

НЕУПРУГИЙ ТУННЕЛЬНЫЙ ТРАНСПОРТ ЭЛЕКТРОНОВ ЧЕРЕЗ АНИЗОТРОПНУЮ МАГНИТНУЮ СТРУКТУРУ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В. В. Вальков^{a}, С. В. Аксенов^{a**}, Е. А. Уланов^b*

*^a Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

*^b Сибирский аэрокосмический университет
660014, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 19 декабря 2013 г.

Методом диаграммной техники Келдыша для фермиевских и хаббардовских операторов рассмотрен квантовый транспорт электронов через магнитную примесь, находящуюся во внешнем магнитном поле и подверженную влиянию подложки. Показано, что в условиях сильной неравновесности, индуцированной процессами многократного отражения электронов на примеси, вольт-амперная характеристика устройства содержит участки с отрицательной проводимостью. Этим эффектом можно управлять посредством изменения параметра анизотропии примесного центра, а также параметров связи магнитной примеси с металлическими контактами. Включение магнитного поля сопровождается увеличением числа кулоновских ступенек в вольт-амперной характеристике примеси. При этом возникает эффект значительного магнитосопротивления. В режиме асимметричной связи магнитной примеси с контактами показана возможность переключения между ее состояниями с различными значениями проекции полного спина.

DOI: 10.7868/S0044451014070165

1. ВВЕДЕНИЕ

Приближение к технологическому пределу применения полупроводниковых полевых транзисторов привело к необходимости поиска альтернативных материалов, способных стать базовыми в электронных приборах и устройствах нового поколения. В качестве таких перспективных систем предлагаются наногетероструктуры, содержащие слои ферромагнитного металла [1] или магнитного полупроводника [2], а также системы джозефсоновского типа [3–5]. В сфере записи и хранения информации решение отмеченной проблемы видится, в частности, в создании новых устройств памяти, которые по основным характеристикам, таким как размеры, энергопотребление, время считывания, число циклов перезаписи будут превосходить сегодняшние полупроводниковые образцы (например, флэш-память).

Значительные достижения в технологии и суще-

ственное расширение экспериментальных возможностей привели к тому, что в последние десятилетия объектами пристального внимания исследователей стали магнитные атомные и молекулярные комплексы, а также отдельные частицы. Такие структуры либо адсорбируются в область разломного контакта [6], либо располагаются на поверхности и зондируются сканирующим туннельным микроскопом (СТМ) [7]. Иногда магнитный ион помещают внутрь квантовой точки [8]. В качестве такого центра может выступать атом переходного или редкоземельного металла (например, Co, Mn, Fe, Ce), а также молекула, у которой магнитное ядро окружено лигандами (например, фталоцианины Co, Fe; Mn₁₂).

Экспериментальные исследования магнитных систем атомного масштаба с применением СТМ выявили ряд резонансных эффектов в транспортных характеристиках этих структур. Природа подобных особенностей связана с неупругим рассеянием электронов, которое обусловлено взаимодействием их спинов со спиновыми моментами атомной структуры [9]. Было показано, что спин-флип-рассеяние транспортируемых электронов на потенциальном профиле структуры позволяет управлять ее маг-

*E-mail: vvv@iph.krasn.ru

**E-mail: asv86@iph.krasn.ru

нитным состоянием [10]. Проведенные эксперименты показали принципиальную выполнимость контроля спинового состояния систем вплоть до отдельного атома. В частности, в недавней работе [11] была продемонстрирована возможность записи и считывания информации на антиферромагнитной цепочке из восьми атомов за счет пропускания спин-поляризованного тока от иглы СТМ, подведенной к отдельному атому такой цепочки. Таким образом, реализован магнитный бит атомного масштаба, не требующий приложения внешнего магнитного поля для записи информации, как это происходит с магнитными доменами в современных жестких дисках.

Как следует из экспериментальных данных, при теоретическом рассмотрении транспортных свойств систем атомного масштаба существенным является учет процессов перехода этих систем в возбужденные состояния. Такие переходы индуцируются за счет взаимодействия транспортируемых электронов с зарядовыми и спиновыми степенями свободы устройства. В результате возникает ситуация, когда протекание туннельного тока приводит к распределению заселенностей энергетических состояний устройства, существенно отличающемуся от равновесного. В частности, включение зарядовых и спиновых корреляций в условиях неравновесности приводит к таким эффектам, как кулоновская блокада и резонанс Кондо [12, 13]. Ранее было показано, что наличие колебательных степеней свободы у молекулы проявляется в модификации ее вольт-амперных характеристик (ВАХ) вследствие возбуждения молекулы при протекании через нее туннельного тока [14, 15].

Поскольку в реальных условиях структуры атомного масштаба находятся в туннельном контакте с металлическими электродами, необходимо принимать во внимание статистические свойства электронных ансамблей в таких электродах. Это означает, что рассеяние электрона на магнитной структуре должно рассчитываться с учетом того обстоятельства, что взаимодействие предшествующих электронов со структурой, вообще говоря, могло изменить ее потенциальный профиль. В результате многократного повторения процессов рассеяния электронов на ренормированном потенциальном профиле структуры устанавливается неравновесное распределение занятости состояний магнитного устройства, существенно отличающееся от исходного равновесного. Соответственно этому появляются ренормировки ВАХ, которые становятся зависящими от свойств индуцированного туннельным током нерав-

новесного состояния магнитного устройства и свидетельствуют о наличии переходов между возбужденными состояниями [10]. Дополнительным фактором, который требуется учитывать при описании транспортных свойств магнитных атомных структур, является влияние кристаллического окружения на магнитные свойства адсорбата. В частности, в зависимости от величины и характера связи адатома с подложкой может меняться тип анизотропии [16] или происходить экранировка магнитного момента вследствие кондо-корреляций [17].

В данной работе при учете отмеченных выше факторов решена задача о ВАХ адсорбированного атома, находящегося во внешнем магнитном поле H при конечной температуре и проявляющего из-за влияния подложки анизотропию магнитных свойств. Для случая $H = 0$ в краткой форме результаты вычисления ВАХ представлены в работе [18]. Точный учет неэквидистантности большого числа состояний системы «магнитный атом + электроны» осуществлен на основе атомного представления и описания динамических процессов на языке операторов Хаббарда [12, 19, 20]. Вычисление неравновесных чисел заполнения состояний рассматриваемого магнитного устройства осуществлялось на основе решения замкнутой системы кинетических уравнений, полученной методом диаграммной техники Келдыша [21], как для фермиевских, так и для хаббардовских операторов [19, 20], модифицированной посредством введения контура Келдыша для неравновесного случая [22, 23]. Такой подход позволил учесть процессы многократного рассеяния электронов во всех порядках теории возмущения по параметру связи структуры с контактами и получить выражение для тока, удовлетворяющее необходимым симметричным свойствам [15]. Проведенные расчеты показали, что ВАХ магнитной примеси в туннельном режиме содержит участки с отрицательной дифференциальной проводимостью (ОДП). Отмечено, что изменение параметра анизотропии примеси и асимметрия связи с контактами могут способствовать усилению эффекта ОДП. Продemonстрировано, что включение внешнего магнитного поля приводит к увеличению числа кулоновских ступенек в ВАХ и к появлению значительного магнитосопротивления у системы.

2. ГАМИЛЬТониан СИСТЕМЫ

Рассмотрим туннельный транспорт электронов через магнитную примесь со спином $S = 1$ во внешнем магнитном поле \mathbf{H} в геометрии, представленной

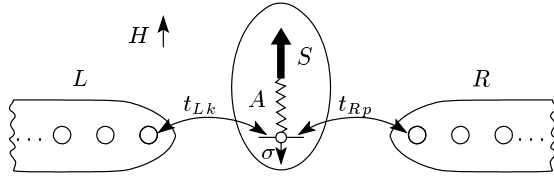


Рис. 1. Магнитная примесь со спином S , расположенная между металлическими контактами

на рис. 1. Подобная конфигурация отвечает ряду упомянутых выше экспериментов, где транспортируемые электроны взаимодействуют с магнитными примесями.

Гамильтониан рассматриваемой системы, находящейся во внешнем магнитном поле H , запишем в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{T} + \hat{V}_\varphi, \quad \hat{H}_0 = \hat{H}_L + \hat{H}_D + \hat{H}_R. \quad (1)$$

Входящие в \hat{H}_0 операторы \hat{H}_L и \hat{H}_R описывают электроны проводимости соответственно левого и правого металлического контакта

$$\hat{H}_L = \sum_{k\sigma} \xi_{Lk\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}, \quad \hat{H}_R = \sum_{p\sigma} \xi_{Rp\sigma} d_{p\sigma}^\dagger d_{p\sigma}, \quad (2)$$

где $c_{k\sigma}$ ($d_{p\sigma}$) — оператор уничтожения электрона в левом (правом) контакте с волновым вектором k (p) и проекцией спина σ ; $\xi_{Lk\sigma} = \varepsilon_{Lk} - \sigma g_e \mu_B H - \mu$, $\xi_{Rp\sigma} = \varepsilon_{Rp} - \sigma g_e \mu_B H - \mu$ — одноэлектронные энергии соответственно в левом и правом контактах, отсчитанные от уровня химического потенциала μ и учитывающие расщепление энергии по проекции спина электрона $\sigma = \pm 1/2$ в магнитном поле; g_e — электронный g -фактор в контактах, μ_B — магнетон Бора. В дальнейшем предполагается, что контакты представляют собой однозонные парамагнитные металлы с шириной зоны $W = 4|t| \sim 1$ эВ (t — интеграл перекрытия электронных волновых функций на соседних узлах в контактах), значительно превышающей характерные энергетические параметры в системе.

Второе слагаемое в \hat{H}_0 является гамильтонианом магнитной примеси (устройства)

$$\hat{H}_D = \sum_{\sigma} \xi_{d\sigma} n_{\sigma} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} + D (S^z)^2 - S^z g \mu_B H + A (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}), \quad (3)$$

где $\xi_{d\sigma} = \varepsilon_d - \sigma g_e \mu_B H - \mu$ — отсчитанная от химического потенциала зависящая от спина энергия электрона, находящегося на примеси, во внешнем магнитном поле H ; ε_d — затравочная одноэлектронная

энергия примесного атома; $n_{\sigma} = a_{\sigma}^\dagger a_{\sigma}$ — оператор числа электронов на примесном центре с проекцией спина σ ; a_{σ}^\dagger (a_{σ}) — оператор рождения (уничтожения) электрона на примесном атоме с проекцией спина σ ; параметр U характеризует хаббардовское отталкивание двух электронов с противоположными проекциями спинов. Влияние кристаллического окружения на магнитные свойства примеси [17] моделируется введением параметра одноосной анизотропии D . Действие магнитного поля на энергетическую структуру примесного центра с эффективным g -фактором описывается посредством предпоследнего слагаемого в (3). Взаимосвязь между спиновыми степенями свободы транспортируемого электрона и примесного атома осуществляется через механизм $s - d(f)$ -обменной связи и описывается последним слагаемым (3), в котором \mathbf{S} является векторным оператором спинового момента примеси, а $\boldsymbol{\sigma}$ — векторным оператором спина транспортируемого электрона. Интенсивность $s - d(f)$ -обменной связи определяется параметром A . Как известно, скалярное произведение $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}$ содержит операторные слагаемые, соответствующие учету спин-флип-процессов, когда происходит одновременное изменение проекций спинов у примеси и у электрона при сохранении суммарного значения z -проекции спина для всей системы. Важность таких процессов связана, в частности, с тем, что благодаря им происходит изменение потенциального профиля рассеивающего центра. Это проявляется, например, в индуцировании эффекта Фано [24]. В нашем случае, как будет показано ниже, отмеченные процессы существенно влияют на ВАХ системы.

Связь магнитной примеси с металлическими контактами описывается вторым слагаемым гамильтониана системы (1) посредством учета процессов туннелирования электронов между контактами и магнитной примесью:

$$\hat{T} = \sum_{k\sigma} t_{Lk} c_{k\sigma}^\dagger a_{\sigma} + \sum_{p\sigma} t_{Rp} d_{p\sigma}^\dagger a_{\sigma} + \text{h.c.} \quad (4)$$

Здесь t_{Lk} , t_{Rp} — параметры связи соответственно левого и правого контактов с примесью.

Последнее слагаемое \hat{V}_φ полного гамильтониана системы, обусловленное приложением к металлическим контактам напряжения смещения V , определяется выражением

$$\hat{V}_\varphi = \sum_{\sigma} (eV/2) a_{\sigma}^\dagger a_{\sigma} + \sum_{p\sigma} (eV) d_{p\sigma}^\dagger d_{p\sigma}. \quad (5)$$

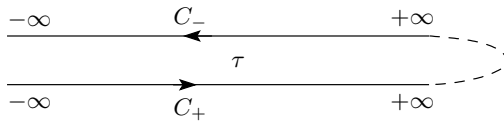


Рис. 2. Временной контур Келдыша C

3. ГИЛЬБЕРТОВО ПРОСТРАНСТВО СОСТОЯНИЙ ИЗОЛИРОВАННОГО УСТРОЙСТВА И АТОМНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

Вычисление транспортных характеристик устройства по методу Келдыша [21] основано на использовании диаграммной формы теории возмущений для неравновесной системы, когда временные интегралы, входящие в S -матрицу, определяются на контуре Келдыша C (см. рис. 2). Структура диаграммного ряда, как известно, зависит не только от оператора возмущения в представлении взаимодействия, но и от гамильтониана нулевого приближения. Если гамильтониан устройства описывать на исходном языке фермиевских операторов вторичного квантования, а также спиновых операторов, то, как следует из приведенных выше формул, оператор Гамильтона устройства не является диагональным. Это существенно усложняет процедуру усреднения по матрице плотности, соответствующей невозмущенному гамильтониану в отмеченном представлении.

Преодоление указанной технической трудности связано с переходом к атомному представлению, в котором \hat{H}_D становится диагональным. Построение такого представления, как известно, основано на использовании в качестве базисных векторов гильбертова пространства состояний устройства полного ортонормированного набора волновых функций $|\psi_n\rangle$ (в нашем случае $n = 1, 2, \dots, 12$). При этом функции $|\psi_n\rangle$ удовлетворяют уравнению Шредингера $\hat{H}_D|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ с оператором \hat{H}_D , в котором напряжение смещения V равно нулю. Если ввести операторы Хаббарда $X^{nm} = |\psi_n\rangle\langle\psi_m|$, то в построенном описанным образом атомном представлении гамильтониан устройства принимает диагональную форму:

$$\hat{H}_D = \sum_{n=1}^{12} E_n X^{nn}. \quad (6)$$

Поскольку оператор числа электронов, находящегося в устройстве, коммутирует с \hat{H}_D , базисные вектора гильбертова пространства состояний

устройства можно расквалифицировать на совокупности векторов, в каждой из которых базисный вектор описывает состояние с фиксированным числом электронов в устройстве: 0, 1 или 2. Соответственно этому гильбертово пространство состояний устройства разбивается на три сектора.

Сектор с нулевым числом электронов определяется как пространство состояний, задаваемых произвольной линейной суперпозицией трех базисных векторов ($S = 1$)

$$\psi_1 = |0, 0\rangle, \quad \psi_{2,3} = |0, \pm 1\rangle. \quad (7)$$

В правой части этих и последующих выражений кет-вектор используется для идентификации состояний с заданным числом электронов и проекции спина на примеси. Для данного сектора первый индекс кет-вектора соответствует тому, что электронов в устройстве нет. Вторым индекс кет-вектора обозначает проекцию спина примеси.

Однофермионный сектор гильбертова пространства задается набором из шести собственных функций оператора \hat{H}_D :

$$\begin{aligned} \psi_4 &= \cos \Theta_+ |\uparrow, 0\rangle - \sin \Theta_+ |\downarrow, +1\rangle, \\ \psi_5 &= \cos \Theta_- |\downarrow, 0\rangle - \sin \Theta_- |\uparrow, -1\rangle, \\ \psi_6 &= \text{sign}(A) (\sin \Theta_+ |\uparrow, 0\rangle - \cos \Theta_+ |\downarrow, +1\rangle), \\ \psi_7 &= \text{sign}(A) (\sin \Theta_- |\downarrow, 0\rangle + \cos \Theta_- |\uparrow, -1\rangle), \\ \psi_8 &= |\uparrow, +1\rangle, \quad \psi_9 = |\downarrow, -1\rangle, \end{aligned} \quad (8)$$

где первый индекс кет-вектора показывает ориентацию спина электрона, находящегося на примеси. Коэффициенты разложения имеют вид

$$\begin{aligned} \sin \Theta_{\pm} &= \text{sign}(A) \sqrt{\frac{1+x_{\pm}}{2}}, \\ \cos \Theta_{\pm} &= \sqrt{\frac{1-x_{\pm}}{2}}, \\ x_{\pm} &= \Delta_{\pm}/\nu_{\pm}, \quad \nu_{\pm} = \sqrt{\Delta_{\pm}^2 + A^2/2}, \\ \Delta_{\pm} &= \Delta \pm (g/2 - 1)h, \quad \Delta = A/4 - D/2, \\ h &= \mu_B H. \end{aligned} \quad (9)$$

Влияние магнитного поля проявляется через зависимость этих выражений от h . Для реальных систем в большинстве случаев выполняются условия, когда энергия зеемановского взаимодействия меньше параметров модели. Тогда в линейном по h приближении нетрудно установить явную зависимость коэффициентов разложения от магнитного поля:

$$\begin{aligned} \sin \Theta_{\pm} &\approx \sin \Theta \pm \left(\frac{g}{2} - 1\right) h \frac{1-x}{2\nu} \sin \Theta, \\ \cos \Theta_{\pm} &\approx \cos \Theta \mp \left(\frac{g}{2} - 1\right) h \frac{1+x}{2\nu} \cos \Theta, \\ \sin \Theta &= \text{sign}(A) \sqrt{\frac{1+x}{2}}, \quad \cos \Theta = \sqrt{\frac{1-x}{2}}, \\ x &= \frac{\Delta}{\nu}, \quad \nu = \sqrt{\Delta^2 + \frac{A^2}{2}}. \end{aligned} \quad (10)$$

Базисные вектора двухэлектронного сектора определяются выражениями

$$\psi_{10} = |2, 0\rangle, \quad \psi_{11,12} = |2, \pm 1\rangle. \quad (11)$$

Собственные значения энергии устройства E_i ($i = 1, 2, \dots, 12$), соответствующие собственным состояниям ψ_i , могут быть записаны следующим образом:

$$\begin{aligned} E_1 &= 0, \quad E_{2(3)} = D \mp gh, \\ E_{4(5)} &= \xi_{d\uparrow(\downarrow)} - \Delta_{\pm} - \nu_{\pm}, \\ E_{6(7)} &= \xi_{d\uparrow(\downarrow)} - \Delta_{\pm} + \nu_{\pm}, \\ E_{8(9)} &= \xi_{d\uparrow(\downarrow)} + D + A/2 \mp gh, \\ E_{10} &= 2\xi_d + U, \quad E_{11(12)} = 2\xi_d + U + D \mp gh. \end{aligned} \quad (12)$$

При однофермионных возбуждениях магнитной примеси происходят переходы между состояниями ψ_i , для которых число электронов различается на единицу. Для каждой проекции спина имеется десять таких переходов. В данной задаче важную роль играют зависимости энергетических разностей отмеченных переходов от магнитного поля. Это связано с тем, что расщепление энергий однофермионных переходов в магнитном поле для электронов с разной проекцией спина лежит в основе изменения зависимости чисел заполнения от электрического поля смещения (см. ниже) и определяет появление дополнительных ступенек в ВАХ. Имея это в виду, приведем с отмеченной выше точностью явную зависимость энергий переходов от h . В случае $\sigma = +1/2$:

$$\begin{aligned} E_{1,4} &= E_1 - E_4 \approx \Delta + \nu - \xi_d + g_+ h, \\ E_{1,6} &\approx \Delta - \nu - \xi_d + g_- h, \\ E_{3,5} &\approx \Delta + \nu + D - \xi_d + g_- h, \\ E_{3,7} &\approx \Delta - \nu + D - \xi_d + g_+ h, \\ E_{2,8} &= -(A/2 + \xi_d - h), \\ E_{4,11} &\approx -(\Delta + \nu + U + D + \xi_d) + g_- h, \\ E_{5,10} &\approx -(\Delta + \nu + U + \xi_d) + g_+ h, \\ E_{6,11} &\approx -(\Delta - \nu + U + D + \xi_d) + g_+ h, \\ E_{7,10} &\approx -(\Delta - \nu + U + \xi_d) + g_- h, \\ E_{9,12} &= -(U - A/2 + \xi_d - h), \end{aligned} \quad (13)$$

