Письма в ЖЭТФ, том 98, вып. 7, с. 459 – 465 © 2013 г. 10 октября

Эффекты многократного отражения при неупругом электронном транспорте через анизотропный магнитный атом

В. В. Вальков[1)], *С. В. Аксенов*[1)], *Е. А. Уланов*[+]

Институт физики им. Киренского СО РАН, 660036 Красноярск, Россия

[+]*Сибирский государственный аэрокосмический университет им. Решетнева, 660014 Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 9 июля 2013 г.

После переработки 26 августа 2013 г.

Исследовано влияние многократного отражения при электронном транспорте на вольт-амперную характеристику адсорбированного магнитного атома с одноионной анизотропией. Для учета вкладов всех порядков теории возмущений по параметрам связи контактов с многоуровневой примесью применены операторы Хаббарда и диаграммная техника Келдыша. Показано, что в режиме сильной неравновесности вольт-амперные характеристики рассмотренной системы содержат участки с отрицательной дифференциальной проводимостью. Обсуждаются способы увеличения этого эффекта.

DOI: 10.7868/S0370274X13190107

1. При исследованиях наноразмерных гибридных систем особое внимание уделяется структурам пленочного типа (например, джозефсоновским структурам [1–3], полупроводниковым [4] или магнитным [5] гетероструктурам), а также одно- и нульмерным объектам [6]. Вольт-амперные характеристики (ВАХ) систем последнего типа обнаруживают особенности, непосредственно связанные с многочастичными эффектами, проявляющимися при электронном транспорте (кулоновская блокада, кондо-корреляции [7, 8]), или с электрон-фононным взаимодействием [9, 10]. Если же у атомного или молекулярного комплекса присутствует некомпенсированный магнитный момент, то такой объект может быть использован в процессах записи и хранения информации [11] или в качестве кубита [12].

В экспериментах по сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) магнитных атомных и молекулярных комплексов был обнаружен неупругий характер электронного транспорта через такие системы [13]. Оказалось, что спин-флип рассеяние транспортируемых электронов на потенциальном профиле структуры позволяет управлять ее магнитным состоянием [14]. В частности, из-за спин-флип процессов транспортируемый через магнитное устройство (например, через спиновый димер [15]) электрон изменяет проекцию спина, а устройство переходит в другое магнитное состояние (для димера – из синглетного в триплетное). При этом электрон может отразиться назад в металлический контакт, а затем снова испытать рассеяние, но уже на измененной структуре потенциального профиля.

При наличии ансамбля электронов необходимо принимать во внимание и многочастичные эффекты, когда процессы рассеяния одного электрона становятся зависящими от результата взаимодействия со структурой другого электрона. В результате многократного повторения отмеченных процессов возникает распределение занятости состояний магнитного устройства, существенно отличающееся от равновесного распределения. Соответственно этому появляются ренормировки ВАХ, которые зависят от свойств индуцированного туннельным током неравновесного состояния магнитного устройства. Кроме того, важным является и твердотельное окружение, которое существенно влияет на транспорт через магнитные системы атомного масштаба [11, 16].

В данной работе при учете отмеченных выше факторов решена задача о ВАХ адсорбированного атома, проявляющего из-за влияния подложки анизотропию магнитных свойств. Для точного описания неэквидистантности большого числа состояний системы магнитный атом + электроны применены операторы Хаббарда [17, 18, 7]. Неравновесные числа заполнения состояний такого магнитного устройства находились из системы кинетических уравнений, полученных на основе диаграммной техники Келдыша [19] для неравновесных функций Грина фермиевского типа, а также диаграммной техники для операторов Хаббарда [17, 18], модифицированной посред-

[1)]e-mail: vvv@iph.krasn.ru; asv86@iph.krasn.ru

ством введения контура Келдыша для неравновесного случая [20, 21]. Такой подход позволил учесть процессы многократного рассеяния электронов и получить выражение для тока, удовлетворяющее необходимым симметрийным свойствам [10]. Показано, что окружение, определяющее кристаллическое поле, может способствовать усилению эффекта отрицательной дифференциальной проводимости. Исследовано влияние асимметричной связи магнитного атома с контактами на его проводящие свойства.

2. Рассмотрим туннельный транспорт электронов через магнитную примесь со спином $S = 1$ в геометрии (см. рис. 1), используемой в эксперименте [16, 22]. В качестве такой примеси может выступать атом переходного или редкоземельного металла (например, Co, Mn, Fe, Ce) или молекула, у которой магнитное ядро окружено лигандами (например, фталцианины Co, Fe; Mn_{12}).

