

# Квантовый транспорт через многоуровневую магнитную структуру при учете процессов многократного неупругого рассеяния в магнитном поле

В.В. Вальков<sup>1</sup>, С.В. Аксенов<sup>1</sup>, Е.А. Уланов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, г. Красноярск, 660036, Россия

<sup>2</sup>Сибирский государственный аэрокосмический университет, г. Красноярск, 660014, Россия

E-mail: vvv@iph.krasn.ru, asv86@iph.krasn.ru

Статья поступила в редакцию 6 октября 2014 г., опубликована онлайн 22 декабря 2014 г.

Представлено решение задачи о квантовом транспорте электронов через магнитный атом, адсорбированный в разломный контакт между металлическими парамагнитными электродами. В соответствии с экспериментальными данными считалось, что электроны проводимости испытывают неупругое рассеяние на адсорбате, связанное с инициируемыми  $s$ - $d(f)$ -обменным взаимодействием переходами между магнитными подуровнями. При получении общего выражения, описывающего ток через многоуровневую структуру при конечных температурах, для вычисления неравновесных функций Грина применен метод Келдыша. Введение атомного представления позволило точно учесть неэквидистантную структуру энергетического спектра магнитного атома и применить теорему Вика для построения неравновесной диаграммной техники для операторов Хаббарда. Показано, что в магнитном поле вольт-амперные характеристики магнитного адатома с туннельной связью при низких температурах содержат участки с отрицательной дифференциальной проводимостью.

Представлено розв'язок задачі про квантовий транспорт електронів через магнітний атом, адсорбований в розломний контакт між металевими парамагнітними електродами. Відповідно до експериментальних даних вважалося, що електрони провідності випробовують непружне розсіяння на адсорбаті, яке пов'язано із переходами між магнітними підрівнями, які ініціюються  $s$ - $d(f)$ -обмінною взаємодією. При отриманні загального виразу, який описує струм через багаторівневу структуру при кінцевих температурах, для обчислення нерівноважних функцій Гріна застосовано метод Келдиша. Введення атомного уявлення дозволило точно врахувати нееквідистантну структуру енергетичного спектру магнітного атома та застосувати теорему Віка для побудови нерівноважної діаграмної техніки для операторів Хаббарда. Показано, що в магнітному полі вольт-амперні характеристики магнітного адатома з тунельним зв'язком при низьких температурах містять ділянки з негативною диференціальною провідністю.

PACS: 73.43.Jn Туннелирование;

73.63.-b Электронный транспорт в наноразмерных материалах и структурах.

Ключевые слова: техника Келдыша, атомное представление, отрицательная дифференциальная проводимость.

## 1. Введение

Перспективы создания электронных устройств, функционирующих на масштабах отдельных молекул и атомов, ставят комплекс задач по изучению кинетических процессов в таких системах [1,2]. При транспорте электронов важную роль играют их зарядовые и спиновые корреляции [3,4], а также процессы неупругого рассеяния на самом нанообъекте, обладающем внутренними степенями свободы [5].

Одни из активно исследуемых систем — магнитные структуры, состоящие из магнитных атомов или молекул (Mn, Co, Fe, фталоцианины и т.д.). Эти объекты осаждаются в область разломного контакта между металлическими электродами [6–8] или адсорбируются на подложку и зондируются сканирующим туннельным микроскопом (СТМ) [9–11]. Экспериментальные исследования показали, что наличие спин-флип процессов при неупругом рассеянии транспортируемых

электронов на таких системах приводит к возбуждению последних [7,9]. В результате, взаимодействие адсорбированных на поверхность атомов и молекул с транспортируемыми частицами и внешними полями позволяет реализовать на практике как стабильные магнитные и зарядовые состояния у этих систем, так и обеспечить контролируемое переключение между ними [11,12]. Это, в частности, делает возможным создание устройств энергонезависимой магнитной памяти с применением структур подобного рода [13]. Кроме того, вследствие зависимости потенциального профиля от проекции спина транспортируемого электрона магнитные атомные структуры проявляют спин-фильтрационные свойства [14].

Присутствие локального окружения приводит к зависимости магнитных и, как следствие, транспортных свойств наносистем от геометрической структуры подложки и места нахождения адсорбата на ней [15,16]. Расчеты из первых принципов показывают, что одни и те же магнитные атомные структуры могут обладать различными магнитными свойствами в зависимости от подложки, на которую они адсорбированы [17–19]. Характерный пример проявления анизотропии магнитных свойств адсорбата — эволюция пика Кондо в дифференциальной проводимости при изменении локального окружения [20,21].

В настоящей работе представлено развитие теории квантового транспорта через структуру атомного масштаба, учитывающее два существенных фактора. Использование атомной статистики [22,23] позволило не просто модифицировать метод неравновесных функций Грина и сформулировать диаграммную технику Келдыша [24] для системы с несколькими взаимодействиями (связь с контактами, неупругое рассеяние электронов проводимости на магнитной примеси, кулоновское взаимодействие), но и просуммировать вклады в ток от всех процессов рассеяния по параметрам связи с контактами. В результате такого подхода получено выражение, описывающее электронный ток через многоуровневую структуру с большим числом неэквидистантных переходов при конечных температурах. В качестве частного случая рассмотрены транспортные свойства магнитного адатома в режиме туннельной связи и низких температур. Показано, что учет процессов многократного неупругого рассеяния приводит к неравновесной заселенности возбужденных состояний системы «адатом+электроны», зависящей от приложенного напряжения. Продемонстрировано, что отрицательная дифференциальная проводимость (ОДП) в вольт-амперных характеристиках (ВАХ) может возникать не только при изменении параметра магнитной анизотропии адатома [25,26], но и при включении магнитного поля.

## 2. Исследуемая система и ее гамильтониан

Предположим, что магнитный атом со спином  $S = 1$  адсорбируется на поверхность в область между металлическими парамагнитными контактами (так называемая геометрия разломного контакта, см. рис. 1). В результате за счет спин-орбитального взаимодействия с электронами подложки возникает анизотропия магнитных свойств адсорбата [20]. Туннельный транспорт электронов через такую систему рассматривается при наличии внешнего магнитного поля  $\mathbf{H}$ .

