

На правах рукописи

Аксенов Сергей Владимирович

**ВЛИЯНИЕ НЕУПРУГИХ ЭФФЕКТОВ  
НА СПИН-ЗАВИСЯЩИЙ ТРАНСПОРТ  
В НАНОСТРУКТУРАХ**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

**Автореферат**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Красноярск – 2011

Работа выполнена в ФГАОУ ВПО «Сибирский федеральный университет» и Учреждении Российской академии наук Институт физики им. Л.В.Киренского Сибирского отделения РАН

**Научный руководитель:** доктор физико-математических наук,  
профессор **Вальков В.В.**

**Официальные оппоненты:** доктор физико-математических наук,  
профессор **Фраерман А.А.**  
доктор физико-математических наук,  
профессор **Петраковский Г.А.**

**Ведущая организация:** Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН,  
Москва

Защита состоится «        » декабря 2011 г. в        часов на заседании диссертационного совета Д 003.055.02 при Институте физики им. Л.В. Киренского СО РАН по адресу: 660036 Красноярск, Академгородок, 50/38, Учреждение Российской академии наук Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН.

Автореферат разослан «\_\_\_» ноября 2011 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,  
доктор физико-математических наук

Втюрин А.Н.



## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность

На сегодняшний день стало очевидным, что дальнейшая миниатюризация приборов и устройств современной полупроводниковой электроники приближается к технологическому пределу. Данное обстоятельство заставляет направлять усилия большого числа исследователей на поиски альтернативы кремниевой технологии. В свою очередь, прогресс в сфере нанотехнологий (литография, молекулярно-лучевая эпитаксия, сканирующий туннельный микроскоп и т.д.) сделал возможным экспериментальное исследование транспортных характеристик систем, размеры которых составляют десятки и даже единицы ангстрем [1]. На этих масштабах низкоразмерные системы, такие как полупроводниковые гетероструктуры с двумерным электронным газом, квантовые проволоки, точки, отдельные молекулы, атомы и их комплексы, проявляют нетривиальные проводящие свойства [2,3].

При теоретическом описании квантового транспорта принято выделять два режима, различающихся характером рассеяния проходящей частицы на потенциальном профиле наноструктуры. В случае если при распространении электрона его фаза сохраняется, то выдерживается когерентный режим, характерный для мезоскопических систем [4]. Его описание, зачастую, сводится к нахождению коэффициента прохождения  $T$  электрона. Другими словами, для решения проблемы транспорта необходимо вычислить  $S$ -матрицу рассеяния [5]. В этом состоит основная идея одночастичного формализма Ландауэра-Бюттикера. Данный инструмент позволяет описать квантование проводимости наноконтактов или эффект Ааронова-Бома [5]. Кроме того, для когерентного режима в транспорте характерны такие эффекты как слабая локализация [4,5] и эффект Фано [6], объясняемые интерференцией электронных волн.

Если же при рассеянии учитываются процессы, приводящие к нарушениям фазы, то транспорт становится некогерентным. В этом случае часто используют более универсальный подход, основанный на аппарате неравновесных функций Грина (НФГ) и диаграммной технике Келдыша для них [7]. Характерным примером реализации некогерентного режима квантового транспорта служит ток через молекулы или цепочки атомов, обладающих колебательными степенями свободы. В такой ситуации носители активно взаимодействуют с наноструктурой, изменяя ее состояние, что непосредственно отражается на транспортных характеристиках: могут возникать скачки дифференциальной проводимости [8,9], участки с отрицательной дифференциальной проводимостью в вольт-амперных характеристиках (ВАХ), бистабильность и гистерезис тока [10]. Еще одним примером, где необходимо применять принципиально иной способ описания, нежели метод S-матрицы, является рассмотрение многочастичных корреляционных эффектов в неравновесных системах, к которым относятся эффект Кондо и кулоновская блокада [11,12].

Возможность использования спиновых степеней свободы в качестве дополнительного канала для передачи и хранения информации выдвинула задачи по спин-зависящему транспорту в ряд основных. Наряду с активным изучением магнитных сред [13] в этом направлении в последние годы появился ряд работ, где экспериментально была измерена дифференциальная проводимость отдельных магнитных атомов марганца и железа, цепочек атомов марганца, а также магнитных молекул на основе элементов переходных металлов [14,15]. Во всех измерениях проводимость характеризуется скачками, связанными с включением дополнительных каналов для транспорта электронов. В свою очередь, эти дополнительные каналы соответствуют возбужденным состояниям магнитной структуры, отдельные спиновые моменты в которой связаны друг с другом обменным антиферромагнитным взаимодействием. Таким образом, демонстрируется

принципиальная возможность изменения спинового состояния отдельных атомов, а также атомных и молекулярных комплексов за счет неупругого действия тока. Этим подчеркивается необходимость и важность изучения спин-зависящего транспорта через спиновые наноструктуры, обладающие собственным энергетическим спектром.

Изложенные аргументы говорят об актуальности исследований транспортных свойств, коэффициента прохождения и ВАХ, модельных спиновых структур, спиновые моменты которых связаны обменным антиферромагнитным взаимодействием. При этом неупругий характер одноэлектронного транспорта будет определяться спин-спиновым обменным взаимодействием между проходящим электроном и структурой. Принимая во внимание существенное влияние магнитного поля на системы, где рассматривается когерентный транспорт [16], а также специфику изучаемых в диссертации наноструктур, особый интерес связан с исследованием влияния внешнего магнитного поля как фактора, управляющего транспортными свойствами. Решение перечисленных задач составляет предмет данной диссертации.

## **Цель работы**

Изучение особенностей транспорта спин-поляризованного электрона через потенциальные рельефы спиновых наноструктур во внешнем магнитном поле с учетом того, что спин-флип процессы, обусловленные взаимодействием транспортируемого электрона со спиновыми моментами структуры, индуцируют изменение этих рельефов.

## **Научная новизна и практическая значимость**

В приближениях непрерывной среды и сильной связи впервые получены коэффициенты прохождения спин-поляризованного электрона через потенциальные профили, формируемые неупругим s-f- взаимодействием с

локализованными спиновыми моментами ряда структур: спинового димера, четырехспиновой цепочки и шестиспинового кластера. Показано, что пики резонансного прохождения подавляются при ненулевых вероятностях возбуждения спиновой структуры. Развитый подход применим к изучению транспорта через более сложные спиновые системы.

Впервые продемонстрировано, что включение магнитного поля приводит к возникновению асимметричных резонансных пиков при энергиях налетающего электрона, недостаточных для возбуждения системы. Обнаружено, что появление этих резонансов связано с интерференционными процессами по механизму Фано. В частности, снятие вырождения по энергии триплетных состояний димера во внешнем магнитном поле приводит к появлению двух пиков Фано. Анализ различных ситуаций транспорта через спиновый димер позволил установить, что индуцирование асимметричных пиков Фано возможно только при учете слагаемых, ответственных за спин-флип процессы в обменных гамильтонианах.

На основе метода коэффициентов прохождения впервые рассчитаны ВАХ и магнитосопротивление устройства, в котором спиновый димер выступает в качестве активного элемента. Обнаружено, что ВАХ может иметь участки с отрицательной дифференциальной проводимостью. Показано, что влияние магнитного поля на резонансные пики Фано является причиной возникновения anomalно высоких значений магнитосопротивления у рассматриваемого устройства.

Практическая значимость диссертационных исследований определяется не только возможностью применения полученных результатов для качественного анализа проводящих свойств наносистем, состоящих из небольшого числа магнитных атомов или молекул, но и тем, что предсказанные эффекты по гигантскому магнитосопротивлению могут быть использованы при создании устройств, в которых рассмотренные спиновые наноструктуры выступают в качестве активных элементов.

## **Достоверность результатов**

Достоверность полученных результатов определяется корректностью использования математического аппарата, контролируемостью применяемых приближений и их апробацией при исследованиях других авторов, а также правильностью предельных переходов к известным результатам.

## **Положения, выносимые на защиту**

1. Результаты теоретического рассмотрения одноэлектронного спин-поляризованного транспорта через потенциальный рельеф, создаваемый s-f-обменным взаимодействием электрона с локализованными спиновыми моментами наноструктуры, содержащей в качестве активного элемента спиновый димер, четырехспиновую цепочку, или шестиспиновый кластер;
2. Вывод о том, что возникновение в низкоэнергетической области резкого всплеска до единицы и падения до нуля коэффициента прохождения спин-поляризованного электрона через потенциальный рельеф спинового нанокластера связано с резонансом и антирезонансом Фано, обусловленными интерференцией между коллективизированными состояниями электрона и локализованными в пределах спинового кластера состояниями;
3. Обнаружение эффекта индуцирования магнитным полем в транспортных характеристиках спиновых наноструктур резонанса и антирезонанса Фано, проявляющихся посредством возникновения в магнитном поле узких окон прозрачности и узких областей полного отражения, а также доказательство того, что этот эффект связан с расщеплением в магнитном поле верхних высокоспиновых состояний спиновых нанокластеров;
4. Результаты численного расчета по методу Ландауэра-Бюттикера с

использованием приближения сильной связи вольт-амперной характеристики спин-димерной наноструктуры и анализ влияния магнитного поля на модификацию этой характеристики;

5. Тезис о возможности использования резонанса и антирезонанса Фано при спин-поляризованном транспорте электронов в магнитном поле через спиновые наноструктуры в качестве механизма, индуцирующего аномально высокие значения магнитосопротивления.

### **Апробация работы**

Основные результаты диссертации обсуждались на Всероссийских и международных конференциях: XXXII и XXXIII Международные зимние школы физиков-теоретиков «Коуровка-2008» и «Коуровка-2010» (Екатеринбург, 2008, 2010), XIII Международный симпозиум «Нанозифика и нанозлектроника» (Нижний Новгород, 2009), 2-ой и 3-й Международные симпозиумы «Среды со структурным и магнитным упорядочением» Multiferroics-2 и Multiferroics-3 (п. Лоо, 2009, 2011), XXXV Совецание по физике низких температур «НТ-35» (Черноголовка, 2009), 1-ая конференция нанотехнологического общества России (Москва, 2009), IV Евро-азиатский симпозиум по проблемам магнетизма: наноспинтроника EASTMAG - 2010 (Екатеринбург, 2010), 14-ый Международный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах» ОМА-14 (п. Лоо, 2011), конференция «Научная сессия НИЯУ МИФИ-2011» (Москва, 2011). Результаты диссертационных исследований докладывались на заседаниях секции «Магнетизм» Научного совета РАН по физике конденсированных сред в Институте физических проблем РАН (Москва, 2009), на конференциях студентов-физиков НКCF-XXXVII, XXXVIII (Красноярск, 2008-09) и конференциях молодых ученых КНЦ СО РАН (Красноярск, 2008, 2010-11), на научном семинаре Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН.



## **Публикации**

Основные результаты диссертации изложены в 12 печатных работах, из них 3 статьи в рецензируемых журналах из перечня ВАК, 9 – в тезисах докладов и трудах международных и внутрисоссийских конференций и симпозиумов; а также в 2 статьях в электронных изданиях.

## **Структура и объем работы**

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы, изложена на 168 страницах, включает 44 рисунка. Список цитируемой литературы содержит 195 наименований.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Отделения физических наук РАН; Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы»; Междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН № 53; Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 09-02-00127, р\_сибирь № 11-02-98007); гранта Президента РФ МК-1300.2011.2.

## **СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

Во **введении** обосновывается актуальность темы, формулируется цель исследования, описывается структура диссертации, перечисляются основные положения, выносимые на защиту, приводятся сведения об апробации материалов диссертации.

**Первая глава** диссертации посвящена обзору экспериментальных и теоретических работ, в которых исследовались особенности транспорта частиц, проявляющиеся на наноразмерных масштабах, где ярко выражены квантовомеханические эффекты. В частности, рассмотрены основные результаты, относящиеся к обычному и спин-зависящему транспорту в полупроводниковых наногетероструктурах с двумерным электронным газом, резонансно-туннельных структурах, квантовых точках, молекулах, которые сегодня рас-

смаиваются как перспективные базовые элементы для новых приборов и устройств наноэлектроники. Подробно изложен метод Ландауэра-Бюттикера для теоретического описания когерентного квантового транспорта в наноразмерных структурах, основанный на нахождении S-матрицы рассеяния.

Во **второй главе** проводится расчет одномерного когерентного неупругого транспорта спин-поляризованного электрона через потенциальные рельефы ряда спиновых наноструктур: спинового димера, четырехспиновой цепочки и шестиспинового кластера. Количественное рассмотрение отмеченных эффектов проведено в рамках гамильтониана

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} \sum_{\langle fm \rangle} I_{fm} (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_m) - A_{sf} a \sum_f (\mathbf{s} \mathbf{S}_f) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R}_f) - \mu_B H \left( 2S^z + g_D \sum_f S_f^z \right). \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое учитывает кинетическую энергию транспортируемого электрона с массой  $m$ . Второй член в (1) описывает обменное взаимодействие между ближайшими спинами наноструктуры в гейзенберговской форме, где  $\mathbf{S}_f$  и  $\mathbf{S}_m$  обозначают векторные операторы спиновых моментов в положениях, определяемых радиус-векторами  $\mathbf{R}_f$  и  $\mathbf{R}_m$ , а  $I_{fm}$  - обменные интегралы. В случае димера и четырехспиновой цепочки все  $I_{fm}=I$ . В случае шестиспинового кластера, когда два набора из трех спиновых моментов лежат в параллельных плоскостях, разнесенных на величину  $2a$ , параметр обмена между спинами внутри отдельной плоскости  $I_{int}$  предполагается большим аналогичного параметра  $I_{ext}$ , описывающего обмен между спинами из разных плоскостей. Антиферромагнитный характер обменного взаимодействия между спиновыми моментами структуры приводит к синглетному основному состоянию. Триплетные состояния, а также состояния с большей мультиплетностью находятся выше по энергии на величину, определяемую интегралами  $I_{fm}$ . Третье слагаемое отвечает за s-f-обменную связь между транспортируемым электроном и спинами структуры и приводит к созданию

потенциального профиля, определяющего характер рассеивания. Существенно, что эта же связь индуцирует изменение вида рассеивающего потенциала и обуславливает неупругие эффекты. Для шестиспинового кластера под  $R_f$  понимается координата плоскости. Для димера и четырехспиновой цепочки под  $a$  подразумевается половина расстояния между ближайшими спинами. Последнее слагаемое учитывает энергию зеемановского взаимодействия, где

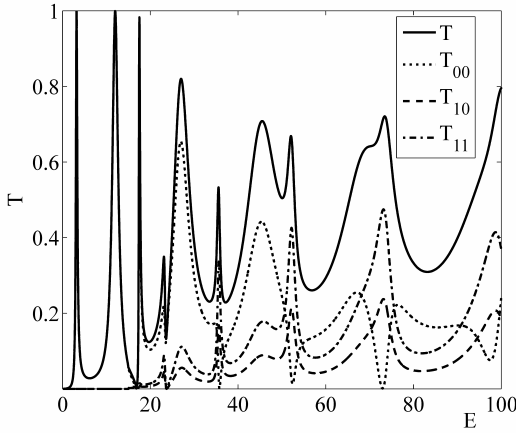


Рис.1. Зависимость коэффициента прохождения  $T$  и его парциальных составляющих  $T_{00}$ ,  $T_{10}$ ,  $T_{11}$  от энергии налетающего электрона при  $H=0$ .

производится шивка решений на границах областей, в точках сингулярности. Основные особенности поведения этой характеристики наглядно демонстрируются для наиболее простой ситуации, когда структура представляет собой спиновый димер и состоит всего из двух спиновых моментов. Тогда коэффициент прохождения имеет вид

$$T = \begin{cases} T_{00} = |u|^2, & E \leq I, \\ T_{00} + T_{10} = |u|^2 + q|v|^2 / k, & I \leq E \leq I + \mu_B H, \\ T_{00} + T_{10} + T_{11} = |u|^2 + (q|v|^2 + p|w|^2) / k, & E \geq I + \mu_B H, \end{cases} \quad (2)$$

$g_D$  – g-фактор структуры (для простоты  $g_D=1$ ).

Транспортные свойства спиновых наноструктур анализируются посредством нахождения коэффициента прохождения  $T$ . Для этого решения уравнения Шредингера с гамильтонианом (1) записываются на языке отраженных и прошедших волн в трех областях пространства согласно геометрии задачи. В дальнейшем

где  $k=[2mE/\hbar^2]^{1/2}$ ,  $q=[2m(E-I)/\hbar^2]^{1/2}$ ,  $p=[2m(E-I-\mu_B H)/\hbar^2]^{1/2}$  – волновые вектора основного и возбужденных состояний электрона;  $T_{00}$ ,  $T_{10}$ ,  $T_{11}$  – парциальные вклады в  $T$ , соответствующие синглетному и триплетным состояниям димера (первый индекс отвечает спину димера; второй – проекции спина);  $u$ ,  $v$ ,  $w$  – амплитуды прохождения через димер. Из графика на рисунке 1 видно, что зависимость общего коэффициента прохождения и его составляющих от энергии электрона разбивается на две области, в которых она принципиально различается. В низкоэнергетической области энергии электрона недостаточно для возбуждения триплетных состояний димера ( $E < I$ ), и рассеяние является упругим. В результате функция  $T(E)$  имеет вид последовательности пиков резонансного туннелирования. В нашем случае этому режиму соответствует рассеяние на потенциальном профиле синглетного состояния. В высокоэнергетической области ( $E > I$ ), когда происходит включение неупругого механизма рассеяния электрона, имеет место подавление пиков резонансного туннелирования. При этом результирующий потенциальный профиль формируется при учете вкладов от возбужденных триплетных состояний.

Качественно новый эффект возникает при включении магнитного поля.

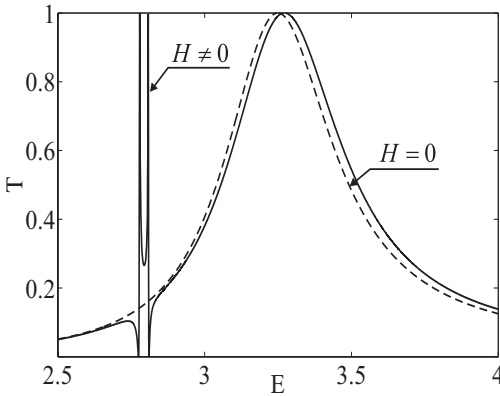


Рис.2. Индуцирование магнитным полем резонансных пиков.

В этом случае в низкоэнергетической области происходит индуцирование дополнительной пары резонансных пиков. Причем, эти пики имеют асимметричную форму с близко расположенными резонансом ( $T=1$ ) и антирезонансом ( $T=0$ ) (см. рис.2). В дальнейшем для транспорта через спиновый димер

рассматривается случай больших магнитных полей, когда в спиновом димере произошла смена типа основного состояния. При этом транспортные характеристики системы существенно зависят от спиновой поляризации проходящего электрона. Если в исходном состоянии спин электрона направлен противоположно полю, то электрон испытывает неупругое рассеяние при всех энергиях. Когда же спин электрона ориентирован по полю, картина транспорта упрощается, т.к. неупругие процессы исключены, а зависимость  $T(E)$  представляет собой последовательность резонансных пиков.

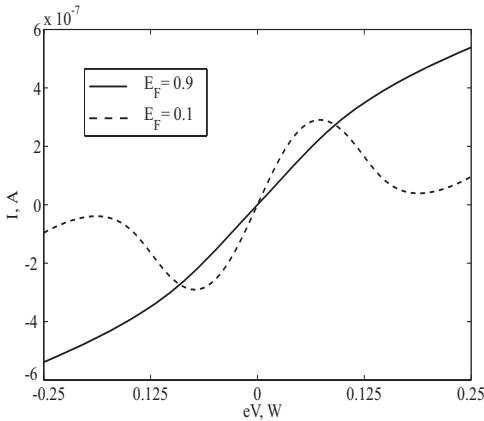
К концу второй главы приводятся результаты численных расчетов транспорта через четырехспиновую цепочку и шестиспиновый кластер, которые показывают, что поведение  $T(E)$  характеризуется теми же свойствами, что и в случае димера при малых магнитных полях. При этом усложнение спиновой структуры приводит к усилению эффекта индуцирования асимметричных пиков магнитным полем. В частности, в последних двух ситуациях возникает по четыре пары резонансных пиков.

**Третья глава** диссертации посвящена рассмотрению транспортных характеристик спинового димера в рамках метода сильной связи. В частности, в этой главе вычисляется ВАХ устройства, в качестве активного элемента (устройства) которого выступает спиновый димер. ВАХ рассчитывается с использованием коэффициентов прохождения системы (формализм Ландауэра-Бюттикера) на основе формулы

$$I = \frac{e}{h} \sum_m \int dE [T_m(E) f_L(E) - T'_m(E) f_R(E)], \quad (3)$$

где  $m=00, 10, 11$ ;  $T_m(E)$  и  $T'_m(E)$  – парциальные вклады в общие коэффициенты прохождения  $T$  и  $T'$  для электронных волн, попадающих в устройство из левого и правого полубесконечных электродов соответственно;  $f_L(E) \equiv f(E-\mu_L)$ ,  $f_R(E) \equiv f(E-\mu_R)$  – функции Ферми-Дирака левого и правого контактов с электрохимическими потенциалами  $\mu_L=E_F$  и  $\mu_R=E_F - eV$ . Специфический вид формулы (3) связан с тем, что расчет транспортных характеристик в диссертации ограничивает-

ся 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  $k_L$  ( $k_R$ ), т.е. задействован только один эффективный канал. Вместе с тем для отраженных волн, а также для волн, прошедших через устройство, примешиваются состояния с другими значениями волновых векторов. Таким образом, включаются дополнительные эффективные каналы, отвечающие возбужденным состояниям системы. ВАХ, вычисленная для разных значений энергии Ферми в рамках такого подхода, приведена на рисунке 3. При расчетах в рамках метода сильной связи варьируются следующие параметры:  $\varepsilon_L$  ( $\varepsilon_R$ ),  $\varepsilon_D$  – одноэлектронные энергии на узле для левого (правого) электродов, а также димера;  $t_L$  ( $t_R$ ),  $t_D$  – параметры перескока между узлами левого (правого) электродов, а также димера;  $t_{LD}$  ( $t_{DR}$ ) – параметр перескока между областью левого (правого) электродов и областью устройства. Здесь и в дальнейшем все энергетические величины измеряются единицах ширины зоны  $W=4|t|$ . Из гра-



*Рис.3. Вольт-амперная характеристика устройства, содержащего спиновый димер, вычисленная для параметров  $\varepsilon_L=\varepsilon_D=\varepsilon_R=0$ ,  $t=t_L=t_R=-0.05$  эВ,  $t_{LD}=t_{DR}=-0.125$ ,  $t_D=-0.25$ ,  $\mu_B H=0.025$ ,  $I=0.375$ ,  $A_{sf}=0.625$ ,  $T\approx 30$  К.*

фиков следует, что ВАХ может существенно отличаться в зависимости от того, являются ли возбужденные состояния токонесящими или нет (см. рис.3). При малых значениях энергии Ферми, когда в транспорте принимает участие только электрон в основном состоянии, ВАХ содержит участки с отрицательной дифференциальной проводимостью. В случае больших значений энергии Ферми, ко-

гда энергии электрона достаточно для перевода димера в возбужденные состояния, области с отрицательной дифференциальной проводимостью в ВАХ исчезают. Выход за приближение непрерывной среды не приводит к качественному изменению эффекта индуцирования магнитным полем асимметричных пиков в низкоэнергетической области.

В этой главе проводится аналогия между проблемой транспорта через спиновую структуру и транспортом через мезоскопические системы. Для анализа проводящих свойств последних строится S-матрица рассеяния, которая связывает амплитуды волн, входящих в устройство, с амплитудами волн, выходящих из него. В случае транспорта через спиновый димер S-матрица имеет наибольшую размерность в высокоэнергетической области ( $E > I + \mu_B H$ ). При таких энергиях эта матрица имеет блочный вид, где каждый блок представляет собой матрицу отражения  $\rho$  ( $\rho'$ ) или  $\tau$  ( $\tau'$ ) размерностью  $3 \times 3$ . Матричный элемент  $\rho_{n,m}$  ( $\rho'_{n,m}$ ) блока представляет собой амплитуду рассеяния электрона из канала  $m$  в канал  $n$  левого (правого) электрода. В свою очередь матричный элемент  $\tau_{n,m}$  ( $\tau'_{n,m}$ ) представляет собой амплитуду рассеяния электрона из канала  $m$  левого (правого) электрода в канал  $n$  правого (левого) электрода. При этом  $T_m = |\tau_{m,l}|^2$ ,  $T'_m = |\tau'_{m,l}|^2$ . В силу того, что электронный поток как при транспорте через мезоскопические системы, так и рассматриваемых спиновых структурах предполагается стационарным, S-матрица является унитарной,  $S^+ = S^{-1}$ .

Таким образом, электронный транспорт в рассматриваемой нами одномерной цепочке 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. При этом контактами инжектируются только спин-поляризованные электроны со спином  $1/2$ , когда димер находится в синглетном состоянии.

В **четвертой главе** диссертации в рамках метода сильной связи на примере спинового димера анализируется причина возникновения асимметричных пиков при включении внешнего магнитного поля. На основе точного решения системы уравнений для парциальных амплитуд показано, что индуцирование асимметричных пиков магнитным полем связано с тем, что в низкоэнергетической области ( $E < I$ ) возбужденные состояния системы, соответствующие триплетным конфигурациям димера, являются локализованными. Интерференция этих состояний с состоянием непрерывного спектра, отвечающим синглетной конфигурации димера, и приводит к появлению асимметричных пиков.

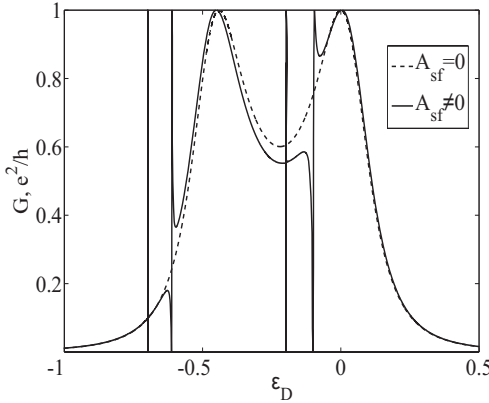


Рис.4. Зависимости  $G(\epsilon_D)$  при  $t=-0.2$  эВ,  $A_{sf}=I=0.125$ ,  $\mu_B H=0.005$ ,  $V=0$ ,  $E_F=0.06$ .

Наличие в системе состояний непрерывного и дискретного спектра и их взаимодействие служит необходимым условием для реализации эффекта Фано. В предположении одинаковости параметра перескока  $t$  во всей системе, а также  $\epsilon_L=\epsilon_R=0$ ,  $V=0$  выводится следующее точное аналитическое выражение на коэффициент прохождения для ненулевых магнитных полей

$$T = \frac{4 \left[ G_q \Omega_q + \Delta \cdot \Phi \right]^2 \sin^2 k}{4 \left[ Z_q \Omega_q + \Delta \cdot F \right]^2 \sin^2 k + \left[ R_q \Omega_q + \Delta \cdot \Psi \right]^2}, \quad (4)$$

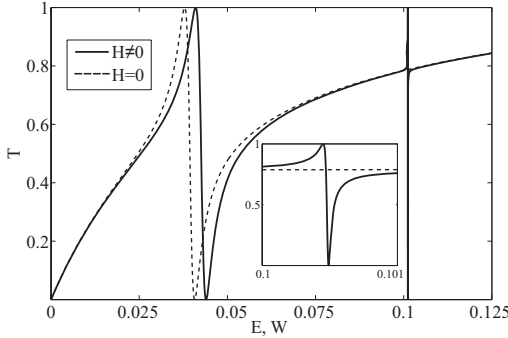
где  $\Delta = e^{-ip} - e^{-iq}$ ,  $\cos q = 1 + 2(I - E)$ ,  $\cos p = 1 + 2(I + \mu_B H - E)$  Главный вывод, следующий из структуры этого выражения (опуская запись всех входящих в него величин в явном виде в силу их громоздкости) сводится к тому, что при  $H \neq 0$  возникают



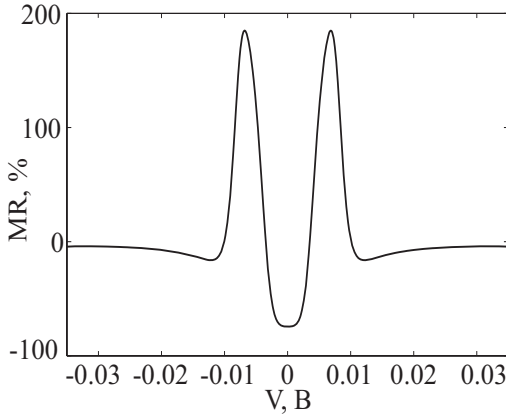
малые слагаемые, пропорциональные  $\Delta$ , в числителе и знаменателе. Из (4) следует, что приближенные значения энергий антирезонансов ( $T=0$ ) равны

$$G_q = 0: E_{\min 1,2} = I - (\alpha_{1,2} - 1) / 4\alpha_{1,2}, \quad \alpha_{1,2} = 2A_{sf} - 4\varepsilon_D \pm \sqrt{3A_{sf}^2 + 1}, \quad (5)$$

$$\Omega_q = 0: E_{\min 3,4} = I + (\alpha_{3,4} + 1) / 4\alpha_{3,4}, \quad \alpha_{3,4} = A_{sf} + 4\varepsilon_D \mp 1, \quad (6)$$



а)



б)

Рис.5. а). Модификация энергетической зависимости коэффициента прохождения электрона при включении магнитного поля для параметров рис.4,  $\varepsilon_D = -0.125$ . На вставке показано структура индуцированного асимметричного пика.

б). Магнитосопротивление спин-димерной структуры  $E_F \approx 0.045$ ,  $T \approx 0.3$  К.

где  $\varepsilon_D$  – одноэлектронная энергия на узлах димера – аналог энергии электрического поля затвора. Из (4) видно, что при  $H=0$  происходит сокращение на  $\Omega_q$ . Следовательно, включение магнитного поля, приводящее к снятию вырождения по энергии триплетных состояний, вызывает появление двух асимметричных пиков Фано с энергиям антирезонансов  $E_{\min 3,4}$ . Наличие еще двух пиков никак не связано с внешним магнитных полем, им соответствуют энергии антирезонансов  $E_{\min 1,2}$ . Все четыре пика показаны на рисунке 4, где представлена зависимость дифференциальной проводимости от напряжения затвора, вычисленная по формуле Ландауэра,  $G = e^2 T(E_F, \varepsilon_D) / h$ . Первый и

третий узкие пики индуцированы магнитным полем, второй и четвертый асимметричные пики остаются и при  $H=0$ . При отсутствии s-f-взаимодействия все асимметричные пики Фано исчезают.

Большая часть заключительной главы диссертации посвящена изучению роли слагаемых, ответственных за спин-флип процессы в гамильтонианах обменных взаимодействий, в возникновении эффекта индуцирования пиков Фано в ненулевых магнитных полях. Рассматриваются вариации задачи об одноэлектронном транспорте через спиновых димер, отличающиеся формой записи гамильтонианов s-f-взаимодействия и внутридимерного обмена, которые могут иметь либо гейзенберговский, либо изинговский вид. Причем, для начала в качестве упрощения взаимодействие спина проходящего электрона учитывается только с одним спиновым моментом димера. Проведенные исследования позволяют сделать вывод о том, что индуцирование магнитным

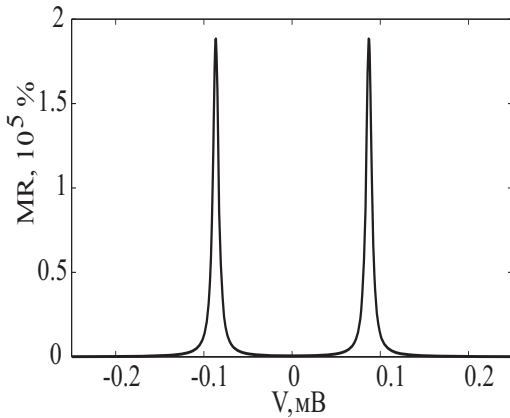


Рис.6. Магнитосопротивление для параметров  $t_L=t_R=-0.1$  эВ,  $t_{TR}=-0.125$ ,  $t_D \approx -0.186$ ,  $\mu_B H=6.25 \cdot 10^{-3}$ ,  $I=0.187$ ,  $A_{sf}=0.75$ ,  $\varepsilon_D=-0.525$ ,  $E_f \approx 0.13$  и  $T \approx 3$  мК.

магнитосопротивление  $MR$  устройства, в качестве активного элемента которого выступает спиновый димер (см. рис.5б),  $MR=[G(H)/G(0)-1] \cdot 100\%$ , где  $G$  вычисляется на основе подхода, использованного в предыдущей главе. Маг-

полем асимметричных пиков Фано возможно только, если оба обменных гамильтониана имеют гейзенберговский вид.

Демонстрируется, что влияние магнитного поля на систему сводится как к индуцированию новых пиков, так и к сдвигу уже имеющихся пиков Фано (см. рис.5а). Подобная реакция позволяет вычислить

нитоспротивление может быть как положительным, так и отрицательным. При определенных параметрах системы возникает ситуация, когда в области антирезонанса, имеющегося при  $H=0$ , ненулевые магнитные поля индуцируют пик резонансного прохождения. Тогда величина  $MR$ , вычисленная для энергий из этого диапазона, достигает аномально высоких значений порядка  $10^5\%$ , как показано на рисунке 6.

В **заключении** сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе.

## **ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ**

1. На основе точного решения уравнения Шредингера для задачи об одноэлектронном спин-зависящем транспорте через спиновый димер в приближении непрерывной среды проанализировано поведение коэффициента прохождения. Показано, что процессы неупругого рассеяния электрона на потенциальном рельефе, формируемом s-f-обменным взаимодействием с димером, приводят к подавлению резонансного прохождения. Включение магнитного поля индуцирует асимметричные резонансные пики в низкоэнергетической области. В больших магнитных полях, когда происходит смена типа основного состояния димера, поведение коэффициента прохождения принципиально зависит от спиновой поляризации транспортируемого электрона.

2. Проведенные расчеты транспорта через четырехспиновую цепочку и шестиспиновый кластер показали, что отмеченные выше особенности поведения коэффициента прохождения для димера сохраняются и даже усиливаются. В частности, увеличивается число пиков, индуцированных магнитным полем.

3. Задача о транспорте спин-поляризованного электрона через спиновый димер в магнитном поле была решена в приближении сильной связи. Рассмотрение показало, что эффект индуцирования магнитным полем пиков резонансного прохождения в рамках данного подхода сохраняется. На основе

метода Ландауэра-Бюттикера была вычислена ВАХ наноустройства, в качестве активной области которого выступает спиновый димер. Применение этого подхода базируется на том, что транспорт в системе идет по трем эффективным каналам, соответствующим основному и возбужденным состояниям. Обнаружено, что ВАХ может иметь выраженное нелинейное поведение и участки с отрицательной дифференциальной проводимостью. Замечено, что ВАХ может существенно отличаться в зависимости от того, являются ли возбужденные состояния системы токонесящими или нет.

4. Показано, что для транспортных характеристик спин-димерной системы в низкоэнергетической области появление асимметричных пиков связано с интерференционными процессами по сценарию Фано. Причиной появления двух асимметричных пиков Фано в ненулевом магнитном поле является снятие вырождения по энергии триплетных состояний. Этот эффект исчезает если хотя бы одно из обменных взаимодействий в системе становится изинговским.

5. В рамках подхода Ландауэра-Бюттикера вычислено магнитосопротивление устройства, содержащего в качестве активного элемента спиновый димер. Показано, что влияние магнитного поля на пики Фано служит причиной возникновения как отрицательного, так и положительного магнитосопротивления. В последнем случае возможно реализовать аномально высокие величины магнитосопротивления.

### **Список публикаций по теме диссертации**

1. Вальков В.В., Аксенов С.В., Эффекты неупругого транспорта электрона через потенциальный рельеф спинового димера в магнитном поле.// Известия РАН. Серия физическая. – 2010. – Т.74. – стр.6-11.
2. Вальков В.В., Аксенов С.В., Проявление неупругих эффектов в транспортных характеристиках спиновых наноструктур.// Известия РАН. Серия физическая. – 2010. – Т.74. – стр.763-765.

3. Вальков В.В., Аксенов С.В., Эффекты неупругого спин-зависящего электронного транспорта через спиновую наноструктуру в магнитном поле.// ЖЭТФ. – 2011. – Т.140. – вып.2(8). – стр.305-316.
4. Val'kov V.V., Aksenov S.V., Fano mechanism of the giant magnetoresistance formation in a spin nanostructure.// arXiv:1109.0391v1. – 2011.
5. Вальков В.В., Аксенов С.В., Эффекты неупругого транспорта электрона через потенциальный рельеф спинового димера в магнитном поле.// Труды XIII Международного Симпозиума «Нанозлектроника». – Нижний Новгород. – 16-20 марта 2009. – Т.1. – стр.179.
6. Вальков В.В., Аксенов С.В., Проявление неупругих эффектов в транспортных характеристиках спиновых наноструктур.// Труды 2-го Международного междисциплинарного симпозиума «Среды со структурным и магнитным упорядочением» (Multiferroics-2). – Ростов-на-Дону, п. Лоо. – 23-28 сентября 2009. – стр.5.
7. Вальков В.В., Аксенов С.В., Эффекты Фано при квантовом транспорте через спиновую наноструктуру.// Труды 3-го Международного междисциплинарного симпозиума «Среды со структурным и магнитным упорядочением» (Multiferroics-3). – Ростов-на-Дону, п. Лоо. – 4-8 сентября 2011. – стр.5.
8. Вальков В.В., Аксенов С.В., Проявление антирезонанса Фано в вольт-амперной характеристике наноструктуры с одиночной магнитной примесью.// Труды 14-го Международного междисциплинарного симпозиума «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-14). – Ростов-на-Дону, п. Лоо. – 9-13 сентября 2011. – Т.1. – стр.5.
9. Вальков В.В., Аксенов С.В., Неупругий одноэлектронный транспорт через спиновые наноструктуры.// Сборник трудов Конференции молодых ученых КНЦ СО РАН 2010. – Красноярск. – 2010. – стр.11.
10. Вальков В.В., Аксенов С.В., Резонансное туннелирование электрона через потенциальный рельеф спинового димера.// Тезисы докладов XXXII Международной зимней школы физиков-теоретиков «Куровка-2008», Екатеринбург 25 февраля – 2 марта 2008г., стр.141.
11. Вальков В.В., Аксенов С.В., Эффекты неупругого спин-зависящего транспорта электрона через спиновые наноструктуры в магнитном поле.// Тезисы докладов XXXV Совещания по физике низких температур (НТ-35), Черногоровка 29 сентября-2 октября 2009г., стр.244.
12. Вальков В.В., Аксенов С.В., Неупругие эффекты при квантовом транспорте электронов через спиновые наноструктуры.// Материалы

1-ой конференции нанотехнологического общества России, Москва, НИЯУ «МИФИ» 9 октября 2009г., URL: <http://www.nsr.info/nor/bulletin/seminars/index.php?ID=1601>.

13. Вальков В.В., Аксенов С.В., Особенности неупругого одноэлектронного транспорта через спиновые наноструктуры.// Тезисы докладов XXXIII Международной зимней школы физиков-теоретиков «Куровка», Екатеринбург 22-27 февраля 2010г., стр.8.
14. Val'kov V.V., Aksenov S.V., Effect of magnetic field on the spin-dependent electron transport through nanostructures taking into account inelastic effects.// Book of Abstracts of IV Euro-Asian Symposium «Trends in Magnetism»: Nanospintronics EASTMAG - 2010. Ekaterinburg. June 28 – July 2, 2010, p.184.

## СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Akkerman H.B., and de Boer B., Electrical conduction through single molecules and self-assembled monolayers // *J.Phys.: Cond. Matt.* – 2008. – Vol.20. – P.013001.
2. Ihn T., *Electronic quantum transport in mesoscopic semiconductor structures.* – Berlin: Springer. – 2004.
3. Agraft N., Yeyatib A.L., and van Ruitenbeek J.M., Quantum properties of atomic-sized conductors // *Phys. Rep.* – 2003. – Vol.377. – P.81.
4. Alhassid Y., *The statistical theory of quantum dots.*// *Rev. Mod. Phys.* – 2000. – Vol.72. – P.895.
5. Datta S., *Electronic transport in mesoscopic systems.* – Cambridge: Cambridge University Press. – 1995.
6. Miroshnichenko A.E., Flash S., and Kivshar Y.S., Fano resonances in nanoscale structures.// *Rev. Mod. Phys.* – 2010. – V.82. – P.2257.
7. Келдыш Л.В., Диаграммная техника неравновесных процессов.// *ЖЭТФ.* – 1964. – Т.47. – С.1515.
8. Арсеев П.И., Маслова Н.С., Взаимодействие электронов с колебательными модами при туннелировании через одиночный электронный уровень молекулы.// *УФН.* – 2010. – Т.180. – С.1197.
9. Ueba H., Mii T., and Tikhodeev S.G., Theory of inelastic tunneling spectroscopy of a single molecule – Competition between elastic and inelastic current.// *Surf. Science.* – 2007. – Vol.601. – P.5220.
10. Galperin M., Ratner M.A., and Nitzan A., Hysteresis, switching and negative differential resistance in molecular junctions: A polaron model.// *Nano Lett.* – 2005. – Vol.5. – P.125.
11. Глазман Л.И., Райх М.Э., Резонансная Кондо-прозрачность барьера с квазилокализованными примесными состояниями.// *Письма в ЖЭТФ.* – 1988. – Т.47. – С.378.
12. Kikoin K., Avishai Y., Kondo tunneling through real and artificial molecules.// *Phys.Rev.Lett.* – 2001. – Vol.86. – P.2090.
13. Фраерман А.А., Удалов О.Г., Фотогальванический эффект в ферромагнетиках с некомпланарным распределением намагниченности // *Письма в ЖЭТФ.* – 2008. – Т.87. – С.187.
14. Hirjibehedin C.F., Lutz C.P., Heinrich A.J., Spin coupling in engineered atomic structures.// *Science.* – 2006. – V.312. – P.1021.
15. Chen X., Fu Y.-S., Ji S.-H., et al., Probing superexchange interaction in molecular magnets by spin-flip spectroscopy and microscopy.// *Phys.Rev.Lett.* – 2008. – Vol.101. – P.197208.
16. Pichugin K.N., and Sadreev A.F., Irregular Aharonov-Bohm oscillations of conductance in two-dimensional rings.// *Phys. Rev. B.* – 1997. – Vol.56. – P.9662.

Подписано в печать 15.11.11

Формат 60×84/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 70 экз. Заказ № 61 .

Отпечатано в типографии Института физики СО РАН  
660036, Красноярск, Академгородок, ИФ СО РАН