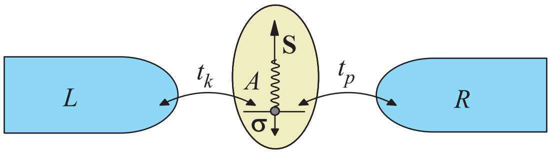

Рис. 1. Магнитная примесь со спином S, расположенная между металлическими контактами, на внешней орбитали которой может располагаться до двух электронов

Запишем гамильтониан системы левый контакт + + устройство + правый контакт в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_D + \hat{H}_R + \hat{T}, \tag{1}$$

где операторы $\hat{H}_L$ и $\hat{H}_R$ учитывают наличие электронов в левом и правом металлических контактах соответственно. В представлении вторичного квантования эти операторы определяются выражениями

$$\hat{H}_{L(R)} = \sum_{k(p)\sigma} \xi_{k(p)} c^{+}_{k(p)\sigma} c_{k(p)\sigma},$$

где $c^{+}_{k(p)\sigma}$ – оператор рождения электрона в левом (правом) контакте с волновым вектором k (p) и спином σ; $\xi_k = \varepsilon_k - \mu$, $\xi_p = \varepsilon_p + eV - \mu$ – одноэлектронные энергии левого и правого контактов, отсчитываемые от уровня Ферми μ. В дальнейшем будем предполагать, что контакты представляют собой однозонные парамагнитные металлы с шириной зоны $W \sim 1$ эВ, значительно превышающей характерные энергетические параметры в системе. Считается, что к контактам приложена разность потенциалов V.

Второе слагаемое в (1) соответствует гамильтониану магнитного атома ($\xi_d = \varepsilon_d + eV/2 - \mu$):

$$\hat{H}_D = \sum_{\sigma} \xi_d n_\sigma + U n_\uparrow n_\downarrow + D\left(S^z\right)^2 + A\left(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{S}\right), \tag{2}$$

который описывает изменение энергии системы при возникновении на атоме дополнительных электронов ($n_\sigma = a^{+}_\sigma a_\sigma$), хаббардовское отталкивание двух электронов с противоположными спинами, влияние одноосной анизотропии с параметром D для описания экспериментально установленной анизотропии магнитных свойств примесного атома [16], а также наличие $s{-}d(f)$-обменной связи между локализованным спином S примесного атома и спином транспортируемого электрона σ (интенсивность связи определяется параметром A). Такая связь не только создает для транспортируемых электронов дополнительный потенциальный профиль, на котором реализуются процессы рассеяния, но и индуцирует ряд явлений, приводящих, например, к спиновому эффекту Фано [15].

Последнее слагаемое в (1) описывает переходы электронов между контактами и магнитной примесью:

$$\hat{T} = \sum_{k(p)\sigma} t_{k(p)} \left[c^{+}_{k(p)\sigma} a_\sigma + \text{Э.С.}\right], \tag{3}$$

где t_k, t_p – параметры связи контактов с примесью, Э.С. означает “эрмитово-сопряженный”.

3. Решая уравнение Шредингера с гамильтонианом (2), получим 12 собственных состояний для изолированной магнитной примеси и электронов. Три из них представляют собой состояния без электронов: $\psi_1 = |0,0\rangle$, $\psi_{2,3} = |0,\pm 1\rangle$, где первый индекс обозначает число электронов, а второй – проекцию суммарного спина системы, $\sigma + S$. В однофермионном секторе гильбертова пространства присутствует три двукратно вырожденных состояния: $\psi_{4,5} = |1,\pm 1/2\rangle_-$, $\psi_{6,7} = |1,\pm 1/2\rangle_+$, $\psi_{8,9} = |1,\pm 3/2\rangle$. Кроме того, имеется три двухэлектронных состояния: $\psi_{10} = |2,0\rangle$, $\psi_{11,12} = |2,\pm 1\rangle$. Разрешенными являются десять переходов с изменением числа электронов со спином σ на уровне магнитной примеси на единицу. Так как у σ нет выделенного направления, энергии переходов с противоположными σ совпадают. В результате энергии переходов для $\sigma = 1/2$ равны

$$\begin{gathered} E_{4,1} = \varepsilon_d - \nu - \Delta,\ E_{6,1} = \varepsilon_d + \nu - \Delta, \\ E_{5,3} = \varepsilon_d - \nu - \Delta - D,\ E_{7,3} = \varepsilon_d + \nu - \Delta - D, \\ E_{8,2} = \varepsilon_d + A/2,\ E_{10,5} = \varepsilon_d + U + \nu + \Delta, \\ E_{11,4} = \varepsilon_d + D + U + \nu + \Delta,\ E_{10,7} = \varepsilon_d + U + \Delta - \nu, \\ E_{11,6} = \varepsilon_d + D + U + \Delta - \nu,\ E_{12,9} = \varepsilon_d + U - A/2, \end{gathered} \tag{4}$$

где $\Delta = A/4 - D/2$, $\nu = \sqrt{\Delta^2 + A^2/2}$.

Поскольку гамильтониан устройства (2) включает ряд взаимодействий, в исходном представлении он является недиагональным. Если использовать такую форму оператора, то приходится развивать теорию возмущений не только по параметрам связи с контактами, но и по параметрам, характеризующим взаимодействия в устройстве. Приведение гамильтониана устройства к диагональному виду в обычном представлении ведет, однако, к тому, что в представлении взаимодействия фермиевский оператор уничтожения электрона на устройстве описывается выражением, препятствующим непосредственному применению теоремы Вика. Преодоление отмеченной трудности связано с использованием атомного представления. На математическом языке этому соответствует введение операторов Хаббарда X^{α}, где $\alpha = \alpha(n, m)$, n и m – индексы начального и конечного состояний перехода $\alpha(n, m)$ [18]. При этом электронные операторы a_{σ} вторичного квантования на примеси выражаются через операторы Хаббарда с помощью соответствующих параметров представления $\gamma_{\sigma}(\alpha)$. Таким образом, гамильтониан структуры в атомном представлении приобретает следующий простой вид: $\hat{H}_D = \sum\limits_{l} E_l X^{ll}$.

4. Используем хорошо известное определение для электрического тока: $I = edN_L/dt$. После несложных преобразований и применения атомного представления получим удобное для практических вычислений выражение:

$$I = ie \sum_{k\sigma,\alpha} t_k \gamma_{\sigma}(\alpha) \left[e^{i\frac{eV}{2}t} \left\langle X^{-\alpha} c_{k\sigma} \right\rangle - e^{-i\frac{eV}{2}t} \left\langle c^{+}_{k\sigma} X^{\alpha} \right\rangle \right]. \tag{5}$$

Это выражение учитывает, что при прохождении тока, когда электрон переходит из контакта в устройство, последнее изменяет свое состояние, переходя из одного сектора гильбертова пространства в другой сектор с числом электронов, большим на единицу. Таких переходов может быть много. Все они, вообще говоря, дают отличный от нуля вклад. Учет этого осуществляется посредством вхождения в (5) суммы по переменной α. Здесь и в дальнейшем $\hbar = 1$.

Входящие в формулу (5) средние выражаются через неравновесные смешанные функции Грина $G^{+-}_{k\sigma,\alpha}(t_+,\, t_-) = -i \left\langle \hat{T}_C c_{k\sigma}(t_+) X^{-\alpha}(t_-) S_C \right\rangle_0$ и $G^{+-}_{\alpha,k\sigma}(t_+,\, t_-) = -i \left\langle \hat{T}_C X^{\alpha}(t_+) c^{+}_{k\sigma}(t_-) S_C \right\rangle_0$, где $S_C = \hat{T}_C \exp\left[-i \int_C d\tau \hat{T}(\tau)\right]$ [19]. Времена t_+, t_- ($t_+ < t_-$) располагаются на нижней ветви контура Келдыша C. Анализируя диаграммный ряд для смешанных функций Грина $G^{+-}_{k\sigma,\alpha}$, $G^{+-}_{\alpha,k\sigma}$, можно показать, что они пропорциональны произведению функции Грина левого контакта, $G_{k\sigma}(\tau - \tau') = -i \left\langle \hat{T}_C c_{k(p)\sigma}(\tau)\, c^{+}_{k(p)\sigma}(\tau') \right\rangle_0$, и функции Грина структуры, $D_{\alpha\beta}(\tau - \tau') = -i \left\langle \hat{T}_C X^{\alpha}(\tau) X^{-\beta}(\tau') \right\rangle_0$. Таким образом, после фурье-преобразования выражение для тока записывается как

$$I = e \sum_{k\sigma,\alpha\beta} t_k^2 \gamma_{\sigma}(\alpha) \gamma_{\sigma}(\beta) \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \times \left[G^{-+}_{k\sigma}(\omega) D^{+-}_{\alpha\beta}\left(\omega - \frac{eV}{2}\right) - G^{+-}_{k\sigma}(\omega) D^{-+}_{\alpha\beta}\left(\omega - \frac{eV}{2}\right) \right]. \tag{6}$$

Следует обратить внимание на то, что для получения естественным путем симметризованного по t_k, t_p выражения для тока необходимо рассматривать порядки теории возмущений выше второго. Этот факт, в частности, отмечался в работе [10]. Учет процессов многократного рассеяния во всех порядках теории возмущений по t_k и t_p был произведен путем решения уравнения Дайсона для функции Грина $D_{\alpha\beta}(\omega)$. Оно представлено в диаграммной форме на рис. 2. Двойной штриховой линии соответствует

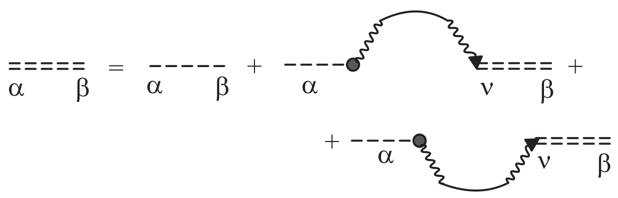

Рис. 2. Уравнение Дайсона на функцию Грина $D_{\alpha\beta}(\omega)$

полная функция Грина $D_{\alpha\beta}(\omega)$, одиночной – затравочная функция $D_{0\alpha}(\omega)$, сплошной изогнутой вверх (вниз) – функция Грина изолированного левого (правого) контакта $G_{k(p)\sigma}(\omega \pm eV/2)$, волнистой – множитель $t_{k(p)}\gamma_{\sigma}(\alpha)$. Учитывая суммирование по переменным, относящимся ко всем внутренним вершинам, получаем следующие выражения на компоненты массового оператора:

$$\begin{aligned} \Sigma^{++}_{\alpha\nu} = \Sigma^{--}_{\alpha\nu} &= i \sum_{j=L,R;\sigma} \gamma_{\sigma}(\alpha) \gamma_{\sigma}(\nu) (2n_j - 1) \Gamma^j, \\ \Sigma^{+-}_{\alpha\nu} &= -2i \sum_{j=L,R;\sigma} \gamma_{\sigma}(\alpha) \gamma_{\sigma}(\nu) n_j \Gamma^j, \\ \Sigma^{-+}_{\alpha\nu} &= 2i \sum_{j=L,R;\sigma} \gamma_{\sigma}(\alpha) \gamma_{\sigma}(\nu) (1 - n_j) \Gamma^j, \end{aligned} \tag{7}$$

где $\Gamma^j(\omega) = 4t_j^2 g_j \sqrt{1 - 4(\omega + \mu)^2 / W^2}$ – параметр уширения уровней системы за счет связи с j-м контактом; n_j – функция Ферми–Дирака j-го контакта; g_j – плотность состояний j-го контакта; t_j – параметр перескока электрона с последнего узла j-го контакта на уровень магнитного атома. При записи (7) было использовано приближение широких зон контактов. Это означает, что при анализе влияния контактов на уровни рассматриваемой структуры мы пренебрегаем их сдвигом. Кроме того, это позволяет пренебречь частотной зависимостью уширения уровней при конкретных расчетах. Тогда, как это часто предполагается, $\Gamma^j \simeq \pi t_j^2 g_j$.

Действуя оператором $\hat{D}_{0\alpha}^{-1} = i\frac{\partial}{\partial t} + E_\alpha$ на уравнение Дайсона (по аналогии с [19]) и решая полученную систему уравнений относительно $D_{\alpha\beta}^{+-}(\omega - eV/2)$, $D_{\alpha\beta}^{-+}(\omega - eV/2)$, находим выражение, описывающее электронный ток через магнитный атом:

$$I = 2e \sum_{\sigma,\alpha\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\Gamma^L \Gamma^R L_{\sigma,\alpha} L_{\sigma,\beta}}{1 + \left[\sum\limits_{\nu} \Gamma L_{\sigma,\nu}\right]^2} \times$$
$$\times \left[n_R(\omega - eV) - n_L(\omega)\right], \qquad (8)$$

$$L_{\sigma,\alpha} = \frac{b_\alpha \gamma_\sigma^2(\alpha)}{\omega - eV/2 + E_\alpha}, \ b_\alpha = N_n + N_m, \ \Gamma = \Gamma^L + \Gamma^R.$$

В этих формулах $E_\alpha = E_n - E_m$, если α соответствует переходу магнитного атома из состояния m в состояние n, т.е. $\alpha = \alpha(n,m)$. Заметим, что выражение (8) симметрично относительно t_L, t_R.

Возникновение ренормированного концевого множителя, показанного на рис. 2 посредством темного кружка, связано с неравновесными процессами, приводящими к многократному рассеянию. Поэтому числа заполнения n-го и m-го состояний системы (N_n и N_m соответственно) оказываются зависящими не только от температуры T и параметров системы, но и от остальных чисел заполнения. Для нахождения $N_1, N_2, ..., N_{12}$ решается при дополнительном условии $\sum\limits_{i=1}^{12} N_i = 1$ следующая система кинетических уравнений

$$N_m = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega D_{\alpha\alpha}^{+-}(\omega) \simeq$$
$$\simeq \sum_\sigma \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\pi\Gamma} \frac{b_\alpha \kappa_{\sigma,\alpha}\left[\Gamma^L n_L(\omega) + \Gamma^R n_R(\omega - eV)\right]}{(\omega + \omega_{\sigma,\alpha})^2 + \kappa_{\sigma,\alpha}^2}. \qquad (9)$$

Здесь были введены обозначения

$$\omega_{\sigma,\alpha} = E_\alpha - eV/2 + \lambda_{\sigma,\alpha}\kappa_{\sigma,\alpha},$$
$$\kappa_{\sigma,\alpha} = \frac{\Gamma\gamma_\sigma^2(\alpha)\, b_\alpha}{1 + \lambda_{\sigma,\alpha}^2}, \quad \lambda_{\sigma,\alpha} = \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{b_\beta \gamma_\sigma^2(\beta)\,\Gamma}{E_\beta - E_\alpha}.$$

В области $T \ll E_\alpha$ входящий в (9) интеграл вычисляется аналитически и система кинетических уравнений принимает более простой вид:

$$N_m = \sum_\sigma \frac{b_\alpha}{\pi}\left[\mathrm{arctg}\left(\frac{W/2 - eV/2 - \omega_{\sigma,\alpha}}{\kappa_{\sigma,\alpha}}\right) + \right.$$
$$\left. + \frac{\Gamma^L}{\Gamma}\mathrm{arctg}\left(\frac{\omega_{\sigma,\alpha}}{\kappa_{\sigma,\alpha}}\right) + \frac{\Gamma^R}{\Gamma}\mathrm{arctg}\left(\frac{\omega_{\sigma,\alpha} + eV}{\kappa_{\sigma,\alpha}}\right)\right]. \qquad (10)$$

Проведем численные расчеты транспортных характеристик магнитной примеси для наиболее важного в практическом отношении режима слабой связи: Γ^L, $\Gamma^R \ll E_\alpha$. В этом случае уширение энергетических уровней примесной системы мало по сравнению с разностью энергий этих уровней. Из определения величин $\Gamma^L = \pi g_L t_L^2$, $\Gamma^R = \pi g_R t_R^2$ видно, что малость произведений $g_R t_R$, $g_L t_L \ll 1$ позволяет выделить два случая. В первом из них режим слабой связи реализуется и в том случае, когда $A < t_L, t_R$. Во втором случае $A > t_L, t_R$ и возможность реализации слабой связи очевидна.

Реальность первого случая следует из сопоставления результатов теоретических и экспериментальных работ. Проведенные в теоретических работах [23, 24] оценки показали, что $A \sim (10^{-4}–10^{-3})$ эВ. С другой стороны, из экспериментальных работ [25, 26] следует, что в режиме слабой связи Γ^L, $\Gamma^R \sim$ $\sim (10^{-5}–10^{-4})$ эВ. Тогда, принимая, что $g_{L(R)} \simeq 1/W$, получаем t_L, $t_R \sim 10^{-2}$ эВ, а $A < t_L, t_R$.

Для первого случая зависимости неравновесных чисел заполнения $N_1, N_2, ...$ от энергии электрического поля смещения eV показаны на рис. 3. Энерге-

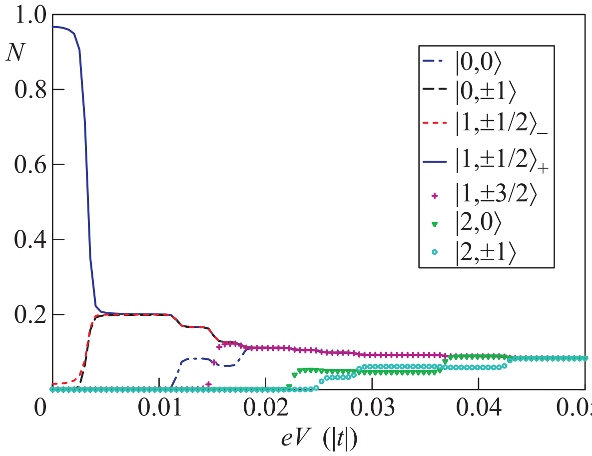

Рис. 3. Неравновесные числа заполнения состояний системы магнитная примесь+электроны для параметров $t = -1$ эВ, $t_L = t_R = t/100$, $\varepsilon_d = A = 0.005\ |t|$, $D = 0.003\ |t|$, $U = 0.01\ |t|$, $T = 1$,K

тические параметры примеси выбраны так, что при $D > 0$ без поля смещения в нулевом приближении по t_L, t_R примесь не содержит электронов, основным состоянием является синглет $|0,0\rangle$, а $N_1 = 1$. При учете процессов многократного рассеяния N_1 уменьшается даже при $V = 0$ (см. сплошную кривую на рис. 3). Возрастание поля смещения приводит к движению энергетических уровней примеси. При каждом значении электрического поля, удовлетворяющем условию $eV/2 \sim E_\alpha$, открывается возможность реализации перехода примесной системы из состояния с номером r в состояние с номером l (предполагается, что $\alpha = \alpha(l, r)$). В результате происходит возрастание числа заполнения N_l при уменьшении значений остальных чисел заполнения. Это приводит к показанным на рис. 3 скачкообразным зависимостям чисел заполнения. При этом в окрестности “резонансных” значений электрического поля резкое изменение претерпевают заселенности всех других ранее возбужденных состояний. Таким образом, при больших напряжениях примесная подсистема с одинаковой вероятностью может находиться в каждом из 12 состояний.

Разобранные особенности индуцируют ступенчатый вид ВАХ, аналогичный виду ВАХ при эффекте кулоновской блокады. На рис. 4 представлены ре-

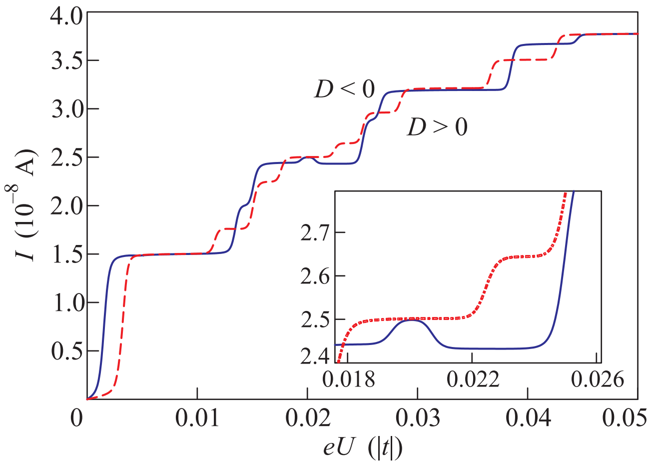

Рис. 4. Вольт-амперная характеристика магнитной примеси для параметров рис. 3: $D = 0.003\ |t|$ – пунктирная кривая; $D = -0.003\ |t|$ – сплошная кривая. На вставке – участок ОДП при $D < 0$

зультаты расчетов ВАХ для двух знаков параметра анизотропии D. Эти зависимости согласуются с экспериментальными данными, полученными при исследовании транспорта через одиночные молекулярные магниты [22]. Каждая ступенька указывает на включение дополнительного канала для прохождения электрона и возникает при отмеченных выше “резонансных” значениях поля смещения, когда $eV/2 \sim E_\alpha$.

Существенная особенность рассчитанных ВАХ заключается в том, что здесь, как и в эксперименте [22], присутствуют области отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП). Для большей наглядности наличие ОДП продемонстрировано на вставке к рис. 4.

Обсудим причину возникновения ОДП. Из выражения для тока (8) следует, что его величина складывается из диагональных ($I_{\alpha\alpha}$) и недиагональных ($I_{\alpha\beta}$) парциальных составляющих. Численные оценки показывают, что $I_{\alpha\alpha} \gg I_{\alpha\beta}$. Парциальный вклад в ток $I_{\alpha\alpha}$, связанный с каналом, отвечающим переходу примесной системы из состояния r в состояние l (т.е. корневому вектору $\alpha(l, r)$), записывается в виде

$$I_{\alpha\alpha} \simeq \frac{2e}{\pi}\frac{\Gamma^L\Gamma^R}{\Gamma}\sum_\sigma b_\alpha\gamma_\sigma^2(\alpha)\left[\operatorname{arctg}\left(\frac{E_\alpha + eV/2}{\Gamma b_\alpha\gamma_\sigma^2(\alpha)}\right) - \operatorname{arctg}\left(\frac{E_\alpha - eV/2}{\Gamma b_\alpha\gamma_\sigma^2(\alpha)}\right)\right]. \quad (11)$$

Отсюда следует, что при поле смещения, меньшем “резонансного” значения ($eV/2 < E_\alpha$), $I_{\alpha\alpha} = 0$.

При переходе через “резонансное” поле смещения ($eV/2 > E_\alpha$) происходит смена знака у аргумента второго арктангенса и

$$I_{\alpha\alpha} \sim \frac{\Gamma^L\Gamma^R}{\Gamma}\sum_\sigma b_\alpha\gamma_\sigma^2(\alpha). \quad (12)$$

Видно, что изменение парциального тока в открытом канале связано с изменением концевого множителя, определяемого как сумма чисел заполнения. Поскольку при переходе через “резонансное” поле смещения увеличивается число отличных от нуля чисел заполнения, вследствие отмеченного выше условия полноты будет происходить уменьшение тех чисел заполнения, которые были отличны от нуля до перехода. Это означает уменьшение парциальных токов $I_{\beta\beta}$ для открытых до рассматриваемого перехода каналов. Учитывая сказанное, нетрудно записать условие возникновения ОДП:

$$\sum_\beta I_{\beta\beta}(V_1) > \sum_\beta I_{\beta\beta}(V_2) + I_{\alpha\alpha}(V_2),\ V_1 < V_2. \quad (13)$$

Отметим, что эффект ОДП зависит от знака анизотропии D. Следовательно, изменяя кристаллическое окружение магнитного атома или молекулы, например помещая их в топологически неэквивалентные места на подложке [16], можно добиться значительной модификации их транспортных свойств.

Для второго случая ($t_L, t_R < A$) выполнение режима слабой связи очевидно. При этом качественное поведение ВАХ остается аналогичным поведению, рассмотренному выше. Существенно, что и в этом режиме сохраняются участки с ОДП (см. рис. 5).

