

## НОВЫЙ МЕХАНИЗМ МОДУЛЯЦИИ ТОКА В ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ В СКАНИРУЮЩЕМ ТУННЕЛЬНОМ МИКРОСКОПЕ

*С.Н.Молотков*

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

Поступила в редакцию 24 декабря 1993 г.

Для объяснения экспериментов [1, 2] предлагается одночастичный механизм модуляции туннельного тока на ларморовской частоте в постоянном магнитном поле.

В серии экспериментов [1, 2] на поверхности Si(111), где имеются парамагнитные центры (созданные, например, бомбардировкой атомами кислорода [1]) было обнаружено следующее. При помещении образца в постоянное магнитное поле (масштаб полей около 200 Гс) измерение частотных характеристик туннельного тока в сканирующем туннельном микроскопе (СТМ) демонстрирует резкий максимум на частоте соответствующей ларморовской прецессии локализованного на центре спина. Характерный масштаб частот в этих полях составляет около 500 МГц. Сигнал хорошо локализован в пространстве, отвод иглы от центра вдоль поверхности на несколько ангстрем приводит к его исчезновению.

На сегодняшний день механизм модуляции тока в постоянном магнитном поле до конца не ясен. В работе [3] был предложен один из возможных механизмов. Было показано, что если имеется заметное обменное спин-спиновое взаимодействие делокализованных электронов со спином на центре, то процессы когерентного туннелирования пар делокализованных электронов с противоположными спинами и обменивающимися ориентацией спинов через спин на центре приводят к особенности на частоте ларморовской прецессии локализованного спина. Данный механизм имеет многочастичную природу и обязан собой обменному взаимодействию.

Однако упомянутый механизм не является единственным. В данной заметке мы хотим обратить внимание на возможность одночастичного механизма модуляции тока. Опишем этот механизм сначала качественно.

С точки зрения электронного спектра, присутствие парамагнитного центра означает возникновение локализованного в пространстве состояния, энергия которого лежит в объемной запрещенной зоне полупроводника. Пусть для начала кулоновское взаимодействие несущественно (далее оно будет принято во внимание), тогда в постоянном магнитном поле состояния электронов на центре со спином вверх и вниз отличаются на зеемановскую энергию  $E_z = \hbar\omega_L$ , ( $\omega_L = g\mu_B H/\hbar$ ,  $g$  –  $g$ -фактор,  $\mu_B$  – магнетон Бора,  $H$  – магнитное поле). Будем также считать, что (это существенно для дальнейшего) локализованный уровень имеет конечную ширину. Это означает, что в запрещенной зоне имеются локализованный вблизи поверхности континуум состояний – поверхностные зоны, в которые возможен уход электронов с центра. В противном случае должна была бы наблюдаться отсечка тока, что не наблюдается в эксперименте. Известно, что на поверхности Si(111)  $7 \times 7$  имеется высокая

плотность состояний в запрещенной зоне [4] (на поверхности запрещенная зона в спектре отсутствует). Фактически требуется, чтобы для электронов на центре был резервуар, пополняющий их уход в иглу и наоборот. Далее, если при туннелировании, для определенности, из кристалла в иглу состояния с определенной проекцией спина не являются собственными (что в эксперименте имеет место из-за большого спин-орбитального взаимодействия в металлах, используемых в качестве иглы, W, Au, Pt, Ir) и распадаются в игле на состояния с обеими проекциями спина. Данное обстоятельство приводит к интерференции потоков электронов со спином вверх и вниз. Поскольку энергии этих состояний отличаются на энергию  $\hbar\omega_L$ , то интерференция имеет место на конечной частоте и проявляется как особенность в частотном спектре тока.

Оказывается, что описанная картина сохраняется, когда велико кулоновское взаимодействие, и когда на центре может находиться только один электрон либо со спином вверх, либо со спином вниз.

