Cuantización de la conductancia en nanocontactos de cobre a temperatura ambiente

Diego Hofman (dmhof@yahoo.com.ar), FCEyN, UBA Alejandro E. García Rosselli (alegarciar@hotmail.com),FCEyN, UBA Departamento de Física, Laboratorio 5,Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires

El objetivo de este trabajo es el estudio de la cuantización de la conductancia en nanocontactos transitorios. El experimento se realizó mediante un dispositivo experimental consistente en un par de cables de cobre a temperatura ambiente en falso contacto. Estos cables eran juntados y separados rápidamente por medio de un oscilador mecánico produciendo así nanocontactos transitorios. Pudo medirse la conductancia en función del tiempo repetidas veces para estos procesos, confeccionándose un histograma. En este se observaron picos correspondientes a la cuantización de la conductancia. Se encontró una dependencia decreciente de los intervalos de cuantización con los picos que se corrigió por medio de resistencias esiduales y de la fuente. Finalmente se calculó el cuanto de conductancia $G_0 = 0.9974 \cdot 2e^2/h$.

1. Introducción

El objetivo de este trabajo es el estudio de la cuantización de la conductancia en nanocontactos de cobre a temperatura ambiente. Para poder comprender este fenómeno es necesario en primer lugar una definición de lo que se conoce como nanoestructuras. Estas son estructuras que poseen una sección transversal de desde uno a cientos de átomos. Como ejemplo podemos nombrar estructuras de tipo gate en heterojunturas de semiconductores y contactos puntuales. Esta última estructura es la que se utilizó en la presente experiencia. En un contacto puntual dos de las dimensiones son del orden de pocos átomos de espesor por lo que esta estructura puede considerarse unidimensional. Al mismo tiempo el espaciamiento entre átomos sucesivos en la tercera de las dimensiones del contacto es comparable a la longitud de onda de los electrones conductores que se encuentran en la estructura. Todas estas características definen un sistema inherentemente cuántico en su naturaleza. Se espera por lo tanto que efectos de naturaleza mecánico-cuántica puedan observados. Como se explicará en detalle más efecto adelante, el que se observa experimentalmente es la cuantización de la conductancia del sistema.

Un contacto puntual puede ser tanto permanente como transitorio (en un ambiente dinámico). En la experiencia realizada, y como se explicará en el procedimiento experimental, se utilizó un contacto transitorio. Esto se logro por medio de un falso contacto entre cables de cobre. El nanocontacto se da al juntarse y apartarse repetidamente dos cables. La principal ventaja de elegir un contacto transitorio es que éstos pueden darse a temperatura ambiente, mientras que para lograr un contacto permanente debe trabajarse a temperaturas cercanas al cero absoluto.

A continuación se muestra un desarrollo teórico del fenómeno de la cuantización de la corriente en nanocontactos, siguiendo el desarrollo realizado por E.L. Foley, D. Candela, K.M. Martini y M.T. Tuominen [ver Ref. 1]. En primer lugar es necesario expresar la corriente en función de las variables del problema:

$$I = v \cdot e \cdot n_e \tag{1}$$

donde I es la corriente, v la velocidad de los electrones conductores en el contacto y n_e la densidad de portadores de carga (electrones) por unidad de longitud. Esta es la definición estándar de corriente en un conductor.

A su vez, la conductancia es:

$$G = \frac{I}{V} = \frac{v \cdot e \cdot n_e}{V} \tag{2}$$

donde V es la diferencia de potencial entre los dos extremos del contacto. Si se quiere expresar esta misma cantidad en función de la diferencia de energía potencial (**D**E) de los electrones entre ambos extremos se obtiene,

$$\Delta E = e \cdot v \tag{3}$$

luego,

$$G = \frac{v \cdot e^2 \cdot n_e}{\Delta E} = \frac{v \cdot e^2 \cdot N}{L \cdot \Delta E}$$
 (4)

donde L es la longitud del contacto y N es la cantidad de electrones conductores en él. Por lo tanto el problema se reduce a calcular la cantidad de electrones conductores accesibles, para una diferencia de energía potencial (DE), en el contacto.

