Письма в ЖЭТФ, том 55, вып. 3, стр. 180 — 184 10 февраля 1992 г.

О ВОЗМОЖНОСТИ НАБЛЮДЕНИЯ СПИН-ПОЛЯРИЗОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ НА ПОВЕРХНОСТИ GaAs(110) СКАНИРУЮЩИМ ТУННЕЛЬНЫМ МИКРОСКОПОМ

С.Н.Молотков

Институт физики твердого тела РАН
142432, Черноголовка, Московская обл.

Поступила в редакцию 15 января 1991 г.

Предлагается способ выделения спин-зависящей компоненты туннельного тока в СТМ между ферромагнитной иглой и поверхностью GaAs(110) со спин-поляризованными электронами.

В настоящее время сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) применяется для манипуляции отдельными атомами на поверхности [1], исследования излучения фотонов при туннелировании [2], детектирования прецессии отдельных спинов на парамагнитных центрах [3]. Воздействие лазерного облучения на туннельный промежуток позволяет исследовать динамические характеристики туннелирования [4] и резонансно-возбужденных поверхностных мод (адсорбатов и плазмонов [5]). Фотовозбуждение носителей в полупроводниках во время сканирования позволило исследовать спектроскопию и пространственное распределение неравновесных квазичастиц с атомарным разрешением [6,7].

Использование иглы из магнитного материала в СТМ позволяет изучать структуру поверхности магнитных материалов. В работе [8] с применением монодоменной иглы из ферромагнитного CrO_2 были обнаружены ферромагнитные террасы с разной ориентацией намагниченности на поверхности Cr(001). Последние эксперименты с ферромагнитной иглой из Fe позволили добиться реального атомарного разрешения отдельных магнитных ионов Fe^{3+} и Fe^{2+} на поверхности шпинели $Fe_3O_4(001)$ [9].

Магнитное упорядочение электронных спинов в ряде полупроводников A^3B^5 может быть достигнуто при межзонном поглощении циркулярно-поляризованного излучения [10,11]. СТМ с магнитной иглой открывает дополнительные возможности исследования спиновой поляризации электронов с атомарным разрешением.

При постоянно действующей подсветке циркулярно-поляризованным светом в GaAs из-за особенностей зонной структуры [10,11] устанавливается некоторое неравновесное распределение носителей и связанная с этим спиновая поляризация. Как следует из экспериментов [6,7], главный вклад в туннельный ток возникает от неравновесной функции распределения в полупроводнике. Считаем также, что туннелирование при слабой туннельной связи происходит на фоне неравновесной функции распределения, искажением которой за счет туннелирования можно пренебречь. Динамический эффект связанный с модуляцией высоты барьера существенен лишь для ряда материалов, например, графита [4].

Поскольку система кристалл+игла не обладает трансляционной инвариантностью будем пользоваться базисом локализованных орбиталей $|\varphi_{n\sigma}(\vec{r}-\vec{R}_l)>$- орбиталь n-типа $(s,p,d..)$ со спином σ на узле $\vec{R}_l$.

Туннельный ток выражается через келдышевские функции Грина, с точностью до T^2, имеет вид [12]

$$I = \frac{e}{\hbar}\mathrm{Sp}\{\int \frac{d\epsilon}{2\pi i}[\hat{T}\hat{g}_c^+(\epsilon)\hat{T}^*\hat{g}_t^-(\epsilon) - \hat{T}^*\hat{g}_c^-(\epsilon)\hat{T}\hat{g}_t^+(\epsilon)]\}, \tag{1}$$

где $\hat{g}^{\pm}_{c,t}(\epsilon)$ - функции Грина, представляющие собой матрицы по орбитальным, узельным и спиновым индексам. Туннельная связь между иглой и кристаллом описывается матрицей перекрытия, которая диагональна по спину

$$\hat{T} = \{T^{nl}_{n'l'}\} = \frac{i\hbar}{2m}\int ds[\varphi_{n\sigma}(\vec{r}-\vec{R}_l)\frac{\vec{d}}{d\vec{r}}\varphi^*_{n'\sigma}(\vec{r}-\vec{R}_{l'}) - \text{э.с.}], \tag{2}$$

остается установить вид $\hat{g}^{\pm}_{c,t}$ для невзаимодействующих кристалла и иглы при наличии спиновой поляризации.

Принципиальное отличие намагниченности в полупроводнике за счет подсветки и ферромагнитной игле состоит в следующем. В игле в термодинамическом равновесии распределение носителей по ветвям спектра с разной ориентацией спина описывается одной функцией распределения Ферми. Плотности состояний в разных спиновых подзонах при этом различны. В полупроводнике плотности состояний в подзонах с проекцией момента вверх и вниз одинаковы (эффекты связанные с отсутствием центра инверсии на поверхности A^3B^5 малы [13]), но различны функции распределения квазичастиц с разной проекцией момента. Функция распределения в металле может быть и неравновесной, существенно лишь то, что она не является спин-поляризованной. Спин-поляризованный вид неравновесной функции распределения может быть связан лишь со спецификой зонной структуры как это имеет место в GaAs.

Келдышевские функции Грина в представлении диагональном для квазичастиц для полупроводника имеют вид

$$\hat{g}^{\mu m}_{\mu m}(\epsilon) = <\psi_{\mu m}|\hat{g}^{\pm}|\psi^*_{\mu m}> = 2\pi i\delta(\epsilon - \epsilon_{\mu m})\left\{\begin{array}{l} f_m(\epsilon) \\ f_m(\epsilon)-1 \end{array}\right., \tag{3}$$

здесь m описывает проекцию момента $m = \pm 1/2, \pm 3/2$, μ - совокупность других квантовых чисел (квазиимпульса вдоль поверхности и номера зоны), f_m - функция распределения квазичастиц в зоне с проекцией момента m. Так как поверхностные состояния на поверхности GaAs(110) отсутствуют [14], то $\psi_{\mu m}$ описывают состояния в непрерывном спектре с энергией $\epsilon_{\mu m}$.

Переход к недиагональному базису локализованных орбиталей, через который выражается туннельный ток дает

$$\hat{g}^{\pm}{}_{\substack{nl\sigma\\ n'l'\sigma'}}(\epsilon) = <\varphi_{n\sigma}(\vec{r}-\vec{R}_l)|\hat{g}^{\pm}(\epsilon)|\varphi^*_{n'\sigma}(\vec{r}-\vec{R}_{l'})> =$$

$$= 2\pi i\sum_{\mu m} A^{nl\sigma}_{\mu m}\delta(\epsilon - \epsilon_{\mu m})\,\overset{*}{A}{}^{n'l'\sigma'}_{\mu m}\left\{\begin{array}{l} f_m(\epsilon) \\ f_m(\epsilon)-1 \end{array}\right\}, \tag{4}$$

где $\hat{A}$ - матрица разложения собственных векторов по локализованным орбиталям

$$|\psi_{\mu m}> = \sum_{\mu m} A^{nl\sigma}_{\mu m}|\varphi_{n\sigma}(\vec{r}-\vec{R}_l)> . \tag{5}$$

Если функция распределения не зависит от индекса проекции m, то $\hat{g}^{\pm}$ принимает вид

$$\hat{g}^{\pm}_{\substack{nl\sigma\\ n'l'\sigma'}}(\epsilon) = 2\pi i \rho_{\substack{nl\sigma\\ n'l'\sigma'}}(\epsilon) \left\{ \begin{array}{c} f(\epsilon) \\ f(\epsilon)-1 \end{array} \right\}, \tag{6}$$

где парциальная плотность состояний

$$\rho_{\substack{nl\sigma\\ n'l'\sigma'}}(\epsilon) = \sum_{\mu m} A^{nl\sigma}_{\mu m} \delta(\epsilon - \epsilon_{\mu m}) \overset{*}{A}{}^{n'l'\sigma'}_{\mu m} . \tag{7}$$

Для иглы в спин-поляризованном случае $\hat{g}^{\pm}$ могут быть представлены в виде (здесь шляпка относится к спиновым индексам)

$$\hat{g}^{\pm}_{\substack{nl\sigma\\ n'l'\sigma'}}(\epsilon) = 2\pi i (\hat{\rho}^{nt}_{\substack{nl\\ n'l'}}(\epsilon) + \hat{\rho}^{st}_{\substack{nl\\ n'l}}(\epsilon)(\hat{\vec{\sigma}}\vec{n}_t)) \left\{ \begin{array}{c} f(\epsilon) \\ f(\epsilon)-1 \end{array} \right\}, \tag{8}$$

где $\hat{\rho}^{n,st}$ - спин-независяшая и спин-зависяшая части плотности состояний $\vec{n}_t$ - направление намагниченности в игле (последнюю для простоты считаем монодоменной, $\vec{n}_t$ не зависит от узла), t - индекс обозначающий иглу.

