ЖЭТФ, 2011, том 140, вып. 2 (8), стр. 305–316

ЭФФЕКТЫ НЕУПРУГОГО СПИН-ЗАВИСЯЩЕГО ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА ЧЕРЕЗ СПИНОВУЮ НАНОСТРУКТУРУ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В. В. Вальков[a,b,c*], *С. В. Аксенов*[a,b]

[a] *Институт физики Сибирского отделения Российской академии наук*
660036, Красноярск, Россия

[b] *Сибирский федеральный университет*
660041, Красноярск, Россия

[c] *Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М. Ф. Решетнева*
660014, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 30 сентября 2009 г.
после переработки 28 декабря 2010 г.

В приближении сильной связи при использовании формализма Ландауэра – Буттикера исследованы транспортные и вольт-амперные характеристики (ВАХ) системы спиновых димеров с антиферромагнитной связью, расположенных между металлическими контактами. Показано, что s–$d(f)$-обменное взаимодействие между спиновыми моментами транспортируемых электронов и спинами наноструктуры приводит как к созданию потенциального профиля, так и к его изменению за счет спин-флип-процессов. В результате спин-зависящий транспорт становится неупругим, а коэффициент прохождения и ВАХ — сильно модифицированными. Обнаружено, что включение магнитного поля индуцирует дополнительные пики прозрачности в спектральной характеристике системы и вызывает эффект колоссального магнитосопротивления.

1. ВВЕДЕНИЕ

Прогресс последних десятилетий в области экспериментальных исследований на нанометровых масштабах привел к необходимости развития теоретического описания квантового транспорта в наноструктурах. На сегодняшний день существует большое количество работ, отражающих существенное влияние транспортируемых частиц на проводящие свойства наноразмерных объектов. Ярким примером такого воздействия может служить эффект кулоновской блокады, возникающий в результате кулоновского отталкивания между электроном, находящимся в наноустройстве, и туннелирующим электроном [1–3].

В такой ситуации транспорт в значительной степени определяется неупругими процессами, обусловленными изменениями потенциального рельефа структуры за счет взаимодействия с проходящим электроном. В частности, неупругие эффекты, обусловленные электрон-фононным взаимодействием и сильными электронными корреляциями, активно проявляются в транспортных характеристиках молекулярных контактов. Неупругий характер квантового транспорта в таких структурах вызывает нелинейное поведение ВАХ и проводимости, отрицательную дифференциальную проводимость, динамическое переключение и переключение токового шума, гистерезис тока, нагрев молекулярного контакта, возникновение резонанса Кондо [4–7]. Нетривиальные свойства проводящих молекулярных контактов обусловливают значительный интерес к этим системам как к потенциальным составным частям приборов наноэлектроники [8].

Идея использования спиновых степеней свободы в качестве дополнительного канала для хранения и передачи информации получила широкое развитие в современных экспериментальных и теоретических исследованиях и способствовала обособлению отдельного направления, так называемой спиновой электроники [9, 10]. В этой области неупругие

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

спин-спиновые взаимодействия также играют существенную роль. Известно, в частности, что посредством s–$d(f)$-обменного взаимодействия между спиновыми моментами электронов проводимости и спиновыми моментами атомов ферромагнитного нанослоя реализуется управление его намагниченностью без приложения внешнего магнитного поля. В качестве механизма, способного инициировать переключение намагниченности, было предложено использовать действие поверхностного крутильного момента на намагниченность ферромагнетика [11, 12]. В дальнейшем был разработан объемный механизм инжекции неравновесных спинов [13, 14]. Другим примером влияния неупругого s–$d(f)$-обменного взаимодействия на проводящие свойства наноразмерных объектов служат эксперименты и теория по сканирующей туннельной микроскопии, где исследуются транспортные свойства магнитных одиночных атомов, а также комплексов из их небольшого числа, адсорбированных на металлическую подложку в присутствии сильных магнитных полей при низких температурах [15–18].

В последние годы интенсивно исследуются транспортные явления, относящиеся как к области молекулярной электроники, так и к спинтронике. Например, для случая магнитных электродов, между которыми находятся молекулярные структуры, влияние неупругих спин-спиновых и электрон-фононных взаимодействий значительно сказывается на электронной заселенности, плотности состояний, спин-зависящем токе и туннельном магнитосопротивлении [19, 20]. Таким образом, перспективным представляется исследование эффектов неупругого спин-зависящего транспорта в магнитных наноструктурах, таких как одиночные атомы или кластеры на металлических поверхностях [21] или магнитные молекулы [22]. Такие системы могут проявлять сильную анизотропию, достаточную для поддержания устойчивой спиновой ориентации при низких температурах. Значительная анизотропия отдельных атомов подобных нанокластеров интересна в качестве возможности уменьшения магнитных битов ниже размеров, при которых домены сегодняшних тонкопленочных магнитных материалов становятся неустойчивыми при комнатных температурах. Большой интерес в системах с выраженной магнитной анизотропией представляет изучение влияния внешнего магнитного поля на их проводящие характеристики.

В данной работе представлены результаты расчетов транспортных характеристик наноструктуры, представленной системой спиновых димеров, расположенной между металлическими контактами во внешнем магнитном поле. Спиновый димер, находящийся в основном синглетном состоянии и имеющий возбужденные триплетные состояния, является распространенной конфигурацией спиновой подсистемы у ряда молекул и молекулярных структур. Неупругое рассеяние электронов проводимости на потенциальном рельефе рассматриваемой наноструктуры возникает за счет спин-спинового s–$d(f)$-обменного взаимодействия между спиновыми моментами транспортируемых частиц и спиновыми моментами димеров. Однако неупругое взаимодействие при этом не вызывает диссипации энергии, т. е. транспорт является когерентным и его описание может осуществляться в рамках формализма Ландауэра – Буттикера [23, 24].

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ГАМИЛЬТОНИАН

Рассмотрим спин-поляризованный электронный ток через две плоскости магнитоактивных атомов, представляющие собой систему спиновых димеров, которую для краткости в дальнейшем будем называть устройством. Будем предполагать, что устройство находится между металлическими электродами, которые, в свою очередь, соединены с электронными резервуарами в виде макроскопических металлических контактов. Схематически система изображена на рис. 1. Поскольку резервуары являются макроскопическими проводниками, много большими чем электроды, электроны, входящие в резервуар, термализованы и обладают температурой и химическим потенциалом контакта перед их возвращением в устройство. Таким образом, контакты должны быть безотражательными. Это означает, что электрон, падающий на контакт, будет полностью поглощен и термализован перед его повторным излучением в устройство [25]. Электроды предполагаются идеальными и, вообще говоря, могут быть приготовлены из разных металлов.

