

Туннельный нанодвигатель

А. М. Дыхне*, В. В. Зосимов¹⁾

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119899 Москва, Россия

** ТРИНИТИ РАН, 142190 Троицк, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 14 августа 2001 г.

Изучается движение участвующих в резонансном туннелировании электронов наночастиц. Движение обусловлено заряжением частиц в процессе резонансного туннелирования. Показана возможность управления движением наночастиц, а также рассмотрен механизм автоколебательного движения частиц.

PACS: 87.16.Nn

Наномеханика – новое направление физики наночастиц, возникновение которого обусловлено, прежде всего, развитием техники туннельной и атомно-силовой микроскопии. Суть этого направления состоит в разработке различных механизмов (способов) манипулирования наночастицами, вплоть до отдельных молекул.

Часть современных исследований в области наномеханики сводится к конструированию модельных потенциалов, обеспечивающих направленное и управляемое движение молекул [1, 2]. В то же время, уже несколько лет назад разработана методика передвижения больших молекул [3–5] путем определенного манипулирования иглой сканирующего туннельного микроскопа (СТМ). С помощью такой техники возможно также проведение управляемых химических превращений отдельной молекулы [6]. В последнем случае реакция управляется туннельным переходом электрона в молекулу.

В настоящей работе рассматривается один из возможных механизмов управления движением наночастицы. Модель опирается на закономерности изменения заряда частицы при туннелировании электрона в системе, близкой к конфигурации резонансно-туннельного микроскопа [7]. Электрохимический вариант такой системы, в котором молекула приобретает заряд в результате его электрохимического переноса, исследован в работе [8].

Идея в том, что при резонансном туннелировании реализуются две стадии – сначала электрон туннелирует с положительного электрода на свободный уровень частицы, а затем с частицы на второй электрод. В резонансе, когда энергия электрона равна энергии свободного уровня частицы, заселенность этого уровня может достигать единицы (именно поэтому ве-

роятность резонансного туннелирования высока), то есть частица заряжена и ускоряется в электрическом поле туннельного зазора. В общей ситуации средний заряд частицы равен доле заряда электрона и зависит от соотношения между вероятностями туннелирования с первого электрода на частицу и с частицы на второй электрод. Это соотношение, в свою очередь определяется соотношением расстояний от частицы до электродов. Таким образом, движение частицы приводит к изменению ее заряда, которое ведет к изменению ускорения частицы.

Вообще говоря, единичный акт резонансного туннелирования – это процесс, имеющий длительность порядка времени жизни электрона на свободном уровне частицы, за это время заряд частицы меняется. На больших временах резонансный ток можно рассматривать как совокупность элементарных актов туннелирования, а заряд частицы равен отношению времени жизни электрона на резонансном уровне к длительности единичного процесса. Способ рассмотрения движения частицы зависит, поэтому, от соотношения длительности единичного акта ко времени пролета частицы через зазор, которое зависит от массы частицы ширины зазора приложенного напряжения. Время пролета есть

$$t = d \sqrt{\frac{2M}{UeN_A}},$$

где M – молекулярная масса частицы, U – напряжение смещения, e – заряд электрона, N_A – число Авогадро. Для характерного зазора в СТМ 1 нм при напряжении смещения 1 В и массе частицы 100 время пролета составляет $5 \cdot 10^{-11}$ с. Характерное время жизни электрона на частице есть $t_1 \approx L/vD$, где L – размер частицы, v – скорость электрона на ее свободном уровне, $D \approx \exp\left((-2d/\hbar)\sqrt{2me\varphi}\right)$ – вероятность туннелирования, φ – потенциал выхода электронов.

¹⁾ e-mail: zosimov@dubna.ru

Время жизни для характерных значений потенциала выхода 1 В составляет 10^{-13} с.