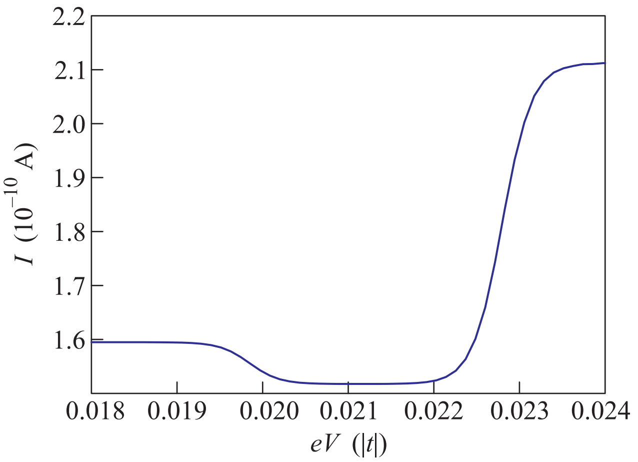

Рис. 5. Участок ВАХ магнитной примеси с ОДП для случая $t_L, t_R < A$, $t = -1$ эВ, $t_L = t_R = t/1000$, $\varepsilon_d = 0.008\ |t|$; $A = 0.011\ |t|$, $D = -0.009\ |t|$, $U = 0.01\ |t|$, $T = 1$ K

Если $t_L \neq t_R$, то, кроме асимметричности ВАХ, возникает существенное усиление эффекта ОДП (см. область $eV \sim -0.02\ |t|$ на рис. 6). При этом асиммет-

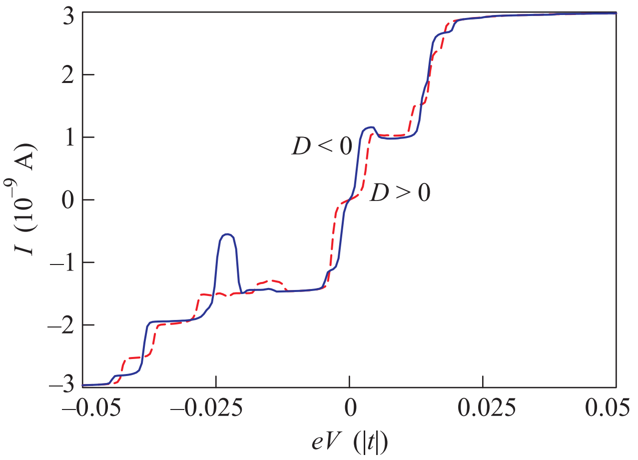

Рис. 6. Вольт-амперная характеристика магнитной примеси для случая асимметричной связи с контактами, $t_L = t/50$, $t_R = t_L/10$, с параметрами рис. 4

ричные зависимости проявляются и для чисел заполнения при смене полярности напряжения. При $V > 0$ электроны движутся в область левого контакта. Однако их туннелирование с правого контакта на орбиталь примеси подавлено, т.к. $t_R \ll t_L$. Это приводит к отсутствию электронов в центральной области, т.е. к преимущественному заполнению состояний $|0,0\rangle$, $|0,\pm1\rangle$ при больших V. Описанная ситуация для $D > 0$ изображена на рис. 7. В противоположном случае (при смене знака V) доминирующими оказываются состояния с двумя электронами.

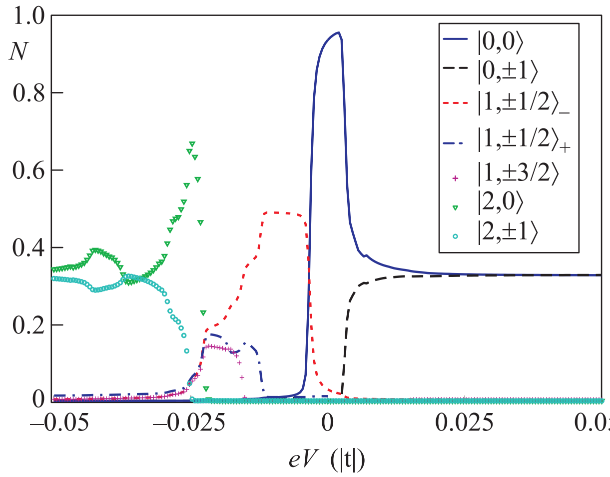

Рис. 7. Неравновесные числа заполнения состояний системы при $D > 0$ с параметрами рис. 6

Заметим, что для записи и хранения информации существенным фактором является возможность последовательного переключения между различными состояниями системы под действием электрического поля. При уменьшении V от нуля реализуется практически стопроцентный переход из основного безэлектронного состояния $|0,0\rangle$ в магнитное одноэлектронное состояние $|1,\pm1/2\rangle_-$ (поведение заселенности этого состояния описывается штриховой кривой на рис. 7) без выделенного направления ориентации суммарного спина. В дальнейшем в области $eV \sim -0.025\ |t|$ имеется высокая вероятность нахождения системы в немагнитном двухэлектронном состоянии $|2,0\rangle$ (соответствующая кривая изображена треугольными маркерами).

5. В заключение остановимся на ряде особенностей представленных расчетов. Главная из них связана с тем, что протекание туннельного тока через магнитоактивный атом из-за $s-f$-обменной связи между спином транспортируемого электрона и спином примеси сопровождается неупругими процессами, приводящими к возбуждению верхних по энергии состояний примесного центра. Поэтому в стационарных условиях туннельные характеристики рассмотренной системы определяются не только процессами рассеяния на основном состоянии примесного центра, но и процессами, связанными с участием возбужденных состояний. При этом существенную роль приобретают процессы многократного рассеяния, когда электрон после отражения и перевода примесного центра в возбужденное состояние испытывает вторичное рассеяние на перестроенной структуре магнитного иона за счет изменения вероятности заполнения состояний.