Дальнейшее описание будет осуществляться в приближении сильной связи. Кроме того, для простоты будем пренебрегать перескоками и обменными взаимодействиями в направлениях, перпендикулярных оси x. Таким образом, транспорт ансамбля электронов в рассматриваемой системе сводится к прохождению отдельной частицы по отдельной одномерной цепочке. Отдельная цепочка образована областями левого и правого металлических электродов, а также центральной областью наноустрой-

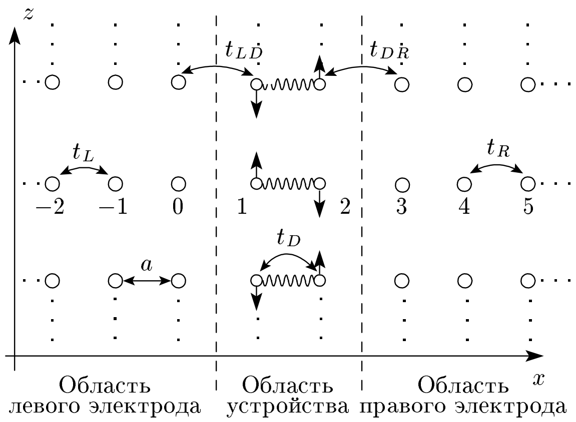

Рис. 1. Профиль наноустройства, связанного с металлическими контактами

ства — спиновым димером. На протяжении всей цепочки расстояние между узлами подразумевается одинаковым и равным a. Гамильтониан отдельной цепочки может быть представлен в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_R + \hat{H}_{LD} + \hat{H}_{DR} + \hat{H}_{De} + \hat{H}_{sf} + \hat{H}_D + U(n). \quad (1)$$

Здесь первые два слагаемых — это электронные гамильтонианы левого L и правого R контактов, которые в представлении вторичного квантования в приближении сильной связи можно записать как

$$\hat{H}_L = \sum_{\sigma,n=-\infty}^{0} \left[\varepsilon_{L\sigma} c_{n\sigma}^{+} c_{n\sigma} + t_L \left(c_{n\sigma}^{+} c_{n-1,\sigma} + c_{n-1,\sigma}^{+} c_{n\sigma}\right)\right], \quad (2)$$

$$\hat{H}_R = \sum_{\sigma,n=3}^{\infty} \left[\varepsilon_{R\sigma} c_{n\sigma}^{+} c_{n\sigma} + t_R \left(c_{n+1,\sigma}^{+} c_{n\sigma} + c_{n\sigma}^{+} c_{n+1,\sigma}\right)\right], \quad (3)$$

где $c_{n\sigma}^{+}$ $(c_{n\sigma})$ — оператор рождения (уничтожения) электрона проводимости со спином σ на узле n контакта α $(\alpha = L, R)$, $\varepsilon_{\alpha\sigma} = \varepsilon_\alpha - g_e \mu_B H \sigma$, t_α — соответственно одноэлектронная спин-зависящая энергия на узле во внешнем магнитном поле $\mathbf{H}$ и интеграл перескока на контакте α. Ось z ориентирована вдоль направления магнитного поля. Третий и четвертый члены описывают перескоки электронов проводимости между устройством и контактами,

$$\hat{H}_{LD} = \sum_{\sigma} t_{LD} \left(c_{1\sigma}^{+} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{+} c_{1\sigma}\right), \quad (4)$$

$$\hat{H}_{DR} = \sum_{\sigma} t_{DR} \left(c_{3\sigma}^{+} c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^{+} c_{3\sigma}\right). \quad (5)$$

Пятый член гамильтониана описывает поведение электронов в устройстве,

$$\hat{H}_{De} = \sum_{\sigma,n=1}^{2} \left[\varepsilon_{D\sigma} c_{n\sigma}^{+} c_{n\sigma} + t_D \left(c_{2\sigma}^{+} c_{1\sigma} + c_{1\sigma}^{+} c_{2\sigma}\right)\right]. \quad (6)$$

Неупругий характер транспорта электронов связан с наличием слагаемого $\hat{H}_{sf}$ в общем гамильтониане (1), которое отвечает за s–$d(f)$-обменное взаимодействие между спиновыми моментами электронов проводимости и спинами димера,

$$\hat{H}_{sf} = \frac{A_{sf}}{2} \sum_{n=1}^{2} \left[\left(c_{n\uparrow}^{+} c_{n\downarrow} \hat{S}_n^{-} + c_{n\downarrow}^{+} c_{n\uparrow} \hat{S}_n^{+}\right) + \left(c_{n\uparrow}^{+} c_{n\uparrow} - c_{n\downarrow}^{+} c_{n\downarrow}\right) \hat{S}_n^{z}\right], \quad (7)$$

где A_{sf} — параметр s–$d(f)$-обменного взаимодействия, $\hat{S}_n^{+}$, $\hat{S}_n^{-}$, $\hat{S}_n^{z}$ — спиновые операторы димера на узле n.

Оператор $\hat{H}_D$ в гамильтониане (1) описывает обменное взаимодействие между спиновыми моментами димеров, находящихся в устройстве, а также их зеемановскую энергию в магнитном поле H. В изотропном случае этот оператор записывается в виде

$$\hat{H}_D = I\left(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2\right) - g_D \mu_B H \left(S_1^z + S_2^z\right), \quad (8)$$

где I — параметр обменного взаимодействия спинов димера. В дальнейшем предполагается, что $I > 0$. Это означает, что между спиновыми моментами реализуется обменная связь антиферромагнитного типа. Следовательно, при относительно слабых магнитных полях $(g_D \mu_B H < I)$ основному состоянию димера соответствует синглетное состояние.

Последний член в гамильтониане характеризует потенциальную энергию электронов во внешнем электрическом поле, обусловленном разностью потенциалов на контактах V. Как известно, вид вольт-амперной характеристики существенно зависит от конкретного профиля потенциала в области между электродами. В работе, для простоты, мы ограничимся рассмотрением транспортных характеристик в предположении, что потенциал изменяется линейно вдоль центральной области.

3. СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ

При записи решений уравнения Шредингера следует учитывать изменение состояния спинового димера, индуцируемое воздействием пролетающего электрона. Анализ s–$d(f)$-оператора показывает, что слагаемое, пропорциональное $\sigma^z S^z$, индуцирует перевод димера из синглетного состояния D_{00} в триплетное D_{10} без изменения проекции спина у транспортируемого электрона, а слагаемое, пропорциональное $\sigma^- S^+$, приводит к переводу димера из синглетного состояния D_{00} в триплетное D_{11} с одновременным изменением проекции спина у транспортируемого электрона. Поэтому полное гильбертово пространство представляет собой произведение подпространства для транспортируемого электрона и подпространства спинового димера. В качестве базиса гильбертова пространства выберем базис состояний, каждое из которых характеризует спиновое состояние транспортируемого электрона на узле n, а также одно из четырех состояний спинового димера. С учетом сказанного этот базис будем обозначать посредством $D_{JJ_z} c^+_{n\sigma}|0\rangle$, где D_{JJ_z} соответствует состоянию спинового димера с суммарным спиновым моментом J и проекцией этого момента J_z на ось квантования z, $|0\rangle$ — вакуумное состояние, обозначающее состояние системы без электрона. В выбранных обозначениях четыре состояния димера описываются выражениями

$$\begin{gathered} D_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right), \\ D_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right), \\ D_{11} = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad D_{1,-1} = |\downarrow\downarrow\rangle, \end{gathered} \tag{9}$$

где использованы дираковские кет-векторы $|\sigma_1\sigma_2\rangle$. Каждый из этих четырех кет-векторов описывает состояние, в котором первый спин димера имеет проекцию σ_1, а второй — σ_2.