где $g_{\pm} = g/2 \pm \Delta(g/2 - 1)/\nu$. Для $\sigma = -1/2$ имеем

$$\begin{aligned} E_{1,5} &\approx \Delta + \nu - \xi_d - g_+ h, \\ E_{1,7} &\approx \Delta - \nu - \xi_d - g_- h, \\ E_{2,4} &\approx \Delta + \nu + D - \xi_d - g_- h, \\ E_{2,6} &\approx \Delta - \nu + D - \xi_d - g_+ h, \\ E_{3,9} &= -(A/2 + \xi_d + h), \\ E_{4,10} &\approx -(\Delta + \nu + U + \xi_d) - g_+ h, \\ E_{5,12} &\approx -(\Delta + \nu + U + D + \xi_d) - g_- h, \\ E_{6,10} &\approx -(\Delta - \nu + U + \xi_d) - g_- h, \\ E_{7,12} &\approx -(\Delta - \nu + U + D + \xi_d) - g_+ h, \\ E_{8,11} &= -(U - A/2 + \xi_d + h). \end{aligned} \quad (14)$$

Используя приведенные формулы, нетрудно записать атомное представление фермиевского оператора a_{σ} через введенные операторы Хаббарда:

$$\begin{aligned} a_{\sigma} &= \sum_{n,m} \langle \psi_n | a_{\sigma} | \psi_m \rangle X^{n,m} \equiv \\ &\equiv \sum_{n,m} \gamma_{\sigma}(n, m) X^{n,m} \equiv \sum_{\alpha} \gamma_{\sigma}(\alpha) X^{\alpha}. \end{aligned} \quad (15)$$

Для сокращения записи последующих выражений введены параметры представления $\gamma_{\sigma}(n, m) = \langle \psi_n | a_{\sigma} | \psi_m \rangle$ и реализован переход от суммирования по двум индексам (n, m) к одному $\alpha(n, m)$ [20]. Учитывая действительность $\gamma_{\sigma}(n, m)$ (см. ниже), получим, что для оператора рождения реализуется представление

$$a_{\sigma}^{\dagger} = \sum_{\alpha} \gamma_{\sigma}(\alpha) X^{-\alpha}, \quad -\alpha(n, m) = \alpha(m, n). \quad (16)$$

Проводя вычисление матричных элементов $\langle \psi_n | a_{\sigma} | \psi_m \rangle$, получаем

$$\begin{aligned} a_{\uparrow} &= [\text{sign}(A) X^{1,6} - X^{4,11}] \sin \Theta_+ + \\ &+ [X^{1,4} + \text{sign}(A) X^{6,11}] \cos \Theta_+ + X^{2,8} + \\ &+ [\text{sign}(A) X^{7,10} - X^{3,5}] \sin \Theta_- + \\ &+ [X^{5,10} + \text{sign}(A) X^{3,7}] \cos \Theta_- + X^{9,12}; \\ a_{\downarrow} &= -[X^{2,4} + \text{sign}(A) X^{6,10}] \sin \Theta_+ + \\ &+ [\text{sign}(A) X^{2,6} - X^{4,10}] \cos \Theta_+ + X^{3,9} + \\ &+ [\text{sign}(A) X^{1,7} + X^{5,12}] \sin \Theta_- + \\ &+ [X^{1,5} - \text{sign}(A) X^{7,12}] \cos \Theta_- - X^{8,11}. \end{aligned} \quad (17)$$

Сравнение (17) и (15) определяет значения отличных от нуля параметров представления $\gamma_{\uparrow}(\alpha)$ и $\gamma_{\downarrow}(\alpha)$.

4. ФОРМУЛА ДЛЯ ТОКА И СПЕКТРАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ УСТРОЙСТВА

Вычисление туннельного тока I через магнитную примесь проведем на основе неравновесной диаграммной техники Келдыша [21], в которой роль невозмущенного оператора играет только оператор H_0 , а все возмущения перенесены в оператор туннелирования. Это достигается посредством проведения унитарного преобразования [22], в результате которого от матрицы плотности $\rho(t)$ переходим к матрице плотности $\rho_\varphi(t)$:

$$\rho_\varphi(t) = \exp(-iV_\varphi t)\rho(t)\exp(iV_\varphi t). \quad (18)$$

Здесь и далее $\hbar = 1$. При этом оператор туннелирования приобретает временную зависимость,

$$\hat{T}_\varphi(t) = \sum_{k\sigma} t_{Lk} e^{-ieVt/2} c_{k\sigma}^\dagger a_\sigma + \sum_{p\sigma} t_{Rp} e^{ieVt/2} d_{p\sigma}^\dagger a_\sigma + \text{h.c.} \quad (19)$$

Следовательно, формула для вычисления тока I также содержит временной множитель,

$$I = e \left\langle \frac{d\hat{N}_L}{dt} \right\rangle = ie \sum_{k\sigma} t_{Lk} \left(\langle a_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle e^{ieVt/2} - \text{h.c.} \right), \quad (20)$$

где $\hat{N}_L = \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$ — оператор числа электронов в левом контакте. Угловые скобки означают усреднение с матрицей плотности $\rho_\varphi(t)$.

Следуя [21], введем матрицу рассеяния

$$S_C = T_C \exp \left\{ -i \int_C \hat{T}_I(\tau) d\tau \right\}, \quad (21)$$

где оператор туннелирования записан в представлении взаимодействия

$$\begin{aligned} \hat{T}_I(\tau) &= \\ &= \sum_{k\sigma,\alpha} t_{Lk} \gamma_\sigma(\alpha) \left[e^{-ieV\tau/2} c_{k\sigma}^\dagger(\tau) X^\alpha(\tau) + \text{h.c.} \right] + \\ &+ \sum_{p\sigma,\alpha} t_{Rp} \gamma_\sigma(\alpha) \left[e^{ieV\tau/2} d_{p\sigma}^\dagger(\tau) X^\alpha(\tau) + \text{h.c.} \right]. \quad (22) \end{aligned}$$

В формуле (21) интегрирование осуществляется по контуру Келдыша, изображенному на рис. 2. На этом же контуре определен оператор упорядочения

по T_C [21]. При записи оператора туннелирования $\hat{T}_I(t)$ использован переход от операторов a_σ к операторам Хаббарда. Это связано с тем, что временная зависимость $X^\alpha(\tau)$, как и операторов $c_{k\sigma}(\tau)$, $d_{p\sigma}(\tau)$ в представлении взаимодействия сводится к умножению на c -числовую функцию, тогда как для $a_\sigma(\tau)$ такого правила нет (это и препятствует построению фейнмановской диаграммной техники, использующей операторы a_σ). Если $\alpha = \alpha(n, m)$, то $X^\alpha(\tau) = X^\alpha \exp[i(E_n - E_m)\tau] \equiv X^\alpha \exp[iE_\alpha \tau]$. Такая простая временная зависимость позволяет сформулировать теорему Вика, необходимую для получения рекуррентных соотношений при раскрытии среднего от произведения операторов Хаббарда по нулевой матрице плотности.

Определим четыре семейства неравновесных функций Грина:

$$\begin{aligned} R_{k\sigma,\alpha}^{ab}(\tau, \tau') &= -i \langle T_C c_{k\sigma}(\tau_a) X^{-\alpha}(\tau'_b) S_C \rangle_0, \\ R_{\alpha,k\sigma}^{ab}(\tau, \tau') &= -i \langle T_C X^\alpha(\tau_a) c_{k\sigma}^\dagger(\tau'_b) S_C \rangle_0, \\ D_{\alpha,\beta}^{ab}(\tau, \tau') &= -i \langle T_C X^\alpha(\tau_a) X^{-\beta}(\tau'_b) S_C \rangle_0, \\ G_{Lk\sigma}^{ab}(\tau, \tau') &= -i \langle T_C c_{k\sigma}(\tau_a) c_{k\sigma}^\dagger(\tau'_b) \rangle_0, \end{aligned} \quad (23)$$

для которых каждый из верхних индексов a и b может принимать два значения: «+» или «-». Первому индексу a соответствует время τ_a у первого оператора, стоящего в упорядоченном по контуру Келдыша среднем. Это означает, что при $a = +(-)$ оператор $c_{k\sigma}(\tau_a)$ или $X^\alpha(\tau_a)$ в представлении взаимодействия берется в момент времени τ , на нижней (верхней) ветви контура Келдыша. Аналогично сказанному, при $b = +(-)$ оператор $X^{-\alpha}(\tau'_b)$ или $c_{k\sigma}^\dagger(\tau'_b)$ берется в момент времени τ' на нижней (верхней) ветви контура Келдыша.

Применяя представления (15) и (16), а также введенные функции $R_{k\sigma,\alpha}^{ab}$ и $R_{\alpha,k\sigma}^{ab}$, получим, что выражение для тока может быть записано в виде

$$I = e \sum_{k\sigma,\alpha} t_{Lk} \gamma_\sigma(\alpha) \left\{ e^{ieVt/2} R_{Lk\sigma,\alpha}^{++}(t, t + \delta) - e^{-ieVt/2} R_{\alpha,Lk\sigma}^{++}(t, t + \delta) \right\}, \quad \delta \rightarrow +0. \quad (24)$$

Проведя разложение матрицы рассеяния S_C в (23), нетрудно убедиться в справедливости уравнений

$$\begin{aligned}
 R_{k\sigma,\alpha}^{++}(t, t') &= \sum_{\beta} t_{Lk} \gamma_{\sigma}(\beta) \times \\
 &\times \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \left\{ G_{Lk\sigma}^{++}(t-\tau) D_{\alpha\beta}^{++}(\tau-t') - \right. \\
 &- \left. G_{Lk\sigma}^{+-}(t-\tau) D_{\alpha\beta}^{-+}(\tau-t') \right\} e^{-ieV\tau/2}, \\
 R_{\alpha,k\sigma}^{++}(t, t') &= \sum_{\beta} t_{Lk} \gamma_{\sigma}(\beta) \times \\
 &\times \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \left\{ D_{\alpha\beta}^{++}(t-\tau) G_{Lk\sigma}^{++}(\tau-t') - \right. \\
 &- \left. D_{\alpha\beta}^{+-}(t-\tau) G_{Lk\sigma}^{-+}(\tau-t') \right\} e^{ieV\tau/2}.
 \end{aligned} \tag{25}$$

Использование этих уравнений позволяет после проведения преобразования Фурье по временным аргументам получить удобное выражение для тока:

$$\begin{aligned}
 I = e \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left[Q_{\sigma}^{-+}(\omega) W_{\sigma}^{+-} \left(\omega - \frac{eV}{2} \right) - \right. \\
 \left. - Q_{\sigma}^{+-}(\omega) W_{\sigma}^{-+} \left(\omega - \frac{eV}{2} \right) \right].
 \end{aligned} \tag{26}$$

Здесь введены спектральные функции устройства:

$$W_{\sigma}^{ab}(\omega) = \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\sigma}(\alpha) \gamma_{\sigma}(\beta) D_{\alpha\beta}^{ab}(\omega), \tag{27}$$

а также спектральные функции туннельной связи левого контакта с устройством:

$$Q_{\sigma}^{ab}(\omega) = \sum_k t_{Lk}^2 G_{Lk\sigma}^{ab}(\omega), \tag{28}$$

где $G_{Lk\sigma}^{ab}$ — затравочные функции Грина левого контакта:

$$\begin{aligned}
 G_{Lk\sigma}^{++}(\omega) &= \frac{n_{Lk\sigma}}{\omega - \xi_{Lk\sigma} - i\delta} + \frac{1 - n_{Lk\sigma}}{\omega - \xi_{Lk\sigma} + i\delta}, \\
 G_{Lk\sigma}^{+-}(\omega) &= 2\pi i n_{Lk\sigma} \delta(\omega - \xi_{Lk\sigma}), \\
 G_{Lk\sigma}^{-+}(\omega) &= -\frac{n_{Lk\sigma}}{\omega - \xi_{Lk\sigma} + i\delta} - \frac{1 - n_{Lk\sigma}}{\omega - \xi_{Lk\sigma} - i\delta}, \\
 G_{Lk\sigma}^{--}(\omega) &= 2\pi i (n_{Lk\sigma} - 1) \delta(\omega - \xi_{Lk\sigma}),
 \end{aligned} \tag{29}$$

где

$$n_{Lk\sigma} = \left\{ 1 + \exp \left[\frac{\varepsilon_{Lk\sigma} - \mu}{T} \right] \right\}^{-1}.$$

Из выражения (26) следует, что для нахождения туннельного тока необходимо решить задачу о вычислении спектральных функций устройства $W_{\sigma}^{+-}(\omega)$ и $W_{\sigma}^{-+}(\omega)$. Заметим, что входящие в определения суммы по α и β соответствуют учету вкладов в ток от переходов устройства между состояниями.

5. ВЫЧИСЛЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ УСТРОЙСТВА

Вывод уравнений для функций Грина $D_{\alpha\beta}^{ab}$ упрощается, если принять во внимание два фактора. Первый из них связан с тем, что оператор H_0 аддитивен относительно подсистем двух контактов и устройства. Поэтому среднее от произведения фермиевских и хаббардовских операторов распадается на произведение средних, каждое из которых содержит только операторы одного типа. Второй фактор следует из того, что слагаемые ряда для $D_{\alpha\beta}^{ab}(\tau-\tau')$, возникающего из разложения матрицы рассеяния \hat{S}_C , обращаются в нуль, как только оператор \hat{T}_I под знаком среднего появляется нечетное число раз. При этом в слагаемых четного порядка нетрудно провести вычисления средних от возникающих произведений фермиевских операторов. В результате бесконечный ряд может быть свернут в экспоненту так, что в определение $D_{\alpha\beta}^{ab}$ будет входить ренормированная матрица рассеяния \tilde{S}_C :

$$D_{\alpha\beta}^{ab}(\tau-\tau') = -i \left\langle T_C X^{\alpha}(\tau_a) X^{-\beta}(\tau'_b) \tilde{S}_C \right\rangle_0, \tag{30}$$

которая определяется через эффективное взаимодействие, относящееся только к подсистеме устройства и выраженное посредством операторов Хаббарда

$$\begin{aligned}
 \tilde{S}_C = T_C \exp \left\{ -i \int_C d\tau_1 \int_C d\tau_2 \times \right. \\
 \left. \times \sum_{\alpha\beta} \tilde{V}_{\alpha\beta}(\tau_1 - \tau_2) X^{-\alpha}(\tau_1) X^{\beta}(\tau_2) \right\}.
 \end{aligned} \tag{31}$$

Заметим, что аналогичная процедура использовалась ранее при нахождении гриновских функций квазилокализованных электронов в модели Андерсона [25].

Матричные элементы эффективного взаимодействия зависят от двух, определенных на контуре Келдыша, временных аргументов:

$$\begin{aligned}
 \tilde{V}_{\alpha\beta}(\tau_1 - \tau_2) &= \sum_{\sigma} \gamma_{\sigma}(\alpha) \gamma_{\sigma}(\beta) \times \\
 &\times \left\{ \sum_k t_{Lk}^2 \exp \left\{ i \frac{eV}{2} (\tau_1 - \tau_2) \right\} G_{Lk\sigma}(\tau_1 - \tau_2) + \right. \\
 &+ \left. \sum_p t_{Rp}^2 \exp \left\{ -i \frac{eV}{2} (\tau_1 - \tau_2) \right\} G_{Rp\sigma}(\tau_1 - \tau_2) \right\}.
 \end{aligned} \tag{32}$$

Проведенные преобразования показывают, что при нахождении неравновесных функций Грина $D_{\alpha\beta}^{ab}$

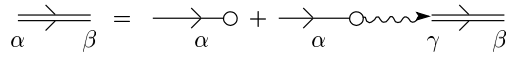


Рис. 3. Система уравнений для неравновесных функций $D_{\alpha\beta}$

можно воспользоваться диаграммной техникой для операторов Хаббарда [19, 20], модифицированной в соответствии с методом Келдыша [21].

Для дальнейшего существенно, что при квантовом транспорте электронов реализуются процессы рассеяния, сопровождающиеся изменением состояния устройства. В результате электрон, пришедший в устройство из левого контакта, может перейти в правый контакт или вернуться обратно в левый, а затем снова туннелировать в область устройства. Такие процессы могут инициировать переход устройства в возбужденные состояния. Эффекты многократного отражения будут учтены, если в ряду теории возмущений для $D_{\alpha\beta}^{ab}$ сохранить слагаемые всех порядков по параметрам туннельной связи устройства с левым и правым контактами. На диаграммном языке это означает, что функции $D_{\alpha\beta}^{ab}$ должны удовлетворять системе уравнений, графическая форма которых хорошо известна для хаббардовских систем [19, 20] и приведена на рис. 3. Воспользовавшись определением контура Келдыша C (см. рис. 2), получим, что в частотном представлении графической системе уравнений для $D_{\alpha\beta}^{ab}$ (рис. 3) соответствует аналитическая запись

$$\begin{aligned}
 D_{\alpha\beta}^{+-}(\omega) &= \delta_{\alpha\beta} D_{0\alpha}^{+-}(\omega) + \sum_{\gamma} D_{0\alpha}^{++}(\omega) \times \\
 &\times [\tilde{V}_{\alpha\gamma}^{++}(\omega) D_{\gamma\beta}^{+-}(\omega) - \tilde{V}_{\alpha\gamma}^{+-}(\omega) D_{\gamma\beta}^{--}(\omega)] + \\
 &+ \sum_{\gamma} D_{0\alpha}^{+-}(\omega) \times \\
 &\times [\tilde{V}_{\alpha\gamma}^{--}(\omega) D_{\gamma\beta}^{--}(\omega) - \tilde{V}_{\alpha\gamma}^{-+}(\omega) D_{\gamma\beta}^{+-}(\omega)], \\
 D_{\alpha\beta}^{--}(\omega) &= \delta_{\alpha\beta} D_{0\alpha}^{--}(\omega) + \sum_{\gamma} D_{0\alpha}^{-+}(\omega) \times \\
 &\times [\tilde{V}_{\alpha\gamma}^{++}(\omega) D_{\gamma\beta}^{+-}(\omega) - \tilde{V}_{\alpha\gamma}^{+-}(\omega) D_{\gamma\beta}^{--}(\omega)] + \\
 &+ \sum_{\gamma} D_{0\alpha}^{--}(\omega) \times \\
 &\times [\tilde{V}_{\alpha\gamma}^{--}(\omega) D_{\gamma\beta}^{--}(\omega) - \tilde{V}_{\alpha\gamma}^{-+}(\omega) D_{\gamma\beta}^{+-}(\omega)].
 \end{aligned} \tag{33}$$

Решение этой системы большого числа линейных уравнений значительно упрощается, если учесть два фактора. Первый связан с тем, что зависимость матричных элементов взаимодействия от корневых векторов имеет расщепленный характер:

$$\tilde{V}_{\alpha\beta}^{ab}(\omega) = \sum_{\sigma} \gamma_{\sigma}(\alpha) \gamma_{\sigma}(\beta) M_{\sigma}^{ab}(\omega), \tag{34}$$

где

$$M_{\sigma}^{ab}(\omega) = Q_{\sigma}^{ab} \left(\omega + \frac{eV}{2} \right) + P_{\sigma}^{ab} \left(\omega - \frac{eV}{2} \right). \tag{35}$$

В этом случае использование методики [26] позволяет свести задачу к решению простой системы уравнений. Второй фактор связан с тем, что рассматривается коллинеарная геометрия задачи, когда внешнее магнитное поле ориентировано вдоль оси анизотропии. При этом z -проекция оператора полного спина коммутирует с гамильтонианом системы, что позволяет проводить классификацию состояний устройства по значению этой проекции. Тогда для всех переходов $\gamma_{\uparrow}(\alpha) \gamma_{\downarrow}(\alpha) \equiv 0$ и функции $L_{\sigma\sigma'}^{ab}(\omega) = \sum_{\alpha} \gamma_{\sigma}(\alpha) \gamma_{\sigma'}(\alpha) D_{0\alpha}^{ab}(\omega) = \delta_{\sigma\sigma'} L_{\sigma}^{ab}(\omega)$ диагональны по спиновому индексу. Поэтому решение системы уравнений для неравновесных функций Грина разбивается на две независимые подсистемы для каждой проекции спина в отдельности.