El contacto por su parte, puede considerarse como un conjunto de cables unidimensionales. La cantidad de estos cables depende del tamaño del contacto. Por lo tanto, al hacer variar esta magnitud cambia el número de "canales" disponibles. La situación es análoga a los canales accesibles en una guía de ondas. Hechas las consideraciones previas puede, por lo tanto, debe resolverse el problema mecánicocuántico de electrones confinados a un potencial en una dimensión. El potencial real que observan los electrones es periódico, consecuencia de los átomos que forman el contacto, que se comportan como eslabones de una cadena unidimensional. La situación es similar al caso de una estructura cristalina pero en una sola dimensión. Además los extremos del contacto se hallan fjos a conductores con una estructura similar. En física del estado sólido es común trabajar en una aproximación de orden cero donde se considera que los electrones se comportan libremente como si no estuvieran ligados a este potencial. Sin embargo, para no perder la periodicidad inherente del sistema, se especifican condiciones periódicas de contorno para la resolución de la ecuación de Schrödinger. De esta manera las longitudes de onda permitidas (λ) para electrones confinados en un pozo de tamaño L y condiciones de contorno periódicas $(\psi(r)=\psi(r+L))$ son:

$$I_n = \frac{L}{n} \tag{5}$$

donde n es el número cuántico asociado al estado.

Utilizando ciertas identidades de la mecánica cuántica para una partícula libre se llega a:

$$k_n = \frac{1}{I} \tag{6}$$

$$p_n = m \cdot v_n = h \cdot k \tag{7}$$

donde k es el número de onda, p el momento del electrón, m la masa del electrón, v la velocidad del electrón y h la constante de Planck. Luego,

$$v_n = \frac{n \cdot h}{L \cdot m} \tag{8}$$

De esta manera se puede calcular la cantidad de estados (N) en un intervalo de velocidades $\mathbf{D}v$,

$$N = \frac{2 \cdot L \cdot m \cdot \Delta v}{h} \tag{9}$$

donde el 2 corresponde a la degeneración de los estados por ser el electrón una partícula de spin ½. Se puede ahora transformar el intervalo de velocidades e uno de energías (E) de la siguiente manera,

$$E = \frac{1}{2}m \cdot v^2 \tag{10}$$

$$\Delta E = m \cdot v \cdot \Delta v \tag{11}$$

Finalmente reemplazando en la expresión para *N* se obtiene:

$$N = \frac{2 \cdot L \cdot \Delta E}{v \cdot h} \tag{12}$$

Si se reemplaza una vez más esta expresión en la (4) se obtiene:

$$G = \frac{2 \cdot e^2}{h} = G_0 \tag{13}$$

Queda claro así que cada "cable" unidimensional que compone el contacto aporta una conductancia de valor G_0 . Como se dijo anteriormente el contacto se modeliza como un conjunto de estos "cables". Como las

conductancias de cables en paralelos se suman, se obtiene finalmente que la conductancia total del contacto es un número entero multiplicado por G_0 . En el experimento que se describe a continuación, los cables de cobre en falso contacto aumentan y disminuyen la cantidad de "cables" que conforman el contacto al juntarse y separarse y se puede por lo tanto observar el salto discontinuo de la variable G.

2. Método experimental

De lo comentado en la introducción se desprende que es necesario el armado de una disposición experimental donde se pueda medir diferencia de potencial y corriente (ya que esto permite el cálculo de la conductancia) para un par de cables de cobre en falso contacto.

El problema principal que surge en la construcción del dispositivo es la necesidad de medir corrientes muy bajas, correspondientes a los escalones más bajos de la cuantización. Es por esto que es importante el diseño de un circuito que permita amplificar esta corriente sin introducir ruido. Al mismo tiempo, debe convertirse la señal de corriente a voltaje para que la medición pueda realizarse con un osciloscopio. Esto es de fundamental importancia ya que, como se verá, se requiere tomar mediciones en intervalos muy cortos de tiempo (del orden de los 100 µs) con altas frecuencias muestreo. Con consideraciones en mente se armó la disposición experimental que se muestra en las siguientes figuras. En la Fig. 1 se muestra la configuración externa mientras que en las Fig. 2 y 3 se muestran en detalle las secciones "fuente" y "amplificador". Cabe resaltar que todo el dispositivo se situó dentro de una jaula de Faraday para evitar ruido externo.

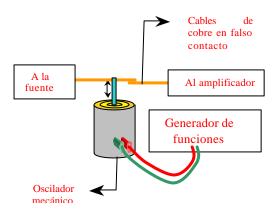


Fig. 1. Disposición experimental. El dispositivo se situó dentro de una jaula de Faraday.

Como puede verse en la Fig. 1, los cables se mantienen en falso contacto por medio de un oscilador mecánico. Éste estaba constituido por un parlante conectado a un generador de funciones que hacía vibrar uno de los dos cables, mientras el otro estaba fijo. El oscilador mecánico se alimentó con una frecuencia de entre 15 Hz y 20 Hz, que fue la que resultó empíricamente la más adecuada. La amplitud de oscilación fue ajustada durante las mediciones de manera de observar el fenómeno de la cuantización. A amplitudes muy altas la vibración se hace muy fuerte y el fenómeno no se observa, mientras que a amplitudes bajas no hay separación entre los cables. De esta manera fue necesario en cada experiencia encontrar una amplitud de compromiso.