В соответствии с принятой системой обозначений решение уравнения Шредингера для случая, когда транспортируемый из левого контакта электрон обладал проекцией спинового момента $\sigma = +1/2$, а спиновый димер находился в синглетном состоянии, записывается в виде

$$|\Psi_L\rangle = \sum_n \Big[w_{n\uparrow} c^+_{n\uparrow} D_{00} + \\ + u_{n\uparrow} c^+_{n\uparrow} D_{10} + v_{n\downarrow} c^+_{n\downarrow} D_{11} \Big] |0\rangle. \tag{10}$$

Примешивание триплетных состояний димера описывается двумя последними слагаемыми и связано с разобранными выше процессами, индуцируемыми s–$d(f)$-обменным взаимодействием электрона с локализованными моментами спинового димера.

Будем считать, что инжектируемый левым контактом электрон обладает волновым вектором k_L. Тогда выражения для парциальных амплитуд в левом ($n \le 0$) и правом ($n \ge 3$) контактах можно представить в виде

$$\begin{aligned} n \le 0: \; & w_{n\uparrow} = e^{ik_L na} + r_{00} e^{-ik_L na}, \\ & u_{n\uparrow} = r_{10} e^{-iq_L na}, \quad v_{n\downarrow} = r_{11} e^{-ip_L na}; \\ n \ge 3: \; & w_{n\uparrow} = t_{00} e^{ik_R na}, \\ & u_{n\uparrow} = t_{10} e^{iq_R na}, \quad v_{n\downarrow} = t_{11} e^{ip_R na}, \end{aligned} \tag{11}$$

где r_{00}, r_{10}, r_{11} — амплитуды, возникновение которых связано с процессами отражения от потенциальной структуры димера, при этом димер находится соответственно в синглетном и триплетном состояниях; t_{00}, t_{10}, t_{11} — амплитуды, описывающие процессы прохождения электрона, при которых димер остается соответственно в синглетном и триплетных состояниях; k_L, k_R, q_L, q_R, p_L, p_R — волновые векторы. Содержание индексов у амплитуд r, t аналогично ранее обсуждавшимся индексам для спиновых волновых функций димера. Введенные волновые векторы связаны с энергией электрона в левом контакте посредством дисперсионных соотношений

$$\begin{aligned} & E = \varepsilon_L + U(1) + 2t_L \cos k_L a, \\ & E = \varepsilon_L + U(1) + I + 2t_L \cos q_L a, \\ & E = \varepsilon_L + U(1) + I + (2 - g_D)\mu_B H + 2t_L \cos p_L a. \end{aligned} \tag{12}$$

Аналогично для правого контакта выполняются соотношения

$$\begin{aligned} & E = \varepsilon_R + U(2) + 2t_R \cos k_R a, \\ & E = \varepsilon_R + U(2) + I + 2t_R \cos q_R a, \\ & E = \varepsilon_R + U(2) + I + (2 - g_D)\mu_B H + 2t_R \cos p_R a. \end{aligned} \tag{13}$$

Из уравнения Шредингера после приравнивания парциальных амплитуд при ортогональных базисных элементах для $n = 0, 1, 2, 3$ получаем недостающие двенадцать уравнений (с учетом трех различных спиновых конфигураций системы), приведенные в Приложении (А.1).

Для расчета вольт-амперной характеристики необходимо знать решения и в том случае, когда электрон с проекцией спинового момента $\sigma = +1/2$ инжектируется правым контактом. В этом случае соотношения (12), (13) остаются в силе, а волновая функция системы записывается в виде

$$|\Psi_R\rangle = \sum_n \Big[w'_{n\uparrow} c^+_{n\uparrow} D_{00} + u'_{n\uparrow} c^+_{n\uparrow} D_{10} + \\ + v'_{n\downarrow} c^+_{n\downarrow} D_{11} \Big] |0\rangle, \tag{14}$$

где

$$
\begin{aligned}
n \le 0:\ & w'_{n\uparrow} = t'_{00} e^{-ik_L na}, \\
& u'_{n\uparrow} = t'_{10} e^{-iq_L na}, \quad v'_{n\downarrow} = t'_{11} e^{-ip_L na}; \\
n \ge 3:\ & w'_{n\uparrow} = e^{-ik_R na} + r'_{00} e^{ik_R na}, \\
& u'_{n\uparrow} = r'_{10} e^{iq_R na}, \quad v'_{n\downarrow} = r'_{11} e^{ip_R na}.
\end{aligned}
\tag{15}
$$

Дополнительная система из двенадцати уравнений приведена в Приложении (А.2). В выражениях (12), (13), (А.1), (А.2) проведена ренормировка энергии $E \to E + 3I/4 + \mu_B H$.

Следует подчеркнуть, что дальнейшее рассмотрение будет ограничено изучением одномодового режима. Под этим понимается ситуация, когда в левом (правом) электроде налетающий на устройство электрон для заданного значения энергии описывается состоянием только с одним фиксированным значением волнового вектора k_L (k_R). Вместе с тем для отраженных от устройства волн, а также для прошедших через устройство волн примешиваются состояния с другими значениями волновых векторов. Это связано с наличием внутренних степеней свободы у димерного устройства. Из-за s–$d(f)$-обменной связи внутренние степени свободы участвуют в процессе рассеяния и индуцируют дополнительные состояния всей системы в целом. Таким образом, присутствие нескольких подзон в энергетическом спектре электронов для всей системы, отличающихся значениями квантовых чисел полного спинового момента димера $\hat{J}_D$ и его проекции $\hat{J}_{Dz}$, вызвано отмеченным s–$d(f)$-взаимодействием. В этом состоит одно из отличий от распространенных мезоскопических систем, в которых многомодовый режим квантовых проволок, образующих электроды, связан с учетом пространственного квантования [25].

4. КОЭФФИЦИЕНТ ПРОХОЖДЕНИЯ

Решение полученных систем уравнений определяет амплитуды отражения r_{00}, r_{10}, r_{11} и прохождения t_{00}, t_{10}, t_{11}. После их вычисления можно перейти к нахождению коэффициентов отражения R и прохождения T. Для этого воспользуемся квазиклассическими выражениями для плотностей падающего j_{inc}, отраженного j_{ref} и прошедшего j_{tr} потоков вероятности

$$
\begin{aligned}
j_{inc} &= \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k_L}, \\
j_{tr} &= \frac{1}{\hbar}\left[\frac{\partial E}{\partial k_R}|t_{00}|^2 + \frac{\partial E}{\partial q_R}|t_{10}|^2 + \frac{\partial E}{\partial p_R}|t_{11}|^2\right], \\
j_{ref} &= \frac{1}{\hbar}\left[\frac{\partial E}{\partial k_L}|r_{00}|^2 + \frac{\partial E}{\partial q_L}|r_{10}|^2 + \frac{\partial E}{\partial p_L}|r_{11}|^2\right].
\end{aligned}
\tag{16}
$$

Как известно, коэффициент прохождения T определяется через отношение плотности прошедшего потока вероятности к плотности падающего потока вероятности $T = |j_{tr}|/|j_{inc}|$ [26]. Соответственно этому, получаем

$$
T = \begin{cases} T_{00}+T_{10}+T_{11}, & 0 < k_R, q_R, p_R < \pi/a, \\ T_{00} + T_{10}, & 0 < k_R, q_R < \pi/a, \\ T_{00}, & 0 < k_R < \pi/a, \end{cases} \tag{17}
$$

где

$$
\begin{aligned}
T_{00} &= \frac{|t_R|}{|t_L|}\frac{\sin k_R a}{\sin k_L a}|t_{00}|^2, \\
T_{10} &= \frac{|t_R|}{|t_L|}\frac{\sin q_R a}{\sin k_L a}|t_{10}|^2, \\
T_{11} &= \frac{|t_R|}{|t_L|}\frac{\sin p_R a}{\sin k_L a}|t_{11}|^2
\end{aligned}
\tag{18}
$$

— парциальные вклады в общий коэффициент прохождения T от состояний, в которых димер имеет соответственно синглетную или триплетные спиновые конфигурации. Коэффициент отражения $R = |j_{ref}|/|j_{inc}|$ определяется выражением

$$
R = \begin{cases} R_{00}+R_{10}+R_{11}, & 0 < k_L, q_L, p_L < \pi/a, \\ R_{00} + R_{10}, & 0 < k_L, q_L < \pi/a, \\ R_{00}, & 0 < k_L < \pi/a, \end{cases} \tag{19}
$$

где

$$
\begin{aligned}
R_{00} = |r_{00}|^2, \quad R_{10} &= \frac{\sin q_L a}{\sin k_L a}|r_{10}|^2, \\
R_{11} &= \frac{\sin p_L a}{\sin k_L a}|r_{11}|^2.
\end{aligned}
\tag{20}
$$

Число не равных нулю парциальных вкладов соответствует числу решений дисперсионных уравнений для волновых векторов, лежащих в пределах первой зоны Бриллюэна. Величины R и T удовлетворяют закону сохранения полной вероятности, т. е. $R + T = 1$.

Характерное поведение коэффициента прохождения $T(E)$ и его парциальных составляющих $T_{00} = T_{00}(E)$, $T_{10} = T_{10}(E)$, $T_{11} = T_{11}(E)$ при изменении энергии входящих электронов из левого электрода представлено на рис. 2. На графике выделяются две области, где зависимости от энергии этих величин существенно различаются. В области $E < -0.05$ эВ полный коэффициент прохождения определяется только теми процессами, при которых не происходят переходы димеров в триплетные состояния. При $E > -0.05$ эВ происходит включение процессов, приводящих к возбуждению димеров в

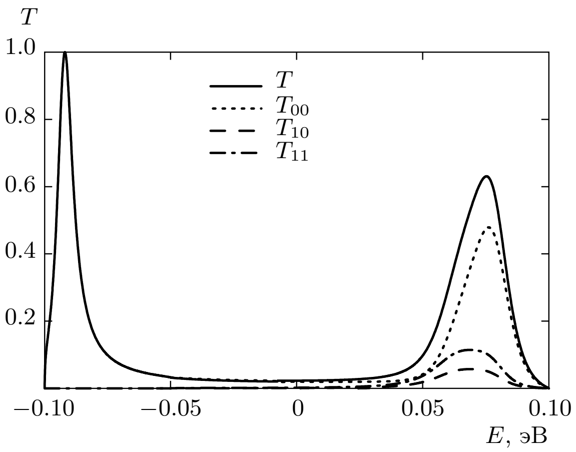

Рис. 2. Зависимость общего коэффициента прохождения T и его парциальных компонент T_{00}, T_{10} и T_{11} от энергии налетающего электрона для параметров $\varepsilon_L = \varepsilon_D = \varepsilon_R = 0$, $t_L = t_R = -0.05$ эВ, $t_{LD} = t_{DR} = -0.025$ эВ, $t_D = -0.0375$ эВ, $\mu_B H = 0$, $I = 0.05$ эВ, $A_{sf} = 0.15$ эВ, $V = 0$

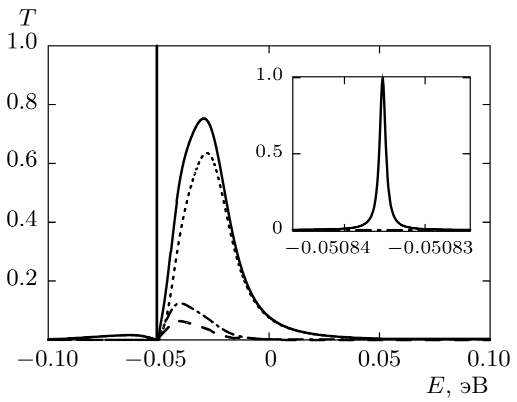

Рис. 3. Зависимость общего коэффициента прохождения T и его парциальных компонент T_{00}, T_{10} и T_{11} от энергии налетающего электрона для параметров $t_L = t_R = -0.05$ эВ, $t_{LD} = t_{DR} = -0.025$ эВ, $t_D = -0.0375$ эВ, $\mu_B H = 0.25$ мэВ, $I = 0.05$ эВ, $A_{sf} = 0.15$ эВ, $\varepsilon_L = \varepsilon_R = 0$, $\varepsilon_D = -0.09$ эВ, $V = 0$. На вставке: индуцирование магнитным полем пика резонансного прохождения

триплетные состояния. Поэтому полный коэффициент T формируется с учетом вкладов от возбужденных состояний электрона и димера (штриховая и штрихпунктирная кривые рис. 2).

В области низких энергий, когда электроны рассеиваются на потенциальном профиле димера, находящегося в основном синглетном состоянии, включение магнитного поля может привести к возникновению дополнительных резонансных пиков, как это показано на вставке к рис. 3. В представленном случае продемонстрировано появление одного из двух пиков в магнитном поле, когда одноэлектронная энергия на узлах устройства ε_D отлична от аналогичного параметра электродов ε_L и ε_R. Качественно схожая ситуация имеет место и при других значениях параметров системы. Пик при $E \approx -0.025$ эВ соответствует правому пику на рис. 2 ($E \approx 0.075$ эВ), который смещается влево при увеличении модуля ε_D. Эффект индуцирования магнитным полем окон прозрачности отмечался ранее авторами при рассмотрении задач о неупругом спин-зависящем электронном транспорте через модельные спиновые наноструктуры в непрерывной среде [27, 28].

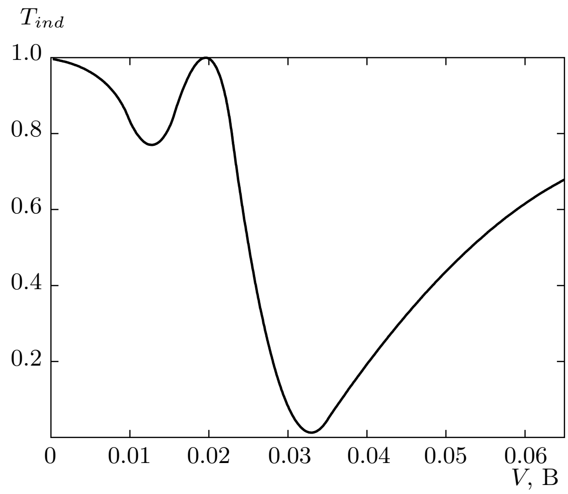

Рис. 4. Зависимость величины пика, наведенного магнитным полем, T_{ind}, от величины напряжения для параметров $t_L = t_R = -0.05$ эВ, $t_{LD} = t_{DR} = -0.025$ эВ, $t_D = -0.0375$ эВ, $\mu_B H = 0.25$ мэВ, $I = 0.1$ эВ, $A_{sf} = 0.15$ эВ, $\varepsilon_L = \varepsilon_R = 0.05$ эВ, $\varepsilon_D = -0.6$ эВ

Включение электрического поля, как видно из рис. 4, вызывает заметные изменения величины этих пиков. При построении рис. 4 считалось, что к правому контакту приложено электрическое напряжение так, что $-eV = U(2) - U(1)$. Поэтому $\mu_R = \mu_L - eV$, где μ_R и μ_L — электрохимические потенциалы соответственно левого и правого контактов. Отмеченное предположение будет использоваться в дальнейшем в работе при расчете ВАХ.

Изменяя параметры системы, можно добиться возникновения запрещенной зоны по энергии (энергетический диапазон $0 < E < 0.05$ эВ на рис. 5*a*) для электронов в правом контакте. Соответственно,

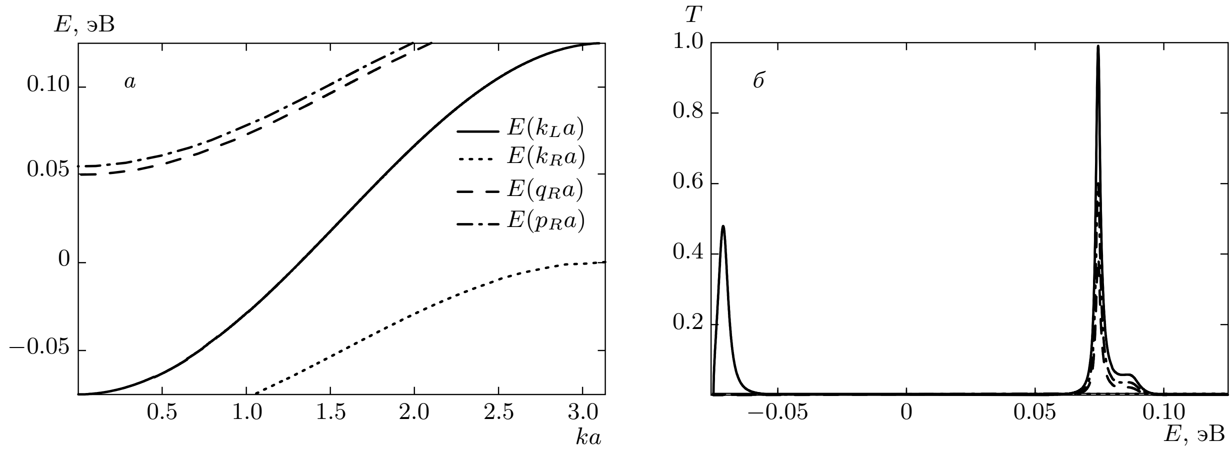

Рис. 5. Зонная структура (a) и зависимость общего коэффициента прохождения T и его парциальных компонент T_{00}, T_{10} и T_{11} от энергии налетающего электрона ($б$) для параметров $t_L = -0.05$ эВ, $t_R = -0.025$ эВ, $t_{LD} = t_D = t_{DR} = -0.0125$ эВ, $\mu_B H = 0.005$ эВ, $I = 0.15$ эВ, $A_{sf} = 0.15$ эВ, $\varepsilon_L = 0.025$ эВ, $\varepsilon_D = -0.0375$ эВ, $\varepsilon_R = -0.05$ эВ, $V = 0$

электроны, падающие на димер из левого контакта и имеющие энергии из данного диапазона, испытывают полное отражение (см. рис. 5$б$).

5. ВОЛЬТ-АМПЕРНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА

Учитывая, что электронная плотность, связанная с одним k-состоянием в проводнике длиной L, равна $1/L$, получим, что в квазиклассическом приближении ток I_{LR}, переносимый состоянием рассеяния (10), определяется выражением ($m = 00, 10, 11$; $k_{00} = k_R$, $k_{10} = q_R$, $k_{11} = p_R$)

$$I_{LR} = \frac{e}{L}\sum_m \sum_k \frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial E}{\partial k}\right)_{k=k_m} T_m(E) f_L(E), \quad (21)$$

где $f_L(E) \equiv f(E-\mu_L)$ — фермиевская функция распределения электронов. Переходя от суммирования по квазиимпульсу к интегрированию по энергии, получаем

$$I_{LR} = \frac{e}{h}\sum_m \int dE\, T_m(E) f_L(E). \quad (22)$$

При конечных температурах необходимо учитывать поток электронов из правого контакта в левый. Поэтому ток, переносимый состояниями (14), можно записать аналогично I_{LR}, а именно

$$I_{RL} = \frac{e}{h}\sum_m \int dE\, T'_m(E) f_R(E), \quad (23)$$

где $f_R(E) \equiv f(E-\mu_R)$, T'_m — парциальные коэффициенты прохождения для электрона, падающего на устройство из правого электрода, которые определяются следующими выражениями:

$$\begin{aligned} T'_{00} &= \frac{|t_L|}{|t_R|}\frac{\sin k_L a}{\sin k_R a}|t'_{00}|^2, \\ T'_{10} &= \frac{|t_L|}{|t_R|}\frac{\sin q_L a}{\sin k_R a}|t'_{10}|^2, \\ T'_{11} &= \frac{|t_L|}{|t_R|}\frac{\sin p_L a}{\sin k_R a}|t'_{11}|^2. \end{aligned} \quad (24)$$

Результирующий ток определяется выражением

$$I = I_{LR} - I_{RL} = \frac{e}{h}\times \\ \times \sum_m \int dE\big[T_m(E) f_L(E) - T'_m(E) f_R(E)\big], \quad (25)$$

которое эквивалентно формуле, получаемой в рамках формализма Ландауэра–Буттикера [29].

Таким образом, электронный транспорт в рассматриваемой системе можно интерпретировать как транспорт по трем эффективным каналам, возникающим благодаря наличию возбужденных состояний спинового димера. В каждом канале электроны проводимости имеют свою проекцию спиновых моментов: в двух из них спины поляризованы по магнитному полю, а в третьем — противоположно.

Типичные вольт-амперная характеристика и дифференциальная проводимость $G(V) = dI/dV$ устройства, использующего спиновый димер в качестве активного элемента, расположенного

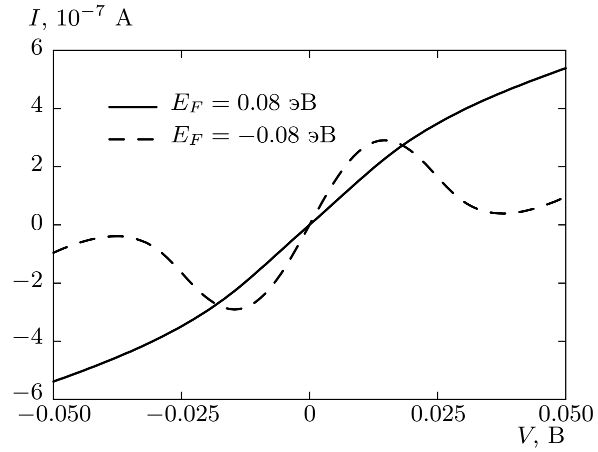

Рис. 6. ВАХ спинового димера, вычисленная для параметров $\varepsilon_L = \varepsilon_D = \varepsilon_R = 0$, $t_L = t_R = -0.05$ эВ, $t_{LD} = t_{DR} = -0.025$ эВ, $t_D = -0.05$ эВ, $\mu_B H = 0.005$ эВ, $I = 0.075$ эВ, $A_{sf} = 0.125$ эВ, $T \approx 30$ К при двух значениях энергии Ферми контактов

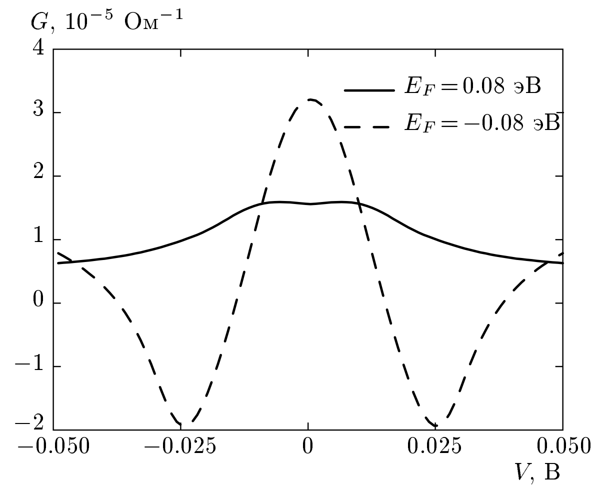

Рис. 7. Дифференциальная проводимость спинового димера, вычисленная для рис. 6

между металлическими электродами, представлена соответственно на рис. 6 и рис. 7. Из вида представленных зависимостей следует, что увеличение энергии Ферми в левом контакте приводит к качественному изменению ВАХ. При малых значениях энергии Ферми, когда в транспорте принимают участие только низкоэнергетические электроны, ВАХ содержит участки с отрицательной дифференциальной проводимостью. Это происходит в режиме, когда триплетные состояния димера не возбуждаются и неупругие процессы не включены. Заметим, что возникновение областей с отрицательной дифференциальной проводимостью

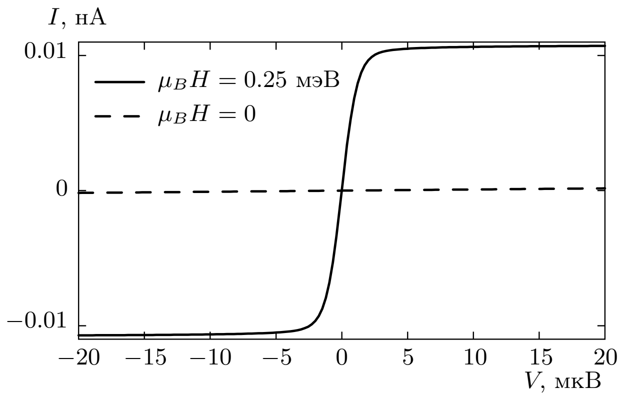

Рис. 8. Влияние магнитного поля на ВАХ в результате индуцирования пика прозрачности для параметров рис. 3, $E_F \approx -0.051$ эВ и $T \approx 3$ мК

обнаруживалось, в частности, в экспериментах по сканирующей туннельной микроскопии, где транспорт осуществляется через молекулярные комплексы и отдельные молекулы, адсорбированные на поверхности металлов [30].

В случае больших значений энергии Ферми, когда энергия электронов достаточна для перевода димеров в возбужденные состояния и транспорт становится неупругим, области с отрицательной дифференциальной проводимостью в ВАХ исчезают. При этом с хорошей степенью точности получающаяся ВАХ соответствует закону Ома.

Ранее отмечалось, что включение магнитного поля может приводить к нетривиальному изменению транспортных свойств исследуемой системы. В частности, было показано, что при определенных условиях магнитное поле способно индуцировать дополнительные пики прозрачности для транспортируемого электрона. Очевидно, что этот эффект должен проявляться и в ВАХ системы, изображенной на рис. 8. Видно, что при значениях напряжения порядка одного микровольта ВАХ имеет сильную нелинейную зависимость, а дифференциальная проводимость, представленная на рис. 9, обладает резким максимумом.

Приведенные результаты показывают, что в рассмотренной области параметров исследуемая система будет характеризоваться аномально большим магнитосопротивлением $\mathrm{MR} = (G(H)/G(0) - 1) \times 100\,\%$. Соответствующие расчеты зависимости магнитосопротивления от приложенного напряжения показаны на рис. 10.

Видно, что изменение сопротивления в магнитном поле может достигать $10^5\,\%$. Заметим, что вы-

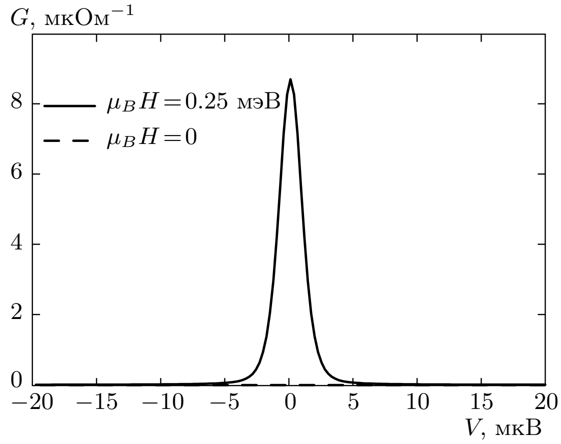

Рис. 9. Влияние магнитного поля на проводимость в результате индуцирования пика прозрачности для параметров рис. 3, $E_F \approx -0.051$ эВ и $T \approx 3$ мК

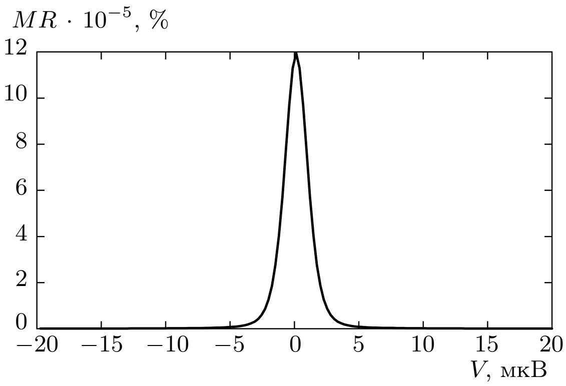

Рис. 10. Магнитосопротивление для параметров рис. 3, $E_F \approx -0.051$ эВ и $T \approx 3$ мК

сокие значения магнитосопротивления получаются достаточно часто для устройств, основанных на использовании наноструктурных элементов.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное рассмотрение квантового транспорта электронов через спин-димерную систему позволило установить ряд принципиальных особенностей, связанных с наличием у этой системы внутренних степеней свободы. Главная из них обусловлена тем, что потенциальный профиль для транспортируемого электрона формируется за счет s–$d(f)$-обменного взаимодействия спинового момента электрона со спиновыми моментами наноструктуры. Поэтому для синглетного состояния димера, когда спиновая конфигурация описывается когерентной суперпозицией состояний с различными значениями проекций спиновых моментов на ось квантования, изинговская часть s–$d(f)$-обменного взаимодействия приводит к формированию смеси потенциальных профилей типа «барьер–яма», «яма–барьер» и т. д. Конкретная реализация этих профилей определяется спиновой поляризацией транспортируемого электрона. Это индуцирует спин-поляризационную зависимость транспортных характеристик рассматриваемой наноструктуры. Поперечная часть s–$d(f)$-обменного взаимодействия вызывает перевод состояния спинового димера из синглетного в возбужденные триплетные состояния с одновременным изменением потенциального профиля структуры. Именно эти эффекты ответственны за существенные модификации транспортных характеристик наноструктур при увеличении энергии электронов и включении магнитного поля.

Примешивание возбужденных триплетных состояний димерной подсистемы приводит к появлению дополнительных каналов как в отраженных от структуры состояниях, так и в состояниях, определяющих вклад в коэффициент прохождения. В таких каналах из-за обменного взаимодействия внутри димерной подсистемы значение квазиимпульсов для электронных волн может значительно отличаться от квазиимпульса электрона, налетающего на структуру. При этом транспортные характеристики рассматриваемой системы определяются в результате когерентной суперпозиции состояний с несколькими квазиимпульсами.

Отмеченные эффекты определяют особенности ВАХ спин-димерной системы. Одна из них связана с исчезновением участка отрицательной дифференциальной проводимости при возрастании энергии Ферми. Подчеркнем, что только для случая, когда энергия Ферми относительно мала и кинетической энергии электронов недостаточно для возбуждения димерной подсистемы, ВАХ имеет участки отрицательной дифференциальной проводимости. Для больших значений энергий Ферми, когда электроны способны переводить спиновые димеры в возбужденные состояния и инициировать отмеченные выше дополнительные каналы транспорта, дифференциальная проводимость становится всюду положительной.

В заключение остановимся на эффекте, обусловленном индуцированием магнитным полем дополнительных пиков прозрачности в спектральной характеристике системы. Как показано в заключительной части работы, следствием этого эффекта является качественное изменение вида ВАХ системы и возникновение колоссального магнитосопротивления. Выше отмечалось, что дополнительные пики прозрачности возникают в магнитном поле только в том случае, когда принимаются во внимание спин-флип-процессы. Это обстоятельство позволяет утверждать, что при рассмотрении эффектов спин-зависящего транспорта, обусловленных взаимодействием пролетающих электронов со спиновыми степенями свободы рассеивающей структуры, учет процессов, приводящих к изменению спиновой конфигурации наноструктуры, может иметь кардинальное значение для создания рассеивающих наноструктур, обладающих колоссальным магнитосопротивлением.

Работа выполнена в рамках программы Отделения физических наук РАН, Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 гг.», Междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН № 53, а также РФФИ (грант № 09-02-00127). Исследование одного из авторов (С. В. А.) поддержано грантом Президента РФ (МК-1300.2011.2).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Система уравнений для амплитуд

Для случая, когда электрон со спином 1/2 падает из левого электрода на димер, находящийся в синглетном состоянии, система уравнений на амплитуды отражения и прохождения имеет вид

$$\begin{aligned}
&t_L\left(e^{-ik_La}+r_{00}e^{ik_La}\right)+(\varepsilon_L+U(1)-E)(1+r_{00})+t_{LD}w_{1\uparrow}=0,\\
&t_{LD}(1+r_{00})+(\varepsilon_D+U(1)-E)w_{1\uparrow}+\frac{A_{sf}u_{1\uparrow}}{4}-\frac{A_{sf}v_{1\downarrow}}{2\sqrt{2}}+t_Dw_{2\uparrow}=0,\\
&t_Dw_{1\uparrow}+(\varepsilon_D+U(2)-E)w_{2\uparrow}-\frac{A_{sf}u_{2\uparrow}}{4}+\frac{A_{sf}v_{2\downarrow}}{2\sqrt{2}}+t_{DR}t_{00}e^{3ik_Ra}=0,\\
&t_{DR}w_{2\uparrow}+(\varepsilon_R+U(2)-E)t_{00}e^{3ik_Ra}+t_Rt_{00}e^{4ik_Ra}=0,\\
&t_Lr_{10}e^{iq_La}+(\varepsilon_L+U(1)+I-E)r_{10}+t_{LD}u_{1\uparrow}=0,\\
&t_{LD}r_{10}+(\varepsilon_D+U(1)+I-E)u_{1\uparrow}+\frac{A_{sf}w_{1\uparrow}}{4}+\frac{A_{sf}v_{1\downarrow}}{2\sqrt{2}}+t_Du_{2\uparrow}=0,\\
&t_Du_{1\uparrow}+(\varepsilon_D+U(2)+I-E)u_{2\uparrow}-\frac{A_{sf}w_{2\uparrow}}{4}+\frac{A_{sf}v_{2\downarrow}}{2\sqrt{2}}+t_{DR}t_{10}e^{3iq_Ra}=0,\\
&t_{DR}u_{2\uparrow}+(\varepsilon_R+U(2)+I-E)t_{10}e^{3iq_Ra}+t_Rt_{10}e^{4iq_Ra}=0,\\
&t_Lr_{11}e^{ik_{11}{}_La}+(\varepsilon_L+U(1)+(2-g_D)\mu_BH+I-E)r_{11}+t_{LD}v_{1\downarrow}=0,\\
&t_{LD}r_{11}+\left(\varepsilon_D+U(1)+(2-g_D)\mu_BH+I-\frac{A_{sf}}{4}-E\right)v_{1\downarrow}+\frac{A_{sf}}{2\sqrt{2}}(u_{1\uparrow}-w_{1\uparrow})+t_Dv_{2\downarrow}=0,\\
&t_Dv_{1\downarrow}+\left(\varepsilon_D+U(2)+(2-g_D)\mu_BH+I-\frac{A_{sf}}{4}-E\right)v_{2\downarrow}+\frac{A_{sf}}{2\sqrt{2}}(u_{2\uparrow}+w_{2\uparrow})+t_{DR}t_{11}e^{3ip_Ra}=0,\\
&t_{DR}v_{2\downarrow}+(\varepsilon_R+U(2)+(2-g_D)\mu_BH+I-E)t_{11}e^{3ip_Ra}+t_Rt_{11}e^{4ip_Ra}=0.
\end{aligned}\tag{A.1}$$

Аналогично, в ситуации, когда электрон со спином 1/2 падает из правого электрода на димер, находящийся в синглетном состоянии, система уравнений на амплитуды отражения и прохождения может быть записана следующим образом:

$$
\begin{aligned}
&t_L t'_{00} e^{ik_L a} + (\varepsilon_L + U(1) - E)\, t'_{00} + t_{LD} w_{1\uparrow} = 0,\\
&t_{LD} t'_{00} + (\varepsilon_D + U(1) - E)\, w_{1\uparrow} + \frac{A_{sf} u_{1\uparrow}}{4} - \frac{A_{sf} v_{1\downarrow}}{2\sqrt{2}} + t_D w_{2\uparrow} = 0,\\
&t_D w_{1\uparrow} + (\varepsilon_D + U(2) - E)\, w_{2\uparrow} - \frac{A_{sf} u_{2\uparrow}}{4} + \frac{A_{sf} v_{2\downarrow}}{2\sqrt{2}} + t_{DR}\left(e^{-3ik_R a} + r'_{00} e^{3ik_R a}\right) = 0,\\
&t_{DR} w_{2\uparrow} + (\varepsilon_R + U(2) - E)\left(e^{-3ik_R a} + r'_{00} e^{3ik_R a}\right) + t_R\left(e^{-4ik_R a} + r'_{00} e^{4ik_R a}\right) = 0,\\
&t_L t'_{10} e^{iq_L a} + (\varepsilon_L + U(1) + I - E)\, t'_{10} + t_{LD} u_{1\uparrow} = 0,\\
&t_{LD} t'_{10} + (\varepsilon_D + U(1) + I - E)\, u_{1\uparrow} + \frac{A_{sf} w_{1\uparrow}}{4} + \frac{A_{sf} v_{1\downarrow}}{2\sqrt{2}} + t_D u_{2\uparrow} = 0,\\
&t_D u_{1\uparrow} + (\varepsilon_D + U(2) + I - E)\, u_{2\uparrow} - \frac{A_{sf} w_{2\uparrow}}{4} + \frac{A_{sf} v_{2\downarrow}}{2\sqrt{2}} + t_{DR} r'_{10} e^{3iq_R a} = 0,\\
&t_{DR} u_{2\uparrow} + (\varepsilon_R + U(2) + I - E)\, r'_{10} e^{3iq_R a} + t_R r'_{10} e^{4iq_R a} = 0,\\
&t_L t'_{11} e^{ip_L a} + (\varepsilon_L + U(1) + (2 - g_D)\,\mu_B H + I - E)\, t'_{11} + t_{LD} v_{1\downarrow} = 0,\\
&t_{LD} t'_{11} + \left(\varepsilon_D + U(1) + (2 - g_D)\,\mu_B H + I - \frac{A_{sf}}{4} - E\right) v_{1\downarrow} + \frac{A_{sf}}{2\sqrt{2}}\,(u_{1\uparrow} - w_{1\uparrow}) + t_D v_{2\downarrow} = 0,\\
&t_D v_{1\downarrow} + \left(\varepsilon_D + U(2) + (2 - g_D)\,\mu_B H + I - \frac{A_{sf}}{4} - E\right) v_{2\downarrow} + \frac{A_{sf}}{2\sqrt{2}}\,(u_{2\uparrow} + w_{2\uparrow}) + t_{DR} r'_{11} e^{3ip_R a} = 0,\\
&t_{DR} v_{2\downarrow} + (\varepsilon_R + U(2) + (2 - g_D)\,\mu_B H + I - E)\, r'_{11} e^{3ip_R a} + t_R r'_{11} e^{4ip_R a} = 0.
\end{aligned}
\tag{A.2}
$$

ЛИТЕРАТУРА

1. C. J. Gorter, Physica **17**, 777 (1951).
2. K. K. Likharev, IBM J. Res. Dev. **32**, 144 (1988).
3. H. Ishikuro, T. Fujii, T. Saraya et al., Appl. Phys. Lett. **68**, 3585 (2009).
4. M. Galperin, M. A. Ratner, and A. Nitzan, Phys. Rev. B **74**, 075326 (2006).
5. T. Frederiksen, M. Paulsson, M. Brandbyge et al., Phys. Rev. B **75**, 205413 (2007).
6. M. Galperin, M. A. Ratner, A. Nitzan et al., Science **319**, 1056 (2008).
7. П. И. Арсеев, Н. С. Маслова, УФН **180**, 1197 (2010).
8. J. M. Tour, *Molecular Electronics*: *Commercial Insights, Chemistry, Devices, Architecture, and Programming*, World Scientific, Singapore (2003).
9. G. A. Prinz et al., Science **282**, 1660 (1998).
10. S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman et al., Science **294**, 1488 (2001).
11. J. C. Slonczewski, J. Magn. Magn. Mater. **159**, L1 (1996).
12. L. Berger, Phys. Rev. B **54**, 9353 (1996).
13. Ю. В. Гуляев, П. Е. Зильберман, Э. М. Эпштейн и др., ЖЭТФ **127**, 1138 (2005).
14. Ю. В. Гуляев, П. Е. Зильберман, А. И. Панас и др., ЖЭТФ **134**, 1200 (2008).
15. A. J. Heinrich, J. A. Gupta, C. P. Lutz et al., Science **306**, 466 (2004).
16. C. F. Hirjibehedin, C. P. Lutz, and A. J. Heinrich, Science **312**, 1021 (2006).
17. C. F. Hirjibehedin, C.-Y. Lin, A. F. Otte et al., Science **317**, 1199 (2007).
18. J. Fernández-Rossier, Phys. Rev. Lett. **102**, 256802 (2009).
19. G.-Y. Sun, C.-X. Wu, Y. Chen et al., Eur. Phys. J. B **49**, 459 (2006).
20. R.-Q. Wang, Y.-Q. Zhou, B. Wang et al., Phys. Rev. B **75**, 045318 (2007).
21. P. Gambardella, S. Rusponi, M. Veronese et al., Science **300**, 1130 (2003).

22. D. Gatteschi, R. Sessoli, and J. Villain, *Molecular Nanomagnets*, Oxford University Press, Oxford (2006).

23. R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **1**, 223 (1957).

24. M. Büttiker, IBM J. Res. Dev. **32**, 317 (1988).

25. H. Bruus and K. Flensberg, *Many-body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*, Oxford University Press, Copenhagen (2004).

26. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Наука, Москва (2001).

27. В. В. Вальков, С. В. Аксенов, Изв. РАН, Сер. физ. **74**, № 1, 6 (2010).

28. В. В. Вальков, С. В. Аксенов, Изв. РАН, Сер. физ. **74**, № 5, 763 (2010).

29. S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, Cambridge (1995).

30. J. M. Seminario, *Molecular and Nano Electronics: Analysis, Design, and Simulation*, Elsevier, Oxford (2007).