В неколлинеарном же случае недиагональные компоненты $L_{\uparrow\downarrow}^{ab}(\omega)$, $L_{\downarrow\uparrow}^{ab}(\omega) \neq 0$, и спектральные функции устройства находились бы из решения системы четырех уравнений.

Величина $Q_{\sigma}^{ab}(\omega)$ была вычислена ранее, а

$$P_{\sigma}^{ab}(\omega) = \sum_p t_{Rp}^2 G_{Rk\sigma}^{ab}(\omega) \tag{36}$$

является спектральной функцией туннельной связи правого контакта с устройством.

Применяя метод Келдыша [21] к системе уравнений (33) для неравновесных функций Грина, находим

$$W_{\sigma}^{+-}(\omega) = -\frac{M_{\sigma}^{+-}(\omega)}{\Delta_{\sigma}(\omega)}, \tag{37}$$

где

$$\begin{aligned}
 \Delta_{\sigma}(\omega) &= \left([L_{\sigma}^{++}(\omega)]^{-1} - M_{\sigma}^{++}(\omega) \right) \times \\
 &\times \left([L_{\sigma}^{--}(\omega)]^{-1} - M_{\sigma}^{--}(\omega) \right) - \\
 &- M_{\sigma}^{+-}(\omega) M_{\sigma}^{-+}(\omega).
 \end{aligned} \tag{38}$$

Появление в этих выражениях функций

$$L_{\sigma}^{ab}(\omega) = \sum_{\alpha} \gamma_{\sigma}^2(\alpha) D_{0\alpha}^{ab}(\omega)$$

связано с возможностью устройства осуществлять переходы между собственными состояниями. Входящие сюда затравочные функции устройства $D_{0\alpha}^{ab}(\omega)$ определяются выражениями

$$\begin{aligned}
 D_{0\alpha}^{++}(\omega) &= \frac{N_n}{\omega + E_\alpha + i\delta} + \frac{N_m}{\omega + E_\alpha - i\delta}, \\
 D_{0\alpha}^{+-}(\omega) &= 2\pi i N_m \delta(\omega + E_\alpha), \\
 D_{0\alpha}^{--}(\omega) &= -\frac{N_n}{\omega + E_\alpha - i\delta} - \frac{N_m}{\omega + E_\alpha + i\delta}, \\
 D_{0\alpha}^{-+}(\omega) &= -2\pi i N_n \delta(\omega + E_\alpha).
 \end{aligned} \tag{39}$$

Заметим, что величина E_α обозначает энергетическую разность между уровнями n и m , т.е. $E_\alpha = E_n - E_m$ для $\alpha = \alpha(n, m)$. Влияние магнитного поля на актуальные для данной задачи энергии переходов определяется формулами (13) и (14). Переход устройства из состояния n в состояние m становится эффективным, как только ω находится вблизи отмеченной энергетической разности. В этом случае в функции $L_\sigma^{ab}(\omega)$ наблюдается полюсная особенность. Количество таких полюсов определяет число возможных переходов, которые проявляются в ВАХ. Существенно, что без магнитного поля $L_\uparrow^{ab}(\omega) = L_\downarrow^{ab}(\omega)$, поскольку в этом случае положения полюсов и значения параметров представления для обеих функций совпадают. Включение магнитного поля приводит к расщеплению энергетических термов. В результате при переходе электрона из контакта в устройство изменение энергии устройства становится зависящим от проекции спина электрона. Поэтому в магнитном поле происходит увеличение числа наблюдаемых переходов, сопровождающееся возрастанием числа ступенек в ВАХ. Поскольку эти особенности проявляются прежде всего через функции $L_\sigma^{ab}(\omega)$, продемонстрируем сказанное следующим образом. Рассмотрим слагаемые

$$l_{2,8} = \frac{N_2 + N_8}{\omega - A/2 - \xi_d + h}, \quad l_{3,9} = \frac{N_3 + N_9}{\omega - A/2 - \xi_d - h},$$

входящие в функции $L_\uparrow^{ab}(\omega)$ и $L_\downarrow^{ab}(\omega)$ и отвечающие соответственно переходам (2, 8) и (3, 9). Видно, что без магнитного поля в приведенных слагаемых имеется один и тот же полюс $\omega = \omega_0 = A/2 + \xi_d$, соответствующий отмеченным переходам. В магнитном же поле появляются два перехода, которые инициируются двумя полюсами: $\omega = \omega_0 \mp h$. Разобранный сценарий и определяет появление дополнительных ступенек в ВАХ при включении магнитного поля. Кроме того, рассмотренные особенности лежат в основе модификации зависимости чисел заполнения от электрического поля смещения при включении h (см. ниже рис. 5). Заметим, что для других слагаемых функций $L_\uparrow^{ab}(\omega)$ и $L_\downarrow^{ab}(\omega)$ качественная картина влияния магнитного поля не отличается от только что описанной.

Составляя аналогичным образом систему урав-

нений для функций $D_{\alpha\beta}^{-+}(\omega)$ и $D_{\alpha\beta}^{++}(\omega)$ и решая ее, получим

$$W_\sigma^{-+}(\omega) = -\frac{M_\sigma^{-+}(\omega)}{\Delta_\sigma(\omega)}. \tag{40}$$

6. ТОК И СИСТЕМА КВАНТОВЫХ КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ЧИСЕЛ ЗАПОЛНЕНИЯ

Используя полученные выражения для спектральных функций устройства, приходим к следующей формуле для тока:

$$\begin{aligned}
 I &= e \sum_\sigma \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi \Delta_\sigma(\omega)} \times \\
 &\times \left[Q_\sigma^{+-} \left(\omega + \frac{eV}{2} \right) P_\sigma^{-+} \left(\omega - \frac{eV}{2} \right) - \right. \\
 &\left. - Q_\sigma^{-+} \left(\omega + \frac{eV}{2} \right) P_\sigma^{+-} \left(\omega - \frac{eV}{2} \right) \right]. \tag{41}
 \end{aligned}$$

Расписывая в явном виде компоненты массового оператора $M_\sigma^{ab}(\omega)$, получаем

$$\begin{aligned}
 I_L &= 2e \sum_\sigma \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} [n(\omega - eV) - n(\omega)] \times \\
 &\times \frac{\Gamma_{L\sigma}(\omega) \Gamma_{R\sigma}(\omega)}{[L_\sigma^{-1}(\omega) - \Lambda_\sigma(\omega)]^2 + \Gamma_\sigma^2(\omega)}, \tag{42}
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 L_\sigma(\omega) &= \sum_\alpha \frac{b_\alpha \gamma_\sigma^2(\alpha)}{\omega + E_\alpha - eV/2}, \\
 \Lambda_\sigma &= \sum_k \frac{t_{Lk}^2}{\omega - \xi_{Lk\sigma}} + \sum_p \frac{t_{Rp}^2}{\omega - \xi_{Rp\sigma} - eV}.
 \end{aligned} \tag{43}$$

Функция Λ_σ отвечает за радиационный сдвиг энергетических уровней системы за счет влияния левого и правого контактов. Как уже отмечалось ранее, при обсуждении слагаемых гамильтониана системы в работе используется предположение о том, что контакты являются широкозонными металлами. Это позволяет при конкретных расчетах пренебречь сдвигом Λ_σ , а также не учитывать частотную зависимость функций уширения уровней $\Gamma_\sigma = \Gamma_{L\sigma} + \Gamma_{R\sigma} = \pi (t_{L\sigma}^2 g_{L\sigma} + t_{R\sigma}^2 g_{R\sigma})$ [27]. В этом выражении $t_{L(R)}$ — параметр перескока электрона с последнего узла левого (правого) контакта на уровень магнитного атома; $g_{L(R)\sigma}$ — зависящая от спина плотность состояний левого (правого) контакта. Важное свойство полученного выражения для тока (42) связано

с тем, что оно пропорционально произведению $t_L^2 t_R^2$ и, тем самым, удовлетворяет необходимым физическим требованиям [13].

Для получения системы кинетических уравнений на числа заполнения воспользуемся соотношением

$$N_m = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega D_{\alpha\alpha}^{+-}(\omega). \quad (44)$$

Находя по описанной выше методике функцию $D_{\alpha\alpha}^{+-}(\omega)$, получим

$$N_m = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \left(\frac{b_\alpha \gamma_\sigma(\alpha)}{\omega_\alpha L_\sigma(\omega)} \right)^2 \times \frac{\Gamma_{L\sigma}(\omega) n(\omega) + \Gamma_{R\sigma}(\omega) n(\omega - eV)}{[L_\sigma^{-1}(\omega) - \Lambda_\sigma(\omega)]^2 + \Gamma_\sigma^2(\omega)}, \quad (45)$$

где $\omega_\alpha = \omega + E_\alpha - eV/2$. При записи этого уравнения использовано следующее свойство: в рассматриваемой коллинеарной геометрии задачи для каждого однофермионного перехода $\alpha = \alpha(n, m)$ из двух параметров представления $\gamma_\uparrow(\alpha)$ и $\gamma_\downarrow(\alpha)$ только один отличен от нуля. В этой связи значение проекции спина σ у входящих в (45) величин выбирается таким, что $\gamma_\sigma(\alpha) \neq 0$.