Информация о спектральных характеристиках туннельного тока содержится в корреляторе ток-ток. Гамильтониан, учитывающий основные особенности задачи, запишем в виде

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \epsilon_0 c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + \sum_{k, \sigma} \epsilon_{tk} c_{tk\sigma}^{\dagger} c_{tk\sigma} + \sum_{k, \sigma} \epsilon_{ck} c_{ck\sigma}^{\dagger} c_{ck\sigma} + \\ + \sum_{k, \sigma} (T_k c_{tk\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + V_k c_{ck\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + \text{э.с.}) + \sum_{\sigma} U n_{0\sigma} n_{0-\sigma} + \sum_{\substack{k, k' \\ \sigma, \sigma'}} \Lambda_{k, k'}^{\sigma, \sigma'} c_{tk\sigma}^{\dagger} c_{tk'\sigma'}. \quad (1)$$

Первый член описывает состояния электронов на центре, второй и третий – состояния электронов в игле и непрерывном спектре кристалла (резервуаре). Четвертый и пятый учитывают туннельную связь с иглой и резервуаром. Предпоследний член учитывает соответственно кулоновское отталкивание на центре и спин-орбитальное взаимодействие в игле.

Туннелирование в иглу происходит непосредственно с центра, на котором пополнение происходит из резервуара.

Наша задача будет сводиться к вычислению коррелятора ток-ток. Оператор туннельного тока имеет стандартный вид:

$$\hat{I}(t) = \frac{ie}{2} \sum_{k\sigma} (T_k c_{tk\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + V_k c_{ck\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} - \text{э.с.}). \quad (2)$$

Спектр флуктуаций тока определяется коррелятором

$$(II)_{\Omega} = \int dt e^{i\Omega t} \langle \hat{I}(t) \hat{I}(0) + \hat{I}(0) \hat{I}(t) \rangle, \quad (3)$$

последний, аналогично [5], представляется через келдышевские функции Грина (ФГ) [6]:

$$(II)_{\Omega} = \frac{e^2}{4} \int \text{Tr} \{ (\hat{T} + \hat{V})(\omega') \hat{G}(\omega) + \hat{G}(\omega') (\hat{T} + \hat{V})(\omega) + \\ + \hat{G}(\omega') [(\hat{T} - \hat{V})(\omega) \hat{G}(\omega) (\hat{T} - \hat{V})(\omega)] + [(\hat{T} - \hat{V})(\omega') \hat{G}(\omega') (\hat{T} - \hat{V})(\omega')] \hat{G}(\omega) - \\ - [(\hat{T} - \hat{V})(\omega') \hat{G}(\omega')] [(\hat{T} - \hat{V})(\omega) \hat{G}(\omega)] - [\hat{G}(\omega') (\hat{T} - \hat{V})(\omega')] [\hat{G}(\omega) (\hat{T} - \hat{V})(\omega)] \} d\omega / 2\pi. \quad (4)$$

Tr означает суммирование по келдышевским контурным и спиновым индексам, введено также обозначение  $\omega' = \omega + \Omega$ . Удобно учесть недиагональные по спину

ФГ по теории возмущений. Невозмущенные диагональные по спину ФГ  $\hat{T}$  и  $\hat{V}$  определены следующим образом:

$$T^{A,R}(\omega) = \sum_k |T_k|^2 / (\omega - \epsilon_{tk} \pm i0),$$

$$T(\omega) = t \begin{pmatrix} f_t(\omega) \\ f_t(\omega) + 1 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$t = \pi \sum_k |T_k|^2 \delta(\omega - \epsilon_{tk}),$$

где  $f_t(\omega)$  – фермиевская функция распределения в игле. Аналогично для  $\hat{V}$  с заменой индекса  $t$  на  $c$ , и  $t$  на  $v$ .

Функция Грина электронов на изолированном центре может быть найдена точно [7], а туннельная связь с состояниями иглы и резервуара в кристалле учтена по теории возмущений (см., например, [8]). Имеем

$$\rho_\sigma(\omega) = \frac{\gamma[\omega - \epsilon_{0\sigma} - U(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)]}{(\omega - \epsilon_{0\sigma})^2 (\omega - \epsilon_{0\sigma} - U)^2 + [\omega - \epsilon_{0\sigma} - U(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)]^2 \gamma^2},$$

$$G_\sigma^>(\omega) = i\rho_\sigma(\omega) \begin{pmatrix} F(\omega) \\ F(\omega) + 1 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$$F(\omega) = (t f_t(\omega) + v f_c(\omega)) / (t + v),$$

$$\gamma = t + v.$$

Отметим, что функция распределения на центре формируется благодаря туннельной связи с резервуаром и иглой. Спин-зависимый вклад в спектр туннельного тока на фоне обычного избыточного шума связан с корреляцией во времени потоков туннелирующих электронов со спином вверх и вниз, и с учетом (4)–(6) имеет вид

$$\delta(II)_\Omega \cong \frac{|t_{\uparrow\downarrow}|^2}{\pi} \int G_\uparrow(\omega) G_\downarrow(\omega + \Omega) [F(\omega) + F(\omega + \Omega) - 2F(\omega)F(\omega + \Omega)] d\omega / 2\pi, \quad (7)$$