Для полупроводника в недиагональном представлении из-за зависимости функции распределения от проекции момента невозможно факторизовать $\hat{g}^{\pm}$ на произведение плотности состояний и функции распределения, в спин-поляризованном случае, выделяя нормальную F^{n} и спин-поляризованную F^{s} части матрицы плотности в (4), имеем с учетом этого

$$\hat{g}^{\pm}_{\substack{nl\sigma\\ n'l'\sigma'}}(\epsilon) = 2\pi i \left\{ \hat{F}^{nc}_{\substack{nl\\ n'l'}}(\epsilon) + \hat{F}^{sc}_{\substack{nl\\ n'l'}}(\epsilon)(\hat{\vec{\sigma}}\vec{n}_c)) - \left[\begin{array}{cc} & 0 \\ \hat{\rho}^{c}_{\substack{nl\\ n'l'}} & (\epsilon) \quad \delta_{\sigma\sigma'} \end{array} \right] \right\}, \tag{9}$$

$\vec{n}_c$ - направление намагниченности в GaAs, которое определяется условиями подсветки, индекс c - обозначает кристалл.

Для туннельного тока, принимая во внимание (1), (8), (9), находим

$$I^{\pm} = I^{\pm}_{n} \pm I^{\pm}_{s} = \frac{2\pi e}{\hbar} \mathrm{Sp}\{ \int d\epsilon [\hat{T}\hat{\rho}^{c}(\epsilon)\hat{T}^{*}\hat{\rho}^{nt}(\epsilon)f(\epsilon) - \hat{T}^{*}\hat{\rho}^{nt}(\epsilon)\hat{T}^{*}\hat{F}^{nc}(\epsilon)] \pm$$

$$\pm (\vec{n}_c\vec{n}_t)\hat{T}\hat{F}^{cs}(\epsilon)\hat{T}^{*}\hat{\rho}^{st}(\epsilon)\}. \tag{10}$$

Спин-зависящая часть тока I_s здесь выделена лишь формально, знаки $\pm$ отвечают правой и левой циркуляции поляризации света. Спиновая часть матрицы плотности полупроводника (и намагниченность) меняет знак при смене направления циркуляции, поэтому имеем

$$I^{+}_{s} - I^{-}_{s} = (\vec{n}_c\vec{n}_t)\frac{4\pi e}{\hbar}\mathrm{Sp}\{ \int d\epsilon \hat{T}\hat{F}^{cs}(\epsilon)\hat{T}^{*}\hat{\rho}^{st}(\epsilon)\}. \tag{11}$$

Формулу (11) можно получить из качественных соображений. Пусть намагниченность направлена в кристалле и игле вдоль одного направления. Вклад электронов со спином вверх будет

$$I_{\uparrow} \propto \int d\epsilon \{\rho(\epsilon)\rho_{\uparrow}(\epsilon)[f(\epsilon)[1-f_{\uparrow}(\epsilon)] - f_{\uparrow}(\epsilon)[1-f(\epsilon)]\},$$

и со спином вниз, соответственно,

$$I_\downarrow \propto \int d\epsilon\{\rho(\epsilon)\rho_\downarrow(\epsilon)[f(\epsilon)[1-f_\downarrow(\epsilon)]-f_\downarrow(\epsilon)[1-f(\epsilon)]\}, \tag{12}$$

