

УДК 539.23; 539.216.1

DOI: 10.17223/00213411/63/2/110

Д.М. СЕРГЕЕВ^{1,2}, Л.Н. МЯСНИКОВА², К.Ш. ШУНКЕЕВ²

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПИН-ФИЛЬТРУЮЩИХ СВОЙСТВ ОБОРВАННОЙ ОКТАГРАФЕНОВОЙ НАНОЛЕНТЫ, НАСЫЩЕННОЙ АТОМАМИ ВОДОРОДА

В рамках теории функционала электронной плотности и метода неравновесных гриновских функций (LSDA+NEGF) определены спектры пропускания, вольт-амперные характеристики (ВАХ), дифференциальная проводимость оборванной октаграфеновой наноленты, полученной путем удаления атомов углерода из центральной части и насыщенной атомами водорода. Показано, что ВАХ рассматриваемых наноструктур имеют участок с отрицательным дифференциальным сопротивлением, обусловленный резонансным туннелированием квазичастиц. Эти же изменения наблюдаются и на dI/dV -характеристике. Установлено, что в оборванной октаграфеновой наноленте (гексагональные элементы которой соединены трехатомным углеродным мостиком) в интервале энергии $-1.65 \div -0.5$ эВ прохождение квазичастиц со спином вниз блокируется. Такое поведение спектра пропускания позволяет применить их для создания спиновых фильтров по энергии. Обнаружено, что спин-поляризованный ток оборванной октаграфеновой наноленты (части которой соединены между собой пятиугольными элементами и углеродным мостиком) с состоянием спинов вверх-вверх существенно превышает ток структуры с состоянием спинов вверх-вниз. Такой эффект позволяет осуществить селекцию квазичастиц со спином вверх по току в определенном значении приложенного напряжения. Полученные результаты могут быть полезными при расчетах новых приборов спинтроники.

Ключевые слова: октаграфен, спин-зависимый транспорт, спиновый фильтр, вольт-амперная характеристика, дифференциальная проводимость, спектр пропускания.

Введение

В настоящее время для создания новых типов электронных приборов микро- и нанoeлектроники все актуальнее становится освоение новых материалов с контролируемыми электрофизическими свойствами. В этой связи развиваются новые направления нанoeлектроники на базе новых экзотических материалов, отличающихся принципиально новыми электрофизическими свойствами от традиционных полупроводниковых. К таким направлениям нанoeлектроники можно отнести сверхпроводниковую (см., например, [1–3]), органическую (см., например, [4, 5]), молекулярную [6], одноэлектронику [7, 8], где рабочими объектами являются наноразмерные структуры. Одним из развивающихся направлений нанoeлектроники является спинтроника, в основе которой заложена идея использования собственного момента импульса частиц – спина в качестве активного элемента для хранения, обработки и передачи информации [9, 10].

Известно, что приборы спинтроники построены на эффекте гигантского магнитного сопротивления и обычно управление спинами частиц осуществляется с применением внешнего магнитного поля [11]. Для работы такого прибора возникает необходимость включения в электронную схему постоянных микромагнитов. В [12] для упрощения конструкции спинового фильтра без применения постоянных микромагнитов (без внешнего магнитного поля) рассмотрена возможность использования собственного эффекта, связанного со спин-орбитальным взаимодействием, присущим наноструктурам. А в работе [13] в качестве перспективного материала для создания спинового фильтра предлагаются зигзагообразные графеновые наноленты, реализованные путем удаления нескольких атомов углерода в выбранной области. Подобные наноленты имеют магнитно-изолирующее основное состояние с ферромагнитным упорядочением на каждом ребре и антипараллельной ориентацией спинов между двумя ребрами. Такая структура обладает эффектом фильтрации спина: разрешает переносить только по одному типу спина, в то время как по другому типу запрещается. Такой метод получения спин-поляризованного тока обеспечивает новый подход к спинтронике на основе графена и им родственных структур.

Одним из близких по свойству к графену углеродным наноматериалом является октаграфен, представляющий собой полуметалл с ненулевой плотностью состояний на уровне Ферми [14]. Возникает вопрос: возможно ли увеличение спиновой поляризации в октаграфеновой пленке с помощью эффекта фильтрации спинов, обусловленного особенностями электронной зонной структуры, присущими углеродным наноматериалам? Исследование спин-зависимого транспорта различных углеродных наноматериалов представляет заметный интерес для изучения спин-

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://www.elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>