрубок в конфигурации “кресло” подтверждены также с помощью кластерных моделей с оборванными связями, насыщенными атомами водорода, и оптимизацией геометрии без ограничений симметрии. С использованием метода *ab initio* и классического молекулярно-динамического моделирования исследованы структура, энергетика и термическое поведение нанотрубок SiGe в кресельной и зигзагообразной структурах и установлено, что нанотрубки большого диаметра более стабильны, чем нанотрубки малого диаметра. Предсказано, что в процессе плавления нанотрубок SiGe сначала происходят структурные превращения от исходных нанотрубок к компактным нанопроводам, которые при более высокой температуре преобразуются в агломератные структуры [9].

Энергетика и электронные свойства кремниевых, германиевых и SiGe-нанотрубок малого диаметра изучали также из первых принципов с помощью метода псевдопотенциала [10]. По результатам расчетов отмечена возможность использования нанотрубок SiGe в качестве высокоэффективных термоэлектрических материалов. Термоэлектрические свойства двух нанотрубок SiGe исследованы путем сочетания теории функционала плотности, теории переноса Больцмана и молекулярно-динамического моделирования [11]. Установлено, что рассчитанные коэффициенты Зеебека и времена релаксации SiGe-нанотрубок значительно больше, чем у объемных термоэлектрических материалов.

Механические свойства SiGe-нанотрубок, включая расчеты модулей Юнга, изучали методами молекулярно-динамического моделирования в зависимости от их хиральности и размера, температуры, а также от влияния вакансий и дефектов Стоуна–Уэйлса [12]. Установлено, что с увеличением радиуса трубок модуль Юнга убывает, а деформация разрушения и напряжение разрушения возрастают. Переход к SiGe-нанотрубкам с двойными и тройными стенками демонстрирует более высокие параметры разрушения и рост модуля Юнга за счет увеличения числа стенок нанотрубки.

Некоторые сведения о зонной структуре SiGe-нанотрубок известны из предыдущих качественных

моделей и *ab initio* расчетов. Эти вычисления, однако, были выполнены с помощью нерелятивистских подходов в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием с учетом трансляционной симметрии, но без учета винтовой и вращательной симметрии нанотрубок. Вместе с тем сейчас формируется и быстро развивается спинтроника — область исследований, тесно связанная с переносом спина электронов и созданием в материалах токов с заданными спинами, что имеет исключительно важное фундаментальное и прикладное значение и стимулирует изучение их спиновых свойств [13–19].

Цель настоящей работы — теоретическое исследование электронного строения и спиновых состояний в SiGe-нанотрубках. Использован релятивистский метод симметризованных линейных присоединенных цилиндрических волн (ЛПЦВ). С использованием техники ЛПЦВ в предыдущих работах нами были рассчитаны электронные и спиновые свойства углеродных, кремниевых, золотых и платиновых нанотрубок, в том числе хиральных [20–23]. В хиральных системах образуются хиральные спиновые токи, когда перемещающиеся в материале спины также хиральны, что используют для фильтрации спинов, индуцированной хиральностью спиновой селективности электрических и оптических свойств материала, спин-зависимой передачи заряда и информации [14–17].

МЕТОД РАСЧЕТА

В методе ЛПЦВ применяется записанный с использованием единиц Ридберга двухкомпонентный релятивистский гамильтониан:

$$H = -\Delta + V(r) + (1/c^2)\sigma \cdot [(\nabla V(r)p)]. \quad (1)$$

Здесь первые два члена описывают нерелятивистскую (H_0) часть гамильтониана, а последнее слагаемое представляет собой вклад спин-орбитальной связи H_{S-O} , где c — скорость света, σ — матрица Паули и p — импульс электрона. Для потенциала $V(r)$ нами использована модель атомных сфер (маффин-тин потенциал) и слейтеровское $\rho^{1/3}$ -приближение локальной электронной плотности для обменного взаимодействия, которые обычно применяют в стандартной теории линейных присоединенных плоских волн (ЛППВ) [24–26] для объемных твердых тел, а метод ЛПЦВ — это распространение метода ЛППВ на системы с новой (цилиндрической) геометрией и новыми граничными условиями. Все свойства симметрии нанотрубок учтены нами при построении гамильтониана и ба-