В дальнейшем ограничимся рассмотрением транспортных свойств магнитного устройства для режима туннельной связи устройства с контактом при низких температурах. Этот случай наиболее часто реализуется в экспериментальных исследованиях [28, 29]. На математическом языке отмеченному режиму соответствует выполнение неравенств $T, \Gamma_\sigma \ll E_\alpha$, что означает малость температуры и уширения уровней энергии по сравнению с расстоянием между этими уровнями. Тогда

$$N_m \approx \frac{b_\alpha}{\pi} \left[\arctg\left(\frac{W/2 + eV/2 - \omega_{0\alpha}}{\kappa_\alpha}\right) + \frac{\Gamma_{L\sigma}}{\Gamma_\sigma} \arctg\left(\frac{\omega_{0\alpha} - eV/2}{\kappa_\alpha}\right) + \frac{\Gamma_{R\sigma}}{\Gamma_\sigma} \arctg\left(\frac{\omega_{0\alpha} + eV/2}{\kappa_\alpha}\right) \right], \quad (46)$$

где введены следующие обозначения:

$$\omega_{0\alpha} = E_\alpha + \lambda_\alpha \kappa_\alpha, \quad \kappa_\alpha = \frac{b_\alpha \gamma_\sigma^2(\alpha) \Gamma_\sigma}{1 + \lambda_\alpha^2},$$

$$\lambda_\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{b_\beta \gamma_\sigma^2(\beta) \Gamma_\sigma}{E_\beta - E_\alpha}.$$

Нетрудно убедиться, что при сделанных предположениях основной вклад в туннельный ток вносят диагональные слагаемые, $I \approx \sum_\alpha I_{\alpha\alpha}$, поэтому

$$I \approx \frac{2e}{\pi} \sum_\alpha \frac{\Gamma_{L\sigma} \Gamma_{R\sigma}}{\Gamma_\sigma} b_\alpha \gamma_\sigma^2(\alpha) \times \left[\arctg\left(\frac{\omega_{0\alpha} + eV/2}{\kappa_\alpha}\right) - \arctg\left(\frac{\omega_{0\alpha} - eV/2}{\kappa_\alpha}\right) \right]. \quad (47)$$

7. ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА МАГНИТНОЙ ПРИМЕСИ

При проведении численных расчетов все энергетические параметры измерялись в единицах $|t|$. Как следует из экспериментальных [30–32] и теоретических [33, 34] работ, между параметрами модели выполнялись следующие соотношения: $|t_L|, |t_R| > |A|, |D|, |\varepsilon_d|, |h|$. Отмеченная область параметров включает и такие соотношения, когда соблюдается условие туннельной связи устройства с контактами, $\Gamma_\sigma \ll E_\alpha$. Поскольку $W \gg h$, будем считать, что $g_{L\sigma} = g_{R\sigma} = 1/W$ [27].

Остановимся прежде всего на результатах численного решения системы кинетических уравнений для чисел заполнения, которые находились при условии $\sum_{i=1}^{12} N_i = 1$. На рис. 4 представлены зависимости неравновесных чисел заполнения состояний системы «электроны + магнитная примесь», N , от энергии электрического поля смещения, eV , при $h = 0$.

Для определенности предположим, что в равновесном случае ($t_L = t_R = 0$) основным состоянием рассматриваемой системы при $D > 0$ являлось состояние без электронов с $S^z = 0, \psi_1 (N_1 \approx 1)$. Тогда в неравновесных условиях, когда активизируются процессы многократного неупругого рассеяния, должны заселяться верхние по энергии состояния магнитной примеси. Это продемонстрировано на рис. 4. Видно, что N_1 начинает существенно отклоняться от равновесного значения уже при нулевом напряжении. Чтобы понять причину возникающих при $V \neq 0$ особенностей в поведении чисел заполнения и тока, обратимся к соответствующим аналитическим выражениям (46) и (47). Поскольку $W/2 \gg E_\alpha, eV/2 \gg \lambda_\alpha, \kappa_\alpha$, главные эффекты будут иметь место в области $eV/2 \sim E_\alpha$. Действительно, пренебрегая малыми поправками к энергии перехода $\alpha, E_\alpha < 0 (E_\alpha > 0)$, в туннельном режиме можно видеть, что при $eV/2 < E_\alpha$ и $t_L = t_R$ верхний уровень остается незаполненным, $N_m = 0 (N_n = 0)$, а вклад в ток от этого

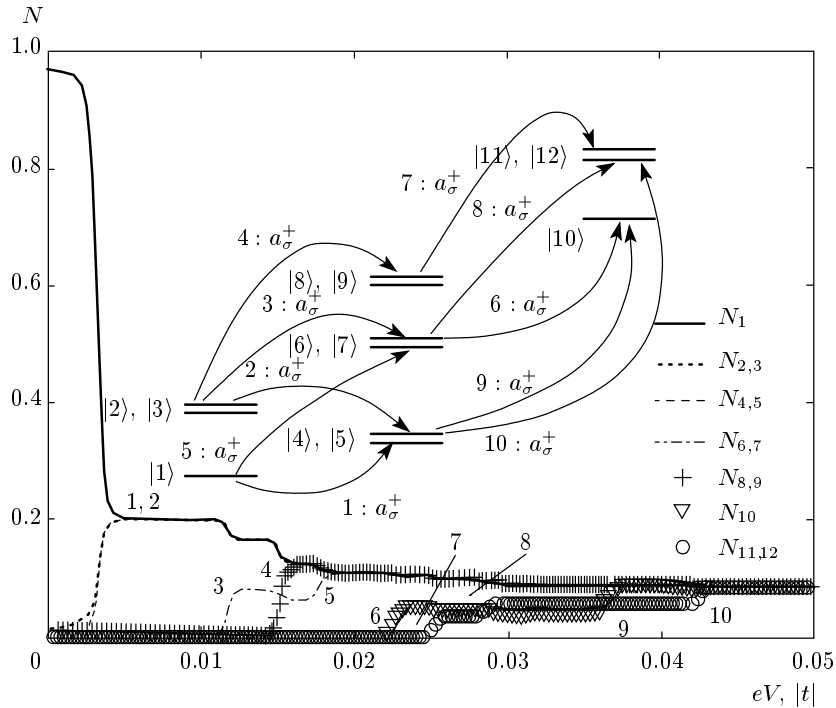


Рис. 4. Зависимость неравновесных чисел заполнения от энергии электрического поля смещения для параметров $t_L = t_R = t/2$, $\varepsilon_d = 10$, $A = 0.1$, $|t|, D = 0.01$, $|t|, U = 0.01$, $T = 0.1$ К, $g = 0.1$, $h = 0.1$. На вставке представлены возможные электронные переходы между уровнями системы

перехода отсутствует, $I_{\alpha\alpha} = 0$. В свою очередь, когда $eV/2 > E_\alpha$, заполнение уровней одинаково, $N_n = N_m$, а вклад в ток от такого канала становится ненулевым, $I_{\alpha\alpha} = 2e\Gamma_{L\sigma}\Gamma_{R\sigma}b_\alpha\gamma_\sigma^2(\alpha)/\Gamma_\sigma$. Вернемся к рис. 4. Наименьшей энергией перехода является энергия $E_{3,5} \approx 0.0013$. Однако, с возрастанием V в области $eV/2 \sim E_{3,5}$ никаких существенных изменений в распределении вероятностей заполнения уровней и ВАХ (см. ниже пунктирную кривую на рис. 6a) не наблюдается. Это связано с тем, что лежащие ниже состояния $\psi_{4,5}$ (см. штриховую кривую на рис. 4) практически не заполнены. Заселенность этих состояний становится значительной, только когда энергия электрического поля подходит к удвоенной энергии следующего перехода ($E_{1,4} \approx -0.0017$). В результате одновременно заполняются состояния $\psi_{4,5}$ и $\psi_{2,3}$ (пунктирная кривая на рис. 4). Как видно, соответствующая ступенчатая особенность появляется и в ВАХ.

На вставке рис. 4 показано расположение всех уровней энергии системы при выбранных параметрах. Стрелками с цифрами показаны возможные переходы с изменением числа электронов на единицу. При этом номер перехода соответствует номеру ступенчатой особенности на графике. В частно-

сти, стрелками с цифрами 1 и 2 обозначены обсуждавшиеся выше переходы между состояниями безэлектронного и одноэлектронного секторов гильбертова пространства. При возрастании напряжения в транспорт включаются все новые каналы, относящиеся к одноэлектронным и двухэлектронным состояниям, и при больших eV заполнение всех состояний становится равновероятным. ВАХ имеет характерный для режима слабой связи наноструктуры с контактами ступенчатый вид, наблюдаемый в экспериментах [28, 29]. Существенно, что пренебрежение процессами неравновесного возбуждения магнитного атома в результате неупругого рассеяния носителей приводит к значительно более простой ВАХ (см. ниже штриховую кривую на рис. 6a).

При включении магнитного поля, как следует из выражения (12), происходит снятие вырождения по энергии для состояний системы с противоположными проекциями суммарного спина. Следовательно, становятся не равными друг другу и энергии переходов, связанные с этими состояниями. Тогда возбужденное состояние с проекцией суммарного спина, имеющей тот же знак, что и магнитное поле, активизируется раньше состояния, обладающего суммарной проекцией спина обратного знака. Данный

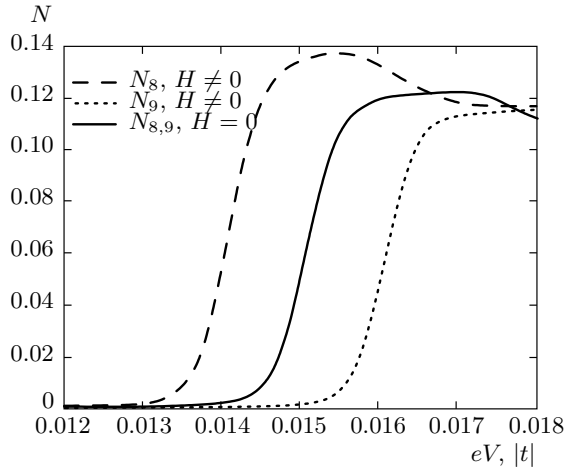


Рис. 5. Модификация зависимостей чисел заполнения $N_{8,9}$ eV в магнитном поле $h = \hbar \omega_c / 4 |t|$ для параметров рис. 4

факт наглядно изображен на рис. 5, где приведены зависимости $N_{8,9}(eV)$ без учета (сплошная кривая) и с учетом (соответственно штриховая и пунктирные кривые) магнитного поля. Аналогичным образом при включении магнитного поля ведут себя неравновесные числа заполнения и других состояний, вырожденных при $h = 0$. В результате увеличивается число кулоновских ступенек в ВАХ, что хорошо видно из сравнения сплошной ($h \neq 0$) и пунктирной ($h = 0$) кривых на рис. 6а. Модификация ВАХ приводит к тому, что на места плато ВАХ без магнитного поля могут приходиться скачки тока при $h \neq 0$. Таким образом, рассматриваемая система обладает магнитосопротивлением, $MR = (G(h)/G(0) - 1) \cdot 100\%$ ($G = dI/dV$ — дифференциальная проводимость), амплитуда которого достигает величин порядка $10^5\%$ (см. вставку на рис. 6а).