La Fig. 2 muestra el circuito fuente al cual se encontraba conectado uno de los cables. Este circuito no es más que un divisor de tensión que posibilita controlar el potencial de salida y una conexión a un multímetro que permite medir dicho potencial.

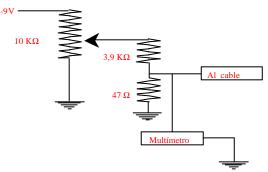


Fig 2. Fuente de tensión conectada a un cable de cobre

El otro cable se encontraba conectado a un amplificador-conversor corriente-voltaje (ver Fig.3). Este dispositivo fue conectado a un osciloscopio con el que se midió la corriente que circulaba por el contacto.

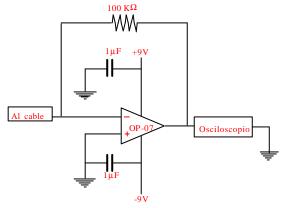


Fig. 3. Amplificador-Conversor Corriente-Voltaje

Este circuito fue construido con un operacional (OP-07) que por especificaciones, introduce poco ruido en las frecuencias a las que se trabajó [ver Ref. 1]. La resistencia en paralelo con el operacional es de 100 $K\Omega$, por lo que el dispositivo convierte corriente en voltaje a la razón 1A=> 10⁵ V. Esto es de esta manera ya que la terminal () del operacional es tierra "virtual" y por lo tanto el potencial a la salida del operacional es de V=IR. Se introdujeron, además, capacitores de 1µF en las entradas de voltaje para hacer de filtro a posibles señales de ruido.

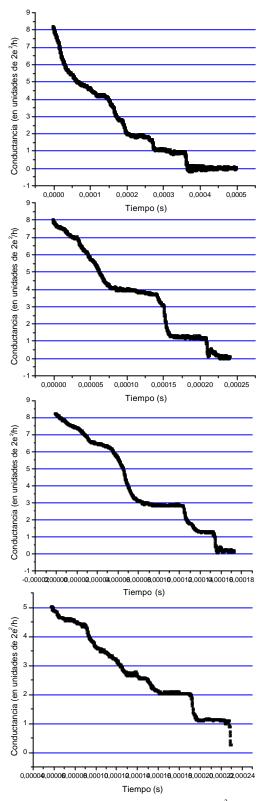
Es importante aclarar que las fuentes utilizadas fueron baterías de 9V. Se comprobó experimentalmente que el uso de fuentes de tensión de corriente continua introducían una fuerte componente ruidosa al sistema lo que hacía imposible la medición. El uso de baterías solucionó este problema. En la misma línea, debe aclararse que la longitud de los cables utilizados se restringió a lo mínimo indispensable y que fue necesario montar los circuitos sobre una plaqueta con el objetivo de disminuir el ruido. Se recuerda una vez más que todo el dispositivo se encontraba situado dentro de una jaula de Faraday.

Se utilizó en todo momento un potencial de salida de 20 mV.

Las mediciones fueron tomadas de la siguiente manera. Con el oscilador mecánico encendido se configuró el osciloscopio de manera tal que dispare para cierto nivel de voltaje. Una vez disparado, el osciloscopio tomaba un barrido de lecturas en un rango de 100µs - 500µs que era posteriormente guardado en medio magnético en forma de archivo de texto. La frecuencia de muestreo fue de 2000 puntos por barrido.

Con estos valores y, sabiendo el factor de conversión a corriente por el amplificador, puede calcularse la corriente que pasa por el contacto durante el tiempo de la barrida. Dividiendo por el potencial de salida de la fuente puede calcularse la conductancia.

A continuación, Figs. 4,5,6 y 7, se muestran barridos típicos donde los valores del eje de las ordenadas están ya expresados en unidades de conductancia.



Figs 4, 5, 6 y 7. Conductancia en unidades de 2e²/h función del tiempo

Cabe señalar que, dadas las condiciones dinámicas en las que se encontraba continuamente el sistema, las mediciones no siempre mostraban el efecto de la cuantización. Esto se debe a que no siempre el contacto se daba correctamente. Fue necesario entonces, tomar una gran cantidad de barridos, de los cuales se seleccionaban las curvas que mostraban el es calonado típico que se mostró en las figuras que preceden.

3. Resultados

Se tomó gran cantidad de barridos (en el orden de los 400) como los que se muestran en las figuras 4, 5, 6 y 7. El objetivo de estas mediciones era construir un histograma que reúna la información de todas las curvas. El procedimiento se puede explicar en los siguientes términos. Los valores en los cuales la conductancia toma los valores permitidos por la cuantización, la pendiente es cercana a 0. Por otro lado en los valores no permitidos se observan pendientes más pronunciadas. Por lo tanto de construirse una densidad para cada curva, proyectando los valores de la conductancia sobre el eje vertical, puede verse que los valores que concentran mayor cantidad de puntos son los que componen las mesetas. De esta manera, la construcción de un histograma que reúna todas las curvas permitiría observar picos en los valores cuantizados de la conductancia. Sin embargo, para que estos resultados sean observables relativamente, poca cantidad de curvas obtenidas (ver por ejemplo el trabajo de J.L. Costa-Krämer, N. García y H. Olin [ver Ref. 2] donde se trabajo con histogramas generados a partir de 900.000 curvas), la cantidad de puntos por mesetas debe ser grande. Por lo tanto se eligieron 47 de las 400 curvas donde las mesetas tenían tamaño suficiente como para diferenciarse claramente de las pendientes de caída. Con estas curvas se confeccionó el siguiente histograma (Fig. 8).

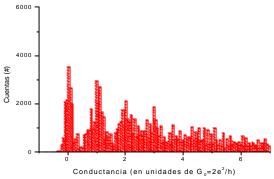


Fig. 8. Histograma de 147 curvas de conductancia.

A partir de este histograma se construyó una curva que representa al histograma "suavizado", al promediar los valores de cada punto con los de 5 vecinos. De esta manera se puede extraer una curva que puede ser ajustada por varios picos Gaussianos y de esta manera calcular la posición de los picos (Fig. 9).

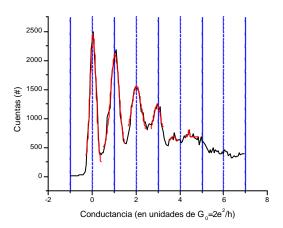


Fig. 9. Histograma "suavizado" y ajustado de la conductancia.

4. Discusión

Puede verse a simple vista que los resultados que se muestran, tanto en los barridos individuales (Figs. 4,5,6 y 7) como en los histogramas (Figs. 8 y 9) se corresponden con el desarrollo teórico de la introducción. La corriente parece mostrar una cuantización y el valor de estos pasos es cercano al teórico de $2e^2/h$.

Para realizar un cálculo numérico de estos valores puede calcularse el centroide de los ajustes gaussianos que se hicieron en la Fig. 9. Estos resultados s e muestran en la Tabla 1

No de Pico (#)	Posición (en unidades de $G_{\it 0}$)	Diferencia (Pos(i)-Pos(i-1))
0	0.059719	-
1	1.0529	0.993181
2	2.0399	0.987
3	2.9725	0.9326
4	3.7131	0.7406
5	4.4192	0.7061

Tabla 1. Posición de los picos en unidades de G₀.

En primer lugar puede observarse un offset de las mediciones dado que el pico que corresponde a 0 de conductancia no se halla precisamente en este valor. Por este motivo se decidió trabajar con las diferencias como valores efectivos de conductancia. Puede verse que los saltos se vuelven más pequeños a medida que se suben en el orden de los picos. Existen dos motivos que explican este fenómeno. En primer lugar debe considerarse que la resistencia equivalente de la fuente es de 47Ω (ver Fig. 2). Por lo tanto existe una resistencia R_{out} en serie conectada a los cables. En segundo lugar, existe una resistencia residual R_{res} que se le asigna al sistema por motivos de desorden en la estructura del nanocontacto. Este es un tema actualmente en debate y se discute en trabajos como los de P. García-Mochales y P.A. Serena [ver Ref. 3] y de D.F. Holcomb [ver Ref. 4]. De cualquier manera se comprueba experimentalmente que es posible ajustar el valor del cuanto de conductancia por medio de la consideración de una resistencia en serie. Por lo tanto, puede definirse una conductancia corregida G_c de la siguiente

$$G_c = (G^{-1} - (R_{out} + R_{res}))^{-1} = (G^{-1} - X)^{-1}$$
 (14)

donde $X = R_{res} + R_{out}$, (en unidades de I/G_0) y por G se entiende los valores de la Tabla 1 de la columna de diferencias. De esta manera es posible encontrar el X que ajuste mejor los datos.