Гамильтониан системы запишем в виде

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

Операторы  $\hat{H}_L$  и  $\hat{H}_R$  в выражении (1) описывают электроны проводимости левого и правого металлических контактов соответственно,

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

где  $c_{k\sigma}^\dagger$  ( $d_{p\sigma}^\dagger$ ) — оператор рождения электрона в левом (правом) контакте с волновым вектором  $k$  ( $p$ ) и проекцией спина  $\sigma$ ;  $\xi_{L(R)k\sigma} = \varepsilon_{L(R)k} - \sigma g_e \mu_B H - \mu$  — одноэлектронные энергии в левом (правом) контакте соответственно, отсчитанные от химического потенциала  $\mu$  и учитывающие влияние магнитного поля на электрон с проекцией спина  $\sigma = \pm 1/2$ ;  $g_e$  — электронный  $g$ -фактор в контактах,  $\mu_B$  — магнетон Бора. Для последующего описания транспортных свойства магнитного адатома важно, что контакты предполагаются выполненными из однозонных металлов 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.

Центральная область (область устройства), где находится магнитный объект, описывается слагаемым  $\hat{H}_D$ :

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

где  $\xi_{d\sigma} = \varepsilon_d - \sigma g_e \mu_B H - \mu$  — отсчитанная от химического потенциала спин-зависящая энергия электрона, находящегося на внешней орбитали адатома, во внеш-

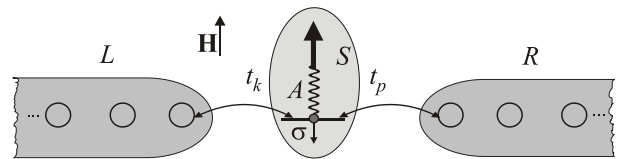


Рис. 1. (Онлайн в цвете) Магнитный адатом со спином  $S$ , расположенный между металлическими контактами, во внешнем магнитном поле  $\mathbf{H}$ .

нем магнитном поле  $H$ ;  $\varepsilon_d$  — одноэлектронная энергия на внешней орбитали адатома;  $n_\sigma = a_\sigma^\dagger a_\sigma$  — оператор числа электронов на уровне устройства с проекцией спина  $\sigma$ ;  $a_\sigma^+$  — оператор рождения электрона на внешней орбитали адатома с проекцией спина  $\sigma$ ; параметр  $U$  характеризует хаббардовское отталкивание двух электронов с противоположными проекциями спинов. Влияние кристаллического окружения на магнитные свойства адатома или примеси моделируется параметром одноосной анизотропии  $D$ . Действие магнитного поля на энергетическую структуру примесного центра с эффективным  $g$ -фактором описывается посредством зеемановского слагаемого в (3). Взаимосвязь между спиновыми степенями свободы транспортируемого электрона и адатома осуществляется через механизм  $s$ - $d(f)$ -обменной связи и описывается последним слагаемым в (3), в котором  $\mathbf{S}$  — векторный оператор спинового момента атома, а  $\boldsymbol{\sigma}$  — векторный оператор спина транспортируемого электрона. Параметр  $A$  определяет интенсивность  $s$ - $d(f)$ -обменной связи.

Взаимодействие трех частей системы, описанных выше, определяется оператором  $\hat{T}$  в (1). Это слагаемое учитывает туннелирование электронов между контактами и устройством:

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

где  $t_{Lk}$ ,  $t_{Rp}$  — параметры связи левого и правого контактов с адатомом соответственно. Наличие оператора  $\hat{V}_\phi$  в полном гамильтониане системы обусловлено приложением к металлическим контактам напряжения смещения  $V$ :

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

### 3. Гамильтониан многоуровневой структуры в атомном представлении

Вычисление транспортных характеристик магнитного адатома по методу Келдыша, как известно, предполагает построение диаграммных рядов для системы неравновесных функций Грина. Использование для этих целей гамильтониана невозмущенной системы  $\hat{H}_0$  ( $\hat{H}_0 = \hat{H}_L + \hat{H}_R + \hat{H}_D$ ) в представлении фермиевских операторов вторичного квантования существенно затрудняет процесс из-за недиагональной в этом представлении структуры оператора  $\hat{H}_D$ . Отмеченную проблему можно преодолеть посредством записи оператора  $\hat{H}_D$  в атомном представлении. Для этого базисные векторы гильбертова пространства состояний определим как собственные векторы  $|\psi_n\rangle$  гамильтониана устройства  $\hat{H}_D$ , т.е.  $\hat{H}_D |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$ . Тогда введение операторов Хаббарда  $X^{nm} = |\psi_n\rangle\langle\psi_m|$  по-

зволяет записать гамильтониан магнитного адатома в диагональной форме:

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

Приведем явный вид собственных векторов  $|\psi_n\rangle$  и собственных энергий  $E_n$  оператора  $\hat{H}_D$ . Рассматриваемая система имеет двенадцать уровней ( $n = 1, \dots, 12$ ). Три состояния — безэлектронные и отличаются проекцией спина адатома  $S^z$ :

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

Здесь и в дальнейшем кет-векторы в правых частях определяют состояние с заданным числом электронов (первое число) и проекции спина адатома (второе число).

В одноэлектронном секторе присутствуют шесть состояний

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

первый индекс кет-вектора показывает ориентацию спина электрона, находящегося на внешней орбитали адатома. Коэффициенты разложения имеют вид

$$\sin \Theta_{\pm} = \text{sgn}(A) \sqrt{\frac{1+x_{\pm}}{2}}, \quad \cos \Theta_{\pm} = \sqrt{\frac{1-x_{\pm}}{2}}, \quad (9)$$

$$x_{\pm} = \Delta_{\pm}/v_{\pm}, \quad v_{\pm} = \sqrt{\Delta_{\pm}^2 + A^2/2},$$

$$\Delta_{\pm} = \Delta \pm \left(\frac{g}{2} - 1\right) h, \quad \Delta = \frac{A}{4} - \frac{D}{2}, \quad h = \mu_B H.$$

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:

$$\begin{aligned} \sin \Theta_{\pm} &\approx \sin \Theta \pm \left(\frac{g}{2} - 1\right) h \frac{1-x}{2v} \sin \Theta, \\ \cos \Theta_{\pm} &\approx \cos \Theta \mp \left(\frac{g}{2} - 1\right) h \frac{1+x}{2v} \cos \Theta, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\sin \Theta = \text{sgn}(A) \sqrt{\frac{1+x}{2}}, \quad \cos \Theta = \sqrt{\frac{1-x}{2}},$$

$$x = \Delta/v, \quad v = \sqrt{\Delta^2 + A^2/2}.$$

Базисные векторы двухэлектронного сектора определяются выражениями

$$|\psi_1 0\rangle = |2, 0\rangle, \quad |\psi_{11,12}\rangle = |2, \pm 1\rangle. \quad (11)$$

Собственные значения энергии устройства  $E_n$  имеют следующий вид:

$$E_1 = 0, \quad E_{2(3)} = D \mp gh,$$

$$E_{4(5)} = \xi_d \uparrow(\downarrow) - \Delta_{\pm} - v_{\pm}, \quad E_{6(7)} = \xi_d \uparrow(\downarrow) - \Delta_{\pm} + v_{\pm}, \quad (12)$$

$$E_{8(9)} = \xi_d \uparrow(\downarrow) + D + A/2 \mp gh,$$

$$E_{10} = 2\xi_d + U, \quad E_{11(12)} = 2\xi_d + U + D \mp gh.$$

Как видно из выражений для собственных энергий  $E_n$  изолированного устройства, в ненулевых магнитных полях происходит расщепление ряда уровней, отличающихся знаком проекции суммарного спина

$\sigma^z + S^z$ . Следовательно, можно ожидать появление дополнительных связанных с эффектом Зеемана особенностей в ВАХ.