ВАХ на рис. 6б при $h = 0$ и $h \neq 0$ (соответственно пунктирная и сплошная кривые), построенные при обратном знаке параметра анизотропии магнитной примеси ($D < 0$), имеют участки с отрицательной дифференциальной проводимостью (ОДП). Два таких участка подробно представлены на вставке рис. 6б. Как уже отмечалось выше, при энергиях электрического поля $eV/2 \sim E_\alpha$ в ВАХ возникает скачок порядка $I_{\alpha\alpha} = 2e\Gamma_{L\sigma}\Gamma_{R\sigma}b_\alpha\gamma_\sigma^2(\alpha)/\Gamma_\sigma$, связанный с заселением нового возбужденного состояния системы. Однако в силу того, что и в неравновесном режиме должно выполняться условие полноты, начинают уменьшаться числа заполнения, не равные нулю при меньших напряжениях. Поэтому даже при

включении дополнительного канала для электронного транспорта полный ток может убывать. В результате условие для возникновения ОДП имеет следующий вид:

$$\sum_{\beta} I_{\beta\beta}(V_1) > \sum_{\beta} [I_{\beta\beta}(V_2) + I_{\alpha\alpha}(V_2)], \quad (48)$$

$$V_1 < V_2.$$

Таким образом, изменяя кристаллическое окружение магнитного атома или молекулы, например, помещая их в топологически неэквивалентные места на подложке [17], можно добиться значительной модификации транспортных свойств систем атомного масштаба.

Если взаимное изменение «нового» и «старых» чисел заполнения будет особенно значительным, то это приведет к усилению эффекта ОДП. Подобная картина наблюдается в присутствии асимметрии туннельной связи контактов со структурой, $t_L > t_R$, $\Gamma_{L\sigma} \gg \Gamma_{R\sigma}$. На рис. 7 изображены ВАХ для случая асимметричной связи магнитной структуры с контактами в нулевом (пунктирная кривая) и ненулевом (сплошная кривая) магнитных полях. В области $-eV/2 \sim E_{6,11} \approx 0.01$ ток изменяется сильнее, чем в аналогичной ситуации, $eV/2 \sim E_{6,11}$, при $t_L = t_R$ (см. вставку на рис. 6б). Для того чтобы понять причину этого различия, проанализируем эволюцию заселенностей состояний системы. При $V < 0$ преобладает поток электронов в область правого контакта. Однако в рассматриваемых условиях переход электронов с уровня устройства в правый контакт в значительной степени подавлен, и при достаточно больших абсолютных значениях V происходит накопление электронов в устройстве и, как следствие, заполнение преимущественно двухэлектронных состояний, N_{10} , N_{11} и N_{12} , с одновременным резким уменьшением заселенности остальных состояний (см. область $eV < -0.02$ на рис. 8). Поэтому уменьшение модуля тока происходит на величину большую по сравнению со случаем симметричной туннельной связи, $t_L = t_R$. Существенно, что аналогичный эффект ОДП отсутствует при напряжении обратной полярности, $eV/2 \sim E_{6,11}$. Для $V > 0$ в силу уже отмеченных причин в основном заполняются только безэлектронные состояния, N_1 , N_2 и N_3 . В результате полный ток практически не меняется при $eV/2 \sim E_{6,11}$ вследствие того, что данный переход осуществляется между одно- и двухэлектронными состояниями.

В заключение отметим, что в рассмотренной системе с высокой вероятностью реализуется переключение между состояниями с различной проек-

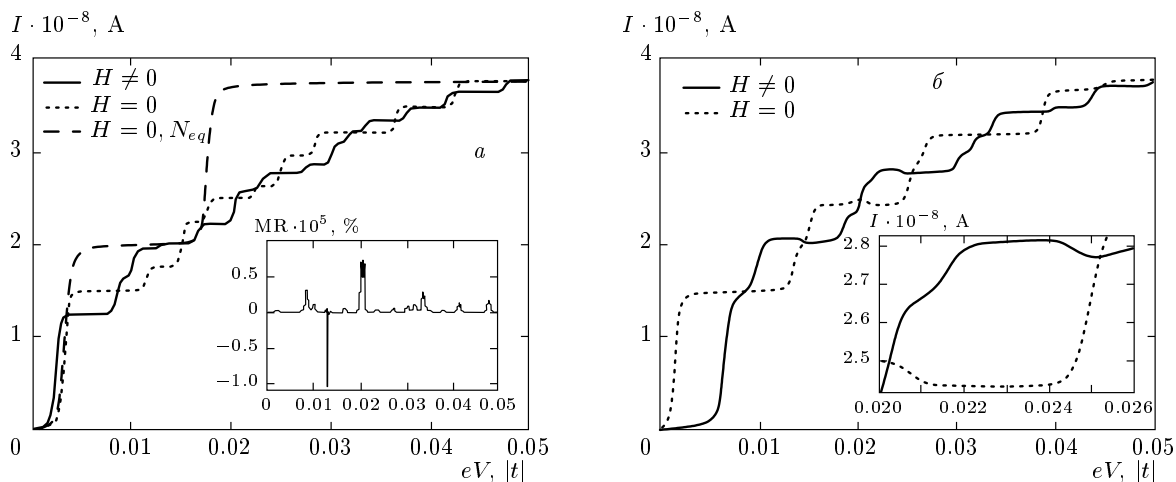


Рис. 6. ВАХ магнитного атома для параметров рис. 5: а) $D = 0.5, t_L = t_R = t$; б) $D = 0.5, t_L = 0.5t, t_R = t$. На вставках рис. а и б — соответственно магнитосопротивление структуры и участок ВАХ с ОДП

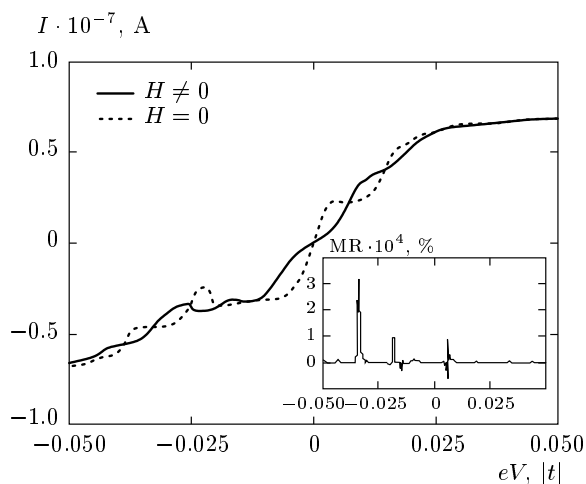


Рис. 7. Влияние асимметрии связи магнитного атома с контактами на ВАХ для параметров рис. 5, $t_L = t/2, t_R = t/4, D = 0.5, t_L = t/2$. На вставке: магнитосопротивление структуры

цией суммарного спина S_{tot}^z . Зависимости $S_{tot}^z(eV)$ при температурах $T = 1$ К (сплошная кривая) и $T = 10$ К (штриховая кривая) представлены на рис. 9. Поведение S_{tot}^z при более низких температурах свидетельствует о том, что при энергиях электрического поля $-0.075 \leq eV \leq -0.05$ система находится в суперпозиции трех двухэлектронных состояний с суммарной проекцией спина, равной нулю. В интервале $-0.01 < eV < -0.005$ проекция суммарного спина равна 1/2; при $-0.005 < eV < 0.005$ с вероятностью свыше 90% реализуется состояние

без электронов с $S_{tot}^z = 1$. При $eV = 0.05$ снова преимущественно заселены три состояния с $S_{tot}^z = 0$. При этом усиление тепловых флуктуаций в системе, как и следовало ожидать, приводит к ослаблению эффекта переключения между спиновыми состояниями (см. штриховую кривую на рис. 9). Подобная возможность управления магнитным состоянием объекта на атомном уровне под действием внешнего электрического поля может оказаться перспективной для приложений записи и хранения информации в нанoeлектронике.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное в работе развитие теории квантового транспорта электронов при учете процессов многократного рассеяния через магнитные структуры атомного масштаба основано на применении метода Келдыша и диаграммной техники для операторов Хаббарда. Использование атомного представления позволило показать, что задача о вычислении туннельного тока сводится к задаче о нахождении спектральных функций устройства. Определение этих функций осуществлялось на основе неравновесной диаграммной техники для операторов Хаббарда, примененной к многоуровневой системе с неэквидистантным энергетическим спектром и с эффективным взаимодействием, зависящим от времени.

