

О ВОЗМОЖНОСТИ НАБЛЮДЕНИЯ МАКРОСКОПИЧЕСКОГО КВАНТОВОГО МАГНИТНОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ СКАНИРУЮЩИМ ТУННЕЛЬНЫМ МИКРОСКОПОМ

С. Н. Молотков

*Институт физики твердого тела Российской академии наук
142432, Черноголовка, Россия*

Поступила в редакцию 8 октября 1996 г.

Предлагается теория, описывающая детектирование макроскопического магнитного квантового туннелирования по флуктуациям тока в сканирующем туннельном микроскопе.

1. ВВЕДЕНИЕ

Впервые идея о возможности макроскопического квантового магнитного туннелирования применительно к малым магнитным частичкам была, по-видимому, высказана в работе [1], хотя вопрос в самом общем виде возник еще на заре становления квантовой механики и был сформулирован Шредингером в виде известного парадокса, именуемого «парадоксом шредингеровской кошки» [2], который фактически сводится к следующему. Если квантовая механика — правильная теория, то она должна быть применима и к описанию макроскопических объектов, если это действительно так, то должна иметь место суперпозиция различных состояний макроскопической системы. Вопрос о наблюдении такой суперпозиции оставался долгое время открытым. Магнитные наночастицы являются такими объектами, которые одновременно достаточно макроскопичны и в тоже время еще достаточно малы, чтобы в них могли проявляться квантовомеханические свойства, такие как квантовое туннелирование.

Объектами наблюдения макроскопического квантового туннелирования являются малые магнитные частицы [3].

Квантовое туннелирование представляет собой переход микроскопической системы из одного состояния в другое по классически запрещенной траектории. Если система приготовлена в одном из таких состояний (без учета слабых туннельных переходов), то в результате учета переходов в другие состояния система оказывается в суперпозиции различных макроскопических состояний. Подобные переходы представляют собой, по сути, обычные квантовые биения, которые должны проявляться экспериментально в виде низкочастотной коллективной моды.

После работы [3] появилось большое число работ, посвященных макроскопическому магнитному квантовому туннелированию [4–11]. Экспериментально явление макроскопического квантового туннелирования исследовалось методом низкотемпературной магнитной релаксации в работах [10, 11], а также методом отклика на слабое магнитное поле в SQUID в [9].

В данной работе мы хотим обратить внимание на одну возможность детектирования макроскопического квантового туннелирования при помощи сканирующего туннельно-

го микроскопа. Он успешно использовался для детектирования локальной намагниченности на поверхности с атомарным разрешением [12]. В работе [13] исследовался частотный спектр шума (флуктуаций) туннельного тока с поверхности образца Si(111)7×7, помещенного в постоянное магнитное поле ($H \approx 100$ Гс). Предварительно поверхность подвергалась легкой бомбардировке кислородом, которая приводила к образованию парамагнитных центров на поверхности. Обнаруженная в [13] особенность в спектре шума туннельного тока на частоте ларморовской прецессии ($\Omega \approx 480$ МГц) превышала по интенсивности фоновый шум на 16 дБ. Отвод иглы сканирующего туннельного микроскопа вдоль поверхности на несколько ($\sim 3-5$) Å от парамагнитного центра приводил к исчезновению сигнала [13]. Авторами данная особенность была интерпретирована как результат ларморовской прецессии спина отдельного электрона, локализованного на парамагнитном центре. Теория возможных механизмов, ответственных за данную особенность, была представлена в [14]. Несколько позднее экспериментально исследовалась непосредственно временная зависимость (а не спектр шума) туннельного тока при туннелировании с металлической подложки в иглу сканирующего микроскопа через сложную органическую молекулу [15]. Конфигурация магнитных полей в этом эксперименте отвечала стандартной конфигурации для исследований электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) — постоянное и слабое перпендикулярное к нему вращающееся магнитные поля. Были обнаружены временные осцилляции туннельного тока на частоте, отвечающей частоте ЭПР для электрона на свободном радикале в молекуле. Отвод иглы микроскопа вдоль поверхности на несколько ангстрем от места локализации радикала приводил к исчезновению сигнала. Теория ЭПР в сканирующем туннельном микроскопе была построена в работе [16]. Предсказывалось также появление спин-зависящей компоненты в токе при туннелировании с поверхности GaAs, облучаемой циркулярно поляризованным светом [17]. Экспериментально появление такой компоненты в токе было обнаружено в работе [18].

Таким образом, поскольку сканирующий туннельный микроскоп является локальным пробником, то в принципе он способен детектировать флуктуации отдельных спинов в магнитной частичке.

В этой работе мы хотим продемонстрировать, что при туннелировании через малую магнитную частичку, находящуюся на поверхности, в иглу микроскопа в частотном спектре флуктуаций туннельного тока должна наблюдаться особенность на частоте, отвечающей низкочастотной моде, связанной с макроскопическим квантовым туннелированием.

Экспериментальное наблюдение макроскопического магнитного квантового туннелирования посредством сканирующего туннельного микроскопа может оказаться более простым, чем наблюдение упомянутых выше эффектов, поскольку характерные частоты макроскопического квантового туннелирования могут быть существенно ниже, чем частоты, при которых наблюдается ЭПР. Кроме того, амплитуда сигнала, поскольку вклад от каждого спина входит аддитивно, должна быть заметно больше, чем сигнал от отдельного электронного спина. Существенно также, что в отличие от экспериментов [13, 15] наблюдение макроскопического квантового туннелирования сканирующим туннельным микроскопом не требует внешнего магнитного поля.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Будем рассматривать систему, состоящую из металлической подложки (M) с находящейся на ней магнитной частичкой (MP) под иглой (T) сканирующего туннельного микроскопа (рис. 1). В качестве модели для описания магнитной частички будем рассматривать систему из квантового спина S , который может испытывать макроскопическое квантовое туннелирование. Гамильтониан, описывающий магнитную частичку, конкретизировать не будем. Для нас будет достаточно только знания частотного поведения коррелятора спин-спин для магнитной частички, который содержит информацию о квантовом туннелировании в изолированной частичке. Считается, что межэлектронное взаимодействие «зажимает» величину полного спина в частичке, вектор намагниченности имеет как минимум два эквивалентных по энергии состояния (без учета возможного туннелирования между ними), положения которых находятся как классические минимумы энергии. Квантовое туннелирование описывается как подбарьерный (туннельный) переход вектора намагниченности S между двумя ориентациями, отвечающими разным минимумам энергии.

При туннелировании через магнитную частичку будем считать, что в ней имеется уровень для избыточного электрона. Такое предположение является достаточно естественным. Далее, чтобы упростить выкладки, будем считать, что частичка является точечной (один узел со спином). В реальной ситуации в частичке спины локализованы на отдельных узлах, каждый из которых связан туннельным матричным элементом с атомами в игле и подложке. Такое обобщение представляет собой техническое усложнение и не влияет на качественный результат. Такое обобщение обсудим позднее. Электронные состояния в игле и подложке будем описывать как одночастичные.

Гамильтониан системы запишем в виде

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_a + \hat{H}_b + \hat{H}_{spin-STM} + \hat{T}_a + \hat{T}_b + \hat{H}_{spin}(\hat{S}) = \\ &= \sum_{k,\sigma} (\epsilon_{ka} - \mu_t) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sum_{k,\sigma} (\epsilon_{kb} - \mu_c) b_{k\sigma}^+ b_{k\sigma} + \\ &+ \sum_{\sigma,\sigma'} J c_{\sigma}^+ c_{\sigma'} S_{\sigma\sigma'} + \sum_{\sigma} \epsilon_0 c_{\sigma}^+ c_{\sigma} + \sum_k (T_{ka} c_{\sigma}^+ a_{k\sigma} + T_{kb} c_{\sigma}^+ b_{k\sigma} + \text{H.c.}) + \hat{H}_{spin}(\hat{S}). \quad (1) \end{aligned}$$

Первые два члена в (1) описывают спектр электронов в подложке и игле. Следующее слагаемое отвечает взаимодействию спинов туннелирующего электрона и спина в частичке, и четвертое — состоянию туннелирующего электрона на уровне для избыточного электрона в частичке, пятое — туннельной связи между подложкой и частичкой, частичкой и иглой. Последнее слагаемое соответствует гамильтониану изолированной

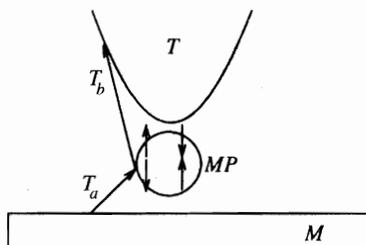


Рис. 1. Схема эксперимента

магнитной частички. Оператор туннельного тока от подложки к игле через частичку описывается обычным образом [19] и в гейзенберговском представлении имеет вид

$$\hat{I}(t) = \hat{I}_a(t) + \hat{I}_b(t),$$

$$\hat{I}(t) = \frac{ie}{2} \left\{ \sum_{k\sigma} [T_{ka}c_{\sigma}^+(t)a_{k\sigma}(t) - T_{ka}^*a_{k\sigma}^+c_{\sigma}(t)] + [T_{kb}b_{k\sigma}^+(t)c_{\sigma}(t) - T_{kb}^*c_{\sigma}^+b_{k\sigma}(t)] \right\}. \quad (2)$$

Нашей конечной целью будет вычисление коррелятора ток-ток, именно эта величина измеряется экспериментально при детектировании прецессии спина отдельного электрона [13] (в [13] эту величину называют radio frequency power spectra). Коррелятор ток-ток записывается обычным образом:

$$K(t - t') = \langle [\hat{I}(t)\hat{I}(t') + \hat{I}(t')\hat{I}(t)] \rangle_K = \langle [\hat{I}(t)\hat{I}(t') + \hat{I}(t')\hat{I}(t)]\hat{S} \rangle, \quad (3)$$

где индекс K означает, что усреднение проводится по келдышевскому контуру, и \hat{S} -матрица имеет вид

$$\hat{S}(-\infty, \infty) = \hat{T}_K \exp \left\{ i \int_{-\infty}^{\infty} [\hat{T}_a(\tau) + \hat{T}_b(\tau) + \hat{H}_{spin-STM}(\tau)] d\tau \right\}, \quad (4)$$

где \hat{T}_K — оператор хронологического упорядочения по келдышевскому контуру. Для выделения интересующих нас слагаемых в корреляторе ток-ток (3) выпишем его более детально, находим с учетом (2)

$$K(t - t') =$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{e}{2}\right)^2 \langle \{ \hat{T}_a \hat{T}_b \hat{c}^+(t) \hat{a}(t) \hat{b}^+(t') \hat{c}(t') - \hat{T}_a \hat{T}_b^+ \hat{c}^+(t) \hat{a}(t) \hat{c}^+(t') \hat{b}(t') \} \hat{S}(-\infty, \infty) \rangle - \\ & - \left(\frac{e}{2}\right)^2 \langle \{ \hat{T}_a^+ \hat{T}_b \hat{a}^+(t) \hat{c}(t) \hat{b}^+(t') \hat{c}(t') - \hat{T}_a^+ \hat{T}_b^+ \hat{a}^+(t) \hat{c}(t) \hat{c}^+(t') \hat{b}(t') \} \hat{S}(-\infty, \infty) \rangle, \quad (5) \end{aligned}$$

где для краткости введены обозначения $\hat{T}_{a,b} = \{T_{ka,b}\}$, $\hat{c} = \{c_{\sigma}\}$, $\hat{a} = \{a_{k\sigma}\}$, $\hat{b} = \{b_{k\sigma}\}$, $\hat{S} = \{S_{\sigma\sigma'}\}$ и где необходимо проводится соответствующее суммирование по спину и индексу k .

Разлагая \hat{S} -матрицу в ряд по $\hat{T}_{a,b}$ и $\hat{H}_{spin-STM}$ и группируя надлежащим образом слагаемые, можно выделить особые члены. Например, последнее слагаемое в формуле (5) дает

$$\begin{aligned} & \hat{T}_a \hat{T}_b^+ \hat{T}_a^+ \hat{T}_b J^2 \iiint d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 d\tau_4 \times \\ & \times \left\langle \left[\hat{a}^+(t) \hat{c}(t) \hat{c}^+(t') \hat{b}(t') \hat{c}^+(\tau_1) \hat{a}(\tau_1) \hat{b}^+(\tau_2) \hat{c}(\tau_2) \hat{c}^+(\tau_3) \hat{c}(\tau_3) \hat{c}^+(\tau_4) \hat{c}(\tau_4) \hat{S}(\tau_3) \hat{S}(\tau_4) \right] \right\rangle. \quad (6) \end{aligned}$$

Данному слагаемому и ему подобным отвечает диаграмма, представленная на рис. 2. Сплошные линии отвечают электронным пропагаторам, черные кружки соответствуют туннельным матричным элементам T_a , T_b , крест — обменному взаимодействию J , волнистая линия — пропагатору спина в магнитной частичке.

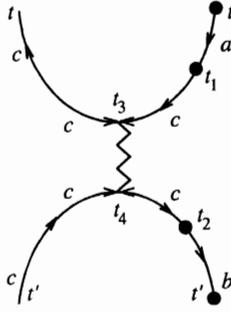


Рис. 2.

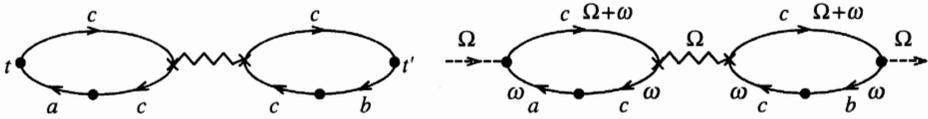


Рис. 3.

Коррелятор ток–ток получается замыканием концов двухчастичной функции Грина (рис. 2) для времен t и t' . Всего возникает 8 однотипных диаграмм, содержащих особенность на частоте макроскопического квантового туннелирования. Данные диаграммы для коррелятора ток–ток после фурье-преобразования по разности времен $t - t'$ представлены на рис. 3. Штриховой линией условно показана внешняя частота Ω . Структура диаграмм и коррелятора может быть представлена в виде

$$K(\Omega) \propto \Pi_a(\Omega) \langle \hat{S} \hat{S} \rangle_{\Omega} \Pi_b(\Omega), \tag{7}$$

где $\Pi_{a,b}$ — поляризационные операторы, отвечающие электронным петлям на рис. 3. Особый по частоте вклад возникает из коррелятора спин–спин в магнитной частичке на частоте, отвечающей макроскопическому квантовому магнитному туннелированию. Коррелятор $\langle \hat{S} \hat{S} \rangle_{\Omega}$ из-за наличия низкочастотной моды макроскопического квантового туннелирования (MQT) ведет себя как $\delta(\Omega - \Omega_{MQT})$ [4, 8, 9]. Прежде чем перейти к детальному вычислению обсудим качественно причину появления особенности. Диаграмма на рис. 2 описывает флуктуации туннельного тока. Верхняя половина диаграммы описывает процессы туннелирования с подложки на магнитную частичку с последующим взаимодействием туннелирующего электрона со спином частички и возвратом после этого в подложку. Такой перескок электрона возбуждает моду макроскопического квантового туннелирования. Второй электрон из иглы перескакивает на частичку и взаимодействует с уже возбужденной модой макроскопического квантового туннелирования и затем возвращается в иглу. Такие процессы описывают когерентное туннелирование электронов из подложки и иглы на магнитную частичку и их взаимодействие с модой макроскопического квантового туннелирования. Если между иглой и подложкой приложено напряжение, то такие процессы происходят на фоне среднего постоянно-го туннельного тока. В отсутствие напряжения средний туннельный ток равен нулю, и процессы представляют собой равновесные флуктуации тока.

Фурье-образ коррелятора ток–ток может быть представлен в следующем виде:

$$\langle II \rangle_{\Omega} = K^{+-}(\Omega) + K^{-+}(\Omega),$$

$$K^{\pm\mp}(\Omega) = \left(\frac{e}{2}\right)^2 \{(\Pi_{1a}(\Omega) - \Pi_{2a}(\Omega)) \Gamma(\Omega) (\Pi_b(\Omega) - \Pi_{2b}(\Omega))\}^{\pm,\mp} + \left(\frac{e}{2}\right)^2 \{(\Pi_{1b}(\Omega) - \Pi_{2b}(\Omega)) \Gamma(\Omega) (\Pi_a(\Omega) - \Pi_{2a}(\Omega))\}^{\pm,\mp}, \quad (8)$$

где индексы $-+$ и $+ -$ означают соответствующие келдышевские компоненты. Поляризационные операторы определены следующим образом:

$$\begin{aligned} \Pi_{1a}(\Omega) &= \int \hat{G}_{cc}(\Omega + \omega) \hat{T}_a \hat{G}_{ac}(\omega) \frac{d\omega}{2\pi}, \\ \Pi_{1b}(\Omega) &= \int \hat{G}_{cc}(\Omega + \omega) \hat{T}_b \hat{G}_{bc}(\omega) \frac{d\omega}{2\pi}, \\ \Pi_{2a}(\Omega) &= \int \hat{G}_{cc}(\omega) \hat{T}_a \hat{G}_{ac}(\Omega + \omega) \frac{d\omega}{2\pi}, \\ \Pi_{2b}(\Omega) &= \int \hat{G}_{cc}(\omega) \hat{T}_b \hat{G}_{bc}(\Omega + \omega) \frac{d\omega}{2\pi}, \\ \Gamma(\Omega) &= J^2 \langle \hat{S} \hat{S} \rangle_{\Omega}. \end{aligned} \quad (9)$$

Для краткости в (8) и (9) использованы обозначения аналогичные (5), которые подразумевают суммирование по спинам. К определению самих функций Грина вернемся позднее. Структура тройных произведений в (8) должна быть выражена через опережающие, запаздывающие и келдышевские функции Грина. Для этого удобно воспользоваться следующим свойством (см., например, [19]):

$$\begin{aligned} \{ABC\}^{+-} + \{CBA\}^{+-} + \{ABC\}^{-+} + \{CBA\}^{-+} = \\ = (A^{+-} + A^{-+})(B^R C^R + C^A B^A) + (C^A A^R + A^A C^R)(B^{+-} + B^{-+}) + \\ + (A^A B^A + B^R C^R)(C^{+-} + C^{-+}), \end{aligned} \quad (10)$$

где A, B, C — одна из функций $(\Pi_{1a,2a}, \Pi_{1b,2b}, \Gamma)$. Введены также обозначения $A = \Pi_{1a} - \Pi_{2a}$, $B = \Gamma$, $C = \Pi_{1b} - \Pi_{2b}$. Информация о спектре флуктуаций макроскопического квантового туннелирования содержится в третьем слагаемом в (10), оно имеет особенность на частоте Ω_{MQT} , поскольку именно келдышевские компоненты $\Gamma^{+-}(\Omega)$ и $\Gamma^{-+}(\Omega)$ входят в обобщенную восприимчивость, фигурирующую в флуктуационно-диссипативной теореме:

$$\langle S_z S_z \rangle_{\Omega} = \Gamma^{+-}(\Omega) + \Gamma^{-+}(\Omega) = J^2 \text{const} \text{cth} \left(\frac{\Omega}{2T} \right) \delta(\Omega - \Omega_{MQT}). \quad (11)$$

Вычисление коррелятора $\langle S_z S_z \rangle_{\Omega}$ представляет собой отдельную задачу (см., например, [4, 8, 9]). Особенность в спектре флуктуаций является проявлением существования низкочастотной особенности, связанной с коллективной модой макроскопического квантового туннелирования.

Остается вычислить запаздывающие и опережающие компоненты электронных поляризационных операторов, которые могут быть преобразованы к виду, например, для Π_{1a} :

$$\begin{aligned} \Pi_{1a}^A(\Omega) &= \Pi_{1a}^{--}(\Omega) - \Pi_{1a}^{+-}(\Omega) = \hat{T}_a \int \hat{G}_{cc}^R(\Omega + \omega) \hat{T}_a \hat{G}_{ac}^A \frac{d\omega}{2\pi} + \\ &+ \hat{T}_a \int \hat{G}_{cc}^R(\Omega + \omega) \hat{T}_a \hat{G}_{ac}^{+-} \frac{d\omega}{2\pi} + \hat{T}_a \int \hat{G}_{cc}^{+-}(\Omega + \omega) \hat{T}_a \hat{G}_{ac}^A \frac{d\omega}{2\pi}. \end{aligned} \quad (12)$$

Поляризационный оператор $\Pi_{1a}(\Omega) - \Pi_{2a}(\Omega)$ может быть приведен в виду

$$\begin{aligned} \Pi_{1a}(\Omega) - \Pi_{2a}(\Omega) &= \int \left[\hat{G}_{cc}^R(\Omega + \omega) \hat{T}_a \hat{G}_{ac}^A - \hat{G}_{cc}^A(\Omega + \omega) \hat{T}_a \hat{G}_{ac}^R \right] = \\ &= \sum_k \int |T_{ak}|^2 G_{ak}^R(\omega) G_{cc}^R(\omega) \left[G_{cc}^A(\Omega + \omega) - G_{cc}^A(\omega - \Omega) \right] \frac{d\omega}{2\pi} = \\ &= N_a \langle |T_{ak_F}|^2 \rangle \frac{2\Omega}{\Omega^2 + (2\gamma)^2}, \end{aligned} \quad (13)$$

где для функций Грина были использованы выражения

$$G_{ak}^{R,A} = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{ak} \pm i0}, \quad G_{cc}^{R,A} = \frac{1}{\omega - \varepsilon_c \pm i\gamma}. \quad (14)$$

Кроме того, предполагалось, что плотность состояний в подложке N_a постоянна в окрестности уровня Ферми (постоянство требуется лишь на масштабе $\Omega_{MQT} \ll \varepsilon_F$), и $\langle |T_{ak_F}|^2 \rangle$ — усредненный по углам туннельный матричный элемент, взятый при энергии Ферми. Функция Грина для электрона на уровне в частичке может быть получена стандартным образом, как это делается в задаче о туннелировании между двумя массивными берегами, связанными между собой слабой связью через уровень в квантовой яме (см., например, [20]). Аналогично [20] для ширины уровня γ в (14) находим

$$\gamma = \gamma_a + \gamma_b = \sum_k \left[|T_{ak}|^2 \delta(\varepsilon_c - \varepsilon_{ak}) + |T_{bk}|^2 \delta(\varepsilon_c - \varepsilon_{bk}) \right]. \quad (15)$$

Если плотность состояний в берегах слабо меняется на интересующем нас интервале энергий, то γ не зависит от частоты.

Далее, последнее слагаемое в (12) можно привести к виду

$$\begin{aligned} \hat{T}_a \int \left[\hat{G}_{cc}^R(\Omega + \omega) \hat{T}_a^+ \hat{G}_{ac}^{+-}(\omega) - \hat{G}_{cc}^R(\omega) \hat{T}_a \hat{G}_{ac}^{+-}(\Omega + \omega) \right] \frac{d\omega}{2\pi} = \\ = \hat{T}_a \int \hat{G}_a^R(\omega) \hat{T}_a^+ \hat{G}_{cc}^R(\omega) \left[\hat{G}_{cc}^{+-}(\Omega + \omega) - \hat{G}_{cc}^{+-}(\omega - \Omega) \right] \frac{d\omega}{2\pi} = \\ = N_a \langle |T_{ak_F}|^2 \rangle \left[F(\varepsilon_c + \Omega) \rho_c(\varepsilon_c + \Omega) \right] - \left[F(\varepsilon_c - \Omega) \rho_c(\varepsilon_c - \Omega) \right], \end{aligned} \quad (16)$$

где келдышевская функция для резонансного уровня находится аналогично [16]:

$$\begin{aligned} G_{cc}^{+-}(\omega) &= 2\pi [1 - F(\omega)] \rho_c(\omega), \\ F(\omega) &= [\gamma_a f(\omega) + \gamma_b f_b(\omega)] / \gamma, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\rho_c(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \{ G_{cc}^R(\omega) \}.$$

Здесь $f_{a,b}(\omega)$ — фермиевские функции распределения в берегах (подложке и игле) с химическими потенциалами соответственно $\mu_{a,b}$. Если имеется приложенное напряжение, то считаем, что оно включено в химические потенциалы $\mu_a - \mu_b = eV$.

Второе слагаемое в формуле (12) может быть преобразовано к виду

$$\begin{aligned} \hat{T}_a \int & \left[\hat{G}_{cc}^R(\Omega + \omega) \hat{T}_a^+ \hat{G}_{ac}^{+-}(\omega) - \hat{G}_{cc}^R(\omega) \hat{T}_a^+ \hat{G}_{ac}^{+-}(\Omega - \omega) \right] \frac{d\omega}{2\pi} = \\ & = \hat{T}_a \int \left[\hat{G}_a^{+-}(\omega) \hat{G}_{cc}^R(\omega) + \hat{G}_a^A(\omega) \hat{G}_{cc}^{+-}(\omega) \right] \hat{T}_a^+ \left[\hat{G}_{cc}^A(\omega + \Omega) - \hat{G}_{cc}^{+-}(\omega - \Omega) \right] \frac{d\omega}{2\pi} = \\ & = N_a \langle |T_{ak}|^2 \rangle 2f_a(\epsilon_c) \frac{\Omega}{\Omega^2 + (2\gamma)^2}. \end{aligned} \tag{18}$$

Аналогично вычисляются функции $G^{R,A}$, содержащие поляризационные операторы $\Pi_{1b,2b}$. Если уровень лишнего электрона ϵ_c в частичке находится выше химических потенциалов в берегах при $V = 0$ (что, как правило, должно иметь место из-за кулоновского отталкивания), то слагаемые с $f_{a,b}(\epsilon_c)$ могут быть опущены. Окончательное выражение упрощается и становится следующим:

$$\langle II \rangle_\Omega = \text{const} J^2 N_a N_b |T_a|^2 |T_b|^2 \left(\frac{\Omega}{\Omega^2 + (2\gamma)^2} \right)^2 \text{cth} \left(\frac{\Omega}{2T} \right) \delta(\Omega - \Omega_{MQT}). \tag{19}$$

Несущественные константы включены в множитель const. Вспоминая, что $\gamma \propto \propto |T_a|^2 N_a + |T_b|^2 N_b$ и частота $\Omega_{MQT} \ll \gamma$ (так как $\gamma \approx 1$ мэВ, а $\Omega_{MQT} \approx 1$ кГц [4]), (19) можно преобразовать к виду

$$\langle II \rangle_\Omega \propto J^2 \left(\frac{\gamma\Omega}{\Omega^2 + (2\gamma)^2} \right)^2 \text{cth} \left(\frac{\Omega}{2T} \right) \delta(\Omega - \Omega_{MQT}). \tag{20}$$

Появление особенности на частоте Ω_{MQT} не удивительно, поскольку наличие собственной моды в системе должно проявляться в спектре флуктуаций величин, относящихся к сложной системе подложка + частичка + игла. В некотором смысле оно аналогично появлению резкой особенности (при слабом затухании) на собственной резонансной частоте обычного электрического колебательного контура.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

До сих пор рассматривалась упрощенная модель магнитной частички с одним спином на узле (см., например, [8]). Покажем теперь, что это обстоятельство не является принципиальным. Для иллюстрации удобно воспользоваться моделью Гейзенберга с анизотропным взаимодействием. Как было показано в [21], если имеется сильная анизотропия ($J_\perp \ll J_\parallel$, где J_\perp, J_\parallel — обменные константы, описывающие обмен $J_\perp(S_{ix}S_{jx} + S_{iy}S_{jy})$ и $J_\parallel S_{iz}S_{jz}$, то в этом случае волновая функция основного состояния

$$|\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\dots\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\dots\rangle).$$

Следующему возбужденному состоянию отвечает функция

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\dots\rangle - |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\dots\rangle).$$

Причем величина расщепления между основным и первым возбужденным состоянием экспоненциально мала по числу частиц (N) и отношению констант J_{\perp}/J_{\parallel} и равна

$$\Delta \approx \omega^+ - \omega^- \propto J_{\perp} \exp(-N \ln(J_{\parallel}/J_{\perp})).$$

При туннелировании электрона из подложки в иглу через частичку имеет место взаимодействие с одним из спинов в частичке \hat{S}_i . Особые слагаемые возникают из разложения \hat{S} -матрицы в (6) в ряд из членов вида

$$\begin{aligned} & \sum_i \langle T_{ia} T_{ia}^* T_{ib} T_{ib}^* \dots \hat{c}_{iz}^+(\tau_3) \hat{c}_{iz}(\tau_3) \hat{S}_{iz}(\tau_3) \hat{S}_{iz}(\tau_4) \hat{c}_{iz}^+(\tau_4) \hat{c}_{iz}(\tau_4) \rangle \propto \\ & \propto \sum_k \langle \Psi^n | \hat{S}_{iz}(\tau_3) \hat{S}_{iz}(\tau_4) | \Psi^n \rangle, \end{aligned} \quad (21)$$

где $T_{ia,ib}$ — туннельные матричные элементы, описывающие перескок электрона из подложки и иглы на i -узел в магнитной частичке, и $|\Psi^n\rangle$ — собственные функции n -го точного состояния частички. Учитывая то обстоятельство, что [21]

$$\hat{S}_{iz} |\Psi^+\rangle = \pm S |\Psi^-\rangle, \quad \hat{S}_{iz} |\Psi^-\rangle = \pm S |\Psi^+\rangle, \quad (22)$$

знак \pm в (22) определяется просто порядком нумерации спинов в состоянии $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots\rangle$. Подставляя в (21) выражения для спиновых операторов в гейзенберговском представлении

$$\hat{S}_{iz}(\tau_{3,4}) = \exp(-i\hat{H}_{spin}\tau_{3,4}) \hat{S}_{iz} \exp(i\hat{H}_{spin}\tau_{3,4}) \quad (23)$$

и вспоминая, что $|\Psi^{\pm}\rangle$ — собственные состояния гамильтониана частички \hat{H}_{spin} , имеем

$$\langle \Psi^+ | \hat{S}_{iz}(\tau_3) \hat{S}_{iz}(\tau_4) | \Psi^+ \rangle = \exp(i\Delta(\tau_3 - \tau_4)) |\langle \Psi^- | \hat{S}_{iz} | \Psi^+ \rangle|^2. \quad (24)$$

Дальнейший переход к фурье-представлению в разложении (21) с учетом (24), дает особенность в слагаемом (21) на частоте макроскопического магнитного квантового туннелирования в частичке ($\Omega_{MQT} = \Delta$). Причем вклад от каждого i -узла со спином S_i войдет со своим весом, зависящим от квадратов туннельных матричных элементов, связывающих данный узел в частичке с состояниями в подложке и игле сканирующего туннельного микроскопа.

Вклад в спектр флуктуаций туннельного тока за счет макроскопического квантового туннелирования возникает даже в отсутствие спин-орбитального взаимодействия в игле. Упомянутые ранее флуктуации туннельного тока, а также амплитуда ЭПР сигнала в сканирующем туннельном микроскопе пропорциональны квадрату величины спин-орбитального взаимодействия в игле сканирующего туннельного микроскопа [14, 16]. Связано это с тем, что состояния спина $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ на парамагнитном центре в постоянном магнитном поле являются собственными. Разность энергий этих состояний равна зеемановской энергии (ларморовской частоте). При туннелировании электронов через парамагнитный центр требуется переворот спина электрона, чтобы ларморовская частота проявилась в спектре флуктуаций туннельного тока. Из-за диагональности оператора туннельного тока по спину «зацепление» спиновых степеней свободы электрона может происходить лишь в меру спин-орбитального взаимодействия. В случае макроскопического квантового туннелирования в магнитной частичке состояния

$$|\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\dots\rangle) \quad \text{и} \quad |\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\dots\rangle),$$

отличающиеся на величину энергии макроскопического квантового туннелирования, уже содержат компоненты с разными проекциями спина на данном узле (спин на узле не имеет определенной проекции). Поэтому туннелирующий электрон с данной проекцией спина «находит» подходящую проекцию спина на узле. Последнее означает, что не требуются переворот спина электрона и наличие спин-орбитального взаимодействия для «зацепления» спиновых степеней свободы за туннельный ток.

Таким образом, сканирующий туннельный микроскоп может оказаться эффективным средством наблюдения макроскопического квантового туннелирования, более того, как было показано ранее, чувствительность этого микроскопа достаточна даже для того, чтобы детектировать флуктуации туннельного тока, связанные с прецессией отдельного электронного спина на поверхности [13].

В заключение выражаю благодарность С. В. Иорданскому и С. С. Назину за плодотворные обсуждения в процессе выполнения работы. Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 94-02-04843), а также программой «Поверхностные атомные структуры» (проект № 95-1.1).

Литература

1. C. P. Bean and J. D. Livingston, *J. Appl. Phys.* **30**, 120 (1959).
2. E. Schrödinger, *Naturwissenschaften* **23**, 884 (1935).
3. E. М. Чудновский, *ЖЭТФ* **50**, 1035 (1979).
4. D. D. Awschalom, D. P. DiVincenzo, and J. F. Smyth, *Science* **258**, 414 (1992); D. D. Awschalom and D. P. DiVincenzo, *Phys. Today*, 43 (1995).
5. B. Barbara and E. М. Chudnovsky, *Phys. Lett. A* **145**, 205 (1990).
6. E. М. Chudnovsky and L. Gunther, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 661 (1990).
7. P. C. E. Stamp, E. М. Chudnovsky, and B. Barbara, *Int. J. Mod. Phys. B* **6**, 1355 (1992).
8. D. Loss, D. DiVincenzo, and G. Grinstein, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3232 (1992).
9. D. D. Awschalom; J. F. Smyth, G. Grinstein, D. P. DiVincenzo, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3092 (1992); D. D. Awschalom, M. A. McGord, and G. Grinstein, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 783 (1990).
10. B. Barbara, L. C. Campaio, J. E. Wegrone, B. A. Ratnam, A. Marchand, C. Paulsen, M. A. Novak, J. L. Tolence, M. Uehara, and D. Fruchart, *J. Appl. Phys.* **73**, 6703 (1993).
11. J. Tejada, X. X. Zhang, and L. I. Ballcells, *J. Appl. Phys.* **73**, 6709 (1993).
12. I. V. Shets, R. Wiesendanger, D. Brügler, G. Tarach, H.-J. Güntherodt, and J. M. D. Coey, *J. Appl. Phys.* **71**, 5496 (1992); R. Wiesendanger, H.-J. Güntherodt, G. Güntherodt, and R. Ruf, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 247 (1990).
13. Y. Manassen, R. J. Hamers, J. E. Demuth, and A. J. Castellano, Jr., *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2513 (1989).
14. S. N. Molotkov, *Surface Science* **264**, 235 (1992); С. Н. Молотков, *Письма в ЖЭТФ* **59**, 178 (1994).
15. A. W. McKinnon and M. E. Weland, in *Abstracts of STM '91*, Int. Conf. Scanning Tunneling Microscopy, Interlaken (1991), p. 51.
16. S. N. Molotkov, *Surface Science* **302**, 235 (1994).
17. С. Н. Молотков, *Письма в ЖЭТФ* **55**, 180 (1992).
18. M. W. Prins, R. Jansen, and H. van Kempen, *Phys. Rev. B* **53**, 8105 (1996).
19. C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James, *J. Phys. C* **4**, 916 (1971); C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James, *J. Phys. C* **5**, 21 (1972).
20. L. Y. Chen and C. S. Ting, *Phys. Rev. B* **43**, 2097 (1991).
21. С. Н. Молотков, С. С. Назин, *Письма в ЖЭТФ* **63**, 688 (1996).