зисных функций, благодаря чему элементарные ячейки SiGe-нанотрубок сводятся к двум соседним атомам Si и Ge, а не к сотням атомов, как это имеет место при учете только трансляционной симметрии [7]. На первом этапе вычисляются собственные функции $\Psi_{\lambda 0}$ и собственные энергии $E_{\lambda 0}$ нерелятивистской (H_0) части гамильтониана (1). Затем базис удваивается за счет включения в него спиновых функций $\Psi_{\lambda 0\chi}$, где $\chi = \alpha$ или β – спиновые функции для электронов со спинами $+\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$, и вычисляются матричные элементы H_{S-O} в спин-зависимом базисном наборе. Явные формулы для базисных функций и вековых уравнений для нерелятивистской [27] и релятивистской [28] версий метода ЛПЦВ приведены в оригинальных статьях [27, 28] и в недавней монографии [29]. Наконец, энергии и волновые функции гамильтониана (1) определяются диагонализацией векового уравнения. Согласно методу ЛПЦВ, зонная структура нанотрубки определяется движением свободных электронов в межатомном пространстве в цилиндрическом слое нанотрубки и рассеянием электронов на атомных сферах.

Для расчета нанотрубки (n_1, n_2) SiGe требуется задать информацию о ее геометрии. Нанотрубки имеют вид цилиндрических поверхностей, покрытых шестиугольниками Si_3Ge_3 (рис. 1) с межатомными расстояниями $d_{\text{Si-Ge}} = 2.37 \text{ \AA}$, как это установлено расчетным путем в работе [7]. Радиусы атомных (маффин-тин) сфер $R_{\text{Ge}} = 1.26 \text{ \AA}$ и $R_{\text{Si}} = 1.11 \text{ \AA}$ выбирали стандартным образом, т.е. так, чтобы величины этих радиусов были пропорциональны эмпирическим атомным радиусам и сумма $R_{\text{Ge}} + R_{\text{Si}}$ совпадала с длиной связи $d_{\text{Si-Ge}}$. Нанотрубки могут различаться диаметром, ориентацией шестиугольников относительно оси трубки и, наконец, хиральностью, когда один энантиомер имеет правую, а другой – левую винтовую ось. Ориентацию гексагональных ячеек относительно оси трубки обычно описывают двумя целыми неотрицательными числами (n_1, n_2) , где $n_1 > 0$ и $0 \leq n_2 \leq n_1$; это подробно изложено в работе [30] на примере углеродных нанотрубок. Нехиральными оказываются нанотрубки (n, n) с равными значениями индексов $n_1 = n_2 = n$, обычно называемые трубками типа “кресло”, а также нанотрубки $(n, 0)$ типа “зигзаг” с нулевым значением индекса n_2 и $n_1 = n$. Они обладают вращательной осью симметрии n -го порядка: седьмого и двенадцатого для обсуждаемых ниже трубок $(7, 7)$ и $(12, 12)$. Если $n_1 \neq n_2$ и n_2 отличается от нуля, то нанотрубка (n_1, n_2) оказывается хиральной. При этом она обладает

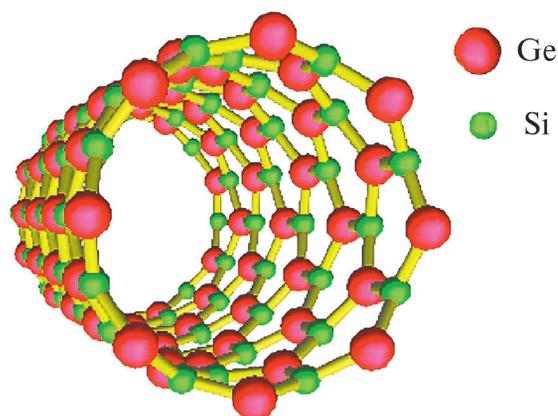


Рис. 1. Строение типичной нанотрубки SiGe.

