



INSTITUTO DE FÍSICA
"MANUEL SANDOVAL VALLARTA"
Universidad Autónoma de San Luis Potosí



Conductancia Eléctrica en el Régimen Balístico a través de Contactos Atómicos Metálicos

Proyecto de Tesis que para obtener el grado de

Maestro en Ciencias (Física)

PRESENTA

Fís. Joel Briones Hernández

Julio 2004



INSTITUTO DE FÍSICA
"MANUEL SANDOVAL VALLARTA"
Universidad Autónoma de San Luis Potosí



Conductancia Eléctrica en el Régimen Balístico a través de Contactos Atómicos Metálicos

Proyecto de Tesis que para obtener el grado de

Maestro en Ciencias (Física)

PRESENTA

Fís. Joel Briones Hernández

ASESOR

Dr. Armando Encinas Oropesa

Julio 2004

*A mi hermano Edgar,
quien ha sido mi más cercano
compañero en este recorrido.*

*A mi hermana Viridiana,
cuyo ímpetu, cariño y optimismo, me
han dado ánimos
para buscar ser una mejor versión de
mí mismo cada día.*

A mis padres, con mucho afecto.

Agradecimientos

*All things by immortal power,
Near or far, Hiddenly
To each other linked are,
That thou canst not stir a flower
Without troubling of a star*

- Francis Thompson

Antes que nada quiero agradecer al Dr. Armando Encinas el haberme dado la oportunidad de desarrollar este proyecto de tesis bajo su asesoría. Me considero muy afortunado de haber sido su alumno y tesista. El Dr. Encinas ha sido un verdadero ejemplo de dedicación y amor al trabajo, de constancia, de honestidad y calidad laborales. Armando, mi más grande y sincero agradecimiento. Aprecio enormemente todo el apoyo y ánimos que me has brindado desde que tuve el privilegio de conocerte.

Mi agradecimiento al Dr. Ricardo Guirado, quien oficialmente fué mi mentor durante mi primer año de estudios en el Instituto, pero con cuyo apoyo y consejos cuento desde hace ya varios años. Mil gracias Ricardo, mucho de esto ha sido posible gracias a tí.

Quiero agradecer al Dr. Yuri Nahmad por las facilidades para la realización de parte del presente trabajo en su laboratorio, a la Ing. Diana Diaz y a la Ing. Luz Del Carmen Nuche por su valiosa orientación y asesoría técnica.

Me gustaría agradecer de manera especial a mi compañero Miguel Angel Olivo, por su sincera amistad y por su apoyo a lo largo de estos dos años. Estimado Miguel, aprendí mucho de tí.

Mi agradecimiento al Dr. Pedro Alvarado, al Dr. Faustino Aguilera y al Dr. Martin Montejano, por su apoyo y orientación.

Mi reconocimiento al Dr. Pedro Villaseñor, al Dr. Jürgen Engelfried, al Dr. Magdaleno Medina, al Dr. Elias Perez, al Dr. Jesus Dorantes, al Dr. Ruben Flores y al Dr. Antonio Morelos, por su contribución a mi formación profesional y humana.

ÍNDICE

Introducción	1
Capítulo 1 Transporte eléctrico cuantizado	5
1. A Antecedentes. Breve historia y definiciones	5
1. B Teoría de la conductancia balística	10
1. C Tipos de nanocontactos	20
a) Spear-anvil y técnicas relacionadas	20
b) Empleo de microscopios de efecto túnel	20
c) Empleo de microscopio de transmisión electrónica de alta resolución	23
d) Juntura de ruptura mecánicamente controlada	26
e) Contactos nanofabricados	27
f) Relays	30
Capítulo 2 Experimental	31
2. A Fabricación de nanocontactos	31
2. A. 1 Elastómeros magnéticos y sus propiedades.....	31
2. A. 2 Elaboración del dispositivo	34
a) Fabricación de los elastómeros magnéticos	34
b) Implementación	35
2. B Sistema de medición eléctrica	39
2. B. 1 Principio del método de medición	39
2. B. 2 Sistema de medición	35
2. B. 3 Construcción del sistema	43
2. B. 4 Caracterización, optimización y especificaciones	45
Capítulo 3 Resultados y discusión	51
3. A Resumen de objetivos	51
3. B Metodología	53
3. C Optimización del experimento y observación de las escaleras de conductancia	56
3. D Conductancia en nanocontactos	61
3. E Histograma de conductancia	71
Capítulo 4 Conclusiones y Perspectivas	77
Referencias	81

Introducción

Las propiedades eléctricas y mecánicas de una pieza de cualquier metal no son diferentes si su tamaño es de milímetros o de kilómetros. Sin embargo, tan pronto como su tamaño se aproxima a la *escala atómica*, todo el conocimiento común acerca de las propiedades del material pierde validez. La familiar ley de Ohm, de la cual aprendimos que la resistencia de un conductor escala de forma proporcional a su longitud, se viene abajo. La razón es que la distancia que un electrón viaja entre dos colisiones es típicamente más grande que el tamaño del conductor. Los electrones atraviesan un conductor de dimensiones atómicas *balísticamente*, y la resistencia llega a ser independiente de la longitud del conductor. De hecho, la propia noción de resistencia cambia, al mismo tiempo que es necesario apelar a la naturaleza ondulatoria de los electrones en el conductor para lograr una descripción adecuada. Las escalas de energía involucradas son tan grandes que los efectos cuánticos son visibles a temperatura ambiente. La naturaleza química de los elementos metálicos comienza a jugar un papel esencial. No sólo las propiedades electrónicas deben ser descritas en términos de ondas de electrones, sino que también la comprensión de propiedades como la cohesión metálica en alambres de dimensiones nanométricas requiere tomar en cuenta ondas de electrones que se extienden sobre todo el conductor.

La investigación experimental de estos fenómenos requiere herramientas de manipulación y caracterización de estructuras a una escala atómica y molecular. En laboratorios alrededor del mundo existe un rápido progreso en esta área. El campo es conocido como nanofísica, o nanociencia, donde el prefijo “nano” se refiere a la escala del orden de nanómetros. Por su propia naturaleza, las fronteras entre el campo de la física de objetos muy pequeños y el campo de la química se desvanecen. De hecho, paralelamente, los químicos están esforzándose por obtener moléculas y compuestos de cúmulos metálicos más grandes que comiencen a presentar las propiedades de la materia en bulto. Desde un tercer frente, la biología se ha desarrollado al grado que es posible el escrutinio de las funciones y propiedades de los bloques moleculares de construcción de los organismos vivos.

El transporte eléctrico figura como uno de los efectos físicos más empleados por el hombre ya que es un observable que es fácil de medir. No es sorprendente entonces que una gran parte de la tecnología moderna (y futura) se base en el uso de esta propiedad para trabajar y crecer. En particular, la electrónica se basa en el uso del electrón para realizar el manejo, transferencia e interpretación de información. La combinación de materiales conductores y semiconductores, aunada con la habilidad de poder fabricar estos últimos con propiedades, formas y dimensiones muy específicas, ha dado lugar a grandes revoluciones tecnológicas durante el pasado siglo. El papel que juega, y jugará, el transporte eléctrico como medio fundamental para transferir información es central debido a que la conductancia eléctrica (resistividad) es proporcional (inversamente proporcional) a las dimensiones del material. Contrariamente a muchas de las propiedades físicas que son medibles en un material, la resistencia eléctrica aumenta entre más pequeño sea el material,

lo cual asegura que esta propiedad podrá ser usada como medio para “leer” información en materiales de dimensiones muy reducidas.

Hoy en día, se percibe un gran interés y una creciente actividad de investigación centrada en el desarrollo de la electrónica a diversas escalas y ampliada más allá de los materiales inorgánicos clásicos, cuyo centro de interés reposa en el uso de novedosos materiales, como son los nanotubos de carbono, compuestos orgánicos y moleculares, así como materiales a escalas de unos cuantos nanómetros. Dando lugar a la nanoelectrónica y a la electrónica molecular.

Un ingrediente que ha contribuido enormemente al rápido desarrollo en nanofísica es el amplio cuerpo de conocimiento obtenido en el campo de la física mesoscópica. La física mesoscópica estudia los efectos de coherencia cuántica en las propiedades de los conductores que son grandes en una escala atómica pero pequeños comparados con las dimensiones ordinarias (macroscópicas).

La atención puesta en la física mesoscópica, y más recientemente en la nanofísica, está motivada fuertemente por la miniaturización en curso en la industria de la microelectrónica. Actualmente, IBM, AMD e Intel están comenzando a producir chips en volumen con componentes de dimensiones de tan sólo 90 nm. Se espera que esta tendencia hacia una mayor miniaturización continúe por al menos una década más y que sea alcanzado el nivel de los 30 nm, lo cual corresponde a tan solo ~ 100 átomos en fila. La nanofísica lleva estos progresos hasta el límite último de tamaño: el tamaño de átomos y moléculas. Aún y cuando muchas barreras deben ser superadas, incluyendo problemas de estabilidad de larga duración a temperatura ambiente y el tiempo requerido para la fabricación y diseño de circuitos de giga-componentes, entre otras cosas, la investigación es sumamente importante para comprender cuales serán las propiedades modificadas al llevar la miniaturización a su última expresión, además de la realización de la búsqueda de nuevos principios que puedan ser explotados.

Uno de los conceptos desarrollados en la física mesoscópica, aplicable directamente en la escala atómica, y que tiene que ver con el transporte eléctrico, se remonta a Rolf Landauer: *“el flujo de corriente eléctrica, en la teoría de transporte, ha sido visto comúnmente como la respuesta a un campo aplicado. Alternativamente, el flujo de corriente puede ser visto como una consecuencia de la inyección de portadores en el extremo de un contacto y su probabilidad de alcanzar el otro extremo”* [1]. Lo anterior es aplicable a contactos y alambres metálicos de tamaño atómico, así como a moléculas. Un ejemplo muy estudiado de esto último es la conductancia a través de nanotubos de carbono [2], moléculas cilíndricas largas formadas exclusivamente por átomos de carbono y cuyo diámetro es del orden de 1 nm. Incluso han aparecido aplicaciones a problemas biológicos, donde las técnicas de la física mesoscópica y la nanofísica han sido explotadas en el estudio de la conductancia de moléculas individuales de ADN [3-5].

En este sentido el trabajo que se ha desarrollado tiene como objetivo principal el de desarrollar un sistema de fabricación y medición de contactos atómicos mediante un sistema novedoso y original. Con esto, se pretende por una parte desarrollar e implementar las técnicas experimentales que permitan estudiar el transporte eléctrico en el régimen

balístico. Adicionalmente, este sistema busca aportar una nueva vía para la obtención de este tipo de sistemas con un mínimo de restricciones y con cierta tolerancia de operación.

El sistema propuesto se basa en el uso de elastómeros magnéticos para la obtención de contactos atómicos entre dos electrodos conductores macroscópicos. Como se reporta en este trabajo, el mecanismo de formación de contactos permite la observación de las escaleras de conductancia que hacen patente la formación de contactos atómicos. Estos resultados son obtenidos sin restricciones mayores. En particular, se demuestra que estas características de la conductancia pueden ser observadas sin problemas a temperatura ambiente y al aire libre. El análisis estadístico de los resultados está en buen acuerdo con los resultados existentes en la literatura para el caso de contactos atómicos de cobre. Adicionalmente, se presentan resultados obtenidos utilizando un alambre de cobre en contacto con una placa de aluminio comprimido (i.e. esto es, una aleación a base de aluminio) que arroja resultados comparables a los obtenidos en el sistema cobre-cobre.

El trabajo está estructurado en tres partes. La primera parte, presenta algunas definiciones importantes, así como los elementos teóricos que serán utilizados para describir el transporte electrónico en contactos atómicos y para hacer una revisión de las principales técnicas experimentales utilizadas para la fabricación y medición de tales contactos. En la segunda parte, se presenta lo esencial del trabajo experimental realizado, las diferentes técnicas utilizadas así como los montajes que fue necesario implementar. En la tercera parte del trabajo, se describe la metodología de trabajo y la optimización que fue realizada para observar los efectos de conducción en contactos atómicos. Por último, se presentan los resultados principales de este trabajo así como su análisis y discusión.

Capítulo 1: Transporte eléctrico cuantizado

1.A. Antecedentes. Breve historia y definiciones

Los conductores macroscópicos están caracterizados por la ley de Ohm, la cual establece que la conductancia G de una muestra dada es directamente proporcional a su sección transversal S e inversamente proporcional a su longitud L :

$$G = \sigma \frac{S}{L}, \tag{1.1}$$

donde la conductividad σ es una propiedad del material de la muestra, independiente de las dimensiones.

A pesar de que la conductancia es una cantidad clave en el análisis de los conductores de dimensiones atómicas, conceptos simples como la ley de Ohm dejan de ser aplicables en la escala atómica. Los conductores de tamaño atómico son un caso límite de sistemas mesoscópicos. En tales sistemas, uno puede identificar diferentes regímenes de transporte de acuerdo al tamaño relativo de varias escalas de longitud.

Cuando la escala de longitud característica de un conductor es reducida por debajo de la trayectoria libre media de los electrones en la superficie de Fermi, se entra lo que se denomina comúnmente como *régimen de transporte balístico* (Fig. 1.1) En este régimen, los electrones serán dispersados predominantemente en las fronteras de la geometría de constricción.

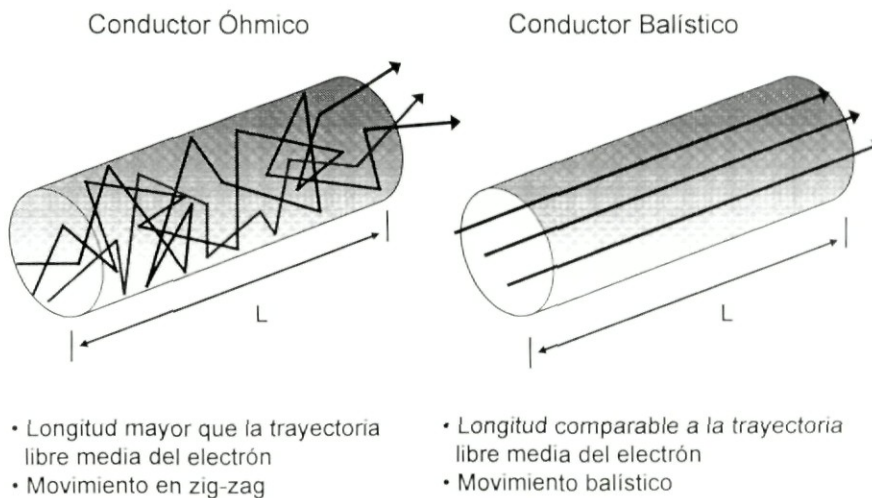


Fig. 1.1. Transporte Óhmico y transporte balístico.

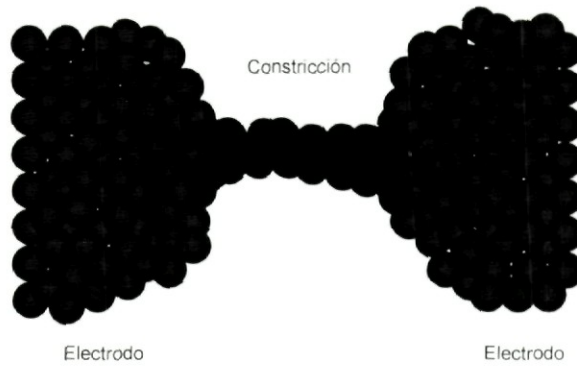


Fig. 1.2. Contacto puntual en una constricción formada entre dos electrodos macroscópicos.

Un contacto puntual es un contacto formado por unos pocos átomos por lo cual también es llamado contacto atómico (Fig. 1.2). Un contacto puntual cuántico (QPC, siglas en inglés de Quantum Point Contact) es un contacto puntual balístico entre dos cuerpos macroscópicos en donde el ancho es tan pequeño que es comparable con la longitud de onda de Fermi λ_F . En un QPC, la naturaleza ondulatoria mecánico-cuántica de los electrones llega a ser importante, abriendo la posibilidad de observar fenómenos cuánticos como la conductancia cuantizada.

Los contactos puntuales pueden presentarse en una diversidad de variantes, desde un simple átomo, pasando por agrupaciones sencillas de varios átomos, hasta moléculas y complejos moleculares como los nanotubos de carbono o incluso moléculas de ADN (Fig.1.3).

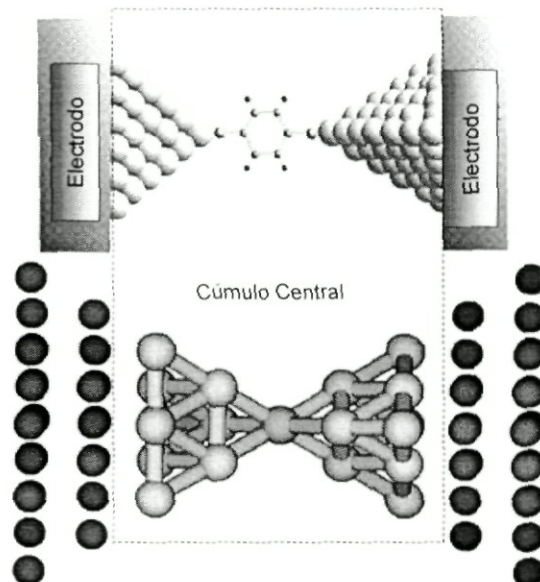


Fig. 1.3. Arriba: Representación esquemática de un contacto de una sola molécula. Nótese que la región indicada como “cúmulo central” consta de una molécula más una parte de puntas metálicas. Abajo: Contacto de un sólo átomo consistente en una estructura FCC con distancias interatómicas de bulto crecida a lo largo de la dirección (111). Los átomos en azul representan los átomos del bulto usados para modelar los reservorios.

El descubrimiento del Efecto Hall Cuántico (QHE, siglas en inglés de Quantum Hall Effect) en 1980 por Von Klitzing, Dorda, y Pepper [6], señaló la llegada de una nueva era en el estudio de los fundamentos del transporte eléctrico en conductores. Una nueva combinación de constantes fundamentales de la naturaleza hizo aparición. En ciertos conductores bidimensionales (*i.e.* conductores en los cuales la tercer dimensión del sistema es del orden o más pequeña que la longitud de onda de Fermi λ_F), se encontró que la resistencia de Hall R_{xy} , medida ya sea en función del campo magnético B o de la densidad superficial de carga n_A , presenta una estructura escalonada. Se encontró además, que los valores de la resistencia Hall pueden describirse por la relación

$$R_{xy} = \frac{V_H}{I_x} = \frac{h}{ne^2} = \frac{25.81k\Omega}{n}, \quad (1.2)$$

donde n toma valores enteros. Muchas mediciones experimentales de R_{xy} muestran que el factor cuántico h/e^2 en esta relación es exacto, esto es, la resistencia R_{xy} está determinada completamente por las constantes fundamentales h y e .

En sistemas mesoscópicos en los cuales el transporte eléctrico está confinado a una sola dimensión, fue observada la combinación e^2/h , en la forma de niveles cuantizados de conductancia. La Fig. 1.4 es un ejemplo de las relevantes observaciones publicadas en 1988 por dos grupos, uno en los Laboratorios de Investigación Phillips (*Phillips Research Laboratories*) en Holanda, y otro en el Laboratorio Cavendish de la Universidad de Cambridge (*Cavendish Laboratory*) [7,8]. A diferencia del efecto Hall, en estas mediciones, no existe campo magnético aplicado alguno.

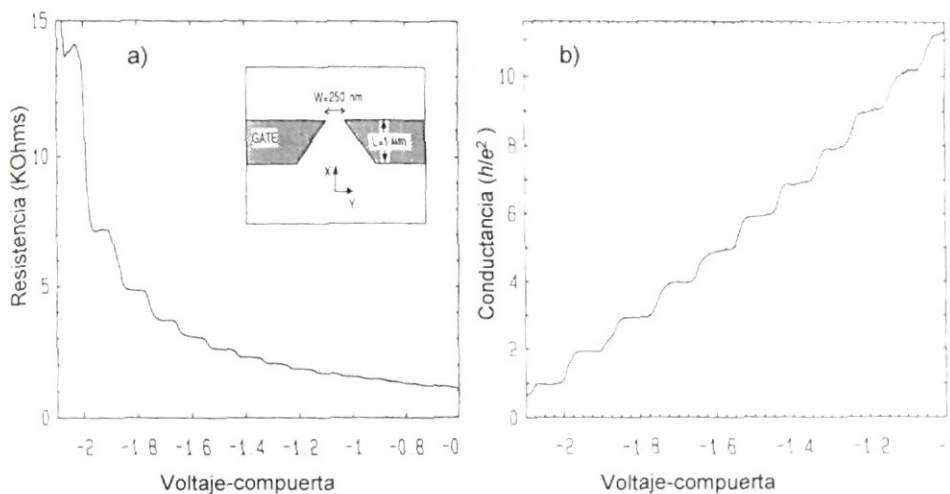


Fig. 1.4. Descubrimiento de la cuantización de la conductancia en junturas de GaAs-AlGaAs . a) Resistencia del contacto puntual como función del voltaje en la compuerta. Recuadro: esquema del contacto puntual. b) Conductancia del contacto puntual en función del voltaje en la compuerta, obtenido a partir de los datos de a) después de restar una resistencia de 400Ω . La conductancia muestra *mesetas* para múltiplos de $2e^2/h$. [7].

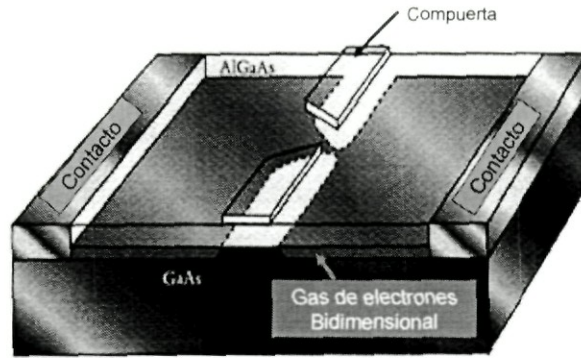


Fig. 1.5. Vista esquemática de la sección transversal de un contacto puntual cuántico, definido en un gas de electrones bidimensional de alta movilidad en la interfase de una juntura de GaAs-AlGaAs.

En sistemas, tales como las junturas de GaAs-AlGaAs, usados en el estudio del efecto Hall cuántico, los electrones son repelidos por impurezas e imperfecciones; el movimiento del electrón de una orilla de la muestra a la otra orilla es por tanto difusivo. Sin embargo, en las muestras de GaAs-AlGaAs de alta movilidad que usaron los grupos de Cambridge y Phillips (Fig. 1.5), la trayectoria libre media elástica es mucho más grande que la longitud del canal conductor que conecta las dos regiones bidimensionales que actúan como reservorios de electrones.

Los experimentalistas observaron la cuantización de la conductancia (Fig. 1.4), cuando el ancho del canal era comparable con la longitud de onda de Fermi en los reservorios (Fig.1.5), o en términos de niveles de energía, cuando la temperatura era inferior a la separación entre niveles de energía sucesivos del sistema de electrones. Los experimentos fueron hechos a una temperatura de unas décimas de Kelvin. Ambos grupos observaron mesetas bien definidas alrededor de los 2 K.

El factor 2 en el nuevo cuanto de conductancia viene de la degeneración en el espín de los estados electrónicos. Cuando dicha degeneración es retirada, por aplicación de un campo magnético paralelo al gas de electrones bidimensional, según el reporte del grupo de Cambridge [8], aparecen nuevas mesetas entre aquellas previamente encontradas en ausencia del campo magnético. Los escalones en la conductancia aparecen entonces en valores que son múltiplos enteros de $e^2 h$. El grupo de Cambridge reportó la observación de mesetas para valores de conductancia de hasta $30 e^2 h$.

Durante la década de los 90s se dio el desarrollo simultáneo de varios campos. En primer lugar, poco después de la invención del microscopio de efecto túnel (STM) en 1986, Gimzewski y Möller [9] fueron los primeros en emplear un STM para el estudio de la conductancia en contactos de tamaño atómico y las fuerzas fueron medidas con un microscopio de fuerza atómica (AFM) por Düring *et al* [10]. Por otro lado, la teoría que describía la cuantización de la conductancia en el gas de electrones bidimensional había provisto el marco conceptual para la discusión del transporte en contactos que tienen una longitud comparable con la longitud de onda de Fermi. A pesar de que la conexión entre estos dos desarrollos fue hecha en unos pocos trabajos teóricos [11-15], pasaron algunos años antes de que aparecieran nuevos experimentos sobre la conductancia en contactos de

dimensiones atómicas. Adicionalmente, las propiedades mecánicas en contactos de tamaño atómico fueron discutidas en dos trabajos que aparecieron en 1990 [16,17]. En tales trabajos se mostraba, empleando dinámica molecular simulando el contacto entre una punta metálica de STM y una superficie plana, que al ejercer presión sobre el contacto éste pasaba a través de etapas sucesivas de deformación elástica y *repentinos* reacomodos de la estructura atómica.

Empleando técnicas experimentales simples, tales como el STM o la denominada *ruptura de juntura por control mecánico* (MCBJ), es posible romper cuidadosamente un contacto metálico para formar un alambre de dimensiones atómicas. De hecho, el diámetro de estos nanoalambres puede ser fácilmente reducido a un sólo átomo. Estos contactos de tamaño atómico han sido ampliamente estudiados en la última década y han resultado ser un campo de pruebas ideal para los conceptos de la física mesoscópica.

Durante la ruptura de uno de estos nanoalambres, la conductancia decrece por escalones hasta que el contacto se rompe. La altura de los escalones es del orden de $G_0 = 2e^2/h$ (cantidad denominada “cuanto de conductancia”). Este hecho, llevo a muchos autores a interpretar este fenómeno como cuantización de la conductancia, en analogía con el caso de los puntos de contacto balístico en estructuras semiconductoras. Sin embargo, en el caso de los contactos metálicos de tamaño atómico las mesetas de conductancia son diferentes para cada apertura individual del contacto. Aun mas, ha sido demostrado que el valor de la conductancia, la longitud de la meseta y el comportamiento de la curva en la meseta, son característicos de cada metal. En un intento de estudiar de una manera más sistemática la ocurrencia o no de la cuantización de la conductancia, se han introducido histogramas de los valores de la conductancia, contruidos con un gran número de curvas. Éstas han demostrado que, en algunos metales, como el Au o el Na, la conductancia tiene cierta preferencia por múltiplos de G_0 , mientras que para muchos otros materiales no hay indicios de cuantización. La interpretación de estos histogramas ha dado origen a un encendido debate, el cual ha sido clarificado en gran parte con la ayuda de Scheer *et al.* [18]. Estos autores demostraron que el conjunto de coeficientes de transmisión T_i es susceptible de medición en el caso de metales superconductores. Desde entonces, otras técnicas, tales como *shot noise* [19], fluctuaciones de conductancia [20] y termopotencia [21], han sido empleadas también para sondear canales individuales de conducción. En su original trabajo, Scheer y colaboradores analizaron contactos de dimensiones atómicas de aluminio empleando juntas de ruptura microfabricadas. Ellos mostraron que, en la última meseta previo al rompimiento del contacto, donde típicamente $G < G_0$, tres canales contribuyen significativamente (más del 1% de la transmisión total) a la conductancia. Varias preguntas fundamentales surgieron inmediatamente de dicho trabajo: ¿Cuál es el origen microscópico de los canales de conducción en un contacto metálico?, ¿Qué propiedades determinan el número de modos y su transmisión en un contacto de tamaño atómico determinado? La respuesta más satisfactoria dada a estas preguntas ha sido dada por Cuevas y colaboradores [22-24] dentro del marco de un modelo de amarre fuerte: la conductancia de un contacto particular de un sólo átomo depende del número de electrones de valencia (*i.e.* la valencia química).

1. B. Teoría de la conductancia balística

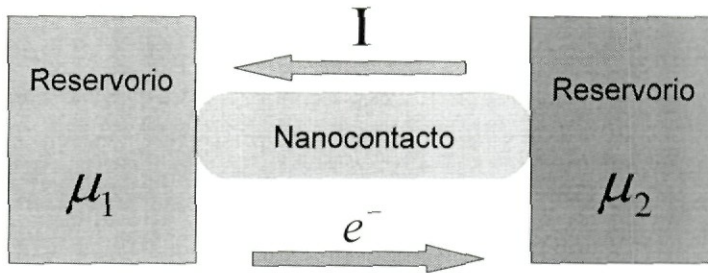


Fig. 1.6. Diagrama de un conductor unidimensional.

Considérese un canal unidimensional en contacto con dos reservorios (Fig. 1.6), a los cuales en adelante se les llamará *reservorio fuente* y *reservorio receptor*. Se asume que los reservorios (fuente y receptor) tienen una distribución continua de estados electrónicos. Tales estados están ocupados hasta una cierta energía μ , llamada potencial electroquímico, nivel de Fermi o sencillamente energía de Fermi (Fig. 1.7).

Si las regiones fuente y receptor están acopladas al canal, entonces los electrones fluirán dentro y fuera de éste llevando a la fuente y al receptor hacia el equilibrio con un potencial electroquímico μ , al igual que dos materiales en equilibrio adquieren una temperatura común T .

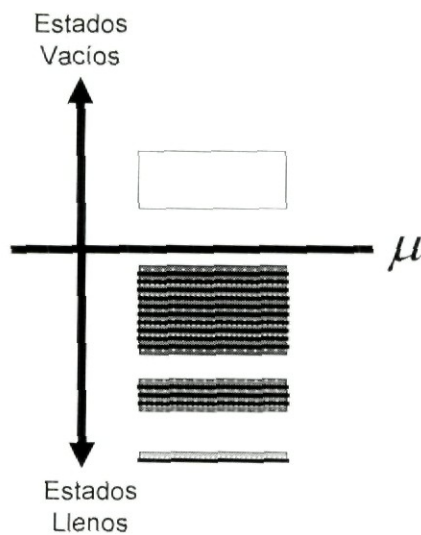


Fig. 1.7. Diagrama de niveles de energía para un contacto. El nivel de energía más alto ocupado se denota por μ y se conoce como nivel de Fermi.

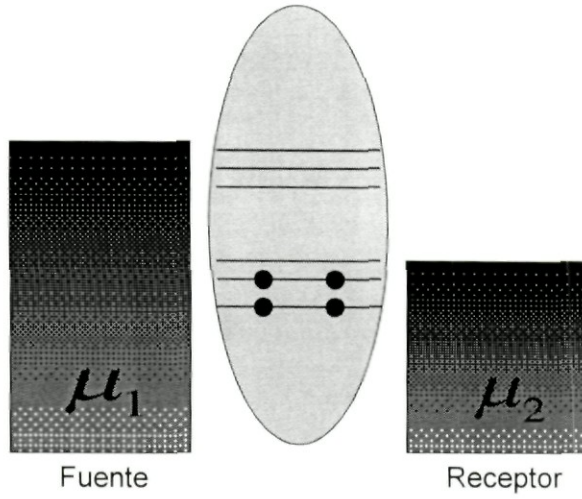


Fig. 1.8. Un voltaje positivo V_D aplicado al receptor respecto de la fuente baja el potencial electroquímico en el receptor: $\mu_2 = \mu_1 - eV_D$. Fuente y receptor intentan imponer ahora diferentes distribuciones de Fermi como se muestra, y el dispositivo va hacia un estado intermedio entre ambas.

En este estado de equilibrio, el número promedio de electrones (en el tiempo) en cualquier nivel de energía E viene dado por la función de Fermi

$$f_0(E - \mu) = \frac{1}{1 + \exp((E - \mu)/k_B T)}, \quad (1.3)$$

la cual es 1 para energías por debajo de μ y 0 para energías mayores a μ .

El flujo de los electrones (la conducción) depende de la disponibilidad de estados alrededor de $E = \mu$. Un voltaje constante V_D aplicado, entre fuente y receptor, baja los niveles de energía del receptor con respecto de la fuente (Fig.1.8) (asumiendo V_{ap} positivo) y los mantiene a diferentes potenciales electroquímicos separados por eV_D :

$$\mu_1 - \mu_2 = eV_D, \quad (1.4)$$

dando origen a dos diferentes funciones de Fermi:

$$f_1(E) = f_0(E - \mu_1) = \frac{1}{1 + \exp((E - \mu_1)/k_B T)}, \quad (1.5a)$$

$$f_2(E) = f_0(E - \mu_2) = \frac{1}{1 + \exp((E - \mu_2)/k_B T)}, \quad (1.5b)$$

Cada reservorio busca llevar al dispositivo activo hacia un equilibrio con él mismo. La fuente se mantiene bombeando electrones hacia el dispositivo buscando el equilibrio. Pero el equilibrio nunca se alcanzará en tanto el receptor se mantenga tomando electrones en su afán de alcanzar el equilibrio con él mismo. El dispositivo es forzado, de esta manera, a un acto de balance entre dos reservorios que lo llevan a un estado de no-equilibrio intermedio entre el que busca la fuente y el que busca el receptor.

Ecuaciones de flujo para el modelo de un solo nivel

Este acto de balance es fácil de apreciar si se considera un sistema de un sólo nivel (Fig. 1.9), predispuesto de manera que su energía ε sea intermedia entre los potenciales electroquímicos en los dos reservorios. Al reservorio 1 le gustaría ver $f_1(\varepsilon)$ electrones, mientras que al reservorio 2 le gustaría ver $f_2(\varepsilon)$ electrones ocupando el estado. El número promedio N de electrones en el estado estacionario será algo intermedio entre f_1 y f_2 . Existe un flujo neto I_1 , a través de la juntura izquierda, que es proporcional a $f_1 - N$:

$$I_1 = (-e) \frac{\gamma_1}{\hbar} (f_1 - N), \quad (1.6a)$$

donde $-e$ es la carga por electrón. Similarmente, el flujo neto I_2 a través de la juntura derecha es proporcional a $f_2 - N$ y puede ser escrito como

$$I_2 = (-e) \frac{\gamma_2}{\hbar} (f_2 - N). \quad (1.6b)$$

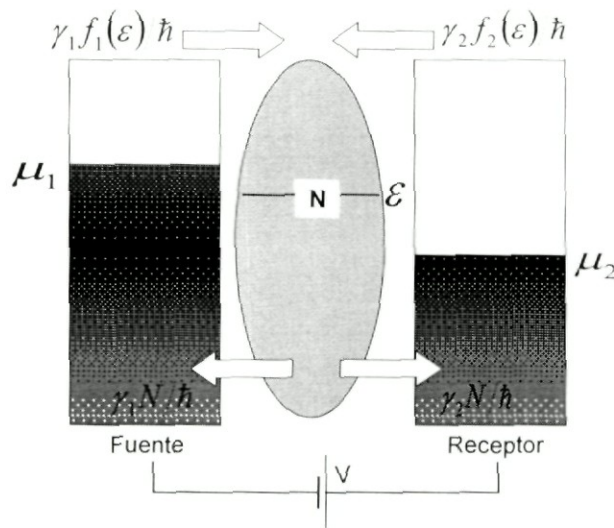


Fig. 1.9. El flujo de electrones hacia fuera y hacia dentro de un dispositivo de un solo nivel situado en las terminales de la fuente y el receptor.

Podemos interpretar los constantes $\gamma_1 \hbar$ y $\gamma_2 \hbar$ como las razones a las cuales un electrón situado inicialmente en el nivel ε escapará de los reservorios fuente y receptor respectivamente.

En el estado estacionario no hay flujo desde o hacia el dispositivo: $I_1 + I_2 = 0$, de manera que, de las Ecs. (1.5a) y (1.5b), obtenemos el resultado

$$N = \frac{\gamma_1 f_1 + \gamma_2 f_2}{\gamma_1 + \gamma_2}. \quad (1.6c)$$

Sustituyendo este resultado en la Ec. (1.6a) o en la Ec. (1.6b) obtenemos una ecuación para la corriente en el estado estacionario:

$$I = I_1 = -I_2 = \frac{e}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} [f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon)]. \quad (1.7)$$

Esta es la corriente por espín. Deberíamos multiplicar por 2 si existen dos estados de espín con la misma energía.

Este sencillo resultado sirve para ilustrar ciertos hechos básicos acerca del proceso de flujo de corriente. En primer lugar, ninguna corriente fluirá si $f_1(\varepsilon) = f_2(\varepsilon)$. Un nivel que esté por debajo de ambos potenciales electroquímicos μ_1 y μ_2 tendrá $f_1(\varepsilon) = f_2(\varepsilon) = 1$ y no contribuirá a la corriente. De manera similar, un nivel que esté por encima de ambos potenciales μ_1 y μ_2 tendrá $f_1(\varepsilon) = f_2(\varepsilon) = 0$, y no contribuirá a la corriente. Es solamente cuando el nivel se encuentra entre unos pocos $k_B T$ de los potenciales μ_1 y μ_2 que tenemos que $f_1(\varepsilon) \neq f_2(\varepsilon)$ y una corriente fluye como resultado de una diferente “agenda” entre los reservorios. El reservorio 1 se mantiene bombeando electrones esforzándose por incrementar el número de electrones de N a f_1 , mientras que el reservorio 2 los absorbe tratando de disminuir ése número a f_2 . El efecto neto es una transferencia continua de electrones desde el reservorio 1 hasta el reservorio 2, correspondiente a una corriente I en el circuito externo. Nótese que la corriente va en dirección opuesta a la dirección del flujo de electrones, puesto que los electrones tienen carga negativa (Fig. 1.6).

Es claro ahora porqué el proceso de conducción requiere de la presencia de estados alrededor de $E = \mu$. No importa si los estados están vacíos (no ocupados) o llenos (ocupados) en el equilibrio, antes de que un voltaje sea aplicado. Con estados vacíos, los electrones son inyectados primero por el contacto negativo y enseguida colectados por el positivo. Con estados llenos, los electrones primero son colectados por el positivo y enseguida “rellenados” por el contacto negativo. De ambas formas, se tiene corriente fluyendo en el circuito externo en la misma dirección.

Considérese el dispositivo de la Fig. 1.10, un dispositivo con un pequeño voltaje aplicado a través de él ocasionando una separación de los potenciales electroquímicos de la fuente y el receptor. La corriente a través del dispositivo puede escribirse de la Ec. (1.7), y

simplificarse suponiendo que $\mu_1 > \varepsilon > \mu_2$, y que la temperatura es lo suficientemente baja para que $f_1(\varepsilon) \equiv f_0(\varepsilon - \mu_1) \approx 1$ y $f_2(\varepsilon) \equiv f_0(\varepsilon - \mu_2) \approx 0$:

$$I = \frac{e}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} = \frac{e \gamma_1}{2\hbar} \quad \text{si } \gamma_2 = \gamma_1. \quad (1.8)$$

Esto sugiere que podríamos bombear una corriente ilimitada a través de este dispositivo de un solo nivel con sólo incrementar $\gamma_1 (= \gamma_2)$, esto es, acoplándolo más y más fuertemente a los reservorios. Sin embargo, uno de los resultados de la física mesoscópica es que la máxima conductancia de un dispositivo de un solo nivel es igual a G_0 .

Lo que no hemos tomado en cuenta es el ensanchamiento del nivel, lo cual acompaña inevitablemente cualquier proceso de acoplamiento. Esto ocasiona que parte del nivel de energía se extienda fuera del rango de energía entre μ_1 y μ_2 donde fluye la corriente. La corriente real es por tanto reducida por debajo del valor esperado de la Ec. (1.8) por un factor de $(\mu_1 - \mu_2) C \gamma_1$, el cual representa la fracción del nivel que se encuentra entre μ_1 y μ_2 , donde $C \lambda_1$ es el ancho efectivo del nivel, siendo C una constante numérica. Puesto que $\mu_1 - \mu_2 = eV_D$, puede verse de la Ec. (1.8) que la conductancia de hecho se aproxima a un valor constante independiente de la magnitud del acoplamiento ($\gamma_1 = \gamma_2$) del nivel con los reservorios:

$$I = \frac{e \gamma_1}{2\hbar} \frac{eV_D}{C \gamma_1} \rightarrow G = \frac{I}{V_D} = \frac{e^2}{2C\hbar}. \quad (1.9)$$

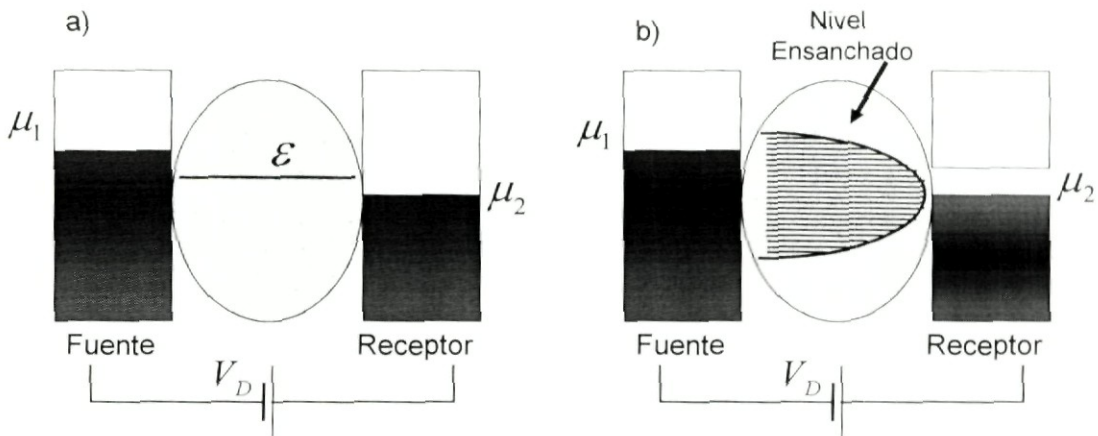
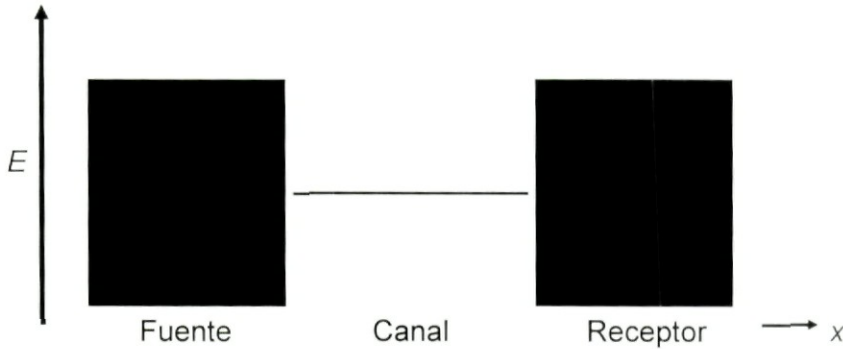


Fig. 1.10. a) Un dispositivo con un pequeño voltaje aplicado a través de él causando un corrimiento de los potenciales electroquímicos de la fuente y el receptor $\mu_1 > \varepsilon > \mu_2$. b) El proceso de acoplamiento con el dispositivo inevitablemente ensancha el nivel esparciendo parte de éste fuera del rango entre μ_1 y μ_2 donde la corriente fluye.

Ahora vamos a realizar este cálculo para obtener una estimación del valor de C .

Una manera de comprender este ensanchamiento es notando que, antes de acoplar el canal a la fuente y al receptor, la densidad de estados $D(E)$ se ve un poco de la siguiente manera:



Tenemos un nivel bien definido en el canal y , por otro lado, una distribución continua de estados en los reservorios fuente y receptor. Después del acoplamiento, el canal “pierde” parte de su estado al esparcirse hacia los reservorios, pero también “gana” parte de los estados de los reservorios, los cuales “se esparcen” hacia el canal. Puesto que la pérdida ocurre a una energía fija (la energía del canal), en tanto que la ganancia ocurre sobre un rango de energías (los espectros de energías de los reservorios), el efecto neto es ampliar la densidad de estados del canal desde su bien definida estructura inicial hacia una estructura más difusa (Fig. 1.11).

Por otro lado, existe una regla de adición que requiere que la pérdida sea compensada exactamente por la ganancia, de manera que al integrar sobre todas las energías, el nivel aún retiene solamente un electrón. Es común representar la densidad de estados ensanchada por una función Lorenciana centrada alrededor de $E = \varepsilon$ (cuya integral sobre toda la energía es igual a uno):

$$D_{\varepsilon}(E) = \frac{\gamma / 2\pi}{(E - \varepsilon)^2 + (\gamma/2)^2} \quad (1.10)$$

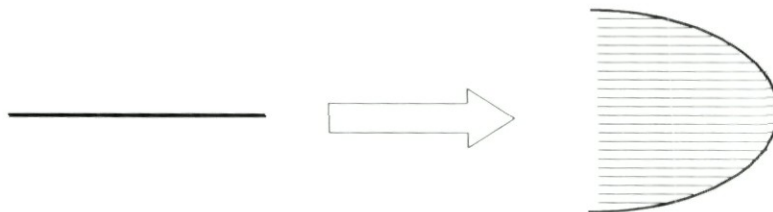


Fig. 1.11. Ensanchamiento de energía del nivel debido al acoplamiento con los reservorios.

La función delta inicial puede ser representada como el caso límite de $D_\varepsilon(E)$ cuando el ensanchamiento tiende a cero: $\gamma \rightarrow 0$. El ensanchamiento γ es proporcional a la intensidad del acoplamiento, tal como podríamos esperar. De hecho, sucede que $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$, donde γ_1/\hbar y γ_2/\hbar son las razones de escape introducidas con anterioridad. Esto se deduce de un tratamiento mecánico cuántico completo, pero podríamos pensar en ello como una consecuencia del principio de incertidumbre el cual requiere que el producto del tiempo de vida de un estado ($= \hbar/\gamma$) y su extensión en energía (γ) sea igual a \hbar .

Otra forma de explicar el ensanchamiento que acompaña el acoplamiento es notando que el acoplamiento del canal con los alrededores hace que los niveles de energía adquieran un tiempo de vida finito, ya que un electrón insertado en un estado con energía $E = \varepsilon$ al tiempo $t = 0$ escapará gradualmente de dicho estado, haciendo que su función de onda luzca como

$$\exp(-i\varepsilon t/\hbar)\exp(-t/2\tau),$$

en lugar de solamente

$$\exp(-i\varepsilon t/\hbar).$$

Esto amplía su transformada de Fourier de una función delta en $E = \varepsilon$ a la función Lorenciana de ancho $\gamma = \hbar/\tau$ centrada alrededor de $E = \varepsilon$ dada en la ecuación (8). Existe, por tanto, una relación simple entre el tiempo de vida de un estado y su ensanchamiento: un tiempo de vida de un picosegundo (ps) corresponde a aproximadamente 0.7meV. En general, el escape de los electrones de un nivel no necesita seguir una exponencial simple y la correspondiente forma de línea no tiene que ser Lorenciana. Esto se ve reflejado normalmente en un ensanchamiento dependiente de la energía $\gamma(E)$.

El acoplamiento entre los contactos, por tanto, ensancha un nivel de energía discreto en una densidad de estados continua, dada por la ecuación (1.10), efecto que podemos incluir modificando la expresión para la corriente dada por (1.7), obteniendo:

$$I = \frac{e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE D_\varepsilon(E) \frac{\gamma_1\gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} [f_1(E) - f_2(E)]. \quad (1.11)$$

La ecuación (1.11) para la corriente amplía el resultado anterior de la ecuación (1.7) para incluir el efecto del ensanchamiento. Podríamos escribir la ecuación como:

$$I = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE T(E) [f_1(E) - f_2(E)], \quad (1.12)$$

donde la *transmisión* $T(E)$ es definida, haciendo uso de la ecuación (1.10), como:

$$T(E) \equiv 2\pi D_\varepsilon(E) \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} = \frac{\gamma_1 \gamma_2}{(E - \varepsilon)^2 + (\gamma/2)^2}. \quad (1.13)$$

A bajas temperaturas, podemos escribir:

$$f_1(E) - f_2(E) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mu_1 > E > \mu_2 \\ 0 & \text{cualquier otro lado} \end{cases}$$

de manera que la corriente viene dada por

$$I = \frac{e}{h} \int_{\mu_1}^{\mu_2} dE T(E). \quad (1.14)$$

Si el voltaje aplicado es lo suficientemente pequeño, de manera que podamos asumir que la densidad de estados, y por tanto la transmisión, sea constante en el rango $\mu_1 > E > \mu_2$, usando la ecuación (1.13) podemos escribir:

$$I = \frac{e}{h} [\mu_1 - \mu_2] \frac{\gamma_1 \gamma_2}{(\mu - \varepsilon)^2 + ((\gamma_1 + \gamma_2)/2)^2}. \quad (1.15)$$

La máxima corriente es obtenida si el nivel de energía ε coincide con μ , el promedio de μ_1 y μ_2 . Notando que $\mu_1 - \mu_2 = eV_D$, podemos escribir el máximo de conductancia como:

$$G \equiv \frac{I}{V_D} = \frac{e^2}{h} \frac{4\gamma_1 \gamma_2}{(\gamma_1 + \gamma_2)^2} = \frac{e^2}{h} \quad \text{si } \gamma_1 = \gamma_2. \quad (1.16)$$

Además, podemos generalizar la ecuación para un número N de electrones [ver ecuación (1.6c)] para tomar en cuenta la densidad de electrones ensanchada:

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} dE n(E), \quad (1.17)$$

donde

$$n(E) \equiv D_\varepsilon(E) \frac{\gamma_1 f_1(E) + \gamma_2 f_2(E)}{\gamma_1 + \gamma_2}. \quad (1.18)$$

Una vez hecha una descripción del transporte eléctrico en un contacto atómico en el cual solo se considera un canal, se obtienen los siguientes resultados importantes:

1) El flujo de electrones, o la conductancia, a través de un solo canal, no puede tomar cualquier valor sino que existe un límite superior G_0 .

2) El valor de la conductancia está definido por los detalles de la estructura electrónica del sistema completo, formado por el canal y los reservorios. Es la estructura electrónica la que define el valor de la probabilidad T , de que un electrón inyectado desde la fuente alcance el receptor.

El vínculo de lo expuesto con la teoría de Landauer es directo. Landauer supone que la conductancia en un sistema real esta dada por:

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_n T_n. \quad (1.19)$$

Donde, en la aproximación semiclásica, a temperatura cero, los coeficientes T_n valen 1 o 0.

En esta aproximación [1], los coeficientes de transmisión son independientes del material y la cuantización de la conductancia es un fenómeno universal definido por la constante de cuantización G_0 .

Sin embargo, los estudios realizados en contactos atómicos metálicos han mostrado, de manera clara y convincente, que los coeficientes de transmisión dependen fuertemente de la naturaleza del material. Por lo cual, durante mucho tiempo, se trató de dar una respuesta al origen microscópico de los canales de conductancia en contactos metálicos y las propiedades que determinan el número y la transmisión de los modos de conducción en un contacto metálico dado.

A partir del modelo sencillo descrito anteriormente para un nivel, se induce que los coeficientes de transmisión en la fórmula de Landauer están definidos por la ecuación (1.13), que depende de la densidad de estados $D_\varepsilon(E)$ en el nivel de Fermi, de la manera en que ocurre el traslape de orbitales entre el contacto y los reservorios. En particular, se tiene que los coeficientes T_n pueden tomar cualquier valor entre 0 y 1 y, a primera aproximación, su valor exacto estará dado por el número de niveles atómicos en el nivel de Fermi una vez que se considera el sistema completo (electrodos y contacto).

En un sistema real, se espera que existan varios niveles, no sólo uno, por lo cual la descripción de la conductancia presenta anteriormente debe ser generalizada al caso de un conductor con niveles múltiples, es decir, n niveles de energía. En este caso, las cantidades introducidas para el caso de un nivel deben ser remplazadas por las matrices $(n \times n)$ correspondientes.

En este sentido, los resultados más relevantes han sido reportados por Cuevas *et al.*, quienes han utilizado una combinación de técnicas de amarre fuerte para el cálculo de la estructura electrónica y las llamadas técnicas de la función de Green fuera de equilibrio (NEGF) para determinar las propiedades de transporte para un voltaje de bias dado.

Lo más destacado de los resultados proporcionados por la teoría es que se puede estimar fácilmente la conductancia de un contacto de solo átomo usando la información del número de orbitales de valencia y la valencia química. Vale la pena remarcar que las predicciones acerca del número de canales de este modelo de amarre fuerte han sido confirmadas por todos los experimentos que han incluido canales individuales [18-21,23]. Es importante señalar también que este modelo explica de una manera natural los valores típicos de la conductancia observados para diferentes materiales. El modelo explica no sólo las diferencias entre las diferentes clases de metal: monovalentes (metales alcalinos y suaves), metales del tipo *sp*, metales de transición, etc., sino también las diferencias entre metales de la misma clase. Así, por ejemplo, dentro de los metales de transición, el modelo predice una jerarquía simple. La conductancia más alta debería ser exhibida por V, Nb y Ta (con cinco electrones de valencia), ya que para ellos el nivel de Fermi yace en medio de la banda *d*. La conductancia, y en particular las transmisiones, de los canales cuarto y quinto deberían disminuir hacia la columna del Pd y Pt, puesto que en éste caso el nivel de Fermi se encuentra en el extremo de la banda *d*. De hecho, esto es precisamente lo que se observa en los histogramas de conductancia [25]. Para los metales del tipo *sp*, Pb, Al, Zn, Cd, etc., existe una gran diferencia entre el plomo, con cuatro electrones de valencia, y los otros materiales, con dos o tres electrones de valencia. La conductancia del plomo es mucho más alta debido a la posición del nivel de Fermi, bastante dentro de la banda *p*.

1. C. Tipos de nanocontactos

Antes de comenzar la descripción de las principales técnicas de fabricación de nanocontactos es importante hacer énfasis en la gran diferencia que existe entre los experimentos a temperatura ambiente y los experimentos a temperatura del helio líquido. A bajas temperaturas, los contactos de dimensiones atómicas pueden ser mantenidos estables durante el tiempo que se desee, permitiendo así la investigación detallada de las propiedades de conductancia. Al mismo tiempo, las condiciones de baja temperatura previenen la adsorción de gases contaminantes sobre la superficie del metal. En cambio, a temperatura ambiente, la difusión térmica de los átomos impide que se dé un contacto estable (de larga duración) de un simple átomo; además de que son requeridas condiciones de ultra-alto vacío para una unión (juntura) metálica.

a) *Spear-anvil* y técnicas relacionadas.

La técnica *spear-anvil* (lanza-yunque) consiste, esencialmente, en acercar lentamente una aguja de metal hacia una superficie metálica. Normalmente, es usado algún tipo de mecanismo diferencial para ajustar manualmente el contacto. Con esta técnica son formados contactos estables los cuales presentan resistencias del rango de ~ 0.1 a $\sim 10 \Omega$, los cuales corresponden a diámetros de contacto entre $d \approx 10$ y 100 nm. Cuando se trabaja con metales limpios a bajas temperaturas, la trayectoria libre media (elástica e inelástica) de los portadores de carga puede ser mucho mayor a esta longitud d ; la naturaleza balística del transporte en tales contactos ha sido demostrada convincentemente en muchos experimentos. La principal aplicación de esta técnica ha sido el estudio de la interacción electrón-fonón en metales [26].

Contactos del tipo *spear-anvil* no son adecuados para el estudio del régimen cuántico, el cual requiere de diámetros de contacto comparables a la longitud de onda de Fermi (i.e. contactos del tamaño de átomos). Para contactos más pequeños (resistencias más altas) la técnica descrita no es lo suficientemente estable para la realización de mediciones. Y lo que es más importante, la mayoría de los experimentos dentro del régimen cuántico requieren de algún medio de control fino sobre el tamaño del contacto. Lo anterior puede resolverse empleando el microscopio de efecto túnel (STM) o la técnica *mechanically controllable break junction* (MCBJ).

b) Empleo de microscopios de efecto túnel.

El microscopio de efecto túnel (STM, siglas en inglés de *Scanning Tunneling Microscope*) es una herramienta versátil que permite el estudio, con resolución atómica, de la topografía y las propiedades electrónicas de la superficie de un metal o de un semiconductor. En su modo topográfico normal, una aguja (la punta) es desplazada sobre la muestra sin hacer contacto. La separación punta-muestra es mantenida constante al controlarse la corriente que fluye entre ellas en virtud del efecto túnel, cuando un voltaje

constante es aplicado. La señal de control da una imagen topográfica de la superficie de la muestra (Fig. 1.12). Es posible lograr una resolución atómica gracias a la dependencia exponencial de la corriente túnel de la separación punta-muestra: sólo el primer átomo *verá* la muestra. Las corrientes típicas de operación son del orden de los nanoampers y la separación punta-muestra es del orden de pocos ångstroms. Evidentemente, la muestra debe ser conductora. Esencial para la operación del STM es el control, con precisión subnanométrica, de la posición relativa de la punta y la muestra, lo cual es posible empleando piezoeléctricos cerámicos.

La distancia entre la punta y la muestra es tan pequeña que es bastante posible que pueda darse un contacto accidental entre ellas. Sin embargo, llegó a ser evidente muy pronto que la punta del STM podría ser utilizada para modificar la muestra a escala nanométrica. El primer reporte sobre la formación y estudio de contactos metálicos de dimensión atómica con STM es el de Gimzewski y Möller [9], quienes encontraron dos distintos tipos de modificación topográfica en la superficie de la muestra inducidas por la punta del STM (Fig. 1.12).

Además, la transición del régimen de tunelamiento al régimen de contacto fue observado como un salto abrupto en la conductancia (Fig. 1.13).

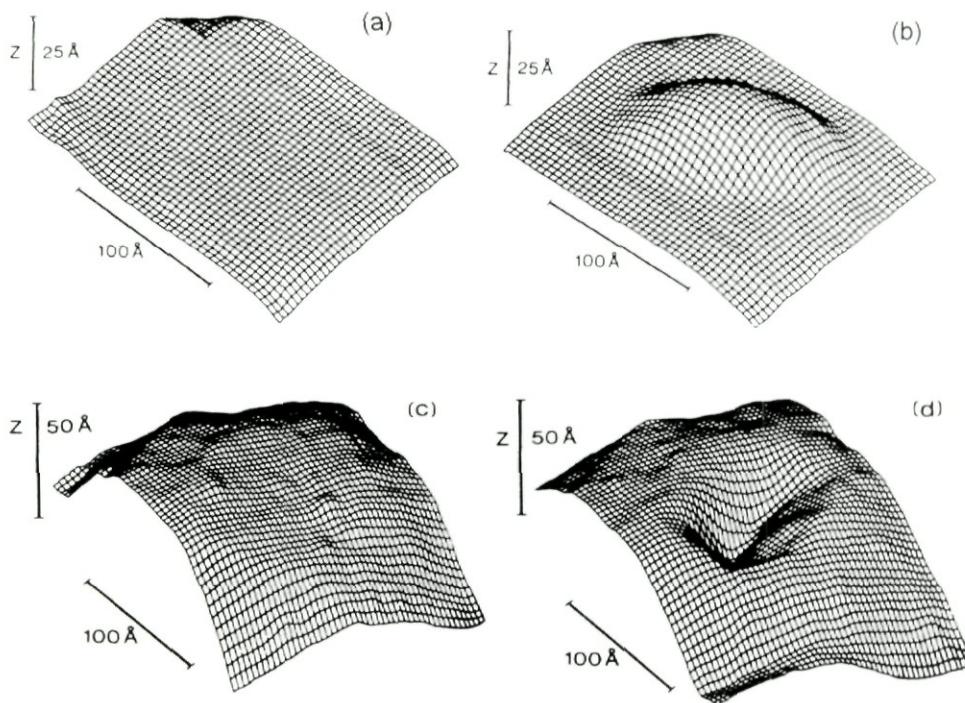


Fig. 1.12. Topografías por STM de dos eventos de acercamiento de la punta a la superficie de una muestra de plata policristalina. Primer evento: (a) antes del contacto, (b) después del contacto, con $\Delta z = 30 \text{ \AA}$. Segundo evento: (c) antes del contacto, (d) después del contacto, con $\Delta z = 30 \text{ \AA}$. [9].

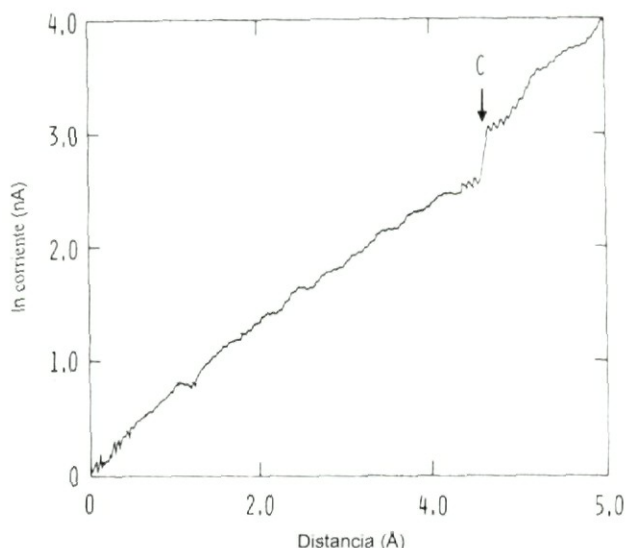


Fig. 1.13. Corriente de tunelamiento contra distancia en z para una punta *limpia* de iridio y una superficie de plata policristalina cuando un voltaje de 20 mV es aplicado entre estas. Es observada una discontinuidad de la corriente (indicada con C). [9].

Diferentes grupos han realizado experimentos de conductancia en contactos de tamaño atómico con STM en diferentes condiciones experimentales: a temperaturas criogénicas [27-29]; a temperatura ambiente bajo condiciones ambientales [30-32]; y en condiciones de ultra alto vacío [33-35].

La presencia de adsorbatos, contaminación, y óxidos sobre las superficies de contacto puede impedir la formación de pequeños contactos metálicos, además de producir espurios resultados experimentales. Este problema puede ser evitado, en principio, realizando los experimentos en ultra alto vacío (UHV) con procedimientos de limpieza *in situ* tanto para la punta como para la muestra [9]. Sin embargo, también es posible la fabricación de contactos metálicos limpios en condiciones que no sean UHV. Después de la limpieza convencional de la punta y la muestra, previa a su montaje en el STM, las superficies de contactos de éstas son limpiadas *in situ* haciendo “chocar” la punta sobre la región de la muestra donde se formará el contacto. Este procedimiento aparta los adsorbatos haciendo posible que se de el contacto metal-metal. La punta y la muestra están entrelazadas (esto es, unidas), y en cuanto la punta es retraída, y el contacto se rompe, nuevas superficies quedan expuestas. Evidencia de esta unión en contactos limpios es la observación de una protuberancia en el lugar donde el contacto se formó (Fig. 1.12). Este procedimiento de limpieza funciona particularmente bien a bajas temperaturas, condiciones en las que las superficies pueden permanecer limpias durante largos periodos de tiempo puesto que todos los gases reactivos están congelados. Tal procedimiento es adecuado si el contacto que se va a estudiar es homogéneo, ya que de otra manera habría transferencia de material de un electrodo al otro. Por otro lado, este comportamiento de “mojado” de la muestra metálica (e.g. Au o Ni) sobre una punta de algún metal duro (W o PtIr), ha sido explotado para el estudio de contactos homogéneos, asumiendo que existe una cobertura completa de la punta por el material de la muestra [33].

Durante un experimento de contactos metálicos con STM, el voltaje aplicado es mantenido fijo (a un valor bajo, por decir 10mV) y la corriente es registrada mientras la distancia punta-muestra es variada en función del voltaje del piezoeléctrico. Los resultados son típicamente presentados como una curva de conductancia (o corriente) contra voltaje del piezoeléctrico (o contra tiempo). La Fig. 1.13 muestra una curva STM típica de conductancia para una punta *limpia* de iridio y una superficie policristalina de plata en condiciones UHV. Antes del contacto, la corriente depende exponencialmente de la distancia, con una aparente barrera de tunelamiento del orden de la función de trabajo del material. Tal valor tan alto de la barrera de tunelamiento es una firma de la existencia de un contacto limpio, ya que los adsorbatos ocasionan una disminución considerable de la barrera de tunelamiento [9] (con excepción del gas inerte helio). El contacto metálico se presenta como un salto abrupto en la conductancia, o en la corriente. Después de este salto, la conductancia aumenta de una forma escalonada a medida que el tamaño del contacto aumenta. Revirtiendo el movimiento de la punta se encuentra que tales escalones presentan histéresis.

Es importante señalar que el voltaje del piezoeléctrico, en los experimentos con STM, no está directamente relacionado con el tamaño del contacto: mientras el contacto es sometido a esfuerzos su configuración atómica cambia *por pasos*.

c) Empleo de microscopio de transmisión electrónica de alta resolución

La observación directa de los contactos es posible empleando microscopía por transmisión electrónica de alta resolución (HRTEM, siglas en inglés de *High-Resolution Transmission Electron Microscopy*) [36]. Varios grupos han construido un STM con el ápice de la punta en el punto focal de un HRTEM. Kizuka y colaboradores [37-39], han observado el proceso de formación del contacto atómico en oro, usando un soporte cuyo movimiento es controlado mediante un piezoeléctrico (Fig. 1.14).

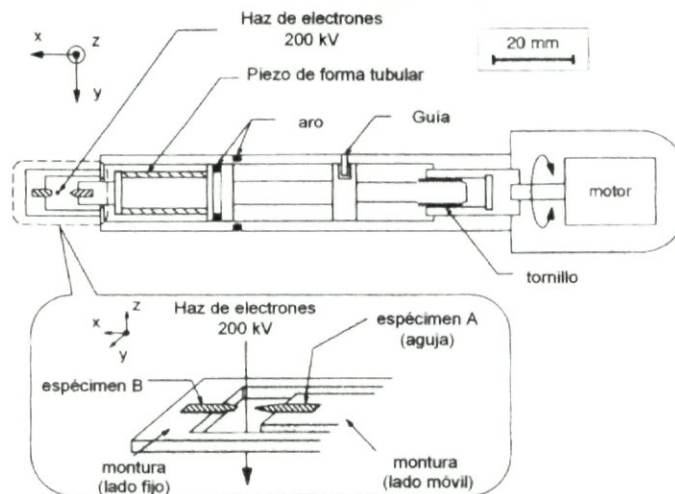


Fig. 1.14. Representación esquemática del soporte que permite el control mediante piezoeléctrico de la distancia punta-muestra dentro del muy reducido espacio disponible en un HRTEM. [37].

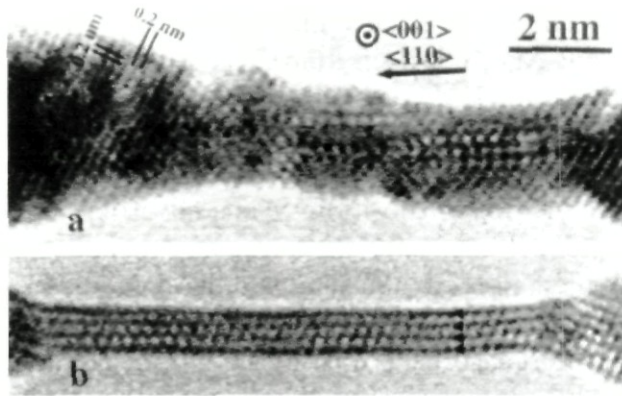


Fig. 1.15. Micrografías por transmisión electrónica mostrando la formación de un nanoalambre: (a) una imagen de una película de oro (001) con nano-orificios próximos entre sí, una etapa inicial del nanoalambre, y (b) el nanopuente más delgado con hileras de cuatro átomos. [40].

Takayanagi y colaboradores [40], han estudiado la estructura de nanoalambres de oro, y alambres atómicos [41]. Ellos fabricaron nanoalambres de oro *in situ* en condiciones de presión de 3×10^{-8} Pa, y temperatura ambiente, dentro de un UHV-TEM equipado con un cañón de electrones de emisión de campo. Mediante bombardeo con haz de electrones, realizaron nano-orificios en una película de oro (001) de 3nm de espesor, de manera que se formara un puente (Fig. 1.15a). Tal puente se encontraba suspendido por la película de oro en ambos extremos. La intensidad del haz empleado fue de 10 A/cm^2 , y el periodo de irradiación fue de una hora. Al irradiar aún más, el puente se hizo más delgado (Fig. 1.15b). La variaciones estructurales de los arreglos atómicos durante el proceso de *escaneo* fueron observadas *in situ* a escala atómica y con una resolución temporal de $1/60$ s.

Por otro lado, Ohnishi *et al.* [41], colocaron un STM “miniaturizado” en la posición de muestra de un UHV-TEM, el cual estaba equipado con un cañón de emisión de campo de 200 kV. Una punta de oro afilada mecánicamente fue colocada próxima a una isla de oro que había sido previamente depositada sobre un delgado alambre de cobre (Fig. 1.16).

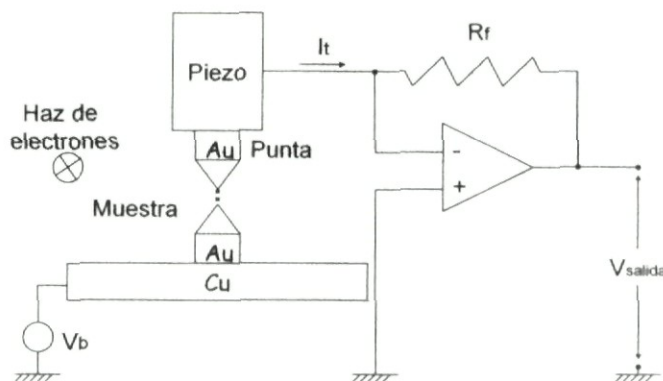


Fig. 1.16. Configuración de STM construida en la posición de muestra de un microscopio electrónico UHV. El haz de electrones entra desde la parte superior con una densidad de corriente típica de 100 A/cm^2 en el contacto entre la punta y el sustrato. [41].

La punta de oro podía ser desplazada en tres dimensiones gracias a un transductor piezoeléctrico. La punta fue sumergida en la isla de oro y retirada lentamente a velocidad constante. Fueron observados continuamente cambios estructurales durante la retracción de la punta, siendo grabadas imágenes a intervalos de 33 ms, y realizándose simultáneamente mediciones de conductancia.

La Fig. 1.17 muestra imágenes de microscopio electrónico de un puente de oro formado entre el sustrato y la punta durante la retracción de ésta.

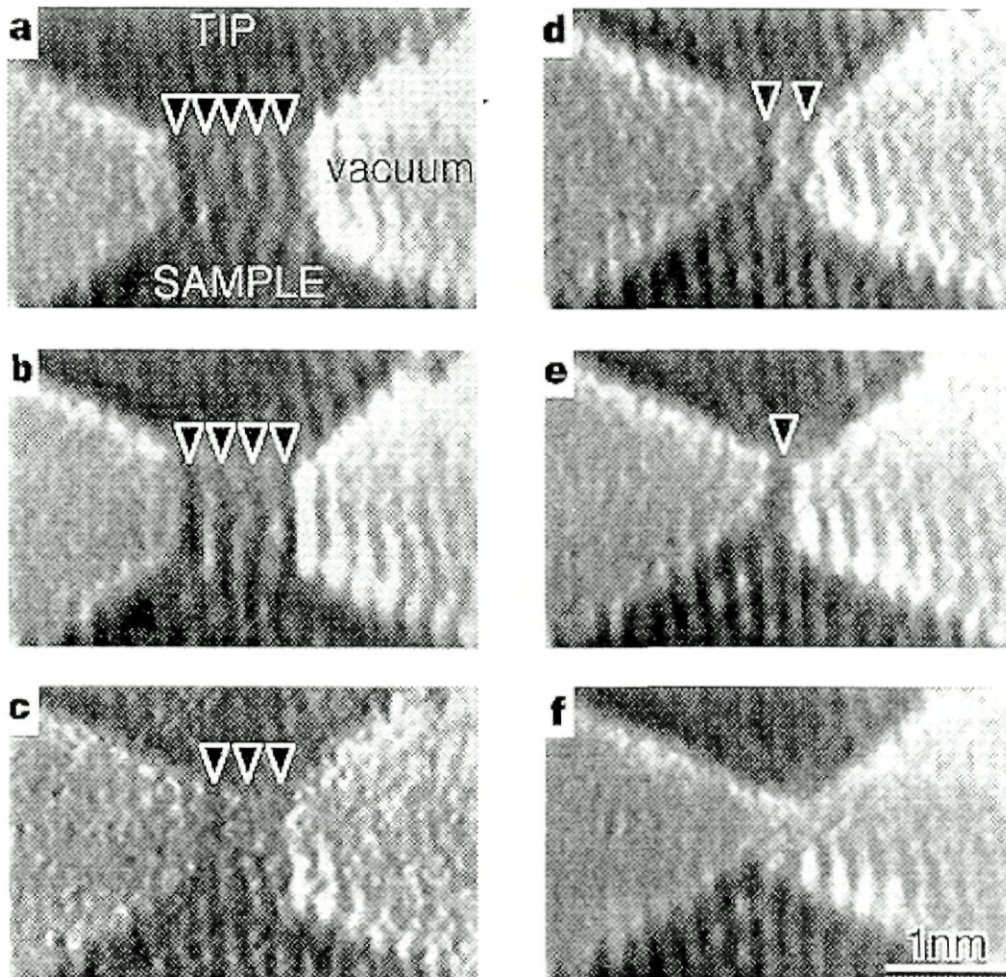


Fig. 1.17. Imágenes de microscopio electrónico de un contacto en el momento en que la punta es retirada. Un puente de oro formado entre la punta de oro (arriba) y el sustrato de oro (abajo), adelgazado desde **a)** hasta **e)**, y roto en **f)**, con tiempos de observación de 0, 0.47, 1.23, 1.33, 1.80 y 2.17 s, respectivamente. Las líneas negras señaladas por las flechas son hileras de átomos de oro. [41].

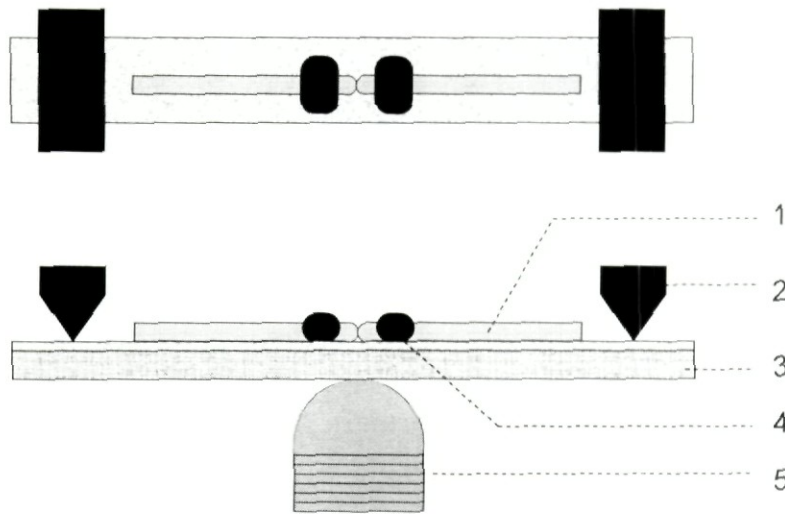


Fig. 1.18. Vista esquemática superior y lateral del montaje de una MCBJ, con el alambre muescado (1), dos contra soportes fijos (2), viga de flexión (3), gotas de adhesivo epoxy (4) y un elemento piezoeléctrico (5).

d) Ruptura de juntura por control mecánico

En 1985 Moreland y Ekin introdujeron juntas de ruptura (break junctions) para el estudio de las características del tunelamiento en semiconductores. Ellos emplearon un filamento de Nb-Sn montado en una “viga” de vidrio flexible la cual al romperse formaba una junta de tunelamiento entre los elementos de la ruptura [42]. Varias extensiones y modificaciones a este concepto han sido introducidas, inicialmente por Muller *et al* [43], quienes acuñaron el término *juntura de ruptura mecánicamente controlada* (MCBJ, siglas en inglés de *Mechanically Controllable Break Junction*). La técnica ha mostrado ser muy fructífera en el estudio de contactos metálicos de tamaño atómico.

El principio de la técnica es mostrado en la Fig. 1.18. La figura muestra una vista superior y una vista lateral del montaje de una MCBJ, donde el metal que será estudiado tiene la forma de alambre muescado, típicamente de 0.1mm de diámetro, el cual es fijado, sobre un sustrato elástico aislado, con dos gotas de adhesivo (epoxy) muy cerca de cada lado de la muesca. La muesca se realiza manualmente en el centro de la muestra. Para la mayoría de los metales, excepto los más duros, es posible rodar el alambre bajo la punta de un cuchillo quirúrgico y así obtener un diámetro en la muesca de alrededor de un tercio del diámetro original del alambre.

El sustrato es dispuesto en una configuración de doblado de tres puntos entre un elemento piezoeléctrico fijo y dos contra soportes fijos. Este arreglo es montado dentro de una cámara de vacío y enfriado a temperaturas del helio líquido. Entonces, el sustrato es doblado al mover el elemento piezoeléctrico usando un arreglo mecánico de engranes. La flexión causa que la superficie superior del sustrato se expanda y que el alambre se rompa en el punto donde se encuentra la muesca.

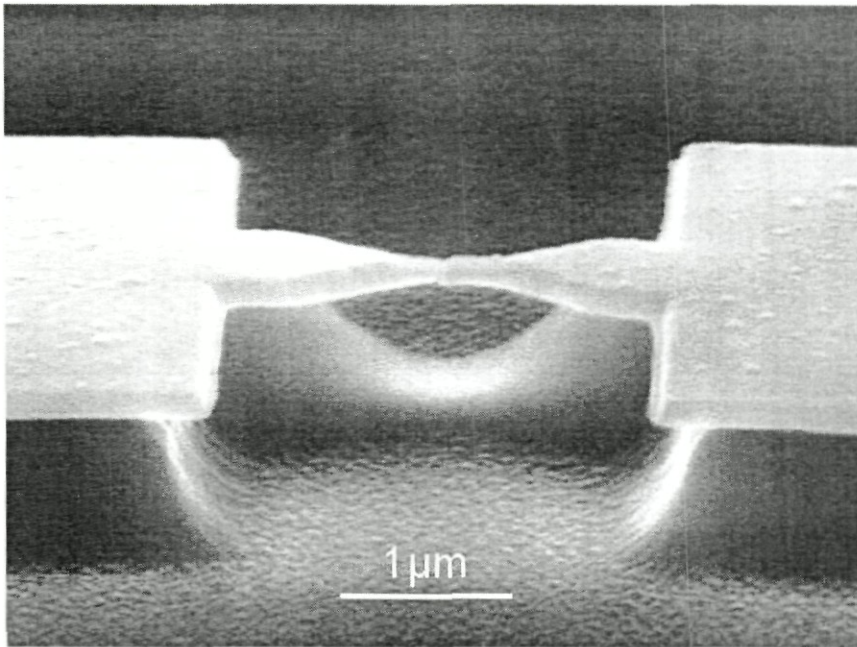


Fig. 1.19. Imagen por microscopía electrónica de un dispositivo MCBJ de oro fabricado mediante litografía. El puente está suspendido libremente sobre el sustrato, y anclado al sustrato solamente en las regiones más amplias de la derecha e izquierda. Al doblar el sustrato el alambre se rompe por la parte más angosta y un contacto consistente de un sólo átomo puede ser obtenido relajando la tensión aplicada al sustrato.

Al romperse el metal, dos superficies de fractura limpias son expuestas una a la otra. Tales superficies permanecen limpias debido a las condiciones de vacío y baja temperatura a las que están sometidas, pudiendo ser puestas en contacto si se relaja la fuerza sobre el sustrato elástico, en donde el elemento piezoeléctrico es usado para tener un control fino.

Aunado a una superficie limpia, una segunda ventaja del método es la estabilidad de los electrodos uno respecto al otro, además de la libre elección del material muestra.

El principio de la técnica de ruptura de junta puede ser refinado empleando técnicas de microfabricación para definir el puente metálico (Fig. 1.19). La ventaja es una mayor inmunidad a las vibraciones externas y la posibilidad de diseñar el entorno electrónico y electromagnético de la junta.

e) Contactos nanofabricados.

Han sido exploradas varias alternativas para producir contactos fijos por técnicas de nanofabricación. La primera de estas alternativas fue introducida por Ralls y Buhrman [44]. Ellos emplearon litografía de haz de electrones para fabricar un orificio de tamaño nanométrico en una película suspendida delgada de Si_3N_4 . Enseguida, una película metálica fue evaporada a ambos lados de la película de nitruro de silicio, llenando el orificio y formando un punto de contacto entre las capas metálicas de lados opuestos (Fig. 1.20).

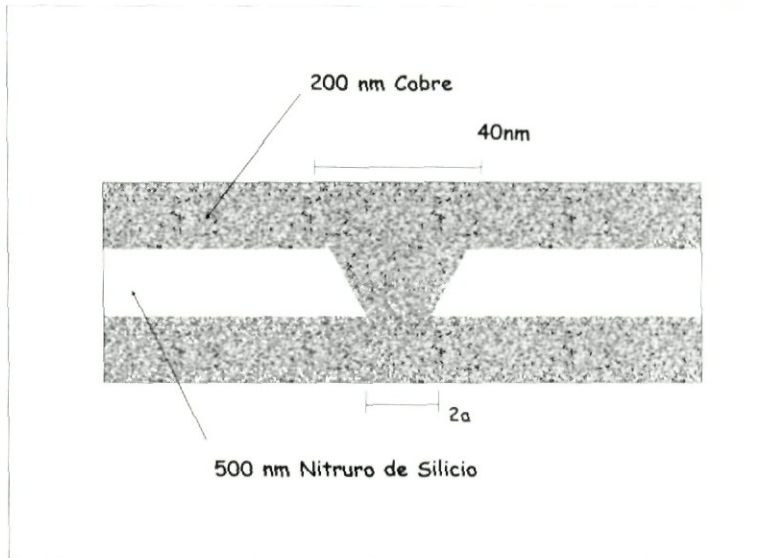


Fig. 1.20. Esquema (no a escala) del dispositivo empleado para la obtención de un contacto punto entre dos películas de cobre. El radio a de la constricción más pequeña es $\sim 5\text{nm}$. [44].

Estas estructuras son muy estables, pudiendo producirse incluso contactos de varios nanómetros de anchura.

Tales contactos son aún grandes en comparación con las dimensiones atómicas, por lo que son usados métodos que permiten una retroalimentación durante la fabricación, por ejemplo, monitoreando la resistencia del contacto. Existen apenas dos métodos: oxidación anódica de una película metálica y deposición desde una solución electrolítica.

Oxidación anódica

El método de *oxidación anódica* fue introducido por Snow et al. [45]. Una película de metal (Al o Ti, $\sim 10\text{ nm}$ de espesor) puede ser oxidada localmente desde la superficie hacia el sustrato. La oxidación es inducida por la corriente de la punta de un microscopio de fuerza atómica (AFM) operando bajo ligeras condiciones de humedad.

Al sondear la superficie de la película con la punta, lograron producir una constricción la cual fueron capaces de adelgazar hasta un solo átomo (Fig. 1.21). Cuando la resistencia del contacto es del orden de kilo-Ohms, dicha resistencia cambia de una manera escalonada, siendo los últimos escalones del orden del cuanto de conductancia ($2e^2/h$), lo cual es una indicación de que el contacto se ha reducido a un tamaño atómico. A temperatura ambiente, tales contactos reducen generalmente en una juntura túnel, dentro de una escala de tiempo de varios minutos. Sin embargo, algunos se estabilizan a un valor de conductancia cercano a $2e^2/h$ para períodos de un días o más. El adelgazamiento controlado del contacto también puede lograrse con la corriente a través del contacto dentro de la misma película [60].

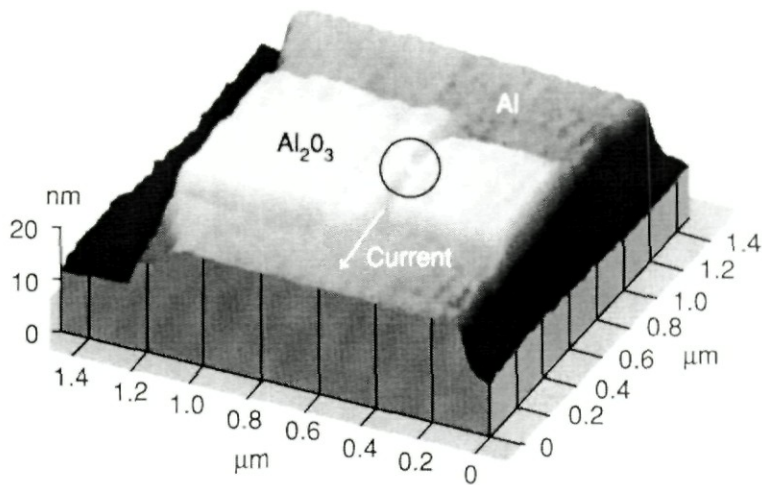


Fig. 1.21. Imagen por AFM del dispositivo para obtención de un contacto de punto. La imagen muestra el alambre de aluminio de una micra de ancho, la constricción de 40nm de ancho definida por el óxido, y el óxido que forma el punto de contacto (resaltado por el círculo). [45].

Deposición electroquímica

Un segundo método de nanofabricación controlada es la *deposición* (o disolución) en un electrolito. En este caso el control se logra mediante la retroalimentación de la polarización del voltaje aplicado a los electrodos inmersos en el electrolito. Li y Tao [46] adelgazaron un alambre de cobre por devastado electroquímico en una solución de sulfato de cobre. Se encontró que los contactos de tamaño atómico formados permanecían estables durante varias horas antes de que la conductancia cayera a cero (Fig. 1.22).

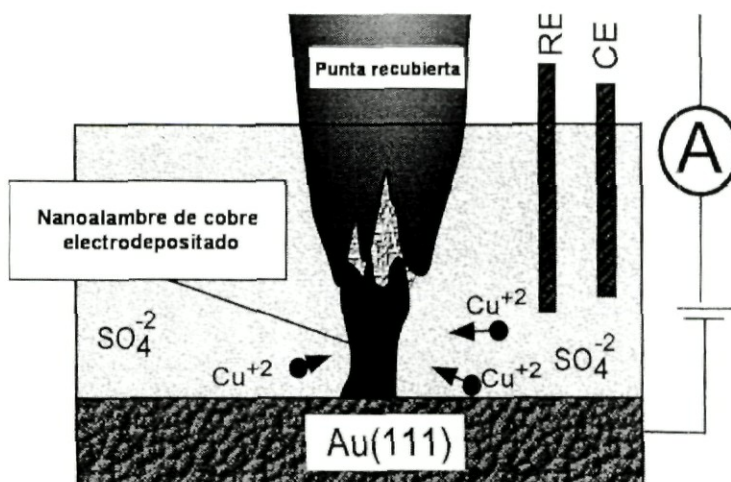


Fig. 1.22. Fabricación de un nanoalambre de cobre por deposición electroquímica en una solución de sulfato de cobre entre un electrodo de oro (111) y la punta de un microscopio de efecto túnel (STM). La punta es mantenida a una distancia fija respecto al electrodo. [46].

El ancho de la constricción puede ser variado reversiblemente disolviendo cobre o re-depositando cobre sobre el alambre. La velocidad de deposición (o disolución) puede ser controlada por el potencial electroquímico del alambre y, gracias a la retroalimentación, la resistencia del contacto puede ser mantenida en el valor deseado.

f) Relays

Se denominan *relays* (relevos) a todas las técnicas que llevan a dos conductores metálicos macroscópicos a tener contacto entre sí por medio de algún control mecánico.

Simulaciones por computadora han mostrado que con tan solo presionar la punta de un STM contra una muestra metálica es obtenido un nanoalambre [47]. En 1995, Costa-Krämer *et al.*, lograron observar la formación de nanoalambres en contactos macroscópicos haciendo vibrar dos alambres los cuales estaban en falso contacto (Fig. 1.23). “Si con tan solo poner en contacto una punta metálica y un metal, y enseguida presionarlos una contra el otro, es obtenido un nanoalambre, podría ser posible obtener nanoalambres al poner en contacto dos metales de *cualquier* tamaño y entonces separarlos, es decir, en las ultimas etapas del rompimiento de un contacto macroscópico, éste debería ser de dimensiones nanométricas”, argumentaba Costa-Krämer [48].

Para una operación más confiable y con el propósito de obtener una estadística suficiente sobre un gran número de ciclos de ruptura del contacto, han sido empleados relays comerciales o caseros, basados en una operación electromecánica controlada. Las técnicas de piezodesplazamiento han sido las más utilizadas [49-51].

Las técnicas *relay* son adecuadas para promediar las propiedades de conductancia de contactos de dimensiones atómicas sobre un gran número de ciclos de formación, a temperatura ambiente.

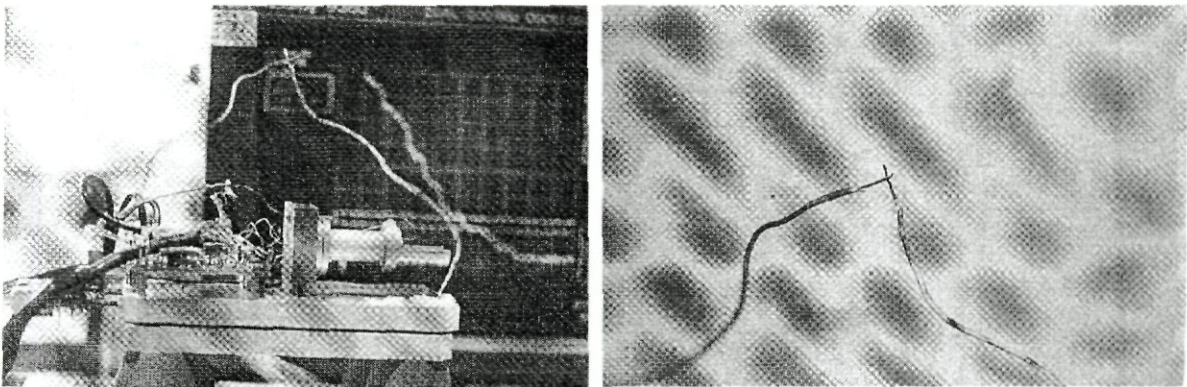


Fig. 1.23. Fotografías del arreglo experimental empleado por Costa-Krämer para la medición de la conductancia en nanoalambres.[48].

Capítulo 2: Experimental

2. A. Fabricación de nanocontactos

Como se discutió en la sección anterior, la fabricación de nanocontactos metálicos se apoya principalmente en la posibilidad de poner en contacto físico (eléctrico) dos materiales conductores. Existen varias formas de realizar esto, una de ellas es mediante accionadores mecánicos cuya función principal es la de mover con relativa precisión una pieza la cual porta uno de los electrodos. En este sentido, el presente trabajo incursiona en esta área con el diseño e implementación de un accionador mecánico novedoso. Éste consiste en el uso de elastómeros magnéticos que, bajo la acción de un campo magnético externo, es capaz de producir un movimiento oscilatorio de manera controlada.

A continuación se hará una breve descripción de estos materiales que sirve como base para presentar, posteriormente, el sistema propuesto.

2. A.1. Elastómeros magnéticos y sus propiedades

Los elastómeros magnéticos son materiales que pertenecen a una clase específica de materiales llamados inteligentes, ya que pueden responder a cambios (o estímulos) en (de) su entorno. Los elastómeros magnéticos son sólidos, tipo hule, cuya rigidez puede ser controlada bajo la acción de un campo magnético [52].

La combinación de polímeros con materiales (micro y nano) muestra a menudo nuevas y acentuadas propiedades en comparación con materiales tradicionales, lo cual les permite abrir posibilidades para nuevas aplicaciones tecnológicas. En esta clase de nuevos materiales figuran los elastómeros magnéticos. Estos materiales inteligentes representan un nuevo tipo de compuesto, que consiste en pequeñas partículas magnéticas (principalmente micro y nano) dispersas en una matriz polimérica altamente elástica. La naturaleza magnética de estas partículas acopla la forma del elastómero con el campo magnético externo. Dado que las partículas no pueden abandonar la matriz polimérica, todas las fuerzas que actúan sobre cada una de las partículas son transmitidas directamente a las cadenas que forman el polímero, lo cual resulta ya sea en movimiento (locomoción) o bien en deformación del material. La distorsión de la forma ocurre de manera instantánea, o bien desaparece abruptamente, cuando el campo externo es aplicado o removido, respectivamente. La combinación de propiedades magnéticas y elásticas lleva a la observación de notables efectos, exhibidos en respuesta a campos magnéticos. La aparición de la capacidad de cambiar de forma o tamaño, única en estos materiales, así como sus propiedades mecánicas, de manera reversible, tiene un interés inherente aunque sea únicamente por poseer una respuesta elástica gigante a la polarización magnética. Los efectos de deformación gigante, modulo elástico ajustable, deformación no homogénea y rápida respuesta a campos aplicados, abren nuevas oportunidades para el uso de estos materiales en nuevas aplicaciones.

La preparación de elastómeros magnéticos es similar a la de otras redes elastoméricas [53]. Una manera es la de precipitar partículas bien dispersadas en el polímero. La precipitación *in situ* puede ser hecha durante ó después de la reacción de entrelazado (*cross-linking*). Otros métodos consisten en la preparación y caracterización de partículas magnéticas coloidales fabricadas por separado, en donde la reacción de entrelazado se efectúa después de haber mezclado el polímero con las partículas. Una variante más, consiste en introducir imanes, previamente fabricados, en el polímero previo al curado. Al curar el elastómero, estos imanes están embebidos en el material.

Las características principales de los efectos de movimiento o deformación que presentará un elastómero magnético, dependen directamente de la respuesta de la parte magnética a la acción de un campo externo. Entre los diferentes tipos de materiales magnéticos que se pueden usar (y obtener con facilidad), figuran los materiales magnéticos duros (o imanes permanentes), los materiales magnéticos suaves y los superparamagnéticos.

Mientras que materiales magnéticos suaves embebidos en una matriz flexible (elastomérica) han mostrado poder servir para la fabricación de actuadores de gran fuerza, los materiales magnéticos duros que poseen una magnetización remanente elevada tienen las ventajas de que pueden alcanzar movimiento bi-direccional (jalar-empujar) bajo la acción de un campo magnético aplicado.

Es fácil argumentar de manera cualitativa, que los materiales magnéticos suaves y súper paramagnéticos llevan al mismo tipo de cambios o locomoción en un elastómero magnético. En particular, ninguno de estos imanes permite obtener un movimiento bi-direccional controlado.

Para entender esto, nos remitimos a las curvas de histéresis típicas de estos sistemas (Fig. 2.1). En el caso de los materiales superparamagnéticos, su respuesta característica a la acción de un campo aplicado es tal que su permeabilidad inicial es alta. Esto es, se requiere de campos pequeños para saturar el sistema. Por otra parte, al quitar el campo aplicado, el sistema vuelve al estado remanente, caracterizado por una remanencia nula, lo cual implica al mismo tiempo un campo coercitivo igual a cero.

Para los imanes suaves, se observa un comportamiento que se asemeja mucho, a primera vista, al de los materiales superparamagnéticos. Esto es, un imán suave posee una alta permeabilidad que se traduce a un campo de saturación bajo, una remanencia muy baja y un campo coercitivo bajo. En un imán suave ideal, se desea una remanencia y un campo coercitivo nulo así como un campo de saturación lo más bajo posible, de manera que la permeabilidad (*i.e.*, la pendiente del ascenso a la saturación) sea lo más alta posible. Se debe mencionar que, entre los materiales magnéticos suaves y superparamagnéticos existen diferencias en los valores de sus parámetros magnéticos característicos. Adicionalmente, el superparamagnetismo, a diferencia del ferromagnetismo en el bulto, aparece solamente en materiales ferromagnéticos cuyas dimensiones son reducidas al punto de que la energía térmica es superior a la energía interna del sistema.

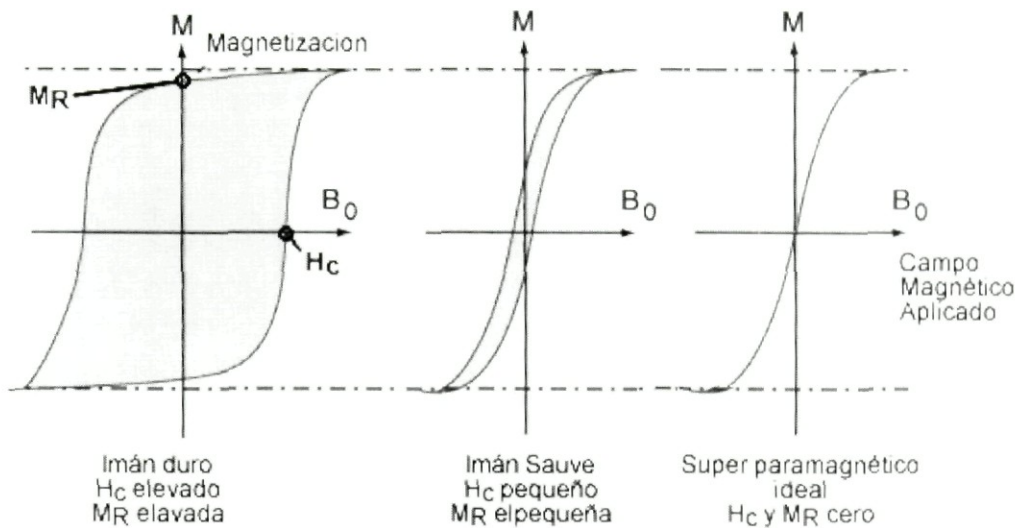


Fig. 2.1. Curvas de histéresis típicas para imanes permanentes (duros), suaves y superparamagnéticos.

Estos dos tipos de materiales se caracterizan por poseer una remanencia baja, la cual en adelante se considerará como idealmente nula. Considérese el ciclo de histéresis, al aplicar un campo magnético; el sistema alcanzará el estado de saturación en la dirección paralela al campo. Al bajar el campo del estado saturado a cero, el sistema vuelve a su estado remanente en el cual el momento magnético neto del sistema vale cero. Al invertir la dirección del campo aplicado, el sistema pasa del estado remanente al estado saturado en el cual el momento magnético es, nuevamente, paralelo al campo. En otras palabras, el momento magnético del material sigue la dirección del campo aplicado. Esta propiedad implica que el momento magnético del material y el campo magnético aplicado nunca presentan una configuración anti-paralela y por lo tanto, nunca existe una fuerza repulsiva entre el campo y el material. Esto se puede ver también de la siguiente manera, la energía de la interacción entre el momento magnético M del material y el campo aplicado H , está dada por el término de Zeemann, $-MH \cos \phi$. La torca asociada a esta energía es

$$\tau = -MH \sin \phi, \quad (2.1)$$

Por definición, M y H siempre tienen el mismo signo y además el ángulo siempre es menor que 90° , por lo cual la torca siempre tiene el mismo signo. Al considerar un elastómero magnético en el cual el material magnético es de este tipo, se concluye que la deformación, o bien el movimiento, siempre se hará en la dirección del campo aplicado, ya que la fuerza que ejerce el electroimán siempre es atractiva.

En el caso de los imanes permanentes ó duros, la situación es muy distinta. Como se ejemplifica en la Fig. 2.1, estos materiales se caracterizan por tener una magnetización remanente muy elevada (idealmente igual a uno) y un campo coercitivo, H_c , muy elevado. Esto se puede ver en el ciclo de histéresis, para lo cual consideramos únicamente medio

ciclo. Iniciando en el estado de saturación positivo, el sistema está saturado y el momento magnético es paralelo al campo. Al reducir el campo hasta cero, el momento magnético permanece en el estado de saturación positivo, lo cual se traduce por una remanencia igual a uno¹. Al invertir el sentido del campo aplicado, el sistema permanecerá en su estado de saturación positiva mientras que el valor del campo aplicado no exceda el valor del campo coercitivo del material. Una vez alcanzado este valor, el sistema pasará gradualmente a su estado de saturación negativo.

En el contexto del uso de elastómeros magnéticos y de sus propiedades magnéticas, la propiedad relevante es que un imán permanente conservará su estado de saturación mientras no se le aplique un campo antiparalelo cuyo valor sea superior al del campo coercitivo. En particular, considérese la región del ciclo de histéresis alrededor de cero y para campos aplicados cuyo valor máximo sea menor que el campo coercitivo. Si el sistema está saturado en la dirección positiva, al aplicar un campo positivo, el imán sentirá una fuerza de atracción. Por el contrario, al aplicar un campo negativo, el electroimán ejercerá una fuerza repulsiva sobre el sistema.

2. A.2. Elaboración del dispositivo

Se busca la implementación de un dispositivo mecánico para la realización de un contacto metálico puntual transitorio (nanocontacto) a temperatura ambiente. Tal dispositivo debe posibilitar la formación y ruptura de nanocontactos entre un alambre y una placa metálicos. Manteniendo la placa metálica fija, el contacto se forma cuando el alambre es acercado a ésta, y se rompe cuando el alambre es alejado. Por esta razón tal configuración es denominada *interruptor mecánico*.

El interruptor mecánico propuesto es accionado por la aplicación de un campo magnético. Esto es posible debido a que el interruptor utiliza un elastómero magnético como su principal componente.

a) Fabricación de elastómeros magnéticos

El elastómero que se utilizó es el polidimetilsiloxano (PDMS), fabricado por Dow Corning y comercializado como Sylgard 184. Este es un elastómero a dos componentes, un polímero base y un agente curante.

El procedimiento de preparación consiste en el pesado de los productos (a razón de 10:1 polímero base: agente de curado). Enseguida, los componentes son mezclados manualmente durante un tiempo de 4 a 5 minutos (Fig. 2.2). Durante el mezclado, se introducen burbujas de aire; con el fin de extraerlas, la mezcla es introducida en un desecador y bombeada durante 20 minutos.

¹ Esto es para un imán permanente ideal, en el caso no ideal, la remanencia es menor a uno, aunque para ser considerado "duro" su valor no debe ser inferior a 0.9. Estas desviaciones del valor ideal pueden ser por la aparición de dominios magnéticos o bien por una ligera rotación del momento magnético.

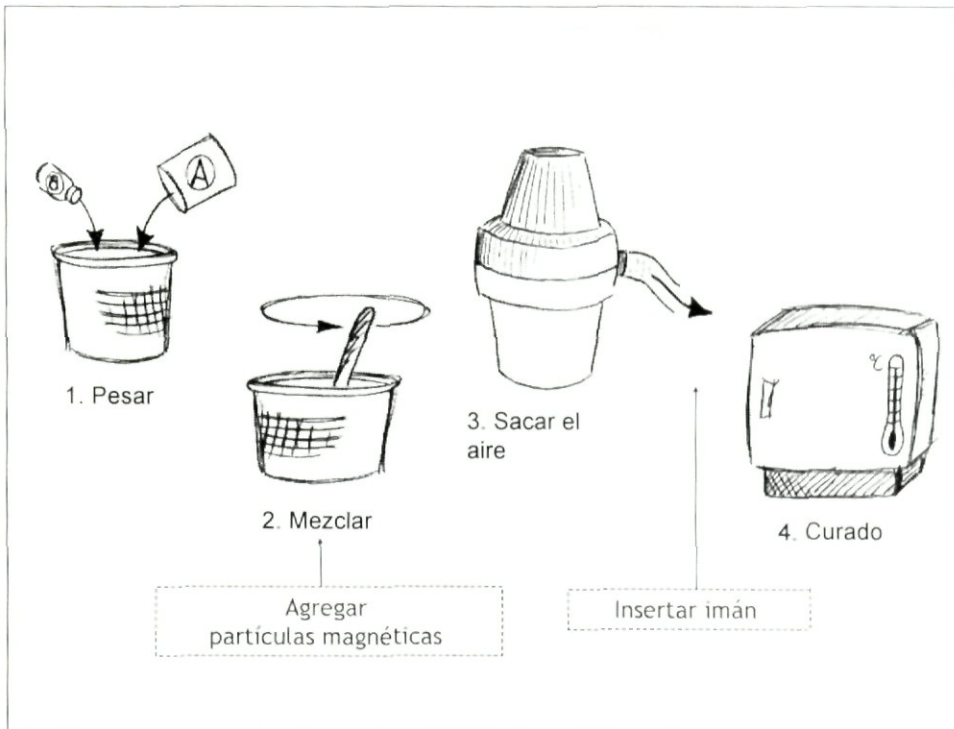


Fig. 2.2. Preparación del elastómero magnético

Una vez extraídas las burbujas, el elastómero es vertido en un molde. Según el tipo de molde usado para definir la forma del elastómero, éste se puede curar a temperatura ambiente (24 a 36 horas) o bien en el horno (20 min. a 100 °C, 4 horas a 50 °C).

La fabricación del elastómero magnético se hace incorporando partículas magnéticas o bien imanes permanentes al elastómero, según el tipo de respuesta que se desea obtener. En nuestro caso, se usaron dos tipos de materiales magnéticos: limadura de fierro (malla 50) e imanes permanentes de NdFeB.

b) Implementación

El experimento a realizar, requiere que el elastómero describa un movimiento de “vaivén”, para lo cual es necesario que se aplique un campo magnético variable. Tal campo debe variar de una manera continua y periódica. Además, se requiere que la amplitud máxima del campo sea configurable. Finalmente, se necesita poder controlar la velocidad del “vaivén”. En la práctica, todo lo anterior puede realizarse con la ayuda de un generador de funciones.

El generador de funciones tiene una salida máxima de 10 Vpp, lo cual es insuficiente para producir la corriente necesaria para alcanzar las amplitudes de campo magnético que se necesitan. Para resolver este problema, se inserta un amplificador entre la salida del generador de funciones y los cables del electroimán. El amplificador es alimentado con una fuente de 5A (Fig. 2.3).

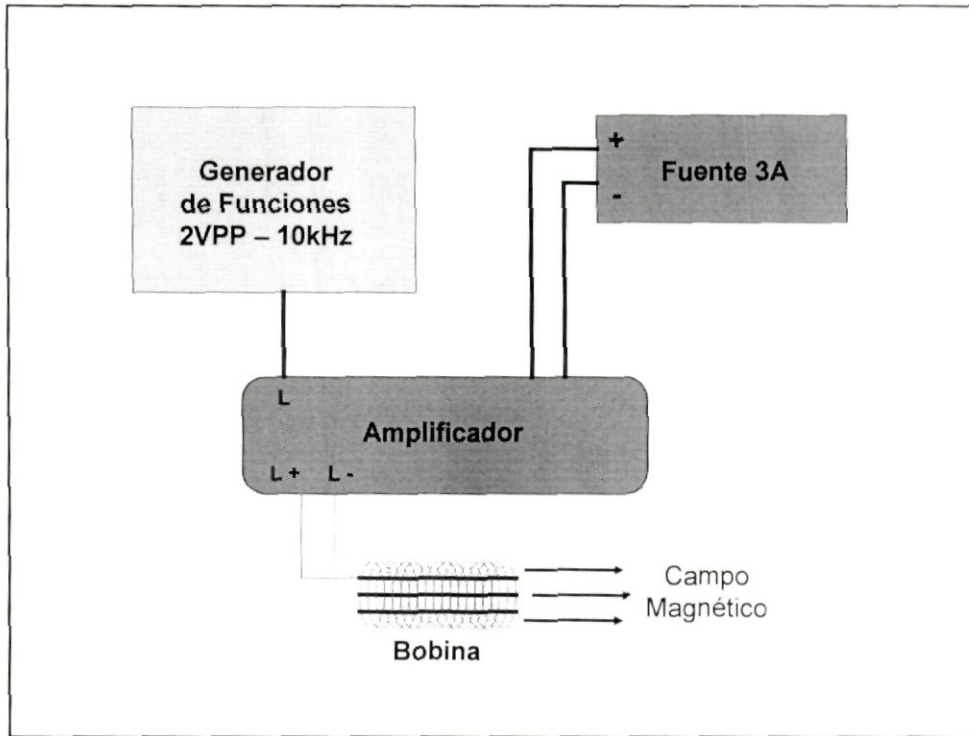


Fig. 2.3. Montaje para la obtención de un campo magnético variable controlable.

El montaje experimental se realizó usando un generador de funciones Agilent (modelo 33120A), el cual es capaz de proporcionar un voltaje pico a pico máximo de 10 Volts, y una frecuencia de operación de 100 μ Hz a 15 MHz. Esto permite controlar la amplitud del campo y la manera en que ésta cambia en función del tiempo (forma de la onda). Para los experimentos realizados en este trabajo, sólo se utilizaron variaciones sinusoidales y lineales. Como amplificador, se utilizó un amplificador de audio alimentado por una fuente DC de 12V y 5A.

El electroimán, se fabricó enrollando alambre de cobre esmaltado (alambre magneto) alrededor de una varilla de hierro dulce (varilla de construcción de 1 pulgada de diámetro), la cual sirve como núcleo.

La inducción B , o campo magnético, producida por el ensamble núcleo-bobina, está dada por la siguiente expresión:

$$B = 4\pi M_S + H, \quad (2.2)$$

donde $4\pi M_S$ es el campo magnético producido por el núcleo una vez saturado, y H es el campo magnético producido por la bobina. Éste último depende del número N de vueltas en la bobina, del valor de la corriente I que circula a través de ella, y de la longitud l de la bobina, esto es:

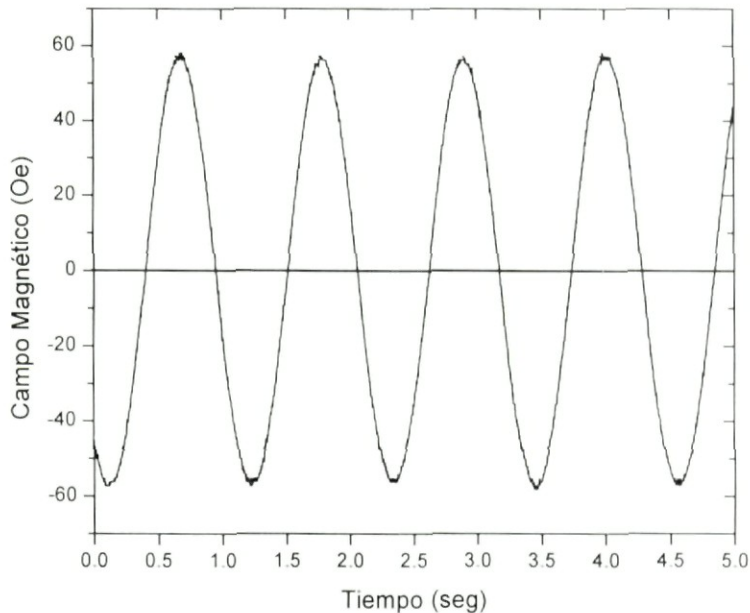


Fig. 2.4. Campo magnético generado por el electroimán medido con el Gaussímetro

$$H = 0.4\pi \frac{NI}{l} \quad (2.3)$$

Aún cuando el cálculo de estas cantidades es relativamente simple, se ha optado por seguir un enfoque más práctico. Esto es, ningún cálculo ha sido realizado y simplemente se fabricó la bobina y se verificó que el campo magnético producido por ésta era lo suficientemente grande para inducir la amplitud de movimiento deseado.

De las ecuaciones (2.2) y (2.3) se observa que, cualitativamente, a un número de vueltas dado en la bobina, así como a una longitud fija, la inducción total que actúa sobre el elastómero depende únicamente del voltaje proporcionado por el amplificador. Puesto que el voltaje tiene una dependencia sinusoidal en el tiempo, el campo magnético tendrá una dependencia sinusoidal en el tiempo (Fig. 2.4). En la práctica, se observó que el uso de campos magnéticos con valores máximos entre 50 y 150 Oe eran suficientes para obtener la amplitud de movimiento deseado.

En la práctica, el diseño que mejor se adaptó a las necesidades del experimento (amplitud de movimiento y campo magnético requerido) consistió en un cilindro de 5 mm de diámetro, en el cual se introdujo un pequeño imán duro (NdFeB), también de forma cilíndrica, de 3.2 mm de diámetro y 1 cm de longitud.

Para los experimentos realizados, la longitud total del elastómero magnético se mantuvo entre 3.5 y 5cm. En la Fig. 2.5 se muestran fotografías del elastómero con el imán permanente embebido, (a) en su estado de equilibrio (sin campo magnético aplicado), y (b) deformado bajo la acción de un campo magnético de 150 Oe.

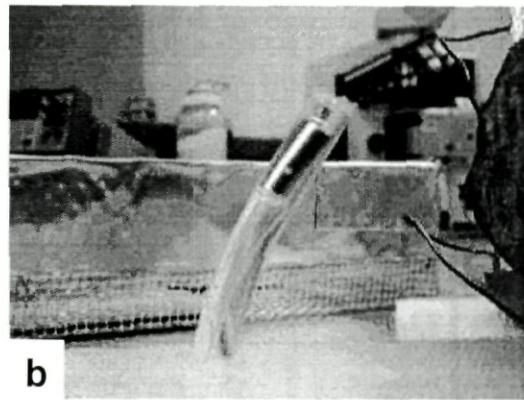
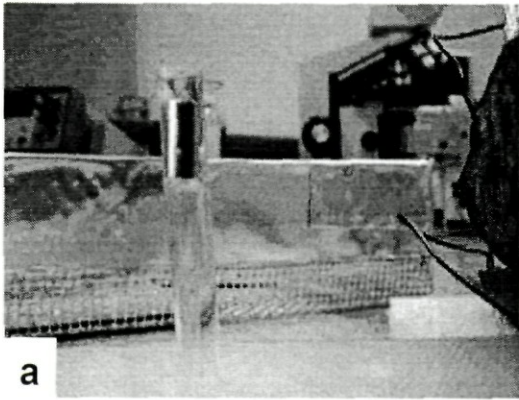


Fig. 2.5 Fotografías del elastómero magnético empleado para la formación del contacto entre una placa metálica y un alambre metálico. a) Elastómero en ausencia de campo. b) Elastómero bajo la acción de un campo magnético aplicado.

2. B. Sistema de medición eléctrica

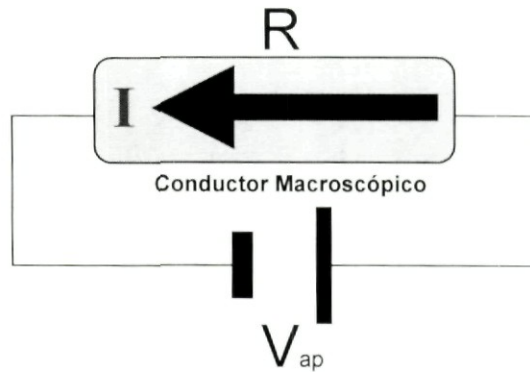


Fig. 2.5. Medición de la conductancia en un conductor macroscópico

2. B.1. Principio del método de medición

La ley de Ohm establece que la corriente I que pasa a través de un conductor es inversamente proporcional a la resistencia R cuando una diferencia de potencial V_{ap} constante es aplicada. O bien, que la corriente que pasa a través del conductor es proporcional a la conductancia G , cuando una diferencia de potencial constante es aplicada (Fig. 2.5).

$$I = \frac{V}{R} \quad \text{ó} \quad I = V G, \quad (2.4)$$

Donde la conductancia es el inverso de la resistencia.

De ésta manera, la conductancia del material puede calcularse si se conoce el voltaje aplicado al conductor y se mide la corriente que pasa a través de éste.

$$G = \frac{I}{V}. \quad (2.5)$$

Se busca medir la conductancia durante la formación o rompimiento de nanocontactos, esto es, medir el valor de la conductancia (G) en función del tiempo. Para esto, una diferencia de potencial (V_{ap}) constante, del orden de milivolts, es aplicada entre los extremos del contacto. La corriente (I) resultante es medida en función del tiempo.

En este caso, la conductancia es proporcional a la corriente:

$$G = \frac{I}{V_{ap}}, \quad eV_{ap} = \mu_1 - \mu_2, \text{ constante} \quad (2.6)$$

Para el primer escalón de conductancia se tiene, en términos de unidades de conductancia, que $G \sim 77.48 \mu\text{S}$, o bien, en términos de constantes fundamentales $G = 2e^2/h$. La resistencia correspondiente es $R = G_1^{-1} = 12.91 \text{ k}\Omega$.

De ésta manera, si un voltaje $V_{ap} \sim 25\text{mV}$ es aplicado, se espera que en el primer escalón de conductancia, la corriente sea $I \sim 1.94 \mu\text{A}$.

Los bajos valores de la corriente, correspondiente a los escalones más bajos de cuantización, hacen necesario el uso de un dispositivo amplificador. Por otro lado, convirtiendo la señal de corriente en una señal de voltaje es posible un seguimiento de alta frecuencia (tiempos muy cortos) mediante el uso de un osciloscopio.

Por lo tanto, se requiere de un sistema que realice las siguientes funciones:

- ✓ Suministro de una diferencia de potencial constante y estable del orden de milivolts.
- ✓ Amplificación de la corriente.
- ✓ Conversión de la señal de corriente a señal de voltaje.
- ✓ Medición y registro de la señal en función del tiempo.
- ✓ Monitoreo y ajuste del voltaje V_{ap} aplicado entre los extremos del nanocontacto.

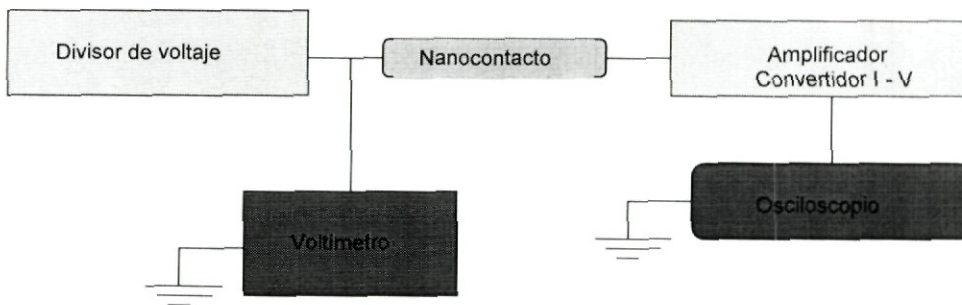


Fig. 2.6. Esquema del sistema de medición.

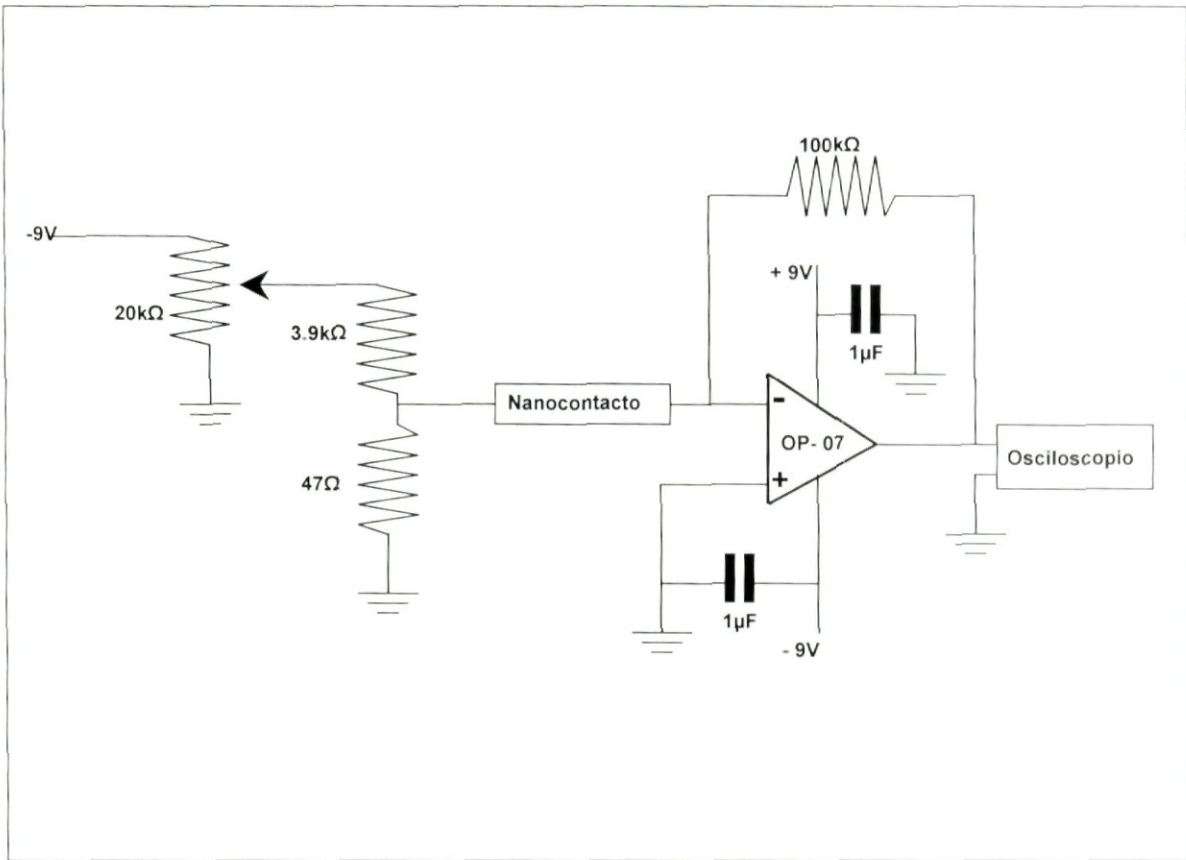


Fig. 2.7. Diagrama del circuito. Divisor de voltaje y amplificador-convertidor corriente-voltaje.

2. B.2. Sistema de medición

La parte electrónica consta de dos dispositivos principales: un divisor de voltaje y un amplificador-convertidor corriente-voltaje. (Fig. 2.7).

El divisor de voltaje está constituido por un potenciómetro de precisión ($20\text{ k}\Omega$, 1%, 0.25 W) y dos resistencias de precisión ($3.9\text{ k}\Omega$ y $47\ \Omega$, ambas de 1%, 0.25 W). El divisor es alimentado por una batería de 9 V. Al variar el valor de la resistencia del potenciómetro es posible obtener, para este sistema, un voltaje V_{ap} que va de los 0 mV a los 107 mV.

El amplificador-convertidor corriente-voltaje tiene como elemento principal un amplificador operacional (OP-07CP de Texas Instruments), el cual por sus especificaciones, introduce bajo ruido.

Un amplificador operacional es un amplificador diferencial con una ganancia muy alta, con una elevada impedancia de entrada y una impedancia de salida baja. Conectando la entrada inversora (-) del amplificador operacional con la salida, a través de una resistencia de retroalimentación, y conectando la entrada no inversora (+) a tierra, se obtiene una configuración llamada *amplificador-inversor* (Fig. 2.8).

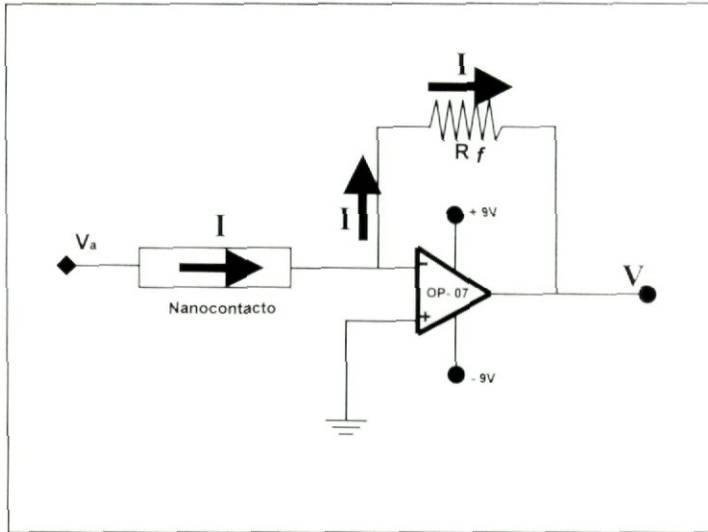


Fig. 2.8. Amplificador operacional en modo de amplificador inversor.

El voltaje entre las entradas (+) y (-) es casi igual a 0 V. Por lo tanto, la terminal de entrada (+) también está a 0 V, de modo que el potencial de tierra está en la entrada (-). Por esta razón se dice que la entrada (-) es una tierra *virtual*.

Toda la corriente de entrada I fluye por la resistencia R_f . La caída de voltaje a través de R_f es

$$V = I R_f. \quad (2.7)$$

En el dispositivo se tiene una resistencia de precisión (100 k Ω , 1%, 0.25 W) conectada en paralelo con la entrada negativa y la salida del amplificador operacional, lo cual permite convertir la señal de corriente a señal de voltaje a una razón de

$$V = 10^5 I. \quad (2.8)$$

El voltaje de salida es proporcional a la corriente que pasa a través del contacto, lo cual hace posible un seguimiento de la señal mediante el uso de un osciloscopio digital.

Por otro lado, en cada entrada de voltaje del amplificador operacional se introdujo un capacitor (1 μ F) para filtrar posibles señales de ruido. La fuente empleada para el amplificador fueron dos baterías de 9 V.

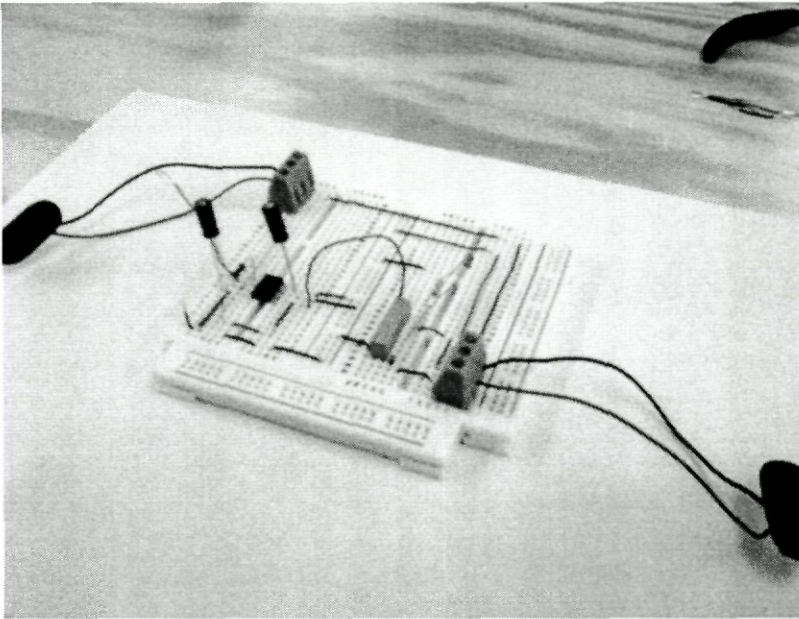


Fig. 2.9. Circuito en proto-board.

2. B.3. Construcción del sistema

El circuito, formado por el divisor de tensión y el amplificador-convertidor $I-V$, fue construido en una tarjeta (circuito impreso). Previo a la construcción de la tarjeta, se realizó el montaje del circuito en un proto-board (Fig. 2.9) y se comprobaron los voltajes de alimentación, tanto para el divisor de voltaje como para el amplificador, así como el rango de V_{ap} disponible.

El rango de V_{ap} disponible encontrado va de los 0 mV a los 107 mV. Por otro lado, como fuente de alimentación, tanto para el amplificador operacional como para el divisor de voltaje, fue utilizada una fuente bipolar (Fig. 2.10). Dicha fuente de alimentación contiene dos fuentes de corriente directa conectadas en serie en el mismo sentido. En este caso fueron empleadas dos baterías de 9 V cada una.

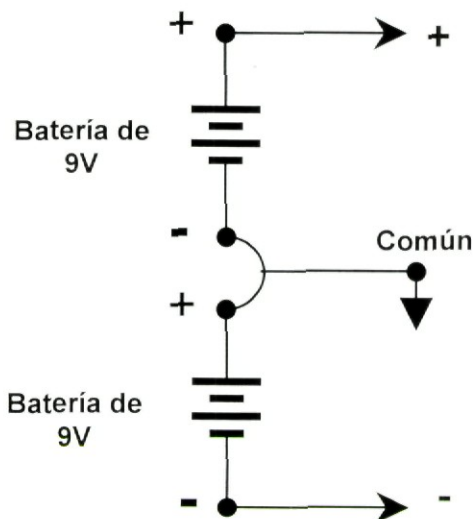


Fig. 2.10. Fuente de alimentación bipolar.

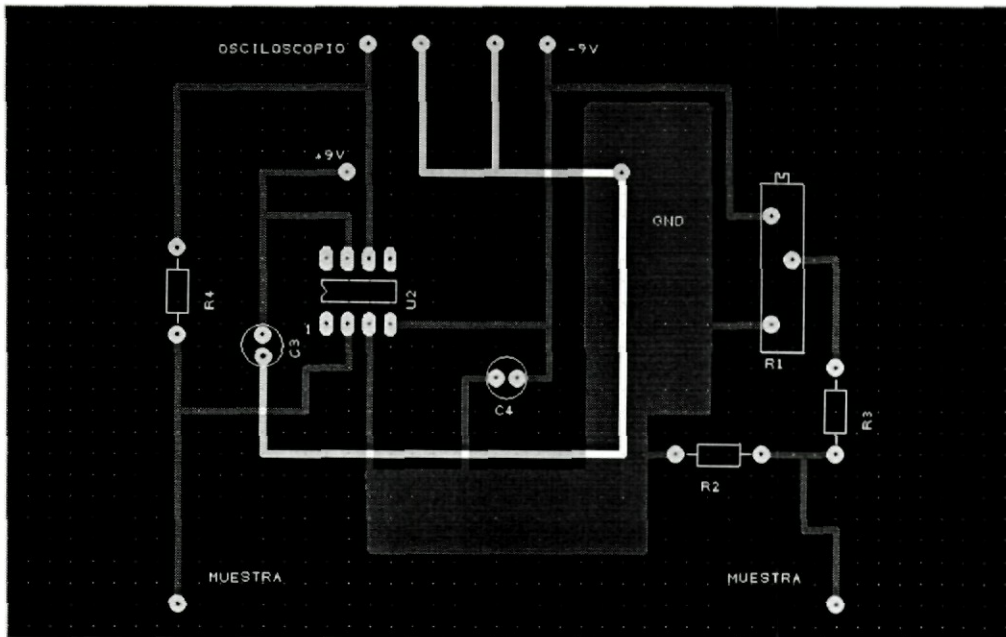


Fig.2.11. Diseño del circuito para tarjeta impresa.

Una vez comprobada la operación del circuito, se realizó el diseño para tarjeta impresa (Fig. 2.11). El diseño fue hecho con el software de electrónica Easy-PC versión 4.0.6.

La tarjeta impresa fue hecha en una placa fenólica de 10 cm x 10 cm. Los componentes del circuito se soldaron a la placa empleando soldadura 35/65 estaño/plomo (Fig. 2.12). Fue necesario el uso de una placa de doble lado para evitar el traslape de pistas.

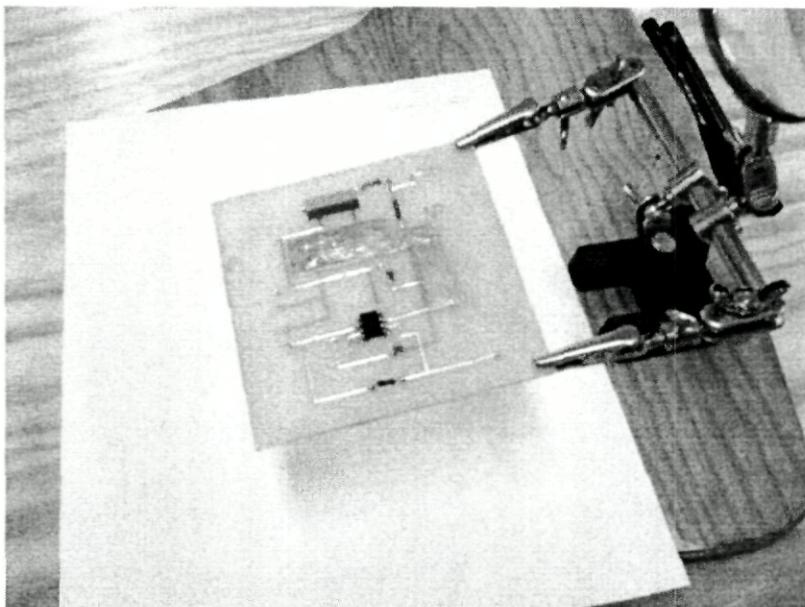


Fig.2.12. Circuito en tarjeta impresa. Vista superior.

2. B.4. Caracterización, optimización y especificaciones.

Si bien la alimentación del circuito electrónico puede ser proporcionada ya sea por una fuente comercial o por un eliminador de 9 V, el uso de estos dispositivos se evitó ya que la señal de 60 Hz de la toma de corriente puede ser una fuente considerable de ruido.

Para minimizar el ruido, la tarjeta fue colocada dentro de una caja de aluminio, la cual actúa como una jaula de Faraday, atenuando la interferencia electromagnética; las terminales del contacto fueron soldadas a las terminales del circuito; fue empleado cable coaxial (RG-58 de AMSA) con conectores BNC para llevar la señal del circuito al osciloscopio.

Para probar la operación del circuito se verificó la señal de voltaje registrada en el osciloscopio en función de la resistencia del contacto y del voltaje aplicado entre sus extremos.

Se utilizó una resistencia constante, con un valor de $12.91 \text{ k}\Omega$, de manera que simulara la resistencia equivalente en el primer salto de conductancia. El voltaje aplicado entre los extremos de la resistencia fue de $V_{\text{ap}} = 25.9 \text{ mV}$. La señal correspondiente para estos valores de voltaje y resistencia es de $V = 200.6 \text{ mV}$. La Fig. 2.13 muestra la señal registrada.

En la figura puede apreciarse una variación por encima y por debajo del valor esperado para el voltaje. Esta señal de ruido es del orden de los 5 mV. Tales mediciones se efectuaron manteniendo encendidas las lámparas del laboratorio.

La prueba se repitió manteniendo las lámparas apagadas, de manera que pudiera evitarse la interferencia generada por los balastos de éstas. La señal registrada en estas condiciones se grafica en la Fig. 2.14. En la figura puede verse que la señal de ruido se atenuó hasta un valor de 1 mV.

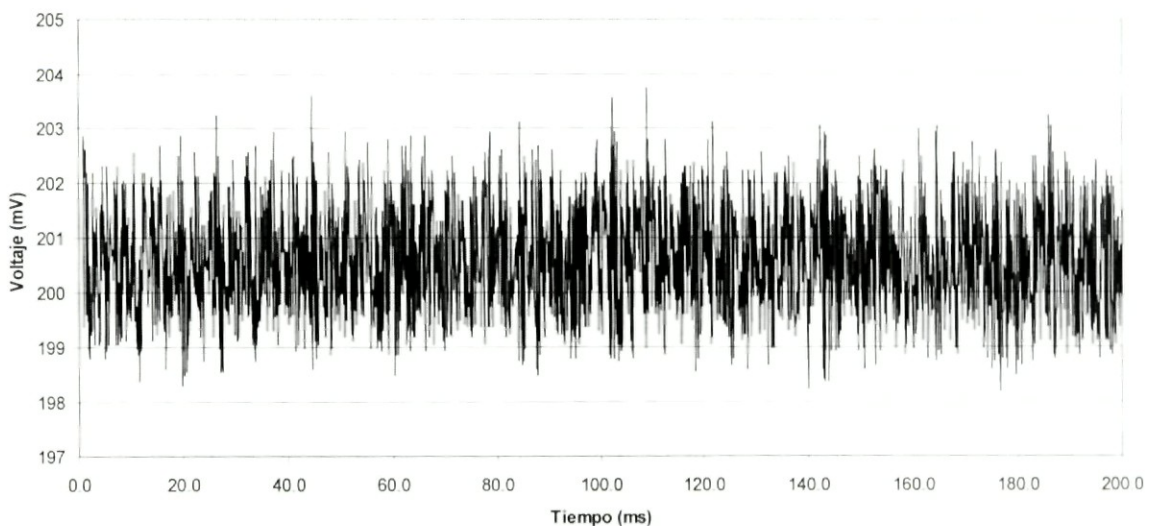


Figura 2.13. Prueba de ruido con lámpara encendida.

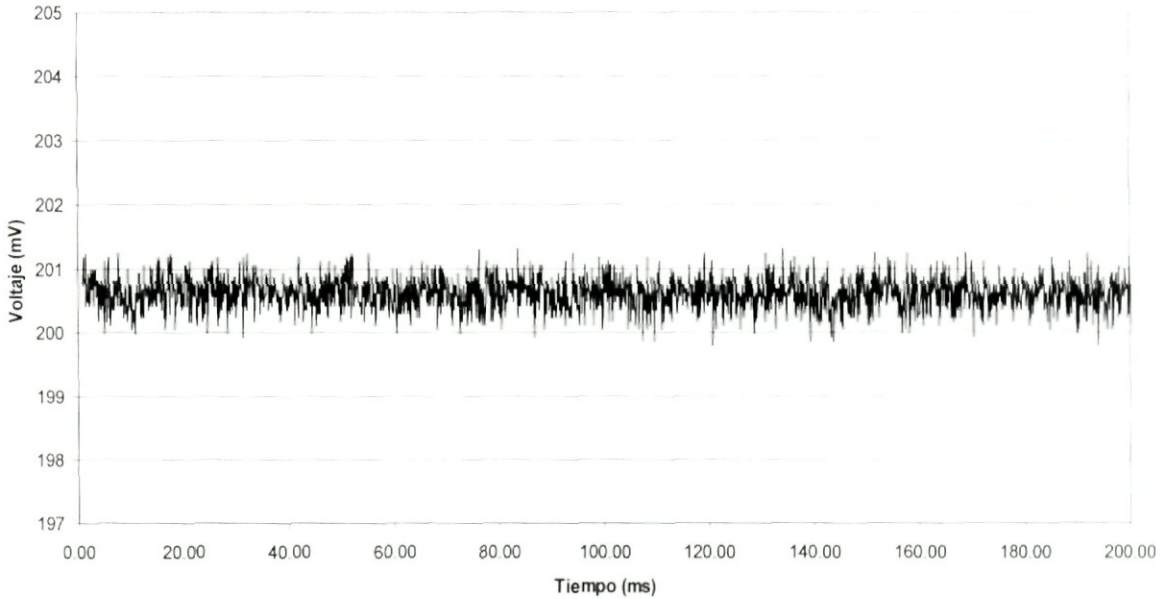


Figura 2.14. Prueba de ruido con lámpara apagada

Por otro lado, fue verificada la respuesta del circuito en función del voltaje aplicado V_{ap} y la resistencia R del contacto.

Recordando que, de la ecuación (2.6), la conductancia es

$$G = \frac{I}{V_{ap}},$$

y que el factor de conversión corriente-voltaje es $V = 10^5 I$, se tiene entonces que la conductancia viene dada por

$$G = 10^{-5} \frac{V}{V_{ap}}, \quad (2.9)$$

o en términos de la resistencia R del contacto

$$\frac{1}{R} = 10^{-5} \frac{V}{V_{ap}}. \quad (2.10)$$

De manera que, manteniendo la resistencia del contacto constante y variando el voltaje aplicado, es de esperarse que la señal de voltaje medida en el osciloscopio sea proporcional al voltaje aplicado. En la Fig. 2.15 aparecen relaciones V vs. V_{ap} para distintos valores de la resistencia.

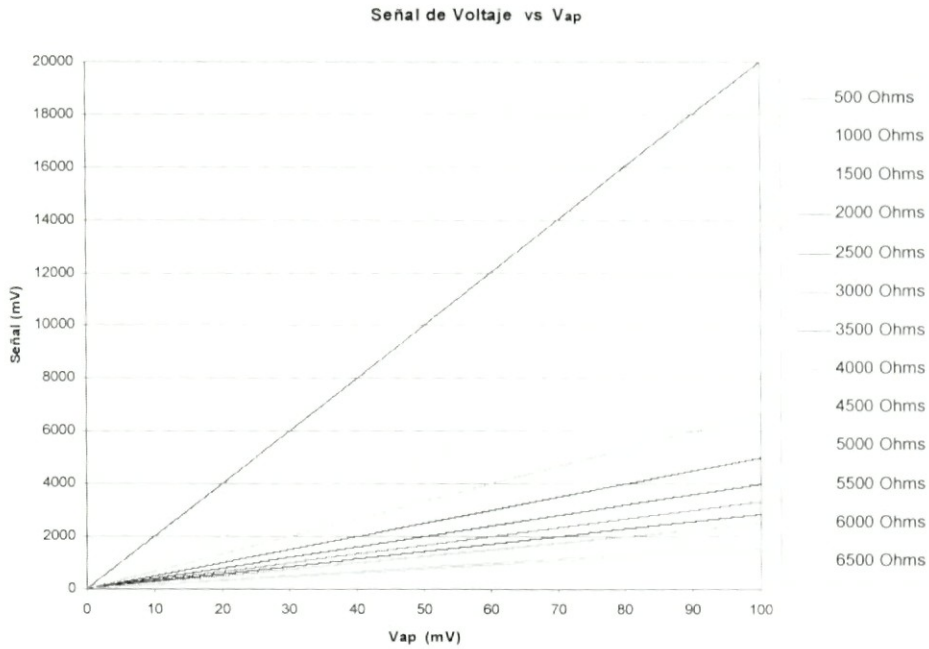


Figura 2.15. Señal de voltaje en función del voltaje aplicado para diferentes valores de resistencia.

Fue medida la señal de voltaje en función del voltaje aplicado, para una resistencia de $6.5 \text{ k}\Omega$ (Fig. 2.16) y para una resistencia de $1 \text{ k}\Omega$ (Fig. 2.17).

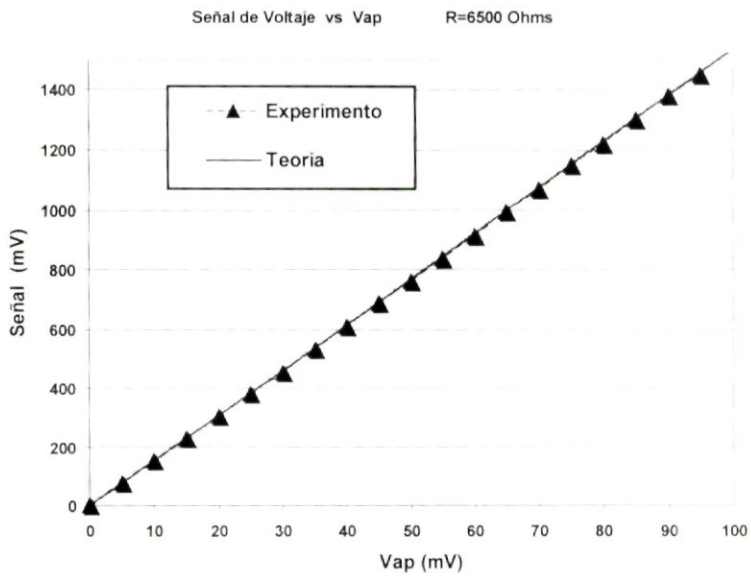


Figura 2.16. Señal medida en función del voltaje aplicado para una resistencia de $6.5 \text{ k}\Omega$

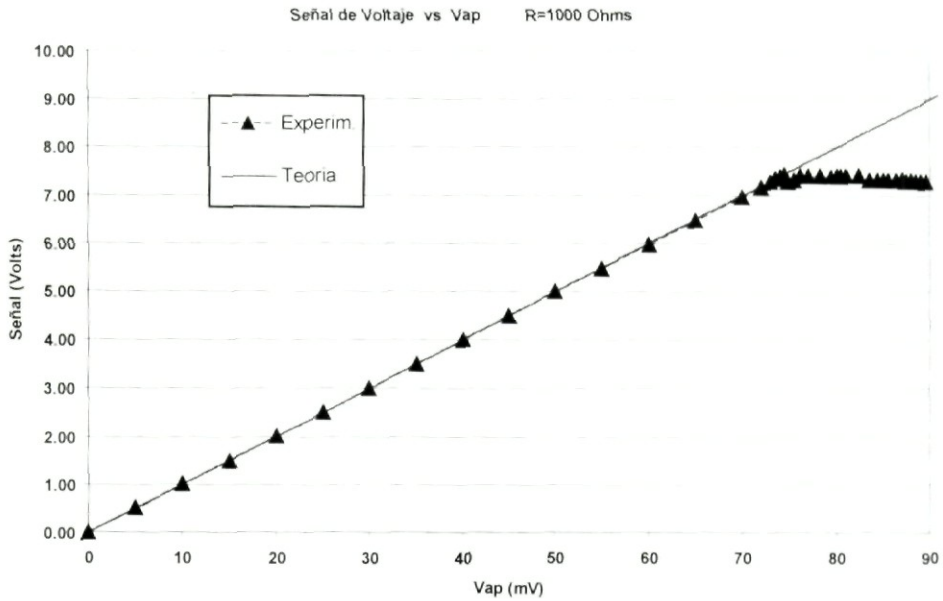


Figura 2.17. Señal medida en función del voltaje aplicado para una resistencia de $1k\Omega$

Se encontró que en el caso de la resistencia de $6.5k\Omega$, la señal medida se corresponde con el valor calculado. En el caso de la resistencia de $1k\Omega$, se observó que la señal de voltaje medida corresponde muy bien con el valor calculado en un rango de 0-75 mV. Cuando V_{ap} es del orden de los 75 mV la señal medida presenta una meseta alrededor de los 7.5 V.

Por otra parte, la señal de voltaje fue medida en función de la resistencia, manteniendo un voltaje aplicado constante de 19 mV. El resultado es comparado con el valor teórico (Fig. 2.18).

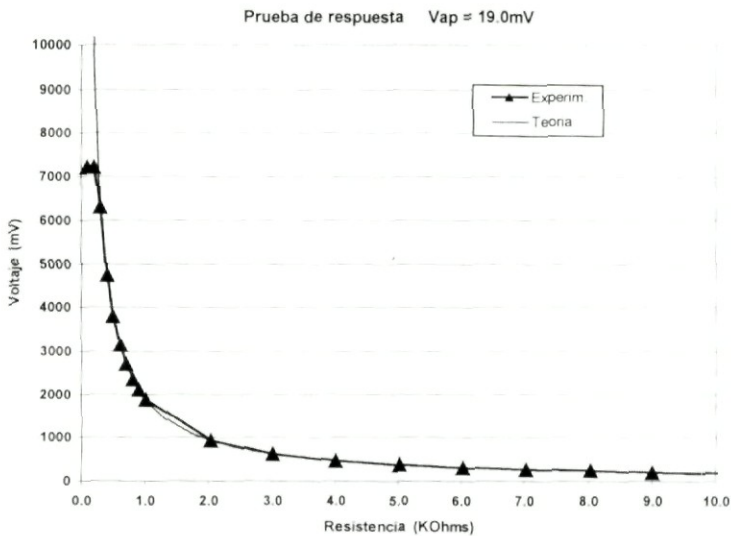


Figura 2.18. Señal medida en función de la resistencia con $V_{ap} = 19mV$.

En este caso, la señal de voltaje medida se corresponde muy bien con el valor teórico, para resistencias mayores de 100Ω . En el caso en que la resistencia es menor a 100Ω , se observa una meseta en la señal de voltaje alrededor de los 7.5 V.

Al comparar los resultados de respuesta del circuito, tanto en función del voltaje aplicado como en función de la resistencia del contacto, puede notarse que existe una señal de voltaje tope *intrínseca* al circuito alrededor de los 7.5 V.

De los resultados anteriores, se verifica una buena respuesta del circuito hasta una señal de salida de 7.5 V.

Este valor tiene dos orígenes. Por un lado, el amplificador operacional utilizado (OP-07) tiene un límite en cuanto a los niveles de voltaje en la terminal de salida; la salida en la terminal puede llegar hasta 1 V debajo de $+V$ y hasta 2 V por encima de $-V$ [54]. El límite superior de V_0 , se llama *voltaje de saturación positivo*, $+V_{sat}$, y el límite inferior *voltaje de saturación negativo*, $-V_{sat}$. Con una fuente de alimentación de ± 9 V, $+V_{sat} = 8$ V y $-V_{sat} = -7$ V. De manera que la máxima señal detectada por el osciloscopio será de 8 V. Por otro lado, las pilas fueron colocadas dentro de la jaula de Faraday desde días antes de comenzar las pruebas, de manera que es de esperarse que proporcionen un voltaje inferior a los 9 V. Para corroborar esto, las pilas que se emplearon en las primeras pruebas fueron remplazadas por pilas nuevas, encontrándose un voltaje tope de 8 V.

Por lo tanto, el circuito permite realizar mediciones de conductancia hasta un valor que viene dado, para un voltaje aplicado V_{ap} , por

$$G_{\max} = 10^{-5} \frac{8}{V_{ap}}. \quad (2.11)$$

Si V_{ap} es 25.9 mV entonces, el circuito permite registrar valores de conductancia de hasta 3.09 mS, o bien, en términos de constantes fundamentales, de $\sim 40 \ 2e^2 \ h$.

Capítulo 3: Resultados y discusión

3. A. Resumen de objetivos

Como objetivo principal se tiene la implementación de un dispositivo mecánico (*relay*) para la formación y ruptura del contacto eléctrico entre un alambre y una placa metálicos.

Un alambre metálico es inmerso en un “poste” de elastómero magnético (Fig. 3.1). El poste se fija frente a una placa metálica, a una distancia tal que un desplazamiento del orden de milímetros, respecto a la posición original del poste, permita que el alambre y la placa entren en contacto físico. Al aplicar un campo magnético sobre el elastómero, éste se mueve permitiendo la realización del contacto. Si el campo magnético aplicado tiene una variación periódica en el tiempo, el movimiento inducido en el elastómero será periódico y, por tanto, la formación y ruptura del contacto también lo serán.

Los metales empleados para la formación de nanocontactos fueron: para el alambre, cobre y latón; para la placa, una aleación de composición Al(99.00%), Si+Fe(0.75%), Cu(0.05%), Mn(0.05%), Ti(0.05%), Zn(0.1%). En lo sucesivo se hará referencia a dicha aleación sólo como aluminio.

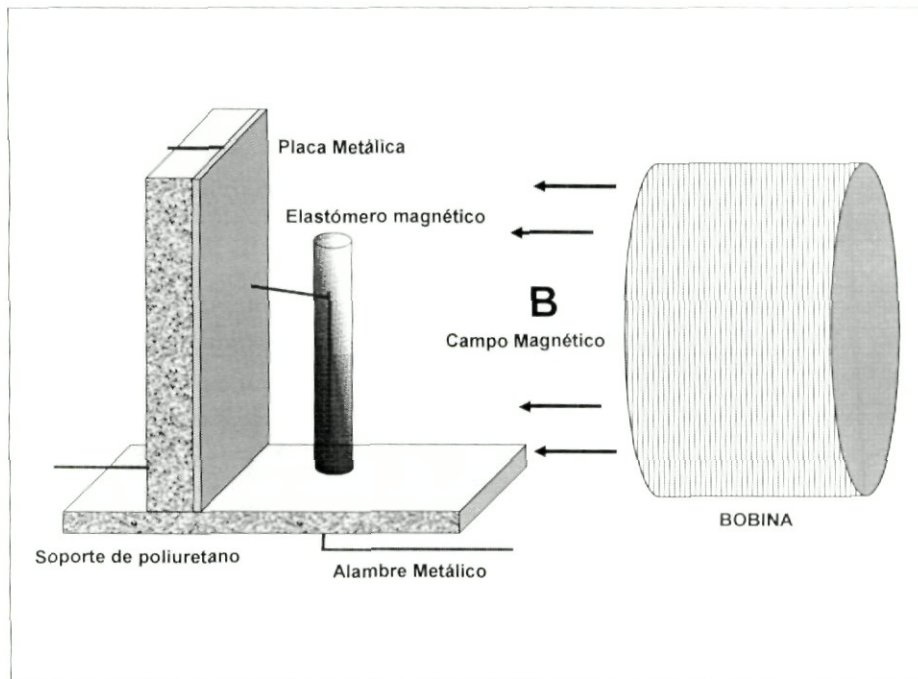


Fig. 3.1. Esquema del dispositivo del tipo *relay* para la formación de nanocontactos. Un alambre metálico es inmerso en elastómero magnético y colocado en la proximidad de una placa metálica. Al aplicar un campo magnético sobre el elastómero, este describirá un movimiento de vaivén.

Se busca medir la conductancia durante la formación o rompimiento de nanocontactos (*i.e.*, medir el valor de la conductancia G en función del tiempo).

Cualitativamente, cuando no hay contacto eléctrico la conductancia debe valer cero. Al formarse el contacto, G debe aumentar hasta un valor final que corresponde al inverso de la resistencia R del sistema. Por el contrario, cuando el contacto se rompe, la conductancia deberá disminuir desde un valor finito hasta cero.

Bajo este principio de funcionamiento, las variables y problemas a considerar son los siguientes:

a) *Estabilidad mecánica del sistema.* Debe mantenerse en todo momento la alineación entre el alambre y la placa metálica. Y, puesto que el alambre inmerso en el elastómero se encuentra en movimiento constante, el movimiento del alambre en el punto de contacto con el sistema de medición deber ser minimizado para evitar generación de ruido.

La estabilidad mecánica se logró fijando el poste de elastómero en un soporte horadado de poliuretano (Fig. 3.2). El diámetro del orificio de la base del soporte tiene el mismo valor que el diámetro del poste de elastómero, de manera que éste se ajusta a la base, evitando así la presencia de desplazamientos laterales y rotacionales.

Por otro lado, para evitar excesivo movimiento de la conexión del alambre con el circuