

# Эффект Фано при туннелировании спин-поляризованного электрона через одиночную магнитную примесь

В.В. Вальков<sup>1,2</sup>, С.В. Аксенов<sup>1</sup>, Е.А. Уланов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, г. Красноярск, 660036, Россия

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

asv86@iph.krasn.ru

<sup>2</sup>Сибирский аэрокосмический университет, г. Красноярск, 660014, Россия

Статья поступила в редакцию 13 сентября 2012 г.

В результате расчета транспортных характеристик одиночной магнитной примеси показано, что присутствие разных эффективных каналов для прохождения электрона приводит к реализации эффекта Фано. Отмечено, что приложение внешнего магнитного поля и электрического поля затвора позволяет управлять проводящими свойствами, обусловленными конфигурационным взаимодействием состояний в системе.

В результаті розрахунку транспортних характеристик поодинокі магнітної домішки показано, що присутність різних ефективних каналів для проходження електрона призводить до реалізації ефекту Фано. Відмічено, що додаток зовнішнього магнітного поля і електричного поля затвора дозволяє управляти властивостями, що проводять, обумовленими конфігураційною взаємодією станів в системі.

PACS: 75.76.+j Эффект спинового транспорта;

72.25.-b Спин-поляризованный перенос;

85.75.-d Магнитоэлектроника, спинтроника, устройства, использующие спин-поляризованный транспорт.

Ключевые слова: эффект Фано, транспортные явления.

## Введение

Идея, заключающаяся в учете влияния спиновых степеней свободы носителей и твердотельного окружения на зарядовый транспорт, стала краеугольной для развития спиновой электроники [1,2], найдя свое выражение в современных устройствах записи и хранения информации. Одним из основных направлений спинтроники является изучение возможностей перемещения ферромагнитного образца как с помощью внешнего магнитного поля [3], так и под действием поляризованного по спину тока. В последнем случае в качестве основных механизмов, приводящих к изменению направления намагниченности, рассматриваются инжекция неравновесных спинов [4] и действие поверхностного крутильного момента [5,6]. Эти процессы базируются на присутствии в системе обменного взаимодействия между коллективизированной и локализованной подсистемами, что было предложено еще в

$s-d(f)$ -модели С.В. Вонсовского [7]. Изменение магнитного состояния в одном из слоев магнитного перехода привлекательно тем, что может приводить к скачкам электросопротивления [8], эмиссии СВЧ и терагерцового излучений [9,10].

Следы обменного взаимодействия между транспортируемыми частицами и магнитными моментами систем, размеры которых не превышают единиц нанометров, отчетливо проявляются при зондировании таких структур сканирующим туннельным микроскопом (СТМ) [11,12]. Использование СТМ позволило экспериментально наблюдать зеэмановское расщепление энергетических уровней отдельного атома на примере марганца [13], подтвердить антиферромагнитный характер обменной связи в цепочках атомов и магнитных молекул на основе переходных металлов [12,14,15], а также установить наличие магнитной анизотропии у подобного рода систем, обладающих спином  $S > 1/2$  [16,17]. Демонстрируемая на сегодняшний день воз-

возможность управления спиновым состоянием посредством электрического тока позволяет рассчитывать на применение магнитных нанообъектов как самодостаточных элементов логики и памяти [18,19], а также использовать их в качестве базовых элементов для квантовых вычислений [20].

Привлекательными с точки зрения будущих приложений молекулярной спинтроники выглядят транспортные свойства одиночных магнитных молекул, находящихся в туннельном 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 [21]. Кроме того, эта молекула работает по принципу спинового диода в случае, если она находится между ферромагнитными электродами с разной степенью спиновой поляризации носителей [22].

В случае сильной связи образование многочастичного основного состояния по сценарию Кондо служит причиной возникновения характерного резонансного пика дифференциальной магнитной проводимости нанообъекта при низких температурах [23]. Однако в работе [24] было показано, что эта особенность может иметь существенно асимметричную форму. Физической причиной здесь выступает интерференция состояний системы, соответствующих двум разным каналам для туннелирования электронов через магнитную примесь. Первый канал определяется прохождением через дискретное состояние  $d$ -орбитали атома кобальта, второй — напрямую в состояния континуума зоны проводимости золотой подложки. Описанный механизм, предложенный Фано [25], возможен только при когерентном характере электронного транспорта, который достигается за счет малого времени жизни электронов проводимости на  $d$ -орбитали Co [26]. Дополнительный интерес к процессам конфигурационного взаимодействия Фано в задачах квантового транспорта вызван тем, что этот механизм может играть существенную роль в формировании особенностей проводящих и оптических свойств полупроводниковых гетероструктур [27], в частности имеющих магнитные примеси [28].

Таким образом, понимание эффектов, сопровождающих электронный транспорт всего через один или два магнитных атома, становится первоочередной проблемой. В данной статье на основе подхода Ландауэра рассмотрен электронный транспорт через спиновую структуру (СС), в качестве которой выступает одиночная магнитная примесь. Предлагаемая модель, основанная на приближении сильной связи, позволяет оценить влияние обменного взаимодействия на транспортные свойства системы, проанализировать эффекты присутствия внешнего магнитного поля и электрического поля затвора.

### Транспорт спин-поляризованного электрона в приближении сильной связи

Рассмотрим транспорт спин-поляризованного электрона, который инжектируется одним из контактов в область устройства. Геометрия задачи для случая, когда в центральной области располагается одиночная магнитная примесь со спином  $S=1$ , показана на рис. 1. В качестве такой примеси может выступать как магнитная молекула, так и магнитный атом (например, Fe, Co, Mn). Предполагается, что СС расположена между левым ( $n \leq 0$ ) и правым ( $n \geq 2$ ) металлическими контактами. Проводя аналогию с экспериментальными ситуациями [11–17], можно заключить, что один из контактов соответствует игле СТМ, а другой — подложке. К системе может быть приложено внешнее магнитное поле  $\mathbf{H}$ . Важная особенность транспорта через СС проявляется в том, что присутствующее в системе обменное взаимодействие интенсивности  $A$  между спиновым моментом транспортируемого электрона  $\sigma = 1/2$  и спиновым моментом примеси индуцирует ее переходы в возбужденные состояния, что на качественном уровне удовлетворяет вышеупомянутым экспериментальным ситуациям.

Общий гамильтониан системы в приближении сильной связи имеет следующий вид:

$$H = H_L + H_R + H_{TR} + H_{De} + H_{\text{exch}} + H_D - eV(n). \quad (1)$$

Первые два слагаемых в (1) — гамильтонианы левого и правого контактов,

$$H_{L(R)} = \sum_{\sigma, n \in L(R)} \left[ \epsilon_{\sigma} c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} + t \left( c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n-1, \sigma} + c_{n-1, \sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} \right) \right], \quad (2)$$

где одноэлектронные спин-зависящие энергии на узлах предполагаются одинаковыми,  $\epsilon_{\sigma} = -g_e \mu_B H \sigma$ . Оператор

$$H_{TR} = \sum_{\sigma} t_{TR} \left[ c_{1\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} c_{1\sigma} + c_{2\sigma}^{\dagger} c_{1\sigma} + c_{1\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma} \right] \quad (3)$$

описывает перескоки электрона проводимости между устройством и контактами. Предположим, что электрон садится на незаполненную орбиталь магнитной примеси. Гамильтониан  $H_{De} = \epsilon_{D\uparrow} c_{1\uparrow}^{\dagger} c_{1\uparrow} + \epsilon_{D\downarrow} c_{1\downarrow}^{\dagger} c_{1\downarrow}$  характеризует электрон проводимости в устройстве.

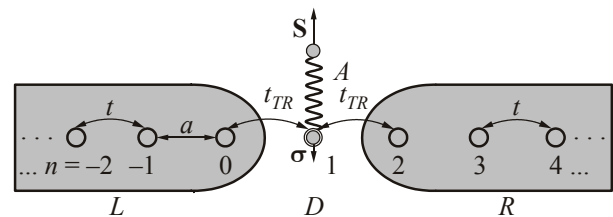


Рис. 1. Магнитная примесь между металлическими контактами.

Одноэлектронная энергия на узле устройства,  $\varepsilon_{D\sigma} = \varepsilon_D - g_e \mu_B H \sigma$ , содержит параметр  $\varepsilon_D$ , отвечающий электрическому полю затвора, которое способно эффективно управлять положением резонансных уровней системы. Неупругий характер транспорта электрона связан с наличием слагаемого  $H_{\text{exch}}$  в общем гамильтониане  $H$ , которое отвечает за обменное взаимодействие между спином электрона и спином наноструктуры,

$$H_{\text{exch}} = \frac{A}{2} \left\{ c_{1\uparrow}^+ c_{1\downarrow} S_1^- + c_{1\downarrow}^+ c_{1\uparrow} S_1^+ + (c_{1\uparrow}^+ c_{1\uparrow} - c_{1\downarrow}^+ c_{1\downarrow}) S_1^z \right\}, \quad (4)$$

где  $S_1^+$ ,  $S_1^-$ ,  $S_1^z$  — спиновые операторы примеси. Оператор  $H_D$  в гамильтониане  $H$  представляет собой стандартный спиновый гамильтониан. Он описывает магнитную анизотропию примесного атома, а также его зеемановскую энергию в магнитном поле. Таким образом,  $H_D = D(S^z)^2 - g_D \mu_B H S^z$ , где  $D > 0$  — параметр анизотропии. В дальнейшем предполагается, что синглетное состояние СС является основным. Последний член в гамильтониане характеризует потенциальную энергию электрона во внешнем электрическом поле, обусловленном разностью потенциалов на контактах  $V$ . Для простоты в работе используется предположение о том, что потенциал изменяется линейно вдоль центральной области, т.е.  $V(n \in L) = 0$ ,  $V(n \in D) = 0,5V$ ,  $V(n \in R) = V$ .

При записи решений уравнения Шредингера следует принимать во внимание изменение состояния СС вследствие взаимодействия с электроном. Учитывая это, запишем базисные состояния как  $D_{SSz} c_{n\sigma}^+ |0\rangle$ , где  $D_{SSz}$  соответствует состоянию СС с суммарным спиновым моментом  $S$  и проекцией этого момента  $S_z$  на ось квантования  $Oz$ ,  $|0\rangle$  — вакуумное состояние. Для случая, когда электрон с проекцией спина  $\sigma = 1/2$  инжектируется левым контактом в область, где находится магнитная примесь, решение уравнения Шредингера записывается в виде

$$|\Psi_I\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left\{ w_n c_{n\uparrow}^+ D_{10} + v_n c_{n\downarrow}^+ D_{11} \right\} |0\rangle. \quad (5)$$

Отсутствие в (5) вклада состояния  $D_{1,-1}$  объясняется выполнением закона сохранения проекции полного спина в системе. Будем считать, что инжектируемый левым контактом электрон обладает волновым вектором  $k_L$ . Тогда выражения для парциальных амплитуд в левом и правом контактах имеют вид

$$\begin{aligned} n \in L: & \quad w_n = e^{ik_L n} + r_{10} e^{-ik_L n}, \quad v_n = r_{11} e^{-ip_L n}, \\ n \in R: & \quad w_n = t_{10} e^{ik_R n}, \quad v_n = t_{11} e^{ip_R n}, \end{aligned}$$

где  $r_{10}$ ,  $r_{11}$  — амплитуды отражения от потенциального профиля СС в основном и возбужденном состояниях соответственно;  $t_{10}$ ,  $t_{11}$  — аналогичные амплитуды прохождения электрона;  $k_L, k_R, p_L, p_R$  — волновые

векторы. Из решения уравнения Шредингера находим коэффициент прохождения через потенциальный профиль СС:

$$T = \begin{cases} T_{10} + T_{11}, & 0 < k_R, p_R < \pi; \\ T_{10} & , \quad 0 < k_R < \pi, \end{cases} \quad (6)$$

$$T_{10} = \frac{\sin k_R}{\sin k_L} |t_{10}|^2, \quad T_{11} = \frac{\sin p_R}{\sin k_L} |t_{11}|^2.$$

### Особенности поведения коэффициента прохождения при малых энергиях транспортируемого электрона

Ранее, в работе [29], было показано, что при  $t = t_{TR}$  поведение функции  $T(E)$ , где  $E$  — энергия падающего электрона, при  $E < D$  характеризуется наличием минимума  $T$ , когда  $T = 0$ . Этот эффект вызван конфигурационным взаимодействием по сценарию Фано дискретного возбужденного состояния системы и состояния континуума, отвечающего состоянию примеси  $D_{10}$ . На рис. 2 приведены результаты вычисления  $T(E < D)$  в туннельном режиме электронного транспорта ( $t \neq t_{TR}$ ) с учетом действия магнитного поля и электрического поля затвора. Видно, что особенность Фано приобретает форму асимметричного пика, где близко располагаются антирезонанс,  $T = 0$ , и резонанс,  $T = 1$ . Стоит отметить, что для рис. 2 формально выполняется условие  $g_D \mu_B H > D$ . Однако при расчетах основным предполагалось состояние  $D_{10}$ . Аналогичное поведение  $T(E)$  имеет место и при малых  $H$ ,  $g_D \mu_B H < D$ . Выбор в пользу больших значений магнитного поля продиктован необходимостью наглядно продемонстрировать сдвиг асимметричного пика при  $H \neq 0$ . В свою очередь, модификация коэффициента прохождения при смене типа основного состояния в больших магнитных полях была показана на примере спинового димера в работе [30].

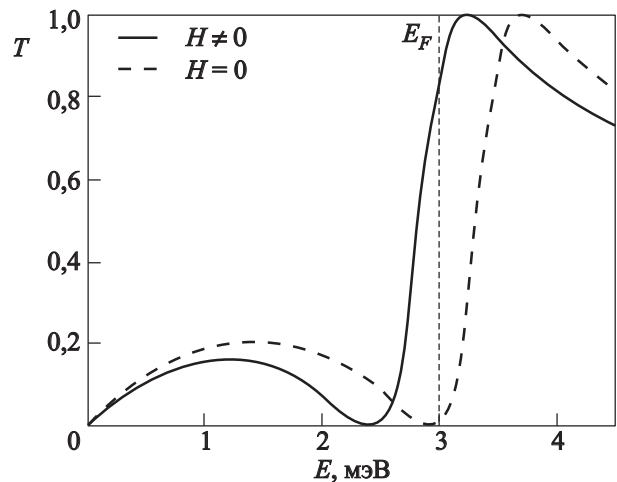


Рис. 2. Зависимость  $T(E)$ ,  $t = -1$  эВ,  $t_{TR} = t/3$ ,  $\varepsilon_D = -1,79$  эВ,  $D = \mu_B H = 5$  мэВ,  $A = 8$  мэВ,  $g_D = 2,1$ .

Решая уравнение Шредингера с гамильтонианом (1) и пользуясь дисперсионными соотношениями для волновых векторов  $k$  и  $p$  при  $V = 0$ ,  $E = 2|t|(1 - \cos k)$ ,  $E = D + (2 - g_D)\mu_B H + 2|t|(1 - \cos p)$ , найдем коэффициент прохождения в низкоэнергетической области в следующем виде:

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

где  $\tau = t_{TR}^2 / |t|$ ,  $D_p = 2\tau e^{ip} - 2|t| \cos p + A/2 - \varepsilon_D$ . Из (7) следует, что  $T = 0$  при  $D_p = 0$ . Тогда энергия антирезонанса равна

$$E_{ares} = D + (2 - g_D)\mu_B H + 2|t| - \frac{(|t| - \tau) A_D - \tau \sqrt{A_D^2 - 4|t|(|t| - 2\tau)}}{|t| - 2\tau}, \quad (8)$$

где  $A_D = A/2 - \varepsilon_D$ . Из (8) следует, что в случае отсутствия поля затвора,  $\varepsilon_D = 0$ , в туннельном режиме ( $|t_{TR}| \ll |t|$ ) энергия  $E_{ares}$  становится комплексной, если характерная величина интенсивности обменного взаимодействия между электроном и примесью порядка температуры Кондо  $T_K$ , т.е.  $A \sim 10^{-3}$  эВ [31]. Энергия антирезонанса  $E_{ares}$  приобретает действительные значения, когда  $|t| \ll A$ . Однако в этом случае должно выполняться условие  $D + (2 - g_D)\mu_B H + 2|t| > A$ , чтобы  $E_{ares}$  осталась в низкоэнергетической области. Это неравенство трудно выполнить, т.к.  $D, \mu_B H \sim 10^{-3}$  эВ [16,17,32]. При  $A \sim T_K$  и  $\varepsilon_D \sim t$  можно выделить два случая: при  $\varepsilon_D > 0$  энергия  $E_{ares}$  лежит за пределами низкоэнергетической области; при  $\varepsilon_D < 0$  антирезонанс Фано может иметь место (см. рис. 2). Таким образом, включение электрического поля затвора делает возможным наблюдение эффекта Фано в ситуации, когда магнитная примесь находится в туннельном контакте с электродами.

### Вольт-амперная характеристика и магнитосопротивление

Для нахождения тока через СС в когерентном режиме воспользуемся подходом Ландауэра [33]:

$$I = \frac{e}{h} \int T(E) (f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)) dE, \quad (9)$$

где  $f(E - \mu_L), f(E - \mu_R)$  — фермиевские функции распределения электронов в левом и правом контактах с электрохимическими потенциалами  $\mu_L = E_F, \mu_R = E_F - eV$  соответственно.

На рис. 3 изображена ВАХ системы с одиночной магнитной примесью, вычисленная в предположении, что токонесящими являются состояния в окрестности асимметричного пика (см. рис. 2). В этой ситуации

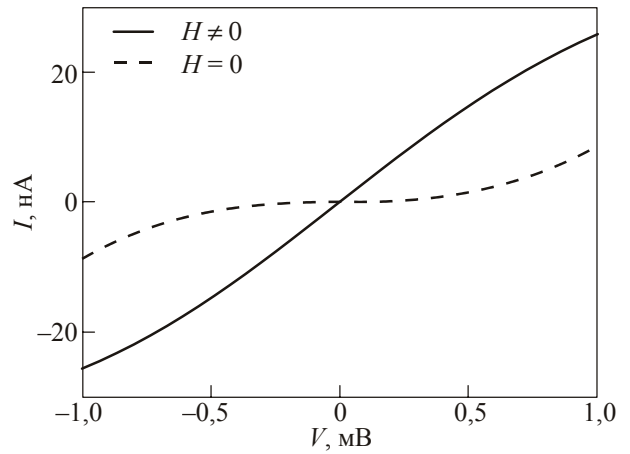


Рис. 3. Вольт-амперная характеристика системы с магнитной примесью для параметров рис. 2,  $E_F = 3$  мэВ.

ВАХ имеет нелинейное поведение, а ее модификация при включении магнитного поля объясняется сдвигом пика  $T$  влево. В результате максимум,  $T = 1$ , попадает в энергетическое окно между электрохимическими потенциалами, и ток становится больше по сравнению с ситуацией  $H = 0$ . Такое поведение асимметричного пика Фано в магнитном поле может выступать основой для возникновения магнитосопротивления у наноустройств, активная область которого представлена одиночной магнитной примесью. Зависимость магнитосопротивления,  $MR = (G(H)/G(0) - 1) \cdot 100\%$  ( $G = dI/dV$  — дифференциальная проводимость), от напряжения смещения  $V$  показана на рис. 4. Видно, что эта характеристика способна принимать аномально высокие значения.

### Заключение

Рассмотрение спин-зависящего электронного транспорта через одиночную магнитную примесь показало, что за счет конфигурационного взаимодействия состояний дискретного и непрерывного спектров в системе реализуется резонанс Фано. Прохождение спин-

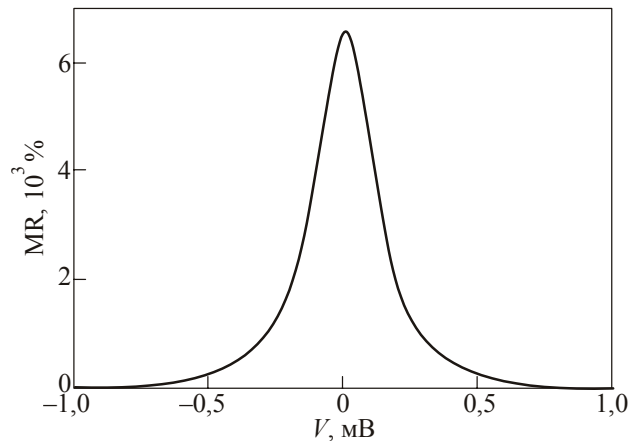


Рис. 4. Магнитосопротивление для параметров рис. 3.

поляризованного электрона через примесь в туннельном режиме приводит в тому, что резонанс Фано приобретает форму асимметричного пика с близко расположенными резонансом прохождения ( $T = 1$ ) и резонансом отражения ( $T = 0$ ). Замечено, что электрическое поле затвора играет важную роль для проявления резонанса Фано в коэффициенте прохождения, позволяя эффективно управлять положением резонанса. Включение внешнего магнитного поля приводит к сдвигу пика Фано. Этот эффект ответственен за появление аномально высокого магнитосопротивления у системы, содержащей одиночную магнитную примесь.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН «Квантовые мезоскопические и неупорядоченные структуры», Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы», Российского фонда фундаментальных исследований (грант р\_сибирь #11-02-98007). Один из авторов (С.В. Аксенов) выражает благодарность за поддержку исследований, оказываемую в рамках гранта Президента РФ МК-1300.2011.2.

1. А. Ферг, *УФН* **178**, 1336 (2008).
2. П.А. Грюнберг, *УФН* **178**, 1349 (2008).
3. В.Л. Миронов, А.А. Фраерман, Б.А. Грибков, О.Л. Ермолаева, С.А. Гусев, С.Н. Вдовичев, *ФТТ* **52**, 2153 (2010).
4. С. Heide, P.E. Zilberman, and R.J. Elliott, *Phys. Rev. B* **63**, 064424 (2001).
5. J.C. Slonczewski, *J. Magn. Magn. Mater.* **159**, L1 (1996).
6. L. Berger, *Phys. Rev. B* **54**, 9353 (1996).
7. С.В. Вонсовский, *Магнетизм*, Наука, Москва (1971).
8. J.A. Katine, F.J. Albert, R.A. Buhrman, E.B. Myers, and D.C. Ralph, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3149 (2000).
9. S.I. Kiselev, J.C. Sankey, I.N. Kivorotov, N.C. Emley, R.J. Schoelkopf, R.A. Buhrman, and D.C. Ralph, *Nature* **425**, 380 (2003).
10. Ю.В. Гуляев, П.Е. Зильберман, И.В. Маликов, Г.М. Михайлов, А.И. Панас, А.И. Чигарев, Э.М. Эпштейн, *Письма в ЖЭТФ* **93**, 289 (2011).
11. C. Timm and F. Elste, *Phys. Rev. B* **73**, 235304 (2006).
12. S. Loth, K. von Bergmann, M. Ternes, A.F. Otte, C.P. Lutz, and A.J. Heinrich, *Nat. Phys.* **6**, 340 (2010).
13. A.J. Heinrich, J.A. Gupta, and C.P. Lutz, *Science* **306**, 466 (2004).
14. C.F. Hirjibehedin, C.P. Lutz, and A.J. Heinrich, *Science* **312**, 1021 (2006).
15. X. Chen, Y.-S. Fu, S.-H. Ji, T. Zhang, P. Cheng, X.-C. Ma, X.-L. Zou, W.-H. Duan, J.-F. Jia, and Q.-K. Xue, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 197208 (2008).
16. C.F. Hirjibehedin, C.-Y. Lin, A.F. Otte, M. Ternes, C.P. Lutz, B.A. Jones, and A.J. Heinrich, *Science* **317**, 1199 (2007).
17. N. Tsukahara, K. Noto, M. Ohara, S. Shiraki, N. Takagi, Y. Takata, J. Miyawaki, M. Taguchi, A. Chainani, S. Shin, and M. Kawai, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 167203 (2009).
18. L. Bogani and W. Wernsdorfer, *Nature Materials* **7**, 179 (2008).
19. S. Loth, S. Baumann, C.P. Lutz, D.M. Eigler, and A.J. Heinrich, *Science* **335**, 196 (2012).
20. M.N. Leuenberger and D. Loss, *Nature* **410**, 789 (2001).
21. S. Barraza-Lopez, K. Park, V. Garcia-Suarez, and J. Ferrer, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 246801 (2009).
22. M. Misiorny, I. Weymann, and J. Barnas, *Europhys. Lett.* **89**, 18003 (2010).
23. W. Liang, M.P. Shores, M. Bockrath, J.R. Long, and H. Park, *Nature* **417**, 725 (2002).
24. V. Madhavan, W. Chen, T. Jamneala, M.F. Crommie, and N.S. Wingreen, *Science* **280**, 567 (1998).
25. U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
26. А.Е. Мирошниченко, S. Flash, and Y.S. Kivshar, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2257 (2010).
27. В.Я. Алешкин, Л.В. Гавриленко, М.А. Одноблюдов, И.Н. Ясневич, *Физика и техника полупроводников* **42**, 899 (2008).
28. I.V. Rozhansky, N.S. Averkiev, and E. Lahderanta, *arXiv:1111.0899v1* (2011).
29. В.В. Вальков, С.В. Аксенов, Е.А. Уланов, *Известия РАН. Серия физическая* **76**, 451 (2012).
30. В.В. Вальков, С.В. Аксенов, *Известия РАН. Серия физическая* **74**, 6 (2010).
31. M. Misiorny, I. Weymann, and J. Barnas, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 126602 (2011).
32. A.F. Otte, M. Ternes, K. von Bergmann, S. Loth, H. Brune, C.P. Lutz, C.F. Hirjibehedin, and A.J. Heinrich, *Nature Phys.* **4**, 847 (2008).
33. S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press (1995).

### The Fano effect under tunneling of a spin-polarized electron through a single magnetic impurity

V.V. Val'kov, S.V. Aksenov, and E.A. Ulanov

The calculation of single magnetic impurity's transport characteristics has showed that presence of different effective channels for electron transmission results the Fano effect. It was noticed the external magnetic field and gate voltage allow to control of conducting properties which are specified by the configuration interaction between states of the system.

PACS: **75.76.+j** Spin transport effects;  
**72.25.-b** Spin polarized transport;  
**85.75.-d** Magnetoelectronics; spintronics: devices exploiting spin polarized transport or integrated magnetic fields.

Keywords: Fano effect, transport processes.