вращательной осью симметрии C_n , где n – наибольший общий делитель n_1 и n_2 , и винтовой $S(h, \omega)$ симметрией в виде повторяющихся операций сдвига на величину:

$$h = \frac{3nd_{\text{Si-Ge}}}{2(n_1^2 + n_2^2 + n_1n_2)^{1/2}} \quad (2)$$

вдоль оси z цилиндра с одновременным поворотом на угол

$$\omega = \pm 2\pi \frac{p_1n_1 + p_2n_2 + (p_2n_1 + p_1n_2)/2}{n_1^2 + n_2^2 + n_1n_2} \quad (3)$$

вокруг этой оси. Положительные и отрицательные знаки ω для хиральных нанотрубок соответствуют трубкам с положительной (правой) и отрицательной (левой) спиральностью. (Здесь целые числа p_1 и p_2 находятся из уравнения $p_2n_1 - p_1n_2 = n$). Неэмпирические расчеты геометрии нанотрубок SiGe показали, что они обладают слабогфрированной структурой, когда радиусы цилиндрических поверхностей, образованных атомами Si и Ge, различаются на $\Delta R \sim 0.3 \text{ \AA}$, так что атомы Ge слегка смещены внутрь цилиндрического слоя, а атомы Si – наружу [7]. В качестве конкретных соединений в данной работе выбраны две нехиральные нанотрубки SiGe $((7, 7)$ и $(12, 12)$) с геометриями “кресло” и “зигзаг” и три хиральные системы SiGe: $(10, 4)$, $(9, 6)$ и $(11, 3)$. Эти нанотрубки имеют близкие радиусы $(7.5\text{--}8.5 \text{ \AA})$, но резко различающиеся значения угла хиральности.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Полные зонные структуры нанотрубок SiGe (нехиральной $(7, 7)$ и хиральной $(11, 3)$) представлены на рис. 2 в схеме повторяющихся зон, согласно которой собственные состояния соединений зависят

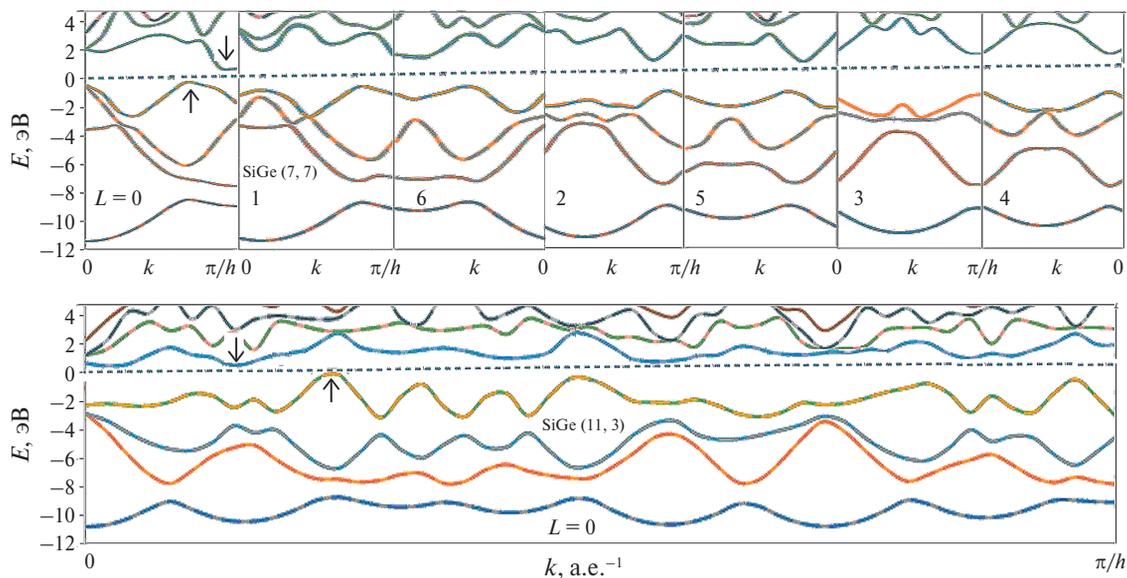


Рис. 2. Зонные структуры нехиральной (7, 7) и хиральной (11, 3) нанотрубок SiGe. Стрелками показано положение краев зон. Результаты приведены для положительных значений k , так как дисперсионные энергетические уровни симметричны относительно замены знака волнового вектора ($E(-k) = E(k)$) без учета спин-орбитальных щелей, которые неразличимы при таком масштабе энергии.

