

О новом механизме трения в наноэлектромеханических системах

О.А. Ильинская

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Науки, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: ilinskaya@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 14 июня 2018 г., опубликована онлайн 27 июня 2018 г.

Предложен новый механизм трения в наноэлектромеханических системах. Рассмотрена модель подвижного квантового дота, находящегося в электрическом поле и туннельно связанного с резервуаром электронов, поддерживаемом при постоянной температуре. Методом кинетических уравнений в рамках теории возмущений по параметру отношения ширины уровня к температуре показано, что в системе возникает внутреннее трение с немонотонной температурной зависимостью. Обсуждается возможность применения полученного результата для нахождения области неустойчивости в шаттловских системах.

Запропоновано новий механізм тертя в наноелектромеханічних системах. Розглянуто модель рухливої квантової точки, яка знаходиться в електричному полі й тунельно зв'язана з резервуаром електронів, що підтримується при постійній температурі. Методом кінетичних рівнянь в теорії збурень за параметром відношення ширини рівня до температури показано, що в системі виникає внутрішнє тертя з немонотонною температурною залежністю. Обговорюється можливість використання отриманого результату для знаходження області нестійкості в шаттлівських системах.

PACS: 81.07.Oj Наноэлектромеханические системы;
73.23.Nk Одноэлектронное туннелирование.

Ключевые слова: наноэлектромеханические системы, одноэлектронное туннелирование, коэффициент трения.

1. Введение

В уравнении Линдблада для квантового гармонического осциллятора (см., например, [1]) присутствует слагаемое, характеризующее взаимосвязь осциллятора с окружением, которая приводит к диссипации механической энергии. Эта «внешняя» диссипация может быть обусловлена, например, излучением и поглощением вибронов [2], и ее температурная зависимость описывается функцией распределения Бозе–Эйнштейна $n_B(T)$. Однако в уравнение для среднего значения координаты центра масс (ЦМ) осциллятора функция $n_B(T)$ не входит (см., например, [3]). Таким образом, полученный из уравнения Линдблада феноменологический коэффициент трения γ_0 не зависит от температуры.

В статье [2] изучен транспорт заряда через молекулярный транзистор в модели, в которой колебания молекулы затухают под воздействием окружающей среды. В настоящей работе рассматривается наноэлектромеха-

ническая система с одноуровневым подвижным квантовым дотом, помещенным в зазор между источником и стоком электронов. Между электродами поддерживается разность потенциалов, создающая электрическое поле, действующее на неравновесный заряд на доте. Для изучения механического трения при колебаниях квантового дота достаточно предположить, что дот туннельно связан только с одним из резервуаров (для определенности, с источником), описываемым функцией распределения Ферми–Дирака с температурой T . Нас интересует вопрос, существует ли в такой системе «внутреннее» трение — трение, связанное с диссипацией энергии только в электронной подсистеме за счет туннельной связи дота с непрерывным спектром электронов в резервуаре, имеющем отличную от нуля температуру.

В работе показано существование нового механизма внутреннего трения. Найденный нами коэффициент трения зависит от температуры немонотонным образом: он обращается в нуль в пределе низких и высоких тем-

ператур и достигает максимума в области температур $T \sim \Gamma$ (Γ — характерная энергия туннельной связи).

Статья построена следующим образом. В разд. 2 приведена модель изучаемой системы. В разд. 3 описан метод матрицы плотности в применении к данной задаче и получено выражение для зависящего от температуры коэффициента трения. В заключительном разделе обсуждаются возможные применения полученных результатов.

2. Гамильтониан модели

Гамильтониан $\hat{H} = \hat{H}_{\text{leads}} + \hat{H}_{\text{dot}} + \hat{H}_{\text{tun}}$ изучаемой системы состоит из трех слагаемых. \hat{H}_{leads} описывает не взаимодействующие электроны в электродах:

$$\hat{H}_{\text{leads}} = \sum_{j,k} \epsilon_{j,k} a_{j,k}^\dagger a_{j,k}, \quad (1)$$

где $\epsilon_{j,k}$ — энергия электрона с импульсом k в береге $j = L, R$; $a_{j,k}^\dagger$ ($a_{j,k}$) — оператор рождения (уничтожения) данного электронного состояния. Второе слагаемое, \hat{H}_{dot} , описывает квантовый дот, находящийся в электрическом поле и имеющий механическую степень свободы:

$$\hat{H}_{\text{dot}} = (\epsilon_0 - eEX)c^\dagger c + \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2 X^2}{2}. \quad (2)$$

Здесь ϵ_0 — энергия уровня электрона на доте, c^\dagger (c) — оператор рождения (уничтожения) электронного состояния, E — напряженность электрического поля, e — заряд электрона. Электрическое поле создается разностью потенциалов V между берегами, $eV = \mu - \epsilon_F$ (μ — химический потенциал левого берега, ϵ_F — энергия Ферми). Движение дота моделируется гамильтонианом гармонического осциллятора с массой m и частотой ω (X и P — координата и импульс ЦМ дота). Всюду в дальнейшем координата и импульс рассматриваются как классические переменные.

Последнее слагаемое, \hat{H}_{tun} , описывает туннелирование электронов между левым берегом и дотом:

$$\hat{H}_{\text{tun}} = \tau(X) \sum_k \left(a_{L,k}^\dagger c + \text{H.c.} \right), \quad (3)$$

где $\tau(X) = \tau_0 \exp(-X/\lambda)$ — экспоненциально зависящая от координаты туннельная амплитуда (λ — туннельная длина). Предполагаем, что между правым берегом и дотом туннелирования нет, так что средний ток в системе равен нулю. Правый электрод в нашей модели вводится для поддержания в системе электрического поля.

3. Зависящий от температуры коэффициент трения

Для нахождения коэффициента трения необходимо получить уравнение для координаты X смещения ЦМ дота. Уравнение движения для координаты — уравнение Ньютона с силой, равной

$$F = -\text{Tr} \left[\hat{\rho} \frac{\partial \hat{H}_{\text{dot}}}{\partial X} \right]. \quad (4)$$

Здесь $\hat{\rho} = \text{Tr}_{\text{leads}} \{ \hat{\sigma} \}$ — приведенная матрица плотности дота ($\hat{\sigma}$ — полная матрица плотности системы), а след в выражении для силы берется по электронным степеням свободы дота. В дальнейшем пренебрегаем (см. также [4]) вкладом когезионной силы, обусловленной зависимостью туннельной амплитуды от координаты.

Вычисление следа в формуле (4) приводит к следующему уравнению для координаты:

$$\ddot{X} + \omega^2 X = \frac{eE}{m} (1 - \rho_0). \quad (5)$$

Здесь $\rho_0 \equiv \langle 0 | \hat{\rho} | 0 \rangle = \rho_0 \{ X(t) \}$ — диагональный матричный элемент оператора $\hat{\rho}$, соответствующий незаполненному уровню на доте и являющийся функционалом координаты. Заметим, что второй диагональный матричный элемент оператора $\hat{\rho}$, действующего в фокковском пространстве размерности 2, ρ_1 , связан с ρ_0 соотношением $\rho_0 + \rho_1 = 1$. Решение уравнения (5) есть $X = x_0 + x$, где

$$x_0 = \frac{eE}{m\omega^2} (1 - \rho_0^{(0)}) \quad (6)$$

— константа, определяющая равновесное положение гранулы, а уравнение для x имеет вид [5]:

$$\ddot{x} + \omega^2 x = -\frac{eE}{m} \rho_0^{(1)}. \quad (7)$$

В формулах (6), (7) $\rho_0^{(0)}$ — не зависящая от времени нулевая поправка к ρ_0 , а $\rho_0^{(1)} = \rho_0^{(1)}(t) \propto x$ — первая поправка.