Введем представление фермиевского оператора  $a_{\sigma}$  через операторы Хаббарда:

$$\begin{aligned} a_{\sigma} &= \sum_{n,m} \langle \psi_n | a_{\sigma} | \psi_m \rangle X^{n,m} \equiv \\ &\equiv \sum_{n,m} \gamma_{\sigma}(n,m) X^{n,m} \equiv \sum_{\alpha} \gamma_{\sigma}(\alpha) X^{\alpha}, \end{aligned} \quad (13)$$

где  $\gamma_{\sigma}(\alpha)$  — параметры представления оператора  $a_{\sigma}$  через операторы Хаббарда  $X^{\alpha}$ . Для удобства записи последующих выражений произведен переход от суммирования по двум индексам  $(n,m)$  к суммированию по корневому вектору  $\alpha(n,m)$  [23]. Находя параметры представления с помощью выражений (7)–(11), получаем:

$$\begin{aligned} a_{\uparrow} &= \left[ \operatorname{sgn}(A) X^{1,6} - X^{4,11} \right] \sin \Theta_+ + \left[ X^{1,4} + \operatorname{sgn}(A) X^{6,11} \right] \cos \Theta_+ + X^{2,8} + \left[ \operatorname{sgn}(A) X^{7,10} - X^{3,5} \right] \sin \Theta_- + \\ &\quad + \left[ X^{5,10} + \operatorname{sgn}(A) X^{3,7} \right] \cos \Theta_- + X^{9,12}; \\ a_{\downarrow} &= - \left[ X^{2,4} + \operatorname{sgn}(A) X^{6,10} \right] \sin \Theta_+ + \left[ \operatorname{sgn}(A) X^{2,6} - X^{4,10} \right] \cos \Theta_+ + X^{3,9} + \left[ \operatorname{sgn}(A) X^{1,7} + X^{5,12} \right] \sin \Theta_- + \\ &\quad + \left[ X^{1,5} - \operatorname{sgn}(A) X^{7,12} \right] \cos \Theta_- - X^{8,11}. \end{aligned} \quad (14)$$

Как видно из (14), в исследуемой системе возможны десять переходов с изменением числа электронов с проекцией спина  $\sigma = +1/2$  на единицу. Столько же переходов реализуется для электронов с  $\sigma = -1/2$ . Энергии переходов для  $\sigma = +1/2$  с точностью до линейных членов по  $h$  равны

$$\begin{aligned} E_{1,4} &= E_1 - E_4 \approx \Delta + v - \xi_d + g_+ h, \\ E_{1,6} &\approx \Delta - v - \xi_d + g_- h, \\ E_{3,5} &\approx \Delta + v + D - \xi_d + g_- h, \\ E_{3,7} &\approx \Delta - v + D - \xi_d + g_+ h, \\ E_{2,8} &= -(A/2 + \xi_d - h), \\ E_{4,11} &\approx -(\Delta + v + U + D + \xi_d) + g_- h, \\ E_{5,10} &\approx -(\Delta + v + U + \xi_d) + g_+ h, \\ E_{6,11} &\approx -(\Delta - v + U + D + \xi_d) + g_+ h, \\ E_{7,10} &\approx -(\Delta - v + U + \xi_d) + g_- h, \\ E_{9,12} &= -(U - A/2 + \xi_d - h), \end{aligned} \quad (15)$$

где  $g_{\pm} = g/2 \pm \frac{\Delta}{v}(g/2 - 1)$ . Энергии переходов для  $\sigma = -1/2$  записываются аналогично.

#### 4. Выражение для тока через многоуровневую структуру. Применение атомного представления в методе Келдыша

Включение внешнего электрического поля смещения  $eV$  приводит к неравновесным процессам в системе. Для получения диаграммной формы теории возмущений проведем унитарное преобразование гамильтониана системы с помощью унитарного оператора [27]

$$\hat{U} = \exp \left( i \frac{eV}{2} t \sum_{\sigma} n_{\sigma} \right) \exp \left( ieVt \sum_{p\sigma} n_{p\sigma} \right).$$

Новый оператор туннелирования приобретает зависящий от времени вид:

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\text{eff}} &= \sum_{k\sigma, \alpha} t_k \gamma_{\sigma}(\alpha) \left[ e^{-ieVt/2} c_{k\sigma}^+ X^{\alpha} + e^{ieVt/2} X^{-\alpha} c_{k\sigma} \right] + \\ &+ \sum_{p\sigma, \alpha} t_p \gamma_{\sigma}(\alpha) \left[ e^{ieVt/2} c_{p\sigma}^+ X^{\alpha} + e^{-ieVt/2} X^{-\alpha} c_{p\sigma} \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

Выражение для электрического тока можно получить на основе соотношения  $I = e \langle dN_L/dt \rangle$ . Тогда

$$I = ie \sum_{k\sigma, \alpha} t_k \gamma_\sigma(\alpha) \left[ e^{i\frac{eV}{2}t} \left\langle \hat{T}_C X^{-\alpha}(t+\delta) c_{k\sigma}(t) S_C \right\rangle_0 - e^{-i\frac{eV}{2}t} \left\langle \hat{T}_C c_{k\sigma}^+(t+\delta) X^\alpha(t) S_C \right\rangle_0 \right], \quad (17)$$

где  $\delta \rightarrow +0$ ;

$$\hat{T}_C, S_C = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_C d\tau_1 \dots d\tau_n \hat{T}_{eff}(\tau_1) \dots \hat{T}_{eff}(\tau_n)$$

— операторы  $T$ -упорядочения и эволюции на контуре Келдыша  $C$  соответственно (см. рис. 2). Индекс «0» у средних в выражении (17) означает усреднение по состояниям системы без возмущений. Формула (17) учитывает, что при прохождении тока, когда электрон распространяется из контакта в устройство, оно изменяет свое состояние, переходя из одного сектора гильбертова пространства в сектор с числом электронов, большим или меньшим на единицу. Таких переходов может быть много, и все они, вообще говоря, дают отличный от нуля вклад. Подобный учет осуществляется посредством суммирования в (17) по переменной  $\alpha$ . Здесь и в дальнейшем  $\hbar = 1$ .

Входящие в формулу (17) средние выражаются через неравновесные смешанные функции Грина,

$$G_{k\sigma, \alpha}^{+-}(t, t+\delta) = -i \left\langle \hat{T}_C c_{k\sigma}(t) X^{-\alpha}(t+\delta) S_C \right\rangle_0,$$

$$G_{\alpha, k\sigma}^{+-}(t, t+\delta) = -i \left\langle \hat{T}_C X^\alpha(t) c_{k\sigma}^+(t+\delta) S_C \right\rangle_0,$$

где время  $t$  располагается на нижней ветке контура Келдыша  $C$  ( $t \in \tau_+$ ) [24]. Проведя разложение оператора эволюции  $S_C$ , получим

$$G_{k\sigma, \alpha}^{+-}(t, t+\delta) = \sum_{\nu} t_k \gamma_\sigma(\nu) \int_C d\tau G_{k\sigma}(t-\tau) D_{\nu\alpha}(\tau-t-\delta),$$

$$G_{\alpha, k\sigma}^{+-}(t, t+\delta) = \sum_{\nu} t_k \gamma_\sigma(\nu) \int_C d\tau D_{\nu\alpha}(t+\delta-\tau) G_{k\sigma}(\tau-t), \quad (18)$$

где  $G_{k\sigma}^{ab}(\tau-\tau')$  — затравочная функция Грина левого контакта. Ее компоненты после фурье-преобразования имеют вид

$$G_{Lk\sigma}^{++}(\omega) = \frac{n_{Lk\sigma}}{\omega - \xi_{Lk\sigma} - i\delta} + \frac{1 - n_{Lk\sigma}}{\omega - \xi_{Lk\sigma} + i\delta},$$

$$G_{Lk\sigma}^{+-}(\omega) = 2\pi i n_{Lk\sigma} \delta(\omega - \xi_{Lk\sigma}), \quad (19)$$

$$G_{Lk\sigma}^{--}(\omega) = -\frac{n_{Lk\sigma}}{\omega - \xi_{Lk\sigma} + i\delta} - \frac{1 - n_{Lk\sigma}}{\omega - \xi_{Lk\sigma} - i\delta},$$

$$G_{Lk\sigma}^{-+}(\omega) = 2\pi i (n_{Lk\sigma} - 1) \delta(\omega - \xi_{Lk\sigma}).$$

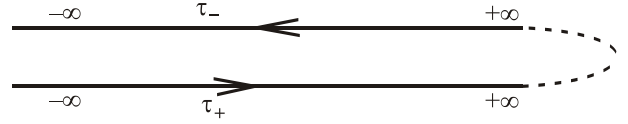


Рис. 2. Временной контур Келдыша  $C$ .

Функция  $D_{\alpha\beta}^{ab}$  в (18) есть полная функция Грина магнитного адатата. Таким образом, после преобразования Фурье промежуточное выражение для тока принимает вид

$$I = e \sum_{k\sigma} t_{Lk}^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left[ G_{Lk\sigma}^{-+}(\omega) W_\sigma^{+-}\left(\omega - \frac{eV}{2}\right) - G_{Lk\sigma}^{+-}(\omega) W_\sigma^{-+}\left(\omega - \frac{eV}{2}\right) \right], \quad (20)$$

где введены спектральные функции устройства

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

Вывод уравнений для  $D_{\alpha\beta}^{ab}$  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  $S_C$ , обращаются в нуль, как только оператор  $\hat{T}_{eff}$  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  $\tilde{S}_C$ :

$$D_{\alpha\beta}^{ab}(\tau-\tau') = -i \left\langle T_C X^\alpha(\tau_a) X^{-\beta}(\tau'_b) \tilde{S}_C \right\rangle_0, \quad (21)$$

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

$$\tilde{S}_C = T_C \exp \left\{ -i \int_C d\tau_1 \int_C d\tau_2 \sum_{\alpha\beta} \tilde{V}_{\alpha\beta}(\tau_1 - \tau_2) X^{-\alpha}(\tau_1) X^\beta(\tau_2) \right\}. \quad (22)$$

Заметим, что аналогичная процедура использована ранее при нахождении гриновских функций квазилокализованных электронов в модели Андерсона [28].

Матричные элементы эффективного взаимодействия имеют вид:

$$\tilde{V}_{\alpha\beta}(\tau_1 - \tau_2) = \sum_{\sigma} \gamma_{\sigma}(\alpha)\gamma_{\sigma}(\beta) \left\{ \sum_k t_{Lk}^2 e^{i\frac{eV}{2}(\tau_1 - \tau_2)} G_{Lk\sigma}(\tau_1 - \tau_2) + \sum_p t_{Rp}^2 e^{-i\frac{eV}{2}(\tau_1 - \tau_2)} G_{Rp\sigma}(\tau_1 - \tau_2) \right\}. \quad (23)$$

Проведенные преобразования показывают, что при нахождении неравновесных функций Грина  $D_{\alpha\beta}^{ab}$  можно воспользоваться диаграммной техникой для операторов Хаббарда [22,23], модифицированной в соответствии с методом Келдыша [24]. В результате удается записать уравнения, учитывающие вклады в  $D_{\alpha\beta}^{ab}$  во всех порядках по параметрам связи с контактами  $t_{Lk}$  и  $t_{Rp}$ . Фактически это означает, что проблема электронного транспорта через многоуровневую структуру решается, принимая во внимание не только процессы последовательного прохождения (sequential tunneling), но и все возможные процессы многократного неупругого рассеяния (inelastic cotunneling).

На рис. 3 в графической форме представлена система уравнений на  $D_{\alpha\beta}^{ab}(\omega)$  (двойная сплошная линия). Сплошной линии соответствуют затравочные функции  $D_{0\alpha}^{ab}(\omega)$ , которые определяются выражениями

$$\begin{aligned} D_{0\alpha}^{++}(\omega) &= \frac{N_n}{\omega + E_{\alpha} + i\delta} + \frac{N_m}{\omega + E_{\alpha} - i\delta}, \\ D_{0\alpha}^{+-}(\omega) &= 2\pi i N_m \delta(\omega + E_{\alpha}), \\ D_{0\alpha}^{-+}(\omega) &= -\frac{N_n}{\omega + E_{\alpha} - i\delta} - \frac{N_m}{\omega + E_{\alpha} + i\delta}, \\ D_{0\alpha}^{--}(\omega) &= -2\pi i N_n \delta(\omega + E_{\alpha}). \end{aligned} \quad (24)$$

Величина  $E_{\alpha}$  обозначает энергетическую разность между уровнями  $n$  и  $m$ , т.е.  $E_{\alpha} = E_n - E_m$  для  $\alpha = \alpha(n, m)$ . Важно отметить, что входящие в  $D_{0\alpha}^{ab}(\omega)$  числа заполнения собственных состояний атома,  $N_n$  и  $N_m$ , являются неравновесными, т.е. зависят как от величины связи с контактами, так и от приложенного напряжения. Это обстоятельство отражено на рис. 3 в виде кружков. Волнистой линии отвечает фурье-образ эффективного взаимодействия (23),

$$\tilde{V}_{\alpha\beta}^{ab}(\omega) = \sum_{\sigma} \gamma_{\sigma}(\alpha)\gamma_{\sigma}(\beta) M_{\sigma}^{ab}(\omega), \quad (25)$$

где

$$M_{\sigma}^{ab}(\omega) = \sum_k t_{Lk}^2 G_{Lk\sigma}^{ab} \left( \omega + \frac{eV}{2} \right) + \sum_p t_{Rp}^2 G_{Rp\sigma}^{ab} \left( \omega - \frac{eV}{2} \right). \quad (26)$$

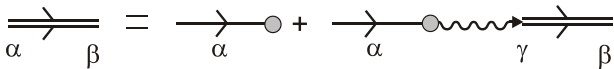


Рис. 3. Уравнение Дайсона для функции Грина  $D_{\alpha\beta}^{ab}(\omega)$ .

Из (25) видно, что зависимость матричных элементов взаимодействия от корневых векторов  $\alpha$  и  $\beta$  имеет расщепленный характер. Это позволяет воспользоваться подходом [29] при решении системы уравнений Дайсона методом Келдыша [24]. Таким образом, находим

$$W_{\sigma}^{+-}(\omega) = -\frac{M_{\sigma}^{+-}(\omega)}{\Delta_{\sigma}(\omega)}, \quad W_{\sigma}^{-+}(\omega) = -\frac{M_{\sigma}^{-+}(\omega)}{\Delta_{\sigma}(\omega)}, \quad (27)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta_{\sigma}(\omega) &= \left\{ \left[ \sum_{\alpha} \gamma_{\sigma}^2(\alpha) D_{0\alpha}^{++}(\omega) \right]^{-1} - M_{\sigma}^{++}(\omega) \right\} \times \\ &\times \left\{ \left[ \sum_{\alpha} \gamma_{\sigma}^2(\alpha) D_{0\alpha}^{--}(\omega) \right]^{-1} - M_{\sigma}^{--}(\omega) \right\} - M_{\sigma}^{+-}(\omega) M_{\sigma}^{-+}(\omega). \end{aligned} \quad (28)$$

В результате общее выражение для тока через многоуровневую структуру записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} I_L &= 2e \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\pi} [n(\omega - eV) - n(\omega)] \times \\ &\times \frac{\Gamma_{L\sigma}(\omega) \Gamma_{R\sigma}(\omega)}{[L_{\sigma}^{-1}(\omega) - \Lambda_{\sigma}(\omega)]^2 + \Gamma_{\sigma}^2(\omega)}, \end{aligned} \quad (29)$$

где

$$\begin{aligned} L_{\sigma}(\omega) &= \sum_{\alpha} \frac{b_{\alpha} \gamma_{\sigma}^2(\alpha)}{\omega + E_{\alpha} - eV/2}, \\ \Lambda_{\sigma} &= \sum_k \frac{t_{Lk}^2}{\omega - \xi_{Lk\sigma}} + \sum_p \frac{t_{Rp}^2}{\omega - \xi_{Rp\sigma} - eV}. \end{aligned} \quad (30)$$

Полученное выражение (29) пропорционально произведению  $t_L^2 t_R^2$  и удовлетворяет симметричным требованиям [30]. В работе, как уже отмечалось, при конкретных расчетах использовано приближение широких зон металлических контактов. В дальнейшем это позволит пренебречь сдвигом  $\Lambda_{\sigma}$ , а также не учитывать частотную зависимость функций уширения уровней  $\Gamma_{\sigma} = \Gamma_{L\sigma} + \Gamma_{R\sigma} = \pi(t_L^2 g_{L\sigma} + t_R^2 g_{R\sigma})$ , где  $t_{L(R)}$  — параметр перескока электрона с последнего узла левого (правого) контакта на уровень магнитного атома;  $g_{L(R)\sigma}$  — спин-зависящая плотность состояний левого (правого) контакта [31]. При численных расчетах для простоты полагаем  $g_{L(R)\sigma} = 1/W$ , так как  $W \gg h$ .

При обсуждении уравнения Дайсона уже отмечалось, что числа заполнения в рассматриваемой системе являются неравновесными, их зависимость от электрического поля смещения определяется из решения системы квантовых кинетических уравнений при условии

$$\sum_{i=1}^{12} N_i = 1,$$

$$N_m = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega D_{\alpha\alpha}^{+-}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{b_{\alpha}^2 \gamma_{\sigma}^2(\alpha)}{(\omega + E_{\alpha} - eV/2)^2} \times$$

$$\times \frac{\Gamma_{L\sigma}(\omega)n(\omega) + \Gamma_{R\sigma}(\omega)n(\omega - eV)}{[1 - \Lambda_{\sigma}(\omega)L_{\sigma}(\omega)]^2 + \Gamma_{\sigma}^2(\omega)L_{\sigma}^2(\omega)}. \quad (31)$$

В формулу (31) не входит суммирование по спиновой переменной. Это связано с тем, что магнитное поле и ось анизотропии коллинеарны. Поэтому для каждого однофермионного перехода  $\alpha = \alpha(n, m)$  из двух параметров представления  $\gamma_{\uparrow}(\alpha)$  и  $\gamma_{\downarrow}(\alpha)$  только один отличен от нуля.