от волнового вектора $-\pi/h \leq k \leq \pi/h$ и вращательного квантового числа $0 \leq L \leq n - 1$ [27, 29]. Учет всех свойств симметрии нанотрубок и сведение элементарной ячейки к двум атомам с восемью валентными электронами позволяют в пренебрежении спин-орбитальными щелями представить электронное строение соединений в виде четырех дважды заполненных дисперсионных кривых валентной зоны, отделенных оптической щелью от зоны проводимости. Во всех случаях ширина валентной зоны равна ~ 12 эВ и включает в себя внутреннюю полосу преимущественно s -электронов атомов Si и Ge шириной 2 эВ и расположенную выше полосу из трех дисперсионных кривых p -электронов шириной ~ 8 эВ. Согласно предыдущим расчетам неэмпирическим методом сильной связи [7], все нанотрубки, независимо от геометрии, обладают полупроводниковым типом зонной структуры с шириной запрещенной зоны $E_g \sim 0.35 \pm 0.02$ эВ. В этом существенное отличие SiGe-нанотрубок от углеродных, кремниевых или германиевых аналогов, которые в зависимости от хиральности обладают полупроводниковыми, полуметаллическими или металлическими свойствами. Это различие обусловлено полярностью химической связи Si–Ge и, как следствие, влиянием антисимметричной компоненты электронного потенциала на зонную структуру, которая приводит к расталкиванию симметричных связывающих и антисимметричных разрыхляющих занятых и вакантных электронных состоя-

ний. Большая устойчивость величин E_g по отношению к вариациям структуры нанотрубок может быть полезна с точки зрения их использования в наноэлектронике, так как должна облегчать получение полупроводниковых нанопроводов с надежно воспроизводимыми характеристиками.

На рис. 3 для положительных значений волнового вектора k в увеличенном масштабе показаны эффекты спин-орбитального расщепления уровней, расположенных вблизи краев валентной зоны и зоны проводимости для нехиральных и правовинтовых нанотрубок SiGe. При $k > 0$ спин вверх (α) соответствует случаю, когда векторы хиральности, электронного потока и спина ориентированы параллельно в направлении $z > 0$, а спин вниз (β), когда он ориентирован в направлении $z < 0$, т. е. противоположно векторам хиральности и потока электронов. Для отрицательных значений k соответствующие дисперсионные кривые получаются из этого рисунка следующим образом: при изменении знака k для нехиральных трубок из-за инверсионной симметрии сохраняется как энергия, так и спиновая поляризация:

$$E_\chi(k) = E_\chi(-k), \quad (4)$$

а для хиральных нанотрубок энергия электронов остается прежней, но поляризация спина меняется на противоположную.