Такая концепция была применена к исследованию транспортных свойств магнитной примеси, находящейся в туннельном контакте между двумя па-

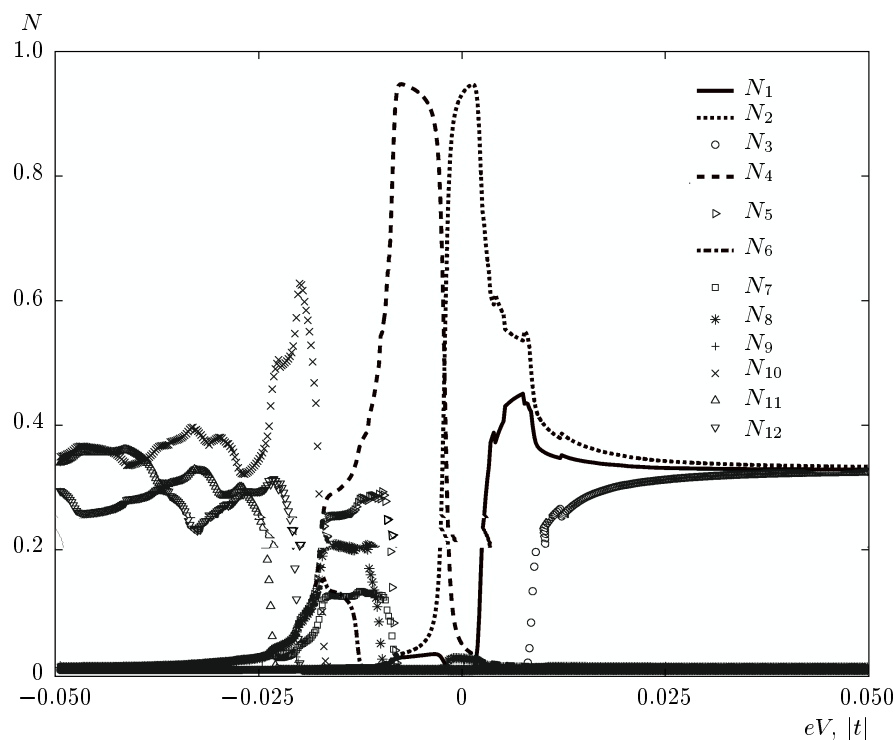


Рис. 8. Неравновесные числа заполнения системы в случае асимметричной связи магнитного атома с контактами для параметров рис. 5, $t_L = t/2$, $t_R = t_L/2$

рамагнитными металлами во внешнем магнитном поле при конечных температурах. Влияние подложки рассматривалось как воздействие кристаллического поля на состояния магнитной примеси и моделировалось посредством введения в гамильтониан слагаемого, описывающего одноионную анизотропию с параметром D .

Основная задача проведенных исследований была связана с учетом процессов многократного неупругого рассеяния электронов проводимости на магнитной примеси в условиях неравновесного распределения заселенности состояний (чисел заполнения). Такие процессы приводят к тому, что вклад в квантовый транспорт электронов начинают давать и те состояния, которые при равновесном распределении были бы не заселены и соответствующий токовый канал был бы неэффективен. Таким образом, процессы многократного отражения, делая возможными переходы устройства из возбужденных состояний в еще более высоко лежащие по энергии состояния [10], проявляются как ренормировка ВАХ.

Численное решение системы кинетических уравнений для чисел заполнения и последующие вычисления тока показали, что ВАХ магнитной атом-

ной структуры имеет характерные для эффекта кулоновской блокады особенности в форме ступенек, полученные ранее в экспериментах [28, 29]. Показано, что при включении магнитного поля, когда происходит снятие вырождения по энергии переходов между состояниями для электронов с проекциями спинов $+1/2$ и $-1/2$, в ВАХ возникают наблюдаемые экспериментально тонкие особенности в форме новых изгибов. Вследствие этого возникает большое магнитосопротивление у примесного атома ($MR \sim 10^5\%$).

Проведенные расчеты показали, что при энергиях электрического поля смещения порядка энергии перехода E_α в рассмотренной системе возникает эффект ОДП. При его формировании существенными являются два фактора. Первый из них связан с уже отмечавшимся влиянием процессов неупругого многократного рассеяния. Второй фактор обусловлен согласованным характером поведения неравновесных чисел заполнения системы, когда из-за условия полноты диагональных операторов Хаббарда возникает требование на неравновесные числа заполнения: их сумма должна равняться единице. В работе показано, что эффект ОДП при практической реализации может быть усилен как за счет измене-

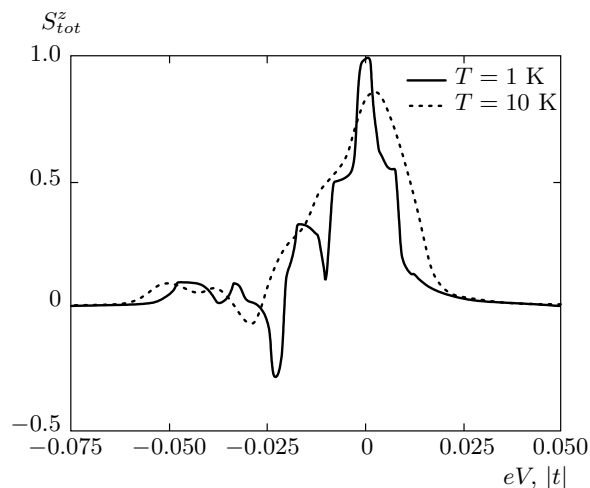


Рис. 9. Проекция суммарного спина системы S_{tot}^z как функция энергии электрического поля смещения eV для параметров рис. 8

ния кристаллического окружения магнитной примеси, так и за счет асимметричной связи с контактами. В последнем случае продемонстрирована возможность переключения между конфигурациями системы магнитная примесь + электроны, обладающими различными проекциями суммарного спина.

Проведенный анализ влияния процессов многократного рассеяния на квантовый транспорт электронов через анизотропный атом был выполнен для частного случая, когда направление магнитного поля коллинеарно оси анизотропии. В этом случае, как уже отмечалось, происходит существенное упрощение решения системы уравнений для неравновесных функций Грина.

В неколлинеарном случае полные спектральные функции устройства нельзя, строго говоря, классифицировать по проекции спинового момента. При этом каждая функция устройства будет содержать все переходы, соответствующие параметрам представления $\gamma_{\uparrow}(\alpha)$ и $\gamma_{\downarrow}(\alpha)$. В этих условиях увеличение магнитного поля будет сказываться как на смещении энергий переходов, так и на их интенсивности. Следует, однако, подчеркнуть, что качественные особенности влияния магнитного поля на транспортные характеристики рассмотренной системы при учете эффектов многократного отражения достаточно полно проявляются в коллинеарной геометрии.

Работа выполнена в рамках Программы Президиума РАН «Квантовые мезоскопические и неупо-

рядоченные системы», при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 13-02-00523, 13-02-98013, 14-02-31280). Работа одного из соавторов (С. В. А.) выполнена при поддержке гранта Президента РФ (МК-526.2013.2) и стипендии Президента РФ (СП-6361.2013.5).

ЛИТЕРАТУРА

1. С. Н. Вдовичев, Б. А. Грибков, С. А. Гусев и др., Письма в ЖЭТФ **94**, 418 (2011).
2. I. V. Rozhansky, N. S. Averkiev, and E. Lahderanta, Phys. Rev. B **85**, 075315 (2012).
3. Y. Makhlin, G. Schon, and A. Shnirman, Rev. Mod. Phys. **73**, 357 (2001).
4. В. Ф. Гантмахер, В. Т. Долгополов, УФН **180**, 3 (2010).
5. A. K. Feofanov, V. A. Oboznov, V. V. Bol'ginov et al., Nature Phys. **6**, 593 (2010).
6. J. Park, A. N. Pasupathy, J. I. Goldsmith et al., Nature **417**, 722 (2002).
7. A. J. Heinrich, J. A. Gupta, and C. P. Lutz, Science **306**, 466 (2004).
8. L. Besombes, Y. Leger, L. Maingault et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 207403 (2004); Phys. Rev. B **71**, 161307 (2005).
9. C. F. Hirjibehedin, C. P. Lutz, and A. J. Heinrich, Science **312**, 1021 (2006).
10. S. Loth, K. von Bergmann, M. Ternes et al., Nature Phys. **6**, 340 (2010).
11. S. Loth, S. Baumann, C. P. Lutz et al., Science **335**, 196 (2012).
12. K. Kikoin, and Y. Avishai, Phys. Rev. Lett. **86**, 2090 (2001).
13. P. I. Arseyev, N. S. Maslova, and V. N. Mantsevich, Письма в ЖЭТФ **94**, 422 (2011).
14. H. Ueba, T. Mii, and S. G. Tikhodeev, Surf. Sci. **601**, 5220 (2007).
15. П. И. Арсеев, Н. С. Маслова, УФН **180**, 1197 (2010).
16. N. Tsukahara, K.-I. Noto, M. Ohara et al., Phys. Rev. Lett. **102**, 167203 (2009).
17. A. F. Otte, M. Ternes, K. von Bergmann et al., Nature Phys. **4**, 847 (2008).

18. В. В. Вальков, С. В. Аксенов, Е. А. Уланов, Письма в ЖЭТФ **98**, 459 (2013).
19. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975).
20. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
21. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ **47**, 1515 (1964).
22. Р. О. Зайцев, *Введение в современную кинетическую теорию: Курс лекций*, КомКнига, Москва (2007).
23. J. Fransson, O. Eriksson, and I. Sandalov, Phys. Rev. Lett. **88**, 226601 (2002).
24. В. В. Вальков, С. В. Аксенов, ЖЭТФ **140**, 305 (2011); В. В. Вальков, С. В. Аксенов, Е. А. Уланов, ЖЭТФ **143**, 984 (2013).
25. В. В. Вальков, Д. М. Дзэбисашвили, ЖЭТФ **134**, 791 (2008).
26. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, ФНТ **11**, 951 (1985).
27. S. G. Tikhodeev and H. Ueba, in *Problems of Condensed Matter Physics*, ed. by A. L. Ivanov and S. G. Tikhodeev, Clarendon Press, Oxford (2008).
28. H. B. Heersche, Z. de Groot, J. A. Folk et al., Phys. Rev. Lett. **96**, 206801 (2006).
29. M.-H. Jo, J. E. Grose, K. Baheti et al., Nano Lett. **6**, 2014 (2006).
30. J. Gores et al., Phys. Rev. B **62**, 2188 (2000).
31. I. G. Zacharia et al., Phys. Rev. B **64**, 155311 (2001).
32. C. F. Hirjibehedin, C.-Y. Lin, A. F. Otte et al., Science **317**, 1199 (2007).
33. K. Park, and M. R. Pederson, Phys. Rev. B **70**, 054414 (2004).
34. F. Qu and P. Hawrylak, Phys. Rev. Lett. **95**, 217206 (2005).