При проведении численных расчетов примем во внимание, что при низких температурах в экспериментах чаще всего реализуется режим слабой (туннельной) связи магнитного адатома с контактами [7,8]. Математически сказанное выражается как малость температуры и уширения уровней энергий по сравнению с расстоянием между этими уровнями:  $T, \Gamma_{\sigma} \ll E_{\alpha}$ . При учете отмеченных соотношений получаем

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

где

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

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

В рассматриваемом режиме основной вклад в туннельный ток вносят диагональные слагаемые  $I \simeq \sum_{\alpha} I_{\alpha\alpha}$ , поэтому

$$I \simeq \frac{2e}{\pi} \frac{\Gamma_{L\sigma} \Gamma_{R\sigma}}{\Gamma_{\sigma}} \sum_{\alpha} b_{\alpha} \gamma_{\sigma}^2(\alpha) \left[ \arctg\left(\frac{\omega_{0\alpha} + eV/2}{\kappa_{\alpha}}\right) - \arctg\left(\frac{\omega_{0\alpha} - eV/2}{\kappa_{\alpha}}\right) \right]. \quad (32)$$

## 5. Анализ полученных результатов

На рис. 4 представлена зависимость неравновесных чисел заполнения  $N_i(eV)$  ( $i = 1, \dots, 12$ ) системы «магнитный адатом + электроны» от электрического поля в режиме туннельной связи при низких температурах. Видно, что  $N_i(eV)$  ведут себя аналогичным образом: увеличение напряжения сопровождается чередованием скачков, когда  $N_i$  претерпевают существенные изменения, и плато, где эти изменения пренебрежимо малы. При этом каждый скачок отвечает активации соответствующего перехода, что хорошо видно из сравнения рис. 4 со схемой возможных переходов, представленной на рис. 5. Для выбранных параметров, совпадающих по порядку величины с полученными в экспериментах [15] и используемыми при численных расчетах [32,33], основное состояние устройства — однофермионный спиновый дублет с проекцией суммарного спина  $\pm 3/2$  (состояния  $|\psi_{8,9}\rangle = |1, \pm 3/2\rangle$ ). Как следствие,  $N_{8,9}(eV \approx 0) \approx 0,5$  на рис. 4 (пурпурная сплошная кривая). Отличие вероятностей  $N_{8,9}$  от значения  $1/2$ , а также остаточная заселенность остальных состояний — прямое следствие неравновесности системы. С ростом энергии электрического поля смещения происходит увеличение энергии электрона, туннелирующего на внешнюю орбиталь адатома. В результате становятся возможными переходы в возбужденные состояния. Первыми заселяются два безэлектронных состояния с  $S^z = \pm 1$ ,  $N_{2,3}$  (черный пунктир), при этом уменьшаются числа заполнения  $N_{8,9}$ . Соответствующее резкое изменение заселенностей обозначено индексом «1a». Сам переход на рис. 5 имеет тот же индекс. Как видно на рис. 4, одновременно с  $N_{2,3}$  возрастают и числа  $N_{4,5}$  (штриховая кривая 2), описывающие одноэлектронные состояния с  $\sigma^z + S^z = \pm 1/2$  и имеющие антисимметричную волновую функцию (8). Это связано с тем, что  $E_{3,5}(E_{2,4}) < E_{2,8}(E_{3,9})$ , и в силу того, что чис-

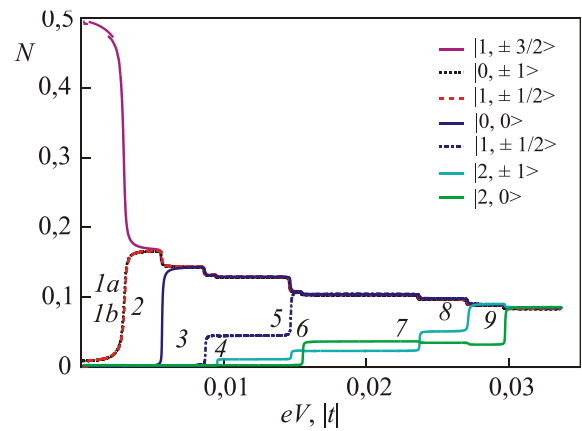


Рис. 4. (Онлайн в цвете) Зависимость неравновесных чисел заполнения от энергии электрического поля для параметров  $t_L = t_R = t/100$ ,  $\varepsilon_d = 0,001|t|$ ,  $A = -0,005|t|$ ,  $U = 0,01|t|$ ,  $D = -0,003|t|$ ,  $T = 0,1$  K,  $h = 0$ .

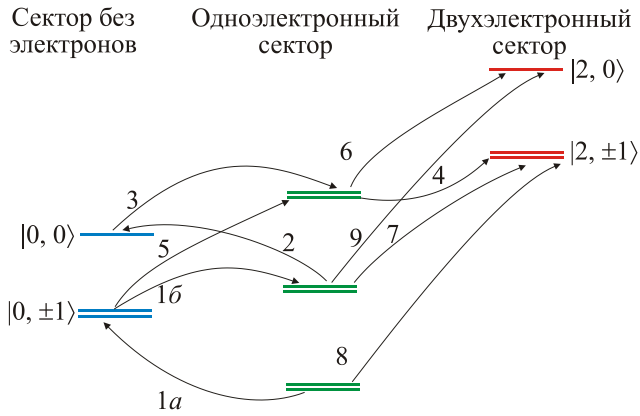


Рис. 5. (Онлайн в цвете) Энергетический спектр и возможные электронные переходы между уровнями системы для параметров рис. 4.

ла  $N_{2,3}$  очень малы при  $eV/2 < E_{2,8}(E_{3,9})$  переход с индексом «1b» «не работает» при этих напряжениях. В соответствии со сказанным, следует ожидать, что каждый переход индуцирует соответствующее резкое изменение заселенностей уровней системы.

На рис. 6 изображена ВАХ магнитного адатома в режиме туннельной связи при низких температурах. Вследствие того, что ток  $I_{\alpha\alpha}$  в канале  $\alpha$  зависит от чисел заполнения (см. (32)), особенности, аналогичные обсуждавшимся выше, появляются и в ВАХ. Наблюдаемая зависимость хорошо известна и представляет собой последовательность кулоновских ступенек [7,8]. Каждая ступенька соответствует включению нового токового канала, вклад от которого в полный ток  $I_{\alpha\alpha}$  равен  $2e\Gamma_{L\sigma}\Gamma_{R\sigma}b_{\alpha}\gamma_{\sigma}^2(\alpha)/\Gamma_{\sigma}$ .

Зеемановское расщепление уровней в системе при ненулевых магнитных полях служит причиной появления дополнительных кулоновских ступенек в ВАХ при включении магнитного поля (кривая 1 на рис. 7). Особенно интересным является то, что при  $h \neq 0$  в ВАХ появляются участки с отрицательной дифференциальной проводимостью (ОДП):  $dG/dV < 0$  (штриховая

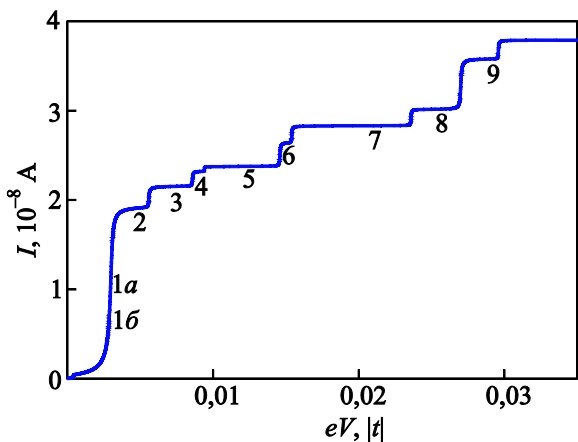


Рис. 6. (Онлайн в цвете) ВАХ магнитного адатома для параметров рис. 4.