$$E_\alpha(-k) = E_\beta(k), E_\beta(-k) = E_\alpha(k). \quad (5)$$

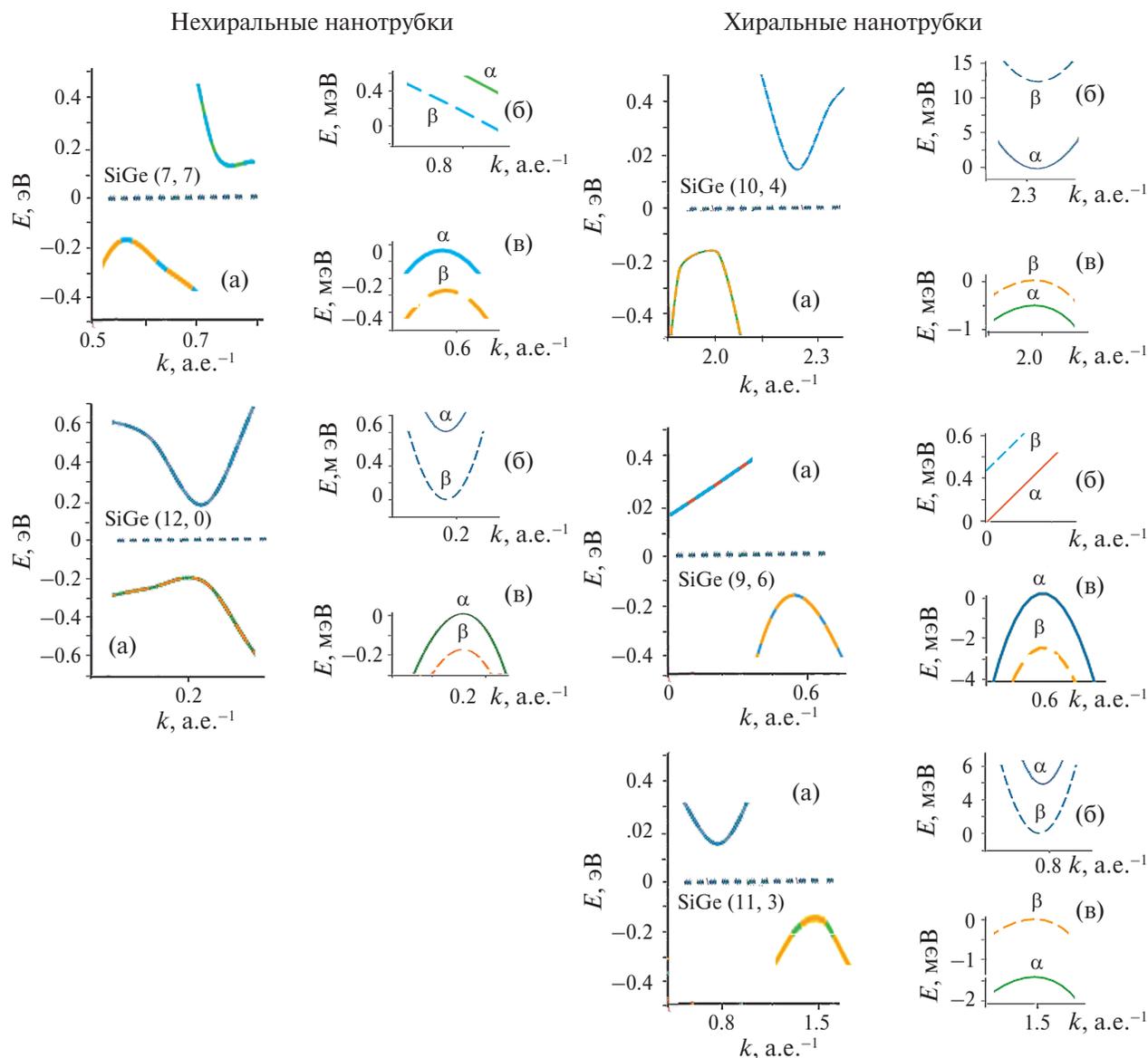


Рис. 3. Электронные уровни нанотрубок в области краев валентной зоны и зоны проводимости. Общий вид (а), дно зоны проводимости (б) и потолок валентной зоны (в). Для хиральных нанотрубок приведенные диаграммы соответствуют трубкам правой винтовой спирали. k , а.е.⁻¹.

В результате спин-орбитальное взаимодействие проявляется по-разному в нанотрубках разной спирали. Например, в нехиральных нанотрубках (7, 7) и (12, 0) минимальная энергетическая щель соответствует переходу $\alpha \rightarrow \beta$ между валентной зоной и зоной проводимости при соответствующих положительных и отрицательных значениях k (например, при $|k| \sim \pm 0.2$ а.е.⁻¹ для трубки (12, 0)). В результате, согласно (4), перенос α -электронов из верха валентной зоны должен совпадать в направлениях $z > 0$ и $z < 0$. То же самое должно быть справедливо и для β -электронов дна зоны проводимости этих нехиральных нанотрубок.

