

# МОДЕЛИРОВАНИЕ СПИНОВОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК (0, 9) ВО ВНЕШНЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ.

Глушков Г. И., Тучин А. В.

Воронежский государственный университет, Россия, 394006, Воронеж,  
Университетская пл. д.1, 8(4732)2281160,  
green5708@yandex.ru

Поиск материалов, в которых достигается значительная спиновая поляризация является одной из основных задач полупроводниковой спинтроники[1]. Высокая стабильность и поляризуемость углеродных нанотрубок (УНТ) объясняют существенную спиновую поляризацию и возможность управления ей приложением внешнего электрического поля [2,3].

Целью работы является исследование размернозависимой перестройки электронной структуры чистых ук-ОУНТ симметрии  $D_{3h}$ ,  $D_{3d}$  и  $D_3$  в спинсинглетном и спинтриплетном состояниях и влияния внешнего электрического поля на спиновую поляризацию

Неограниченным методом DFT в кластерном приближении проводились расчеты полной энергии, зазора между граничными орбиталями и спиновой поляризации. В качестве обменного функционала выбран LSDA . В качестве базисного набора выбран валентно-расщепленный базис 3-21G(dp). Расчеты проводились в программном комплексе Gaussian03.

Расчет спиновой поляризации проводился независимо для двух спиновых каналов проводимости. Установлена монотонное убывание поляризации при дискретном наращивании длины с 50% до 4% для симметрии  $D_3$  и с 14% до 3% для симметрии  $D_{3h}/D_{3d}$ . Обнаружена чувствительность смещения Штарка граничных орбиталей триплетного состояния ук-ОУНТ (0, 9) к ориентации спинов, приводящая к разной по знаку модуляции ширины запрещенной зоны для электронов со спином вверх и вниз.

При приложении внешнего электрического поля наблюдается уменьшение спиновой поляризации электронов со спином «вверх» и увеличение для электронов со спином «вниз». При напряженности поля  $E=0.5$  В/Å достигнуто двукратное увеличение спиновой поляризации электронов со спином «вниз», происходит инверсия поляризации основного канала. Возможность управления спиновой поляризацией внешним электрическим полем определяет перспективность применения ОУНТ в качестве функционального материала спинтронных устройств

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №16-32- 00926 мол\_a)

## Литература

1. [1] Bhattacharya S., et al. // Chem. Comm. 50, 6626 (2014).
2. [2] Yang L., et al. // J. Chem, Phys. 142 (2015);
3. [3] Wu J., et al. // Phys. Rev. B 81 155407 (2010).