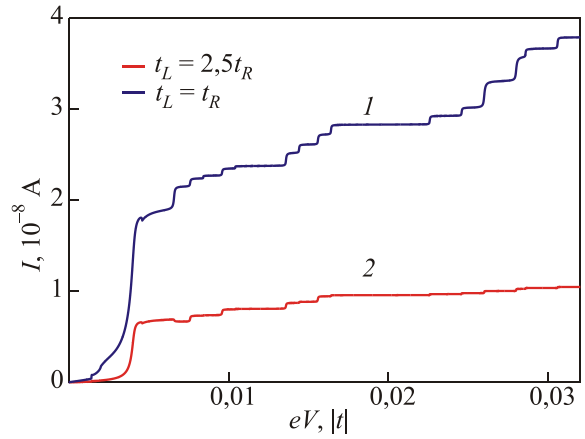


Рис. 7. (Онлайн в цвете) Влияние магнитного поля на ВАХ при симметричной и асимметричной связях с контактами для параметров рис. 4,  $h = 5 \cdot 10^{-4} |t|$ ,  $g = 2$ .

кривая на рис. 8(a)) [7,8]. Падение тока с увеличением напряжения в рассмотренной системе связано с наличием процессов неупругого многократного рассеяния, приводящих к появлению переходов из возбужденных состояний в еще высоколежащие состояния. При этом может реализоваться ситуация, когда вклад нового канала  $I_{\alpha\alpha}$  в полный ток  $I$  из-за малости множителя  $b_{\alpha}\gamma_{\sigma}^2(\alpha)$  оказывается малым. В результате возникающая добавка в ток недостаточна,

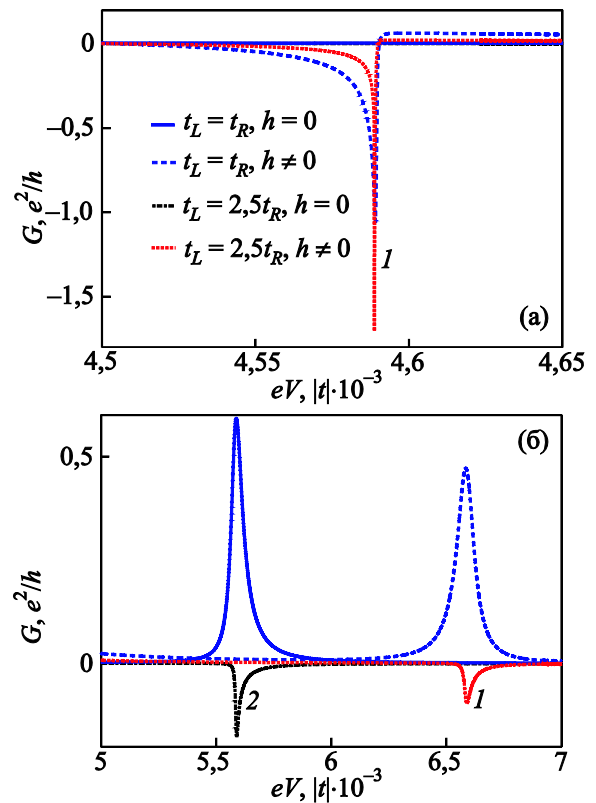


Рис. 8. (Онлайн в цвете) ОДП, индуцированная магнитным полем (а); ОДП, возникающая при асимметрии связи адатома с контактами (б) (использованы параметры рис. 7).



чтобы компенсировать уменьшение тока в остальных каналах. При этом существенную роль играет дополнительный нелинейный фактор, зависящий от условия полноты:  $\sum_{i=1}^{12} N_i = 1$ .

Ранее было показано, что ОДП магнитного адатома, возникающая при изменении параметра анизотропии  $D$ , увеличивается, если связь структуры с контактами становится асимметричной [25,26]. Подобная картина наблюдается и с особенностью, индуцированной магнитным полем (красный пунктир, 1 на рис. 8(a)). В свою очередь, магнитное поле также может выступать в качестве механизма, ослабляющего ОДП. На рис. 8(б) можно видеть, как минимум проводимости, появляющийся при  $t_L \neq t_R$  (черный штрих-пунктир, 2), поднимается, если  $h \neq 0$  (красный пунктир, 1).

## 6. Заключение

В работе представлено развитие теории квантового транспорта через многоуровневую структуру, адсорбированную в разломный контакт между металлическими парамагнитными электродами, в ненулевых магнитных полях при конечных температурах. Особенность проведенных исследований связана с принятием во внимание эффектов многократного неупругого рассеяния электронов проводимости на магнитном адатоме в условиях неравновесности. В результате отмеченных процессов происходит включение возбужденных состояний системы «магнитный адатом + электроны» в квантовый транспорт. Кроме того, учет эффектов многократного рассеяния делает возможными и последующие переходы из уже возбужденных состояний в еще более высоколежащие по энергии состояния [11]. При построении теории возмущения для системы с несколькими взаимодействиями и большим набором неэквидистантных переходов между уровнями было использовано атомное представление. В результате применения диаграммной техники Келдыша, построенной в том числе и на операторах Хаббарда, показано, что ВАХ магнитной атомной структуры в режиме туннельной связи при низких температурах имеет характерные для эффекта кулоновской блокады особенности в форме ступенек. Действие магнитного поля на систему проявляется в снятии вырождения по энергии для переходов электронов с проекциями спинов  $+1/2$  и  $-1/2$ . Это, в свою очередь, приводит к увеличению числа кулоновских ступенек в ВАХ. Установлено, что магнитное поле может как индуцировать ОДП адатома, так и подавлять этот эффект. Причиной ОДП, которая также наблюдается в экспериментах [7,8], является учет процессов многократного неупругого рассеяния и согласованный характер поведения неравновесных чисел заполнения системы, определяемый условием полноты.

Отмечено, что ОДП на практике может быть усилена за счет асимметричной связи с контактами.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН «Квантовые мезоскопические и неупорядоченные системы», Российского фонда фундаментальных исследований (гранты №13-02-00523, №13-02-98013, №14-02-31280).