Для хиральных нанотрубок уравнения (5) определяют зависимость направления потока электронов вдоль оси трубок от ориентации спинов. В качестве примера рассмотрим правовинтовую нанотрубку (9, 6). При $k > 0$ верх валентной зоны и дно зоны проводимости образованы электронами со спином α , поэтому перенос электронов с этим спином будет преобладать в направлении $z > 0$ под действием электрического напряжения U соответствующего знака. Согласно уравнению (5) при $k < 0$ граничные состояния зон образованы электронами со спинами β . Если теперь изменить знак напряжения U на $-U$ и тем самым изменить

направление потока электронов, то будет преобладать перенос электронов с β -спинами в направлении $-z$. Этот эффект является примером так называемой индуцированной хиральностью спиновой селективности, которая является предметом исследований в последние годы [13–19]. Для праввинтовой нанотрубки (11, 3) минимальная энергия электронного возбуждения соответствует переходу $\beta \rightarrow \beta$ без переворота электронного спина, и с помощью этой трубки можно реализовать преимущественный транспорт β -электронов в положительном направлении оси и α -электронов в противоположном направлении. В праввинтовой нанотрубке (10, 4) с минимальной щелью $\beta \rightarrow \alpha$ положительное направление переноса благоприятствует транспорту электронов со спином β верха валентной зоны и электронов со спином α внизу зоны проводимости.

Энергии спин-орбитальных щелей $E_{v,SO}$ и $E_{c,SO}$ краев валентной зоны и зоны проводимости заметно различаются для нехиральных и хиральных нанотрубок. В первом случае $E_{v,SO}$ и $E_{c,SO}$ составляют несколько десятых мэВ, а во втором – несколько мэВ, максимально $E_{v,SO} = 12.8$ мэВ для трубки (10, 4) (табл. 1). Механически воздействуя на нанотрубку, например, скручивая ее вокруг цилиндрической оси в положительном или отрицательном направлении, растягивая или сжимая ее вдоль оси, можно изменять энергии спин-орбитальных щелей, что важно для управления спиновым транспортом в трубках и создания элементов наноспинтроники и наноэлектромеханики. В нехиральных нанотрубках (7, 7) и (12, 12) крутильная деформация представляет собой низкосимметричное возмущение, величина которого не зависит от знака деформации. Расчеты показывают, что крутильная деформация на угол 1 град/Å в положительном или отрицательном направлении приводит к увеличению щелей $E_{v,SO}$ и $E_{c,SO}$ в трубках (7, 7) и (12, 0) максимально на 1 мэВ. Отклик спин-орбитальных щелей хиральных трубок, очевидно, зависит от знака деформации и является более сильным, как видно из численных данных. Максимальным откликом на крутильные деформации является уменьшение $E_{c,SO}$ на 7 мэВ для трубки (10, 4) при ее закручивании на угол $\Delta\omega = 1$ град/Å в направлении хиральности праввинтовой системы и увеличение $E_{v,SO}$ от 0.33 до 14.76 мэВ при закручивании трубки (9, 6) в противоположном направлении на угол $\Delta\omega = -1$ град/Å. Осевые деформации не меняют хиральности нанотрубок и вызывают более слабое возмущение спиновых состояний краев зон по сравнению с эффектами крутильных деформаций. Типичные изменения

энергии спиновых щелей краев зон при изменении длины нанотрубок на $\pm 1\%$ лежат в пределах 1 мэВ.

Наконец, отметим, что диаграммы, представленные на рис. 3 для праввинтовых хиральных нанотрубок, легко трансформируются в зонные

Таблица 1. Энергии спин-орбитальных расщеплений краев валентной зоны $E_{v,SO}$ и зоны проводимости $E_{c,SO}$ для равновесной геометрии нанотрубок с величинами h и ω , рассчитанными по формулам (2) и (3), а также для нанотрубок, дополнительно подвергнутых торсионным деформациям на угол $\Delta\omega = \pm 1$ град/Å в положительном и отрицательном направлениях и растяжению или сжатию вдоль оси z на 1%, т. е. на $\Delta h = \pm 0.01h$ Å