Таким образом, реализуется ситуация, когда за время пролета частицы количество элементарных актов туннелирования значительно превышает единицу. Далее будем рассматривать только такой случай. Противоположная ситуация или общий случай также весьма интересны и их рассмотрение требует решения нетривиальной квантовомеханической задачи об ионе с не полностью заселенным уровнем в электрическом поле. В нашем случае, когда рассматривается импульсное движение частицы, которая на малое время получает единичный заряд, ускоряется, теряет заряд, движется по инерции, затем снова получает заряд и т.д., нетрудно показать, что при большом количестве таких шагов движение частицы эквивалентно движению с дробным зарядом, равным отношению среднего времени присутствия заряда к среднему интервалу между его получением.

Рассмотрим систему из двух электродов, разделенных вакуумным промежутком, в который помещена наночастица, имеющая свободные электронные уровни. Туннельный ток в такой системе определяется резонансным туннелированием.

Пусть w_1 – вероятность туннельного перехода с первого электрода на частицу, w_2 – то же для второго перехода – соответствующее уширение резонансного уровня. Туннельный ток в этом случае описывается выражением

$$i = \frac{e}{\hbar} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\Gamma_1 + \Gamma_2}, \quad (1)$$

где $\Gamma_{1,2} = \hbar w_{1,2}$.

В то же время, ток можно выразить через заряд частицы e_p и время туннелирования $1/w_2$ с частицы на второй электрод следующим образом:

$$i = e_p w_2 = e_p \Gamma_2 / \hbar. \quad (2)$$

Сравнивая (1) и (2), получаем

$$e_p = e \frac{\Gamma_1}{\Gamma_1 + \Gamma_2} = e \frac{1}{1 + w_2/w_1}. \quad (3)$$

Если $w_1 \gg w_2$, то есть частица находится близко к первому (отрицательному) электроду, $e_p \approx e$ и частица отталкивается от него. Если $w_2 \gg w_1$, то $e \approx 0$ и электростатическая сила на нее не действует. В обычной конфигурации СТМ изменение знака напряжения в этот момент приведет к обратному движению частицы. Ток же, согласно (1), меняется, возрастая до максимального значения при $\Gamma_1 = \Gamma_2$, когда частица находится в середине зазора, и снижаясь до минимума в конце пути. Измерение тока с высоким временным разрешением создает принципиальную возможность управления движением частицы.

Мы рассмотрим другое проявление этого механизма – механические автоколебания частицы. Примем во внимание силу Ван-дер-Ваальса, которая может вернуть частицу обратно к отрицательному электроду. Это возможно, когда второй электрод далеко и речь идет о полевой эмиссии под действием однородного поля. Составим систему уравнений движения частицы в такой системе. На рис.1 приведена упрощенная энергетическая эмиссии диаграмма для элек-

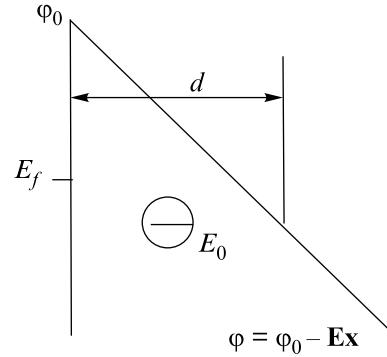


Рис.1. Энергетическая диаграмма для электрона при резонансной полевой эмиссии

трана в такой системе. Тогда вероятности даются выражениями

$$w_1 = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_0^x \sqrt{2m(e(\varphi_0 - Ex) - \epsilon_0)} dx \right],$$

$$w_2 = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_x^d \sqrt{2m(e(\varphi_0 - Ex) - \epsilon_0)} dx \right].$$

Положим $(4/3\hbar)\sqrt{2eEmd} = \kappa_0$, тогда заряд частицы получим из (2) в виде

$$e_p = \frac{e}{1 + \exp(-\kappa_0 d(-1 + 2(1 - x/d)^{3/2}))}.$$

Сила, действующая на частицу, есть

$$F = E_0 e_p - AR/6x^2,$$

где R – радиус частицы, а выражение для силы Ван-дер-Ваальса выбрано в виде, описывающем притяжение шара к плоскости. Максимальное значение заряда частицы e , типичное значение константы $A \approx \approx 10^{-19}$ Дж. Пусть $d \sim 1$ нм, $E \sim 10^9$ В/м, тогда

$$\frac{AR}{6x^2} \approx \frac{1}{2} 10^{-10}, \quad eE \approx 10^{-10},$$

то есть баланс сил Ван-дер-Ваальса и электростатической возможен.