Для решения задачи необходимо найти дифференциальное уравнение для ρ_0 (в которое не входят недиагональные матричные элементы $\rho_{01} = \rho_{10}$), решить его и подставить результат в уравнение движения (7). Исходим из уравнения Лиувилля–фон Неймана для полной матрицы плотности $\hat{\sigma}$ системы ($\hbar = 1$):

$$i \frac{\partial \hat{\sigma}(t)}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{tun}}, \hat{\sigma}(t) \right], \quad (8)$$

где $\hat{H}_0 = \hat{H}_{\text{leads}} + \hat{H}_{\text{dot}}$. Оператор эволюции невозмущенного гамильтониана H_0 имеет вид

$$\hat{U}(t, t') = e^{-i\hat{H}_{\text{leads}}(t-t')} \hat{u}(t, t'), \quad (9)$$

где $\hat{u}(t, t')$ — оператор эволюции дота, $\hat{u}(t, t) = 1$. Уравнение (8) можно записать, используя оператор эволюции (9), в следующей интегро-дифференциальной форме:

$$\hat{\sigma}(t) = \hat{\sigma}(t = -\infty) - i \int_{-\infty}^t dt' \hat{U}(t, t') \left[\hat{H}_{\text{tun}}(t'), \hat{\sigma}(t') \right] \hat{U}^\dagger(t, t'). \quad (10)$$

Чтобы получить уравнение для $\hat{\rho}$ из уравнения (10), делаем предположение о факторизации матрицы плотности:

$$\hat{\sigma}(t) = \hat{\sigma}_{\text{leads}} \otimes \hat{\rho}, \quad (11)$$

где σ_{leads} — равновесная матрица плотности берегов. В теории возмущений по параметру Γ/T (Γ — шири-

на уровня, T — температура в левом берегу) предположение о факторизации матрицы плотности справедливо (см., например, [6]).

Взятие следа от уравнения (10) по электронным степеням свободы берегов с учетом условия (11) дает уравнение для приведенной матрицы плотности дота:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} + i[\hat{H}_{\text{dot}}(t), \hat{\rho}(t)] = & -\frac{1}{2}\Gamma(x_0 + x) \left\{ [c^\dagger \hat{\rho}(t) - c \hat{\rho}(t) c^\dagger + \text{H.c.}] - \right. \\ & \left. -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} ds \frac{iT e^{i\mu s}}{\text{sh}[\pi T(s-i0)]} \left[\left(c, e^{-i\hat{H}_{\text{dot}} s} \left[\rho\left(t-\frac{s}{T}\right), c^\dagger \right]_+ e^{i\hat{H}_{\text{dot}} s} \right) + \text{H.c.} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (12)$$

где $s = t - t'$; $\Gamma(x_0 + x) = 2\pi v \tau_0^2(x_0 + x)$ — зависящая от координаты ширина уровня (v — плотность состояний в берегу, которая не зависит от энергии в приближении широких зон (WBA)). При получении уравнения (12) использовано равенство

$$\sum_{k,k'} \langle a_{L,k}^\dagger(t) a_{L,k'}(t') \rangle = -\pi i v \frac{T e^{i\mu(t-t')}}{\text{sh}[\pi T(t-t'-i0)]}. \quad (13)$$

Чтобы сделать уравнение (12) локальным по времени, применяем теорию возмущений по параметру Γ/T . Используя формулу Тейлора для величины $\hat{\rho}(t-s/T)$ и условие $\Gamma/T \ll 1$, а также то, что в теории возмущений $\partial \hat{\rho} / \partial t \sim \Gamma \hat{\rho}$, получаем, что можно пренебречь всеми слагаемыми ряда по сравнению с «нулевым», $\hat{\rho}(t)$. Из уравнения (12) получаем уравнение для ρ_0 :

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} = \Gamma(x_0 + x) [1 - f(\tilde{\epsilon}_0 - eEx) - \rho_0], \quad (14)$$

где $f(\tilde{\epsilon}_0 - eEx) = \{1 + \exp[(\tilde{\epsilon}_0 - eEx - \mu)/T]\}^{-1}$ — функция распределения Ферми-Дирака, $\tilde{\epsilon}_0 = \epsilon_0 - eEx_0$.