h, ω (2, 3) или $\Delta h, \text{Å}$ и $\Delta\omega, \text{град/Å}$	$E_{v,SO}$, мэВ	$E_{c,SO}$, мэВ
Нанотрубка (7, 7)		
ω, h	0.13	0.02
$+\Delta\omega$	0.50	0.97
$-\Delta\omega$	0.50	0.97
$+\Delta h$	0.45	0.89
$-\Delta h$	0.24	0.82
Нанотрубка (12, 0)		
ω, h	0.18	0.57
$+\Delta\omega$	0.14	1.26
$-\Delta\omega$	0.14	1.26
$+\Delta h$	0.22	0.53
$-\Delta h$	0.20	0.60
Нанотрубка (10, 4)		
ω, h	0.63	12.81
$+\Delta\omega$	0.98	5.59
$-\Delta\omega$	1.91	6.07
$+\Delta h$	0.41	12.46
$-\Delta h$	0.46	11.37
Нанотрубка (9, 6)		
ω, h	0.33	0.44
$+\Delta\omega$	5.38	0.24
$-\Delta\omega$	14.76	0.38
$+\Delta h$	1.78	0.59
$-\Delta h$	0.48	0.75
Нанотрубка (11, 3)		
ω, h	1.45	4.76
$+\Delta\omega$	1.11	3.04
$-\Delta\omega$	1.70	4.43
$+\Delta h$	1.11	5.80
$-\Delta h$	1.54	4.86

структуры трубок с левовинтовой спиральностью. Для этого достаточно на рис. 3 изменить направления спинов α и β дисперсионных кривых: $E_{\alpha}(k)|_{lh} = E_{\beta}(k)|_{rh}$ и $E_{\beta}(k)|_{lh} = E_{\alpha}(k)|_{rh}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Одностенные кремний-германиевые нанотрубки представляют собой полупроводники с минимальными оптическими щелями, практически не зависящими от хиральности трубок. Спин-орбитальное расщепление краев валентной зоны и зоны проводимости составляет несколько десятых мэВ в нехиральных нанотрубках и может превышать 10 мэВ в хиральных материалах. Энергии спин-орбитальных щелей и спиновые свойства нанотрубок сильно чувствительны к крутильным и осевым деформациям, что можно использовать для управления спиновым транспортом в нанотрубках.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (грант № 24-23-00037), <https://rscf.ru/project/24-23-00037/>

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lin N., Wang L., Zhou J. et al. // J. Mater. Chem. A. 2015. V. 3. P. 11199. <https://doi.org/10.1039/C5TA02216A>
2. Yu Y., Yue C., Sun S. et al. // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2014. V. 6. P. 5884. <https://doi.org/10.1021/am500782b>
3. Kennedy T., Bezuidenhout M., Palaniappan K. et al. // ACS Nano. 2015. V. 9. P. 7456. <https://doi.org/10.1021/acs.nano.5b02528>
4. Xiao W., Zhou J., Yu L. et al. // Angew. Chem. Int. Ed. 2016. V. 55. P. 7427. <https://doi.org/10.1002/anie.201602653>
5. Seifert G., Kohler T., Hajnal Z. et al. // Solid State Commun. 2001. V. 119. P. 653. [https://doi.org/10.1016/S0038-1098\(01\)00309-X](https://doi.org/10.1016/S0038-1098(01)00309-X)
6. Fagan S.B., Baierle R.J., Mota R. et al. // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 9994. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.9994>
7. Herrera-Carbajal A., Rodriguez-Lugo V., Hernandez-Avila J. et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2021. V. 23. P. 13075. <https://doi.org/10.1039/D1CP00519G>
8. Rathi S.J., Ray A.K. // Chem. Phys. Lett. 2008. V. 466. P. 79. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2008.10.031>
9. Liu X., Cheng D., Cao D. // Nanotechnology. 2009. V. 20. P. 315705. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/20/31/315705>
10. Pan L., Liu H., Wen Y. et al. // J. Comput. Theor. Nanosci. 2010. V. 7. P. 1935. <https://doi.org/10.1166/jctn.2010.1563>
11. Wei J., Liu H.J., Tan X.J. et al. // RSC Adv. 2014. V. 4. P. 53037. <https://doi.org/10.1039/C4RA07320G>
12. Dadrasi A., Albooyeh A., Mashhadzadeh A.H. // Appl. Surf. Sci. 2019. V. 498. P. 143867. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.143867>
13. Yang S.H. // Appl. Phys. Lett. 2020. V. 116. P. 120502. <https://doi.org/10.1063/1.5144921>
14. Yang S.H., Naaman R., Paltiel Y. et al. // Nature Rev. Phys. 2021. V. 3. P. 328. <https://doi.org/10.1038/s42254-021-00302-9>
15. Michaeli K., Kantor-Uriel N., Naaman R. et al. // Chem. Soc. Rev. 2016. V. 45. P. 6478. <https://doi.org/10.1039/C6CS00369A>
16. Naaman R., Waldeck D.H. // Annu. Rev. Phys. Chem. 2015. V. 66. P. 263. <https://doi.org/10.1146/annurev-physchem-040214-121554>
17. Manchon H., Koo H.C., Nitta J. et al. // Nat. Mater. 2015. V. 14. P. 871. <https://doi.org/10.1038/nmat4360>
18. Koo H.C., Kim S.B., Kim H. et al. // Adv. Mater. 2020. V. 32. P. 2002117. <https://doi.org/10.1002/adma.202002117>
19. Bercioux D., Lucignano P. // Rep. Prog. Phys. 2015. V. 78. P. 106001. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/78/10/106001>
20. D'yachkov P.N., D'yachkov E.P. // Appl. Phys. Lett. 2022. V. 120. P. 173101. <https://doi.org/10.1063/5.0086902>
21. D'yachkov P.N., Lomakin N.A. // Russ. J. Inorg. Chem. 2023. V. 68. № 4. P. 492. <https://doi.org/10.1134/S0036023622602823>
22. D'yachkov E.P., Lomakin N.A., D'yachkov P.N. // Russ. J. Inorg. Chem. 2023. V. 68. № 7. P. 855. <https://doi.org/10.1134/S0036023623600867>
23. D'yachkov P.N., D'yachkov E.P. // Russ. J. Inorg. Chem. 2023. V. 68. № 10. P. 1446. <https://doi.org/10.1134/S0036023623601897>
24. Slater J.C. // Phys. Rev. 1937. V. 10. P. 846. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.51.846>
25. Andersen O.K. // Phys. Rev. B. 1975. V. 12. P. 864. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.12.3060>
26. Koelling D.D., Arman G.O. // J. Phys. F: Metal Physics. 1975. V. 5. P. 2041. <https://doi.org/10.1088/0305-4608/5/11/016>

