

ИНДУЦИРОВАНИЕ СПИН-ФЛИП-ПРОЦЕССАМИ РЕЗОНАНСА ФАНО ПРИ ТУННЕЛИРОВАНИИ ЭЛЕКТРОНА ЧЕРЕЗ СПИНОВЫЕ СТРУКТУРЫ АТОМНОГО МАСШТАБА

B. B. Вальков^{a,b}, C. B. Аксенов^{a**}, E. A. Уланов^b*

*^aИнститут физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

*^bСибирский аэрокосмический университет
660014, Красноярск, Россия*

Статья написана по материалам доклада
на 36-м Совещании по физике низких температур
(Санкт-Петербург, 2–6 июля 2012 г.)

Показано, что включение неупругих спин-зависящих процессов рассеяния электрона на потенциальных профилях одиночной магнитной примеси и спинового димера инициирует резонансные особенности, обусловленные эффектом Фано, в транспортных характеристиках таких спиновых структур атомного масштаба. Для реализации резонанса и антирезонанса Фано принципиальную роль играют спин-флип-процессы, приводящие к конфигурационному взаимодействию состояний системы. Установлено, что приложение внешнего магнитного поля и электрического поля затвора позволяет радикально изменять проводящие свойства спиновых структур через резонансный механизм Фано.

DOI: 10.7868/S0044451013050248

1. ВВЕДЕНИЕ

Возможность зондирования наносистем с помощью иглы сканирующего тунNELьного микроскопа (СТМ) сделала реальным переход к изучению зарядового и спин-зависящего транспорта на уровне отдельных атомов и молекул [1–8]. В частности, в последние годы была показана принципиальная возможность определения спиновой конфигурации атомных и молекулярных систем и управления их спиновым состоянием посредством неупругого взаимодействия спиновых моментов носителей и локализованных спинов структуры [9, 10]. Такой электрический контроль позволяет рассчитывать на применение магнитныхnanoобъектов в качестве элементов логики и памяти [8, 11], а также базовых элементов для квантовых вычислений [12]. Использование СТМ позволило экспериментально наблюдать зеемановское расщепление энергетических уровней

отдельного атома марганца [1], подтвердить антиферромагнитный характер обменной связи в цепочках атомов и магнитных молекул на основе переходных металлов [2, 4, 7], а также установить наличие магнитной анизотропии у подобного рода систем, обладающих спином $S > 1/2$ [3, 6]. Привлекательными с точки зрения будущих приложений молекулярной спинtronики выглядят транспортные свойства одиночных магнитных молекул, находящихся в тунNELьном контакте с электродами. Вычисления для геометрии разломного контакта показали, что одиночная магнитная молекула может функционировать как спиновый фильтр, если она закреплена между парамагнитными металлическими электродами [13]. Кроме того, эта молекула работает по принципу спинового диода в случае, если она находится между ферромагнитными электродами с разной степенью спиновой поляризации носителей [14].

В случае сильной связи образование многочастичного основного состояния по сценарию Кондо служит причиной возникновения резонансного пика в дифференциальной проводимости магнитного nanoобъекта при низких температурах [15, 16]. Однако в работе [17] было показано, что эта особенность

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

**E-mail: asv86@iph.krasn.ru

может иметь существенно асимметричную форму. Это связано с наличием интерференции состояний системы, соответствующих двум каналам для туннелирования электронов через магнитную примесь: первый — через дискретное состояние d -орбитали атома кобальта, а второй — напрямую в состояния континуума зоны проводимости золотой подложки. Описанный механизм, предложенный Фано [18], возможен только при когерентном характере электронного транспорта, который достигается за счет малого времени жизни электронов проводимости на d -орбитали кобальта [19].

В данной статье для двух спиновых структур атомного масштаба, активно исследуемых в последнее время в экспериментах с применением СТМ, проанализировано проявление резонансных особенностей Фано в характеристиках туннельного транспорта электрона. Первая спиновая система представляет собой одиночную примесь с одноионной анизотропией. Для нее наличие спин-флип-процессов, обусловленных обменным взаимодействием с транспортируемым электроном, в определенной области энергий может инициировать эффект Фано. В этом случае транспортная характеристика магнитной примеси содержит асимметричный пик. В качестве второй спиновой структуры выбран спиновый димер, в котором спиновые моменты связаны антиферромагнитным взаимодействием. Как и в первом случае, спин-флип-процессы играют существенную роль в формировании эффекта Фано и модификации транспортных характеристик спинового димера. Изучено влияние поля затвора и магнитного поля на реализацию резонансов Фано. Методом Ландауэра проведен расчет магнитосопротивления системы, содержащей в качестве активного элемента одну из рассмотренных спиновых структур.

2. ГАМИЛЬТОНИАН СИСТЕМЫ С МАГНИТНОЙ ПРИМЕСЬЮ

Рассмотрим квантовый транспорт электрона через область, содержащую магнитную примесь со спином $S = 1$, находящуюся в туннельном контакте с одномерными металлическими электродами. При этом левый электрод соответствует игле СТМ, а правый — металлической подложке. Туннельный характер связи с правым контактом в эксперименте достигается посредством адсорбирования магнитных атомов на диэлектрический нанослой. Эта ситуация в модели сильной связи (tight binding approximation) изображена на рис. 1.

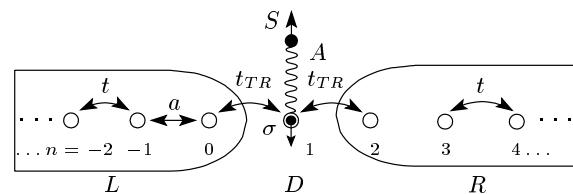


Рис. 1. Одиночная магнитная примесь со спином S , расположенная между левым ($n \leq 0$) и правым ($n \geq 2$) металлическими электродами

Гамильтониан исследуемой системы с учетом принятых допущений может быть записан в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_R + \hat{H}_{TR} + \hat{H}_{De} + \hat{H}_{ex} + \hat{H}_I, \quad (1)$$

где \hat{H}_L и \hat{H}_R — операторы, учитывающие наличие электронных состояний соответственно в металлических левом и правом полубесконечных электродах. В экспериментальной ситуации эти электроды могут быть выполнены из одного металла. Поэтому два первых слагаемых гамильтониана (1) описываются выражением

$$\hat{H}_\alpha = \sum_{n \in \alpha; \sigma} \left[\varepsilon_{\alpha\sigma} c_{n\sigma}^\dagger c_{n\sigma} + t \left(c_{n\sigma}^\dagger c_{n-1,\sigma} + c_{n-1,\sigma}^\dagger c_{n\sigma} \right) \right],$$

где $c_{n\sigma}^\dagger$ ($c_{n\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) электрона проводимости со спином σ на узле n электрода α ($\alpha = L, R$); $t < 0$ — параметр перескока между узлами электрода. Для простоты будем предполагать, что одноэлектронная энергия ε_α на узле электрода α равна энергии Ферми системы E_F . Тогда величина $\varepsilon_{\alpha\sigma} = -g_e \mu_B H \sigma$ — зеемановская энергия электрона со спином σ на узле во внешнем магнитном поле H . Ось z , вдоль которой направлено магнитное поле, ориентирована перпендикулярно направлению движения электрона.

Третий член в формуле (1) описывает перескоки электрона проводимости между контактами и центральной областью:

$$\hat{H}_{TR} = \sum_{\sigma} t_{TR} \left(c_{1\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger c_{1\sigma} + c_{2\sigma}^\dagger c_{1\sigma} + c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} \right),$$

где $t_{TR} < 0$ — параметр туннельного перескока (см. рис. 1), $|t| > |t_{TR}|$. Четвертый член гамильтониана, описывающий энергию электрона на узле со спином S , имеет простой вид, $\hat{H}_{De} = \sum_{\sigma} \varepsilon_{D\sigma} c_{1\sigma}^\dagger c_{1\sigma}$. Здесь, в отличие от берегов, $\varepsilon_D \neq E_F$ и $\varepsilon_{D\sigma} = \varepsilon_D - g_e \mu_B H \sigma$. Как известно, величина ε_D отражает влияние попеченного электрического поля затвора, и, как будет

показано ниже, это поле может играть существенную роль при наблюдении эффекта Фано в туннельном режиме.

С учетом изложенных выше замечаний взаимодействие транспортируемого электрона с примесью определяется слагаемым \hat{H}_{ex} :

$$\hat{H}_{ex} = \frac{A}{2} \left[\left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow} S^- + c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\uparrow} S^+ \right) + (n_{1\uparrow} - n_{1\downarrow}) S^z \right], \quad (2)$$

где A — параметр обменного взаимодействия; S^+ , S^- , S^z — операторы спинового момента примеси.

Как следует из экспериментальных данных, у отдельных атомов марганца и железа наблюдается ярко выраженная магнитная анизотропия [3, 5]. В наиболее простом случае такая система во внешнем магнитном поле описывается следующим гамильтонианом:

$$\hat{H}_I = D (S^z)^2 - g\mu_B H S^z, \quad (3)$$

где $D > 0$ — параметр анизотропии; g — фактор Ланда примеси. Таким образом, как следует из формулы (3), магнитная примесь имеет набор энергетических уровней, классифицируемых по проекции ее спина, S^z . При $D > g\mu_B H$ синглетное состояние ($S^z = 0$) является основным состоянием примеси.

3. ЭФФЕКТ ФАНО ПРИ ТУННЕЛИРОВАНИИ ЧЕРЕЗ ОДИНОЧНУЮ ПРИМЕСЬ

Следуя рассуждениям, использованным в работах [20, 21], о виде решения уравнения Шредингера при наличии в системе неупругих спин-зависящих процессов рассеяния, будем искать волновую функцию в виде

$$|\Psi_L\rangle = \sum_n \left[w_n c_{n\uparrow}^\dagger \chi_0 + u_n c_{n\downarrow}^\dagger \chi_1 \right] |0\rangle. \quad (4)$$

При записи (4) предполагается, что электрон с проекцией спина $1/2$ инжектируется левым контактом, когда примесь находится в основном синглетном состоянии χ_0 . Спин-флип-процессы инициируют переход примеси в возбужденное состояние χ_1 с проекцией спинового момента $S^z = 1$; $|0\rangle$ — вакуумное состояние для фермионной подсистемы. Выражения для парциальных амплитуд записываются как

$$\begin{aligned} n \leq 0 : w_n &= e^{ikn} + r_0 e^{-ikn}, & u_n &= r_1 e^{-iqn}, \\ n \geq 2 : w_n &= t_0 e^{ikn}; & u_n &= t_1 e^{iqn}, \end{aligned} \quad (5)$$

где $r_0(t_0)$, $r_1(t_1)$ — амплитуды отражения (прохождения), когда примесь находится соответственно в основном и возбужденном состояниях. Волновые векторы k , q удовлетворяют следующим дисперсионным соотношениям:

$$\begin{aligned} E &= (1 - \cos k)/2, \\ E &= D + (2 - g)\mu_B H + (1 - \cos q)/2. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь и в дальнейшем все энергетические величины измеряются в единицах ширины зоны $W = 4|t|$. При записи соотношений (6) проведено изменение отсчета энергии электрона на величину $-1/2 - \mu_B H$.

В предыдущей работе [21] авторами было показано, что при энергиях транспортируемого электрона, меньших энергии возбужденного состояния примеси в магнитном поле, $D - g\mu_B H$, коэффициент прохождения электрона T характеризуется наличием эффекта Фано. Эта особенность проявляется в виде антирезонанса коэффициента прохождения ($T = 0$) при $t = t_{TR}$. Подобное поведение является следствием деструктивной интерференции электронных волн, относящихся к состоянию континуума, $c_{n\uparrow}^\dagger \chi_0 |0\rangle$, и состоянию дискретного спектра, $c_{n\downarrow}^\dagger \chi_1 |0\rangle$.

В результате решения уравнения Шредингера для случая $t \neq t_{TR}$ получим следующее выражение для коэффициента туннельного прохождения через магнитную примесь в низкоэнергетическом режиме, $E < D + (2 - g)\mu_B H$:

$$T = |t_0|^2 = \tau^4 D_q^2 \sin^2 k / \left\{ \tau^4 D_q^2 \sin^2 k + \left[[(1 - \tau^2) \cos k + 2\varepsilon_D] D_q + A^2 \right]^2 \right\}, \quad (7)$$

где $D_q = (\tau^2 e^{iq} - \cos q + A)/2 - \varepsilon_D$, $\tau = |t_{TR}|/|t|$. Из формулы (7) следует, что, в отличие от ситуации $t = t_{TR}$, в туннельном режиме кроме антирезонанса T возможно также резонансное прохождение электрона ($T = 1$). На рис. 2 пунктирной ($H = 0$) и сплошной ($H \neq 0$) кривыми изображены пики Фано, которые имеют характерную асимметричную форму с близко расположенными резонансом отражения и прохождения [19]. Как видно, действие магнитного поля на пик Фано сводится к его сдвигу.

Выражение для энергии антирезонанса Фано имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} E_{ares} &= D + (2 - g)\mu_B H + \\ &+ \frac{1}{2} \left\{ 1 - \left[(1 - \tau^2) (A - 2\varepsilon_D) - \right. \right. \\ &\left. \left. - \tau^2 \sqrt{(A - 2\varepsilon_D)^2 + 2\tau^2 - 1} \right] / (1 - 2\tau^2) \right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

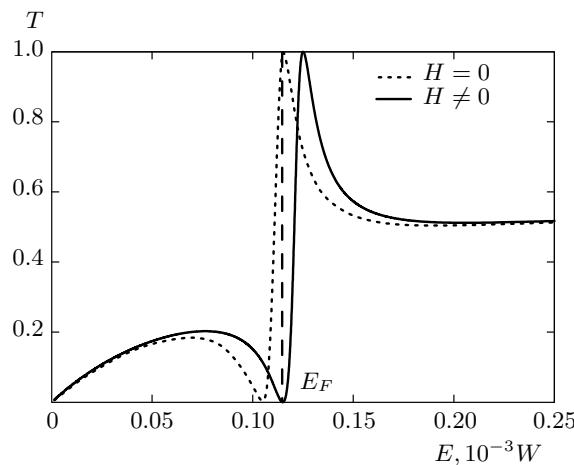


Рис. 2. Низкоэнергетическая область зависимости $T(E)$ для случая туннельной связи магнитной примеси с электродами, $t = -1$ эВ, $\tau \approx 0.25$, $\varepsilon_D \approx -0.47$, $D = A = 0.25 \cdot 10^{-3}$, $\mu_B H = 1 \cdot 10^{-4}$, $g = 1$

При $\tau \ll 1$, а также $A \ll 1$ (в энергетических единицах $A \sim 1$ мэВ [22]) подкоренное выражение в формуле (8) становится отрицательным, если $\varepsilon_D = 0$. Таким образом, электрическое поле затвора позволяет вывести значения резонансных энергий Фано в действительную область в туннельном режиме и может послужить эффективным механизмом для наблюдения резонансов Фано в экспериментальных условиях, поскольку в эксперименте $\varepsilon_D \sim 1$ эВ [23].

Стоит подчеркнуть, что поперечная часть оператора \hat{H}_{ex} , ответственная за спин-флип-процессы, играет принципиальную роль для наблюдения эффекта Фано при транспорте через подобные спиновые структуры. В данном случае учет именно этой компоненты в формуле (2) приводит к «примешиванию» возбужденного состояния в волновую функцию (4).

4. ЭФФЕКТ ФАНО ПРИ ТРАНСПОРТЕ ЧЕРЕЗ СПИНОВЫЙ ДИМЕР

Важная роль спин-флип-процессов, а также внешнего магнитного поля в проявлении резонансных особенностей Фано обнаруживается при анализе неупругого спин-зависящего транспорта электрона через потенциальный профиль другой спиновой структуры. Она формируется из двух спиновых моментов $S_1 = 1/2$ и $S_2 = 1/2$, связанных обменным антиферромагнитным взаимодействием

и образующих спиновый димер. Гамильтониан димера в магнитном поле записывается как

$$\hat{H}_D = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) - g\mu_B H(S_1^z + S_2^z), \quad (9)$$

где $J > 0$ — параметр внутридимерного обменного взаимодействия, g — фактор Ланде димера. В дальнейшем, как и в предыдущей части, будет рассматриваться случай слабого магнитного поля ($g\mu_B H < J$). Поэтому синглетное состояние D_{00} (первый индекс обозначает полный спин, второй — проекцию полного спина) будет являться основным состоянием димера.

Учитывая, что в большинстве случаев доминантным является туннельный матричный элемент для магнитного атома, располагающегося непосредственно под игрой СТМ [9], в дальнейших расчетах будем основываться на том, что транспортируемый электрон взаимодействует только с первым спиновым моментом димера, \mathbf{S}_1 . Таким образом, гамильтониан обменного взаимодействия \hat{H}_{ex} имеет ту же форму, что и оператор (2). Однако, в отличие от предыдущего случая, в результате этого взаимодействия димер из исходного синглетного состояния D_{00} может перейти в два триплетных состояния D_{10} и D_{11} , что отражено в виде волновой функции,

$$|\Psi_L\rangle = \sum_n \left[w_n c_{n\uparrow}^\dagger D_{00} + u_n c_{n\uparrow}^\dagger D_{10} + v_n c_{n\downarrow}^\dagger D_{11} \right] |0\rangle. \quad (10)$$

Здесь парциальные амплитуды w_n , u_n , v_n записываются в виде

$$\begin{aligned} n \leq 0 : \quad & w_{n\uparrow} = e^{ikn} + r_{00} e^{-ikn}; \\ & u_{n\uparrow} = r_{10} e^{-iqn}; \quad v_{n\downarrow} = r_{11} e^{-ipn}; \\ n \geq 2 : \quad & w_{n\uparrow} = t_{00} e^{ikn}; \\ & u_{n\uparrow} = t_{10} e^{iqn}; \quad v_{n\downarrow} = t_{11} e^{ipn}, \end{aligned} \quad (11)$$

где $r_{00}(t_{00})$, $r_{10}(t_{10})$, $r_{11}(t_{11})$ — амплитуды отражения (прохождения), когда димер находится соответственно в синглетном и триплетном состояниях; k , q , p — волновые вектора, удовлетворяющие соотношениям

$$\begin{aligned} E &= (1 - \cos k)/2, \quad E = J + (1 - \cos q)/2, \\ E &= J + (2 - g)\mu_B H + (1 - \cos p)/2. \end{aligned} \quad (12)$$

При записи этих соотношений проведено изменение отсчета энергии электрона на величину $-1/2 - 3J/4 - \mu_B H$. Из соотношений (12) следует, что при $E < J$ плотность вероятности нахождения системы

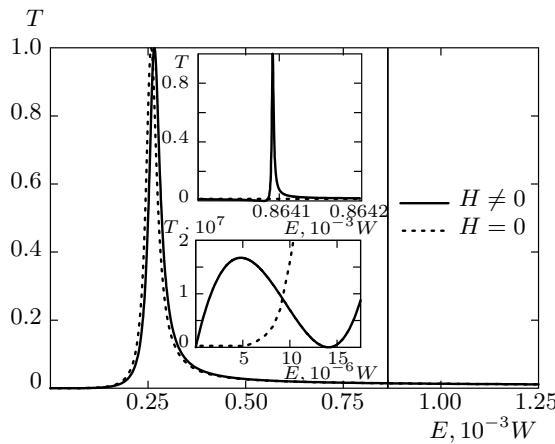


Рис. 3. Низкоэнергетическая область зависимости $T(E)$ при транспорте через спиновый димер, $t = -1$ эВ, $\tau = 0.075$, $J = A = 1.25 \cdot 10^{-3}$, $\mu_B H = 1.25 \cdot 10^{-4}$, $\varepsilon_D = -0.498$, $g = 1.88$. На верхней вставке показана структура индуцированного асимметричного пика. На нижней: сдвиг антирезонанса с энергией E_{ares1} в магнитном поле

в состояниях $c_{n\uparrow}^\dagger D_{10}|0\rangle$ и $c_{n\downarrow}^\dagger D_{11}|0\rangle$ будет экспоненциально затухать, что создает предпосылки для реализации эффекта Фано.

При $E < J$ коэффициент прохождения через спиновый димер имеет следующий вид:

$$T = |t_{00}|^2 = \frac{\alpha^2}{\alpha^2 + 1}, \quad (13)$$

$$\alpha = -\frac{4\tau^2 [\Omega(C_2 + A) + 2\Delta C_2] \sin k}{\Omega [4C_1(C_2 + A) + 3A^2] + 2\Delta(4C_1C_2 + A^2)},$$

где

$$C_1 = (1 - \tau^2) \cos k + 2\varepsilon_D, \quad \Omega = 2C_2 - A,$$

$$\Delta = C_3 - C_2, \quad (14)$$

$$C_2 = \tau^2 e^{iq} - \cos q - 2\varepsilon_D,$$

$$C_3 = \tau^2 e^{ip} - \cos p - 2\varepsilon_D.$$

На рис. 3 показано поведение функции $T(E)$ в низкоэнергетической области. На графике видны два асимметричных пика Фано. На нижней вставке рисунка показан сдвиг антирезонанса Фано первого из пиков. Его энергия при $H = 0$, как следует из формулы (13), находится из уравнения $C_2 + A = 0$ и равна

$$E_{ares1} = J - \left\{ 2\varepsilon_D + 1 - A + \tau^2 \times \right.$$

$$\times \left[\sqrt{(2\varepsilon_D - A)^2 + 2\tau^2 - 1} - \right.$$

$$\left. \left. - 2\varepsilon_D - 2 + A \right] \right\} / 2(2\tau^2 - 1). \quad (15)$$

На верхней вставке рисунка видно, что при $H = 0$ один из асимметричных пиков Фано исчезает. Одновременно с этим в коэффициенте прохождения происходит сокращение на величину Ω . Решив уравнение $\Omega = 0$, получим следующую приближенную энергию антирезонанса, индуцированного магнитным полем,

$$E_{ares2} \approx J - \left\{ 2\varepsilon_D + 1 + \frac{A}{2} + \right.$$

$$+ \tau^2 \left[\sqrt{(2\varepsilon_D + A/2)^2 + 2\tau^2 - 1} - \right.$$

$$\left. \left. - 2\varepsilon_D - 2 - A/2 \right] \right\} / 2(2\tau^2 - 1). \quad (16)$$

С физической же точки зрения включение магнитного поля приводит к снятию вырождения по энергии триплетных состояний, и, как следствие, возникает дополнительный энергетический масштаб, на котором происходит интерференция электронных волн, и появляется новый пик Фано. Таким образом, в случае димера действие магнитного поля отражается не только в сдвиге пика Фано, но и в появлении дополнительного пика. Из выражений для энергии антирезонансов (15) и (16) вытекает, что приложение электрического поля затвора может позволить наблюдение резонансных особенностей Фано средствами СТМ.

Для оценки роли спин-флип-процессов в формировании резонансов Фано проанализируем несколько частных случаев транспорта через димер, различающихся видом обменных взаимодействий в системе. Если оператор \hat{H}_{ex} имеет изинговскую форму, а \hat{H}_D остается в прежнем виде, то изначальная конфигурация $c_{n\uparrow}^\dagger D_{00}|0\rangle$ может перейти только в состояние $c_{n\uparrow}^\dagger D_{10}|0\rangle$. Следовательно, в системе возможно одно состояние континуума и одно локализованное состояние, и индуцирование нового резонанса Фано магнитным полем не произойдет. Обратимся к противоположной ситуации, когда \hat{H}_{ex} имеет гейзенберговскую форму, а \hat{H}_D — изинговскую. В этом случае основное состояние димера двукратно вырождено, так как энергии $E_{00} = -I/4$ обладают два состояния: $|\uparrow\downarrow\rangle$ и $|\downarrow\uparrow\rangle$. Однако и в этом случае действие магнитного поля не приводит к появлению нового пика Фано за счет того, что возбужденное состояние всего одно, $|\uparrow\uparrow\rangle$. Если же у обоих обменных гамильтонианов отсутствуют поперечные компоненты, то транспорт будет осуществляться только за счет исходного состояния системы. При этом задача сводится к стандартному рассеянию частицы на потенциале с мощностью A . Таким образом, индуцирование

дополнительного пика Фано магнитным полем при транспорте через спиновый димер возможно только при полном учете спин-флип-процессов в системе.

5. АНОМАЛЬНО ВЫСОКОЕ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ ЗА СЧЕТ ЭФФЕКТА ФАНО

В заключение отметим, что продемонстрированное влияние магнитного поля на резонансы Фано может являться причиной возникновения аномально высоких значений магнитосопротивления. На рис. 4 изображена вольт-амперная характеристика (ВАХ) системы с одночной магнитной примесью, вычислена в предположении, что токонесущими являются состояния в окрестности пика Фано (см. положение энергии Ферми, E_F , обозначенное штриховой прямой на рис. 2). ВАХ рассчитывалась в рамках подхода Ландауэра,

$$I(V) = \frac{e}{h} \int dE T(E) [f_L(E) - f_R(E)], \quad (17)$$

где $f_L(E) \equiv f(E - \mu_L)$, $f_R(E) \equiv f(E - \mu_R)$ — фермиевские функции распределения электронов в левом и правом контактах соответственно с электрохимическими потенциалами $\mu_L = E_F$ и $\mu_R = E_F - eV$. Коэффициент прохождения вычислялся с учетом приложенного внешнего электрического поля eV в гамильтониане (1). Как видно на рис. 4, ток при $H \neq 0$ практически отсутствует, так как энергии электрона находятся в области антирезонанса Фано. Основываясь на различии в поведении дифференциаль-

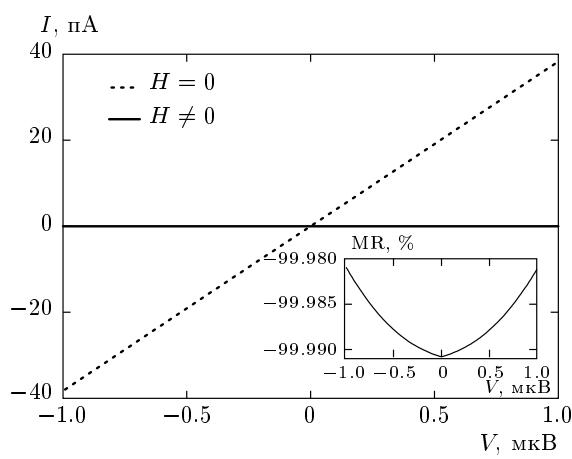


Рис. 4. Вольт-амперная характеристика системы с магнитной примесью для параметров рис. 2, $E_F = 0.115 \cdot 10^{-3}$. На вставке изображено магнитосопротивление системы

ной проводимости, $G(V) = dI/dV$, можно сделать вывод о наличии магнитосопротивления за счет эффекта Фано, $MR = [G(H)/G(0) - 1] \cdot 100\%$, у такого устройства. Его значения в данном случае достигают практически 100 % (см. вставку на рис. 4).

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследованы эффекты неупругого спин-зависящего туннельного транспорта через спиновые структуры атомного масштаба: одиночную магнитную примесь и спиновый димер. Эти структуры имеют набор из основного синглетного и возбужденных состояний. Точное решение уравнения Шредингера в рамках метода сильной связи позволило рассчитать коэффициенты прохождения через спиновые структуры, которые характеризуются наличием резонансных особенностей Фано. Отмечено, что предположение о туннельном характере связи между электродами и спиновой структурой приводит к тому, что энергии антирезонансов Фано становятся комплексными при отсутствии электрического поля затвора. Показано, что учет спин-флип-процессов в системе играет принципиальную роль для реализации эффекта Фано в случае магнитной примеси и индуцировании пика Фано магнитным полем в случае спинового димера. В рамках формализма Ландауэра продемонстрировано, что влияние магнитного поля на резонансы Фано может служить причиной возникновения аномально высокого магнитосопротивления у устройства, в котором рассмотренные спиновые структуры выступают в качестве активных элементов.

Работа выполнена в рамках Программы Президиума РАН «Квантовые мезоскопические и неупорядоченные системы», Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 гг.» (ГК № 16.740.110644), РФФИ (гранты р_сибирь №№ 11-02-98007, 12-02-31130). Работа одного из соавторов (С. В. А.) поддержана грантом Президента РФ (МК-1300.2011.2).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. J. Heinrich, J. A. Gupta, C. P. Lutz et al., Science **306**, 466 (2004).
2. C. F. Hirjibehedin, C. P. Lutz, and A. J. Heinrich, Science **312**, 1021 (2006).

3. C. F. Hirjibehedin, C.-Y. Lin, A. F. Otte et al., *Science* **317**, 1199 (2007).
4. X. Chen, Y.-S. Fu, S.-H. Ji et al., *Phys. Rev. Lett.* **101**, 187208 (2008).
5. A. F. Otte, M. Ternes, K. von Bergmann et al., *Nature Phys.* **4**, 847 (2008).
6. N. Tsukahara, K. I. Noto, M. Ohara et al., *Phys. Rev. Lett.* **102**, 167209 (2009).
7. S. Loth, K. von Bergmann, M. Ternes et al., *Nature Phys.* **6**, 340 (2010).
8. S. Loth, S. Baumann, C. P. Lutz et al., *Science* **335**, 196 (2012).
9. J. Fernandez-Rossier, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 256802 (2009).
10. J.-P. Gauyacq, F. D. Novaes, and N. Lorente, *Phys. Rev. B* **81**, 165423 (2010).
11. L. Bogani and W. Wernsdorfer, *Nature Mater.* **7**, 179 (2008).
12. M. N. Leuenberger and D. Loss, *Nature* **410**, 789 (2001).
13. S. Barraza-Lopez, K. Park, V. Garcia-Suarez et al., *Phys. Rev. Lett.* **102**, 246801 (2009).
14. M. Misiorny, I. Weymann, and J. Barnas, *Europhys. Lett.* **89**, 18003 (2010).
15. J. Park, A. N. Pasupathy, J. I. Goldsmith et al., *Nature* **417**, 722 (2002).
16. W. Liang, M. P. Shores, M. Bockrath et al., *Nature* **417**, 725 (2002).
17. V. Madhavan, W. Chen, T. Jamneala et al., *Science* **280**, 567 (1998).
18. U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
19. A. E. Miroshnichenko, S. Flash, and Y. S. Kivshar, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2257 (2010).
20. В. В. Вальков, С. В. Аксенов, ЖЭТФ **140**, 305 (2011).
21. В. В. Вальков, С. В. Аксенов, Е. А. Уланов, Изв. РАН. Сер. физ. **76**, 451 (2012).
22. M. Misiorny, I. Weymann, and J. Barnas, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 126602 (2011).
23. J. Gores, D. Goldhaber-Gordon, S. Heemeyer et al., *Phys. Rev. B* **62**, 2188 (2000).