где $f_{\uparrow\downarrow}, f$ и $\rho(\epsilon), \rho_{\uparrow\downarrow}(\epsilon)$ - неравновесная функция распределения и плотности состояний в полупроводнике и игле, соответственно. Полный ток для данного направления круговой поляризации

$$I^+ = I_\uparrow + I_\downarrow \propto \int d\epsilon \left\{\frac{1}{2}\rho(\epsilon)[(\rho_\downarrow(\epsilon)+\rho_\uparrow(\epsilon))[f-(f_\uparrow+f_\downarrow)/2]]+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{2}\rho(\epsilon)[(\rho_\downarrow(\epsilon)-\rho_\uparrow(\epsilon))[f-(f_\uparrow-f\downarrow)/2]]\right\}. \tag{13}$$

При изменении направления циркуляции функции распределения в полупроводнике для спина вверх и вниз меняются местами $f_{\uparrow\downarrow} \rightleftharpoons f_{\downarrow\uparrow}$, в игле плотности состояний $\rho_\uparrow$ и $\rho_\downarrow$ очевидно не меняются, поэтому имеем

$$I^+ - I^- \propto \int d\epsilon\rho(\epsilon)[(\rho_\downarrow(\epsilon)-\rho_\uparrow(\epsilon)[f_\uparrow - f_\downarrow], \tag{14}$$

что совпадает, по-существу, с (11). Разность токов в (14) не зависит от неравновесной функции распределения в игле, отсюда также следует, что первоначальное разбиение тока на I_n и I_s в (10) является условным.

В заключение обсудим следствия для поверхности GaAs(110). При положительном напряжении на образце туннелирование в основном происходит в состояния зоны проводимости. Максимальная величина тока при этом будет наблюдаться, когда игла позиционирована над атомом Ga, так как именно его орбитали (в основном s-типа) формируют край зоны проводимости. Изменяя угол падения излучения, и измеряя туннельный ток для данного угла падения, но при различных направлениях поляризации, можно добиться при каком-то угле (и соответственно, направлении момента фотона и намагниченности в GaAs) равенства нулю комбинации $I^+ - I^- \propto (\vec{n}_c\vec{n}_t)$. Данное обстоятельство позволяет установить ориентацию намагниченности на острие иглы. Туннелирование дырок из валентной зоны при этом будет подавлено, если игла находится над атомом Ga, так как состояния края валентной зоны локализованы на атомах As. Собственно этот факт и обусловливает различный туннельный контраст при разных полярностях приложенного напряжения [14]. При отрицательном напряжении на образце, при позиционировании иглы над атомом As, зависимость туннельного тока от угла падения и направления поляризации должна отсутствовать из-за отсутствия спинового упорядочения дырок (см.[10,11]). При сдвиге иглы в позицию над атомом Ga должен появиться сигнал тока, зависящий от подсветки из-за возможности туннелирования неравновесных спин-поляризованных электронов.

Автор благодарит С.С.Назина за обсуждения.

---

1. D.M.Eigler and E.K.Schweizer, Nature 344, 524 (1990).
2. J.H. Coombs, J.K.Gimzewski, B.Reihl et al., Microscopy 152, 325 (1988).
3. Y.Manassen, R.J.Hamers et al., Phys. Rev. Lett. 62, 2531 (1989).
4. M.Volcker, W.Krieger and H.Walther, Phys. Rev. Lett. 66, 1717 (1991).
5. V.Kroo, J.P.Thost, M.Volcker et al., Europhys. Lett 15, 289 (1991).
6. R.J.Hamers, K.Markert, Phys. Rev. Lett. 64, 1051 (1990).
7. Y.Kuk, R.S.Becker et al., Phys. Rev. Lett. 65, 456 (1990).
8. R.Wiesendanger, H.-J.Gunterodt et al., Phys. Rev. Lett. 65, 247 (1990).

9. R.Wiesendander, I.V.Shvets, D.Burger et al., Preprint Basel University, 1991 (будет опубликовано в Phys. Rev. Lett.)

10. А.И.Екимов, В.И.Сафаров, Письма в ЖЭТФ 12, 193 (1970).

11. М.И.Дьяконов, В.И.Перель, ЖЭТФ 60, 1954 (1971).

12. C.Caroli, R.Combescot, P.Nozieres et al., Phys. C 4, 916 (1971).

13. S.V.Meshkov and S.N.Molotkov, Surface Science 240, 263 (1990).

14. R.M.Feenstra, J.A.Stroscio et al., Phys. Rev. Lett. 58, 1192 (1987).