27. *D'yachkov P.N., Makaev D.V.* // Phys. Rev. B. 2007. V. 76. P. 19541. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.19541>
28. *D'yachkov P.N., Makaev D.V.* // Int. J. Quantum Chem. 2016. V. 116. P. 316. <https://doi.org/10.1002/qua.25030>
29. *D'yachkov P.N.* Quantum chemistry of nanotubes: electronic cylindrical Waves. London: CRC Press, 2019. 212 p.
30. *Дьячков П.Н.* Электронные свойства и применение нанотрубок. М.: Лаборатория знаний, 2020. 491 с.

SPIN PROPERTIES OF SILICON-GERMANIUM NANOTUBES

E. P. D'yachkov^a, V.B. Merinov^{a,b}, and P. N. D'yachkov^{a,*}

^a*Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry, Moscow, 119991 Russia*

^b*National Research Nuclear University "MEPhI", Moscow, 115409 Russia*

**e-mail: p_dyachkov@rambler.ru*

The dependence of the electronic structure on the chirality of single-walled SiGe nanotubes has been studied using the quantum chemistry methods. It has been shown that all nanotubes have a semiconductor type of band structure with a band gap E_g of about 0.35 eV, which distinguishes them from silicon analogues, which, depending on chirality, have semiconductor, semimetallic or metallic properties. This difference is due to the polarity of the Si-Ge chemical bond and, as a consequence, the influence of the antisymmetric component of the electronic potential on the band structure of the compounds. The valence band with a width of about 12 eV includes an inner band of predominantly *s* electrons of atoms with a width of 2 eV and a band of *p* electrons located above with a width of 8 eV. The energies of the spin-orbit gaps of the edges of the valence band and the conduction band differ significantly: for non-chiral nanotubes, they are equal to several tenths, and for chiral nanotubes, they are several meV. Using mechanical action, for example, by twisting a nanotube around its axis, it is possible to control the energies of spin-orbit gaps, which can find application in spintronics.

Keywords: SiGe nanotubes, electronic structure, spin properties, modeling