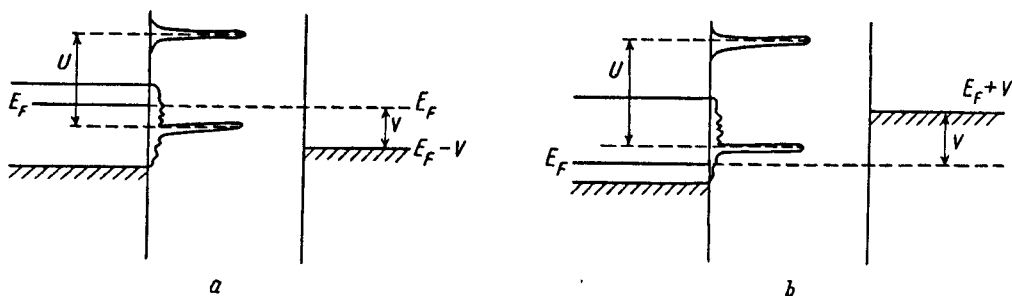
где  $t_{\uparrow\downarrow}$  – поправка к ФГ иглы, недиагональная по спину:

$$|t_{\uparrow\downarrow}|^2 = \frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \sum_{k,k'} |T_k|^2 \Lambda_{k,k}^{\uparrow\downarrow} |T_{k'}|^2 / ((\omega - \epsilon_{tk\uparrow} + i0)(\omega - \epsilon_{tk'\downarrow} + i0)) \right\}. \quad (8)$$

При этом возможны две различные ситуации. Уровень Ферми (в отсутствие приложенного напряжения) лежит выше, чем уровень на центре. Второй уровень всегда пуст, поскольку из-за большого хаббардовского отталкивания лежит высоко в зоне проводимости (см. рисунок, а). Тогда избыточный спиновый шум с особенностью на частоте  $\Omega \cong \omega_L$  должен наблюдаться при положительном напряжении на игле и равен

$$\delta(II)_\Omega \cong e^2 \frac{\gamma}{\pi[(\Omega - \omega_L)^2 + \gamma^2]} |t_{\uparrow\downarrow}|^2 [(v+t)/(2v+t)]^2. \quad (9)$$

В противоположной ситуации, когда уровень Ферми лежит ниже уровня центра (рисунок, б) особенность в спектре тока должна наблюдаться при отрицательном напряжении на игле.



Таким образом, предсказываемый шум в туннельном токе является избыточным шумом (shot noise) в отличие от когерентного шума, рассмотренного ранее [3]. В эксперименте могут работать оба механизма.

Интересно оценить минимальную ширину локализованного уровня, при которой еще не наступает отсечки тока. Типичные значения туннельного тока составляют  $1 \text{ нА}$ , что соответствует темпу туннелирования  $10^{10}$  эл/с. Это означает, что резервуар должен пополнять уровень электронами или удалять электроны с уровня с характерным временем  $\tau \approx 10^{-10}$  с. Ширина уровня должна быть  $\gamma \gg \hbar/\tau \approx 10^{-5}$  эВ. Таким образом, ширина уровня достаточно мала, и в обычных ЭПР экспериментах уровень ведет себя как действительно локализованный.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований.

1. Y.Manassen, R.J.Hamers, J.E.Demuth, and A.J.Castellano, Jr., Phys. Rev. Lett. **62**, 2513 (1989).
2. Y.Manassen, E.Ter-Ovanesyan, D.Shachal, and S.Ricter, Phys. Rev. **B48**, 4887 (1993).
3. S.N.Molotkov, Surf. Sci. **264**, 235 (1992).
4. Guo-Xin Qian and D.J.Chadi, J. Vac. Sci. Techn. **A5**, 906 (1987).
5. L.Y.Chen and C.S.Ting, Phys. Rev. **B43**, 4534 (1991).
6. Л.В.Келдыш, ЖЭТФ **47**, 1515 (1964).
7. J.Hubbard, Proc. Royal Soc. **A276**, 238 (1963).
8. С.Н.Молотков, С.С.Назин, Письма в ЖЭТФ **57**, 482 (1993).