Считая отклонения дота от положения равновесия малыми, $x \rightarrow 0$, уравнение (14) можно решить по теории возмущений, удерживая слагаемые нулевого и первого порядка малости по x . Полагая $X = x_0$ (т.е. $x = 0$), находим не зависящую от времени нулевую поправку к ρ_0 ,

$$\rho_0^{(0)} = 1 - f(\tilde{\epsilon}_0). \quad (15)$$

Линеаризуя уравнение (14) по x , получаем уравнение для первой поправки,

$$\frac{\partial \rho_0^{(1)}}{\partial t} = -\Gamma(x_0) [\rho_0^{(1)} - eE f'(\tilde{\epsilon}_0) x], \quad (16)$$

где f' — производная функции распределения по энергии.

На временах $t \gg 1/\Gamma$ общее решение уравнения (16) имеет вид

$$\rho_0^{(1)}(t) = \Gamma eE f'(\tilde{\epsilon}_0) \int_{-\infty}^t dt' e^{-\Gamma(t-t')} x(t'), \quad (17)$$

где $\Gamma = 2\pi v \tau_0^2$. Подставляя выражение (17) в уравнение (7), будем искать решение полученного уравнения в виде $x(t) = a e^{i\Omega t}$, тогда коэффициент трения $\gamma/2 = \text{Im } \Omega$. Уравнение для Ω имеет вид

$$\Omega^2 - \omega^2 = \frac{(eE)^2}{m} \Gamma f'(\tilde{\epsilon}_0) \frac{\Gamma - i\Omega}{\Gamma^2 + \Omega^2}. \quad (18)$$

Ищем Ω в виде $\Omega = \omega(1 + \alpha y)$, где $\alpha = eE/(m\lambda\omega^2)$ — безразмерный малый параметр. (Разумность условия $\alpha \ll 1$ очевидна из следующих соображений. Формулы (6) и (15) дают следующее выражение для x_0 :

$$x_0 = \frac{eE}{m\omega^2} f(\tilde{\epsilon}_0). \quad (19)$$

Считая начальное отклонение дота малым по сравнению с туннельной длиной, $x_0 \ll \lambda$, приходим к условию $\alpha \ll 1$). Отсюда $\text{Im } y > 0$, т.е. обмен электронами между «горячим» берегом и квантовым дотом приводит к затуханию колебаний ЦМ дота. Коэффициент трения равен (восстанавливаем размерность)

$$\gamma(T) = \frac{\hbar(eE)^2}{4m} \frac{\Gamma}{\Gamma^2 + (\hbar\omega)^2} \frac{1}{T} \frac{1}{\text{ch}^2[\delta\epsilon/(2T)]}, \quad (20)$$

где $\delta\epsilon = \tilde{\epsilon}_0 - \mu$.

Коэффициент трения имеет немонотонную температурную зависимость. С ростом температуры он убывает, причем $\gamma(T \rightarrow \infty) \rightarrow 0$. Формула (20) не дает возможности исследовать коэффициент трения при малых температурах. Однако из физических соображений очевидно, что $\gamma(T \rightarrow 0) \rightarrow 0$. Коэффициент трения достигает максимума при промежуточных температурах $T \sim \Gamma \sim \delta\epsilon$.

Полученный результат (20) с точностью до числового коэффициента может быть объяснен из простых физических соображений. Во-первых, коэффициент трения пропорционален Γ , поскольку в отсутствие тунnelирования затухания нет. (Точнее говоря, $\gamma \propto \Gamma/T$, что согласуется с приближением $\Gamma/T \ll 1$.) Во-вторых, сила трения равна (с точностью до знака) производной энер-

гии по координате x , которая входит в туннельную амплитуду и в функцию распределения Ферми–Дирака. Если функция распределения не зависит от x , работа силы, действующей на дот, в среднем за цикл колебаний равна нулю. Таким образом, коэффициент трения пропорционален производной функции распределения по координате. В-третьих, он пропорционален самой электрической силе eE . Наконец, знаменатель $\Gamma^2 + (\hbar\omega)^2$ связан с учетом ненулевой частоты ω колебаний дота (эффекты запаздывания).

Отметим также, что аналогичный результат для коэффициента трения был получен в статье [7] для системы, в которой горячий берег и дот связаны между собой обменными силами. Таким образом, наличие внутренней диссипации, зависящей от температуры, характерно не только для рассмотренной здесь системы.

4. Заключение

В работе показано, что колебания квантового дота, туннельно связанного с равновесным резервуаром электронов, затухают при наличии электростатических сил, действующих на дот, и туннелирования электронов как с берега на дот, так и обратно. (Возможность возвращения электрона с дота в берег связана с ненулевой температурой берега.) Найдена температурная зависимость коэффициента внутреннего трения. Это трение обусловлено диссипацией в электронной подсистеме и не имеет отношения к феноменологическому трению γ_0 , даваемому уравнением Линдблада (т.е. к трению, связанному с диссипацией энергии в окружающую среду).

Полное трение $\gamma_{\text{total}} = \gamma_0 + \gamma(T)$ можно, в принципе, измерить в эксперименте. Поскольку γ_0 не зависит от T , температурная зависимость внутреннего трения может быть экспериментально изучена.

Полученный для коэффициента трения результат можно применить при нахождении области неустойчивости термоиндуцированного магнитного шаттла [7]. В модели [7] между дотом и полностью поляризованными по спину (в противоположных направлениях) берегами действуют обменные силы. Внешнее магнитное поле обуславливает перевороты спина электронов на доте. Электроны, пришедшие из источника и изменившие направление спина, туннелируют в сток. Этот процесс сопровождается в среднем «раскачкой» дота. Электроны, не изменившие направление спина, возвращаются в источник, что приводит в среднем к затуханию колебаний дота. Сравнение инкремента нарастания колебаний (зависящего от магнитного поля) с декрементом

затухания дает температурную зависимость критического магнитного поля — значения поля, ниже которого нет шаттловской неустойчивости.

Автор благодарит И.В. Криве, С.И. Кулинича и Р.И. Шехтера за ценные обсуждения. Выражается благодарность НАН Украины за финансовую поддержку (научная программа 1.4.10.26/Ф-26–4).

1. H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press (2002).
2. S. Braig and K. Flensberg, *Phys. Rev. B* **68**, 205324 (2003).
3. H. Grabert, U. Weiss, and P. Talkner, *Z. Phys. B: Condens. Matter* **55**, 87 (1984).
4. G.A. Skorobogatko, S.I. Kulinich, I.V. Krive, R.I. Shekhter, and M. Jonson, *Fiz. Nizk. Temp.* **37**, 1295 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 1032 (2011)].
5. Для удобства начало оси координат сдвинем в точку $X = x_0$ и будем изучать малые отклонения x ЦМ дота от этой точки.
6. R.I. Shekhter, L.Y. Gorelik, I.V. Krive, M.N. Kiselev, S.I. Kulinich, A.V. Parafilo, K. Kikoin, and M. Jonson, *Fiz. Nizk. Temp.* **40**, 775 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 600 (2014)].
7. O.A. Ilinskaya, S.I. Kulinich, I.V. Krive, R.I. Shekhter, H.C. Park, and M. Jonson, *New J. Phys.* (2018).

On new friction mechanism in nanoelectromechanical systems

O.A. Ilinskaya

A new friction mechanism in nanoelectromechanical systems is proposed. The model considered comprises a movable quantum dot, placed in electric field and tunnel coupled to an electron reservoir held at fixed temperature. By using density operator method, in perturbation theory over the parameter of level width divided by temperature, it was shown that intrinsic friction with non-monotonic temperature dependence appears in the system. The feasibility of using the obtained result to find an instability domain in shuttle structures is discussed.

PACS: 81.07.Oj Nanoelectromechanical systems;
73.23.Hk Single-electron tunneling.

Keywords: nanoelectromechanical systems, single-electron tunneling, friction coefficient.