Один из авторов (С.В.А.) выражает благодарность гранту Президента РФ МК-526.2013.2 и стипендии Президента РФ СП-6361.2013.5 за оказанную поддержку.

1. D. Gatteschi, R. Sessoli, and J. Villain, *Molecular Nanomagnets*, Oxford University Press, Oxford (2006).
2. J.M. Seminario, *Molecular and Nanoelectronics: Analysis, Design and Simulation*, Elsevier, Oxford (2007).
3. P.I. Arseyev, N.S. Maslova, and V.N. Mantsevich, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **142**, 156 (2012).
4. K. Kikoin, and Y. Avishai, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2090 (2001).
5. H. Ueba, T. Mii, and S.G. Tikhodeev, *Surf. Sci.* **601**, 5220 (2007).
6. J.J. Park, A.N. Pasupathy, J.I. Goldsmith, C. Chang, Y. Yaish, J.R. Petta, M. Rinkoski, J.P. Sethna, H.D. Abruna, P.L. McEuen, and D.C. Ralph, *Nature* **417**, 722 (2002).
7. H.B. Heersche, Z. de Groot, J.A. Folk, H.S.J. van der Zant, C. Romeike, M.R. Wegewijs, L. Zobbi, D. Barreca, E. Tondello, and A. Cornia, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 206801 (2006).
8. M.-H. Jo, J.E. Grose, K. Baheti, M.M. Deshmukh, J.J. Sokol, E.M. Rumberger, D.N. Hendrickson, J.R. Long, H. Park, and D.C. Ralph, *Nano Lett.* **6**, 2014 (2006).
9. A.J. Heinrich, J.A. Gupta, and C.P. Lutz, *Science* **306**, 466 (2004).
10. C.F. Hirjibehedin, C.P. Lutz, and A.J. Heinrich, *Science* **312**, 1021, 2006
11. S. Loth, K. von Bergmann, M. Ternes, A.F. Otte, C.P. Lutz, and A.J. Heinrich, *Nature Phys.* **6**, 340 (2010).
12. A. Bellec, L. Chaput, G. Dujardin, D. Riedel, L. Stauffer, and P. Sonnet, *Phys. Rev. B* **88**, 241406(R) (2013).
13. S. Loth, S. Baumann, C.P. Lutz, D.M. Eigler, and A.J. Heinrich, *Science* **335**, 196 (2012).
14. R.-N. Wang, J.H. Rodriguez, and W.-M. Liu, *Phys. Rev. B* **89**, 235414 (2014).
15. C.F. Hirjibehedin, C.-Y. Lin, A.F. Otte, M. Ternes, C.P. Lutz, B.A. Jones, and A.J. Heinrich, *Science* **317**, 1199 (2007).
16. N. Tsukahara, K.-i. Noto, M. Ohara, S. Shiraki, N. Takagi, Y. Takata, J. Miyawaki, M. Taguchi, A. Chainani, S. Shin, and M. Kawai, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 167203 (2009).
17. P. Ruiz-Diaz, R. Garibay-Alonso, J. Dorantes-Davila, and G.M. Pastor, *Phys. Rev. B* **84**, 024431 (2011).
18. S. Bornemann, O. Siper, S. Mankovsky, S. Polesya, J.B. Staunton, W. Wurth, H. Ebert, and J. Minar, *Phys. Rev. B* **86**, 104436 (2012).
19. O. Siper, S. Bornemann, H. Ebert, S. Mankovsky, J. Vackar, and J. Minar, *Phys. Rev. B* **88**, 064411 (2013).

20. A.F. Otte, M. Ternes, K. von Bergmann, S. Loth, H. Brune, C.P. Lutz, C.F. Hirjibehedin, and A.J. Heinrich, *Nature Phys.* **4**, 847 (2008).
21. J.J. Park, A.R. Champagne, T.A. Costi, W.W. Shum, A.N. Pasupathy, E. Neuscamman, S. Flores-Torres, P.S. Cornaglia, A.A. Aligia, C.A. Balseiro, G.K.-L. Chan, H.D. Abruna, and D.C. Ralph, *Science* **328**, 1370 (2010).
22. P.O. Зайцев, *ЖЭТФ* **68**, 207 (1975).
23. P.O. Зайцев, *ЖЭТФ* **70**, 1100 (1976).
24. Л.В. Келдыш, *ЖЭТФ* **47**, 1515 (1964).
25. В.В. Вальков, С.В. Аксенов, Е.А. Уланов, *Письма ЖЭТФ* **98**, 459 (2013).
26. В.В. Вальков, С.В. Аксенов, Е.А. Уланов, *ЖЭТФ* **146**, 144 (2014).
27. P.O. Зайцев, *Введение в современную кинетическую теорию: Курс лекций*, КомКнига, Москва (2007).
28. В.В. Вальков, Д.М. Дзедзисашвили, *ЖЭТФ* **134**, 791 (2008).
29. В.В. Вальков, Т.А. Валькова, *ФНТ* **11**, 951 (1985) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **11**, 524 (1985)].
30. П.И. Арсеев, Н.С. Маслова, *УФН* **180**, 1197 (2010).
31. S.G. Tikhodeev and H. Ueba, in: A.L. Ivanov and S.G. Tikhodeev (eds.), *Problems of Condensed Matter Physics*, Clarendon Press, Oxford (2008).
32. K. Park and M.R. Pederson, *Phys. Rev. B* **70**, 054414 (2004).
33. F. Qu and P. Hawrylak, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 217206 (2005).

## Quantum transport through a multilevel magnetic structure with taking into account multiple inelastic scattering in magnetic field

V.V. Val'kov, S.V. Aksenov, and E.A. Ulanov

A solution of the problem of quantum electron transport through a magnetic atom adsorbed in the metal break junction is presented. By the experimental data it was assumed that the conduction electrons experienced inelastic scattering by the adsorbate due to the  $s$ - $d(f)$ -exchange interaction. The Keldysh technique was used to provide a general expression describing the current through the multilevel structure at finite temperatures in terms of the nonequilibrium Green function. The use of the atomic statistics allowed to take into account exactly the non-equidistant structure of the magnetic atom energy spectrum and to simplify substantially the application of the Wick theorem for construction of the nonequilibrium diagram technique for Hubbard operators. The calculation of the current-voltage characteristics of the magnetic adatom in the tunnel regime at low temperatures revealed the presence of regions with a negative differential conductance induced by magnetic field.

PACS: 73.43.Jn Tunneling;

**73.63.-b** Electronic transport in nanoscale materials and structures.

Keywords: Keldysh technique, atomic representation, negative differential conductance.