Para realizar esto se eligió el criterio de cuadrados mínimos. Esto es, se define la función U de la siguiente manera,

$$U = \sum_{i=1}^{N} \left(G_c(i) - i \right)^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{G(i)}{1 - G(i) \cdot X} - i \right)^2$$
 (15)

El problema que debe resolverse para encontrar *X* es por lo tanto el de la minimización de U. Este problema fue resuelto numéricamente con un programa en MatLab. Se utilizo N=3 dado que como puede verse en la Fig. 9 los picos correspondientes a N=4 y N=5 no son muy confiables (esto es el ajuste gaussiano no es lo suficientemente bueno como para que el valor calculado sea significativo). Cabe aclarar que en el trabajo de E.L. Foley, D. Candela, K.M. Martini y M.T. Tuominen [ver Ref. 1] tampoco pudo distinguirse picos superiores a N=3. De esta manera se obtuvo,

$$X = 0.0091 \frac{1}{G_0} = 234.8965\Omega$$
 (16)

Por lo tanto el valor de R_{res} es,

$$R_{res} = (234.8965 - 47)\Omega = 187.8965 \Omega$$
 (17)

Este valor es del orden de los encontrados en trabajos para dispositivos experimentales similares [ver Ref. 1].

Con este valor de *X* es posible calcular el tamaño del cuanto de conductancia promediando el valor de los 3 saltos considerados. Se encuentra que este valor es,

$$G_0 = 0.9974$$
 (en unidades de $2e^2/h$) (18)

Dadas las imperfecciones del método gráfico, la pequeña cantidad de picos distinguibles, la inclusión "ad hoc" de una resistencia residual y el ajuste no lineal de la variable X es difícil calcular el valor del error en la medición de G_0 .

5. Conclusiones

Después de un análisis de los datos medidos pueden llegarse a las siguientes conclusiones. En primer lugar, de la examinación visual de las curvas de barrido (como las Figs. 4,5,6 y 7) y los histogramas (Figs. 8 y 9) sobresale claramente el fenómeno de la cuantización de la conductancia en nanocontactos de cobre. En segundo lugar, también visualmente pueden distinguirse los primeros cuatro picos de los histogramas (que corresponden a los órdenes del 0 al 3 de conductancia) y se comprueba que coinciden a primera aproximación con el valor predicho teóricamente. Un análisis gráfico más detallado permite comprobar que la separación entre picos no es constante, sino que se disminuye al aumentar el orden del pico. Esto está de acuerdo con otras experiencias similares ya realizadas que se citan en las referencias. Este fenómeno trata de explicarse por un posible desorden en la estructura del nanocontacto [ver Ref.3] y por lo tanto se justifica la inclusión de una resistencia residual en serie (además de la resistencia de la fuente). Esta resistencia pudo ser calculada por medio de un ajuste no lineal de cuadrados mínimos, obteniéndose $R_{res}=187.8965$ W. A partir de este valor es posible calcular el valor de la constante de cuantización de conductancia G_0 =0.9974 · $2e^2/h$. Este valor se aparta del valor teórico en 0.3%.

Sin embargo ro fue posible hacer un cálculo significativo del error involucrado en esta medición, por lo que esta experiencia puede considerarse en principio demostrativa. Además no fue posible observar picos por arriba del 3. Trabajos realizados por E.L. Foley, D. Candela, K.M. Martini y M.T. Tuominen [ver Ref. 1] tampoco pudieron lograr estas mediciones.

Puede agregarse que un estudio más detallado y que intente hacer evaluaciones cuantitativas confiables necesita de una gran estadística de curvas. El dispositivo experimental utilizado no permite, en principio, un trabajo de este estilo. Se propone, por lo tanto, para posteriores experiencias la mejora del dispositivo experimental de manera tal que sea posible un estudio más mecánico y riguroso.

6. Bibliografía

- [1]. E.L. Foley, D. Candela, K.M. Martini y M.T. Tuominen, "An undergraduate laboratory experiment on quantized conductance in nanocontacts", *Am. J. Phys*, **67**(5), 389, (1999)
- [2]. J.L. Costa-Krämer, N. García y H. Olin, "Conductance quantization histograms of gold nanowires at 4 K", *Physical Review B* **55**(19), 12910, (1997)
- [3]. P. García-Mochales y P.A. Serena, "Disorder as origin of residual resistence in nanowires", *Physical Review Letters* **79**(12), 2316, (1997)
- [4]. D.F. Holcomb, "Quantum electrical transport in samples of limited dimensions", *Am. J. Phys.* **67**(4), 278, (1999)