Описание неупругих процессов и эффектов многократного рассеяния в работе реализовано на основе сочетания метода Келдыша для вычисления неравновесных функций Грина и идеологии атомного представления с привлечением неравновесной диаграммной техники для операторов Хаббарда [17, 18]. Введение атомного представления оказалось весьма эффективным для описания неупругих эффектов при квантовом транспорте через магнитный атом, поскольку оно позволяет представить многоуровневый гамильтониан примесного центра в диагональном виде. При этом в теорию в явном виде входят слагаемые, отражающие вклады от всех каналов рассеяния. В результате удается получить замкнутую систему квантовых кинетических трансцендентных уравнений, в неявном виде определяющую неравновесные числа заполнения структуры.

Расчет ВАХ в режиме слабой связи показал, что возможность заполнения возбужденных состояний системы магнитный атом+электроны за счет усиления неравновесных неупругих процессов рассеяния приводит к ступенчатым особенностям в ВАХ и индуцированию ОДП. Полученные в работе эффекты согласуются с наблюдаемыми в экспериментах по транспорту через одиночные молекулярные магниты [22].

Отмечено, что интенсивность эффекта ОДП существенно зависит как от твердотельного окружения магнитного иона, так и от параметров связи с металлическими контактами. На основании этого предсказано, что рассмотренный в работе магнитный объект атомного масштаба при его асимметричной связи с контактами можно использовать для записи информации.

Работа выполнена при поддержке программы президиума РАН "Квантовые мезоскопические и неупорядоченные системы", федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы" (ГК # 16.740.11.0644) и Российского фонда фундаментальных исследований (гранты # 12-02-31130, 13-02-00523 и 13-02-98013). 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. Y. Makhlin, G. Schon, and A. Shnirman, Rev. Mod. Phys. **73**, 357 (2001).
2. В. Ф. Гантмахер, В. Т. Долгополов, УФН **180**, 3 (2010).
3. A. K. Feofanov, V. A. Oboznov, V. V. Bol'ginov et al., Nature Physics **6**, 593 (2010).
4. I. V. Rozhansky, N. S. Averkiev, and E. Lahderanta, Low Temp. Phys. **39**, 40 (2013).
5. С. Н. Вдовичев, Б. А. Грибков, С. А. Гусев и др., Письма в ЖЭТФ **94**, 418 (2011).
6. J. Park, A. N. Pasupathy, J. I. Goldsmith et al., Nature **417**, 722 (2002).
7. K. Kikoin and Y. Avishai, Phys. Rev. Lett. **86**, 2090 (2001).
8. P. I. Arseyev, N. S. Maslova, and V. N. Mantsevich, Pis'ma v ZhETF **94**, 422 (2011).
9. H. Ueba, T. Mii, and S. G. Tikhodeev, Surf. Science **601**, 5220 (2007).
10. П. И. Арсеев, Н. С. Маслова, УФН **180**, 1197 (2010).
11. S. Loth, S. Baumann, C. P. Lutz et al., Science **335**, 196 (2012).
12. J. Tejada, E. M. Chudnovsky, E. del Barco, and J. M. Hernandez, Nanotechnology **12**, 181 (2001).
13. A. J. Heinrich, J. A. Gupta, and C. P. Lutz, Science **306**, 466 (2004).
14. S. Loth, K. von Bergmann, M. Ternes et al., Nature Physics **6**, 340 (2010).
15. В. В. Вальков, С. В. Аксенов, ЖЭТФ **140**, 305 (2011); В. В. Вальков, С. В. Аксенов, Е. А. Уланов, ЖЭТФ **143**, 984 (2013).
16. A. F. Otte, M. Ternes, K. von Bergmann et al., Nature Physics **4**, 847 (2008).
17. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975).
18. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
19. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ **47**, 1515 (1964).
20. Р. О. Зайцев, *Введение в современную кинетическую теорию. Курс лекций*, М.: КомКнига, 2007.
21. J. Fransson, O. Eriksson, and I. Sandalov, Phys. Rev. Lett. **88**, 226601 (2002).
22. H. B. Heersche, Z. de Groot, J. A. Folk et al., Phys. Rev. Lett. **96**, 206801 (2006).
23. K. Park and M. R. Pederson, Phys. Rev. B **70**, 054414 (2004).
24. F. Qu and P. Hawrylak, Phys. Rev. Lett. **95**, 217206 (2005).
25. J. Gores, D. Coldhaber-Gordon, S. Heemeyer, and M. A. Kastner, Phys. Rev. B **62**, 2188 (2000).
26. I. G. Zacharia, D. Goldhaber-Gordon, G. Granger et al., Phys. Rev. B **64**, 155311 (2001).