Уравнение движения есть просто

$$m_p \ddot{x} = E_0 e_p - AR/6x^2. \quad (4)$$

Введем характерную величину электростатической силы

$$f_0^e = E_0^e e$$

и силы Ван-дер-Ваальса

$$f_0^e = AR/6d^2.$$

Нетрудно получить оценку для их отношения:

$$\alpha = \frac{f_0^e}{f_0^e} = \frac{R}{6d} \frac{A}{E_{\text{kin}}},$$

где E_{kin} – характерная кинетическая энергия электрона. Величина α имеет порядок 0.1–0.001. Далее положим $\xi = x/d$, $\tau = t/t_0$, где $t_0 = \sqrt{dm_p/f_0^e}$ – характерное время пролета частицы с зарядом e под действием поля E_0 , и построим фазовый портрет для уравнения (рис.2)

$$\frac{d^2\xi}{d\tau^2} = \frac{e_p}{e} - \alpha \frac{1}{\xi^2}, \quad (5)$$

полученного из (4) после обезразмеривания для разных α и $\kappa_0 d$. Порядок $\kappa_0 d$ есть 5–10. Видно, что частица совершает периодические колебания, амплитуда которых зависит от параметров. Период колебаний в физических единицах порядка 0.01–0.1 нс. Отметим, что колеблющаяся с такой частотой заряженная частица должна излучать электромагнитную волну в гигагерцовом диапазоне, что в принципе наблюдаемо.

Таким образом, заржение частиц, участвующих в резонансном туннелировании ведет к возможности проявления интересных как для теории, так и для приложений, эффектов. Весьма перспективным может оказаться помещение такой частицы в

поперечно-неоднородное поле, когда можно добиться поступательного управляемого движения частиц.

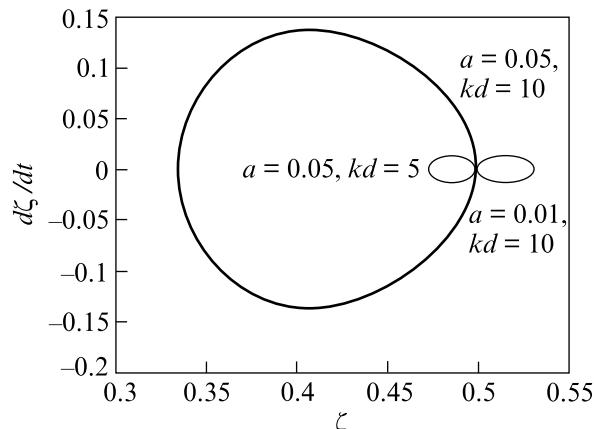


Рис.2. Фазовый портрет уравнения (5) при различных значениях параметров

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект # 99-02-16163.

1. M. Porto, M. Urbakh, and J. Klafter, Phys. Rev. Lett. **84**, 6058 (2000).
2. M. Porto, M. Urbakh, and J. Klafter, Phys. Rev. Lett. **85**, 491 (2000).
3. J. A. Stroscio and D. M. Eigler, Science **254**, 1319 (1991).
4. Y. Z. Li, M. Chander, J. C. Partin et al., Phys. Rev. **B45**, 13837 (1992).
5. P. H. Beton, A. W. Dunn, and P. Moriarty, Appl. Phys. Lett. **67**, 1075 (1995).
6. S.-W. Hla, L. Bartles, G. Meyer, and K.-H. Rieder, Phys. Rev. Lett. **85**, 2777 (2000).
7. А. М. Дыхне, С. Ю. Васильев, О. А. Петрий и др., ДАН **368**, 467 (1999).
8. F.-R. F. Fan and A. J. Bard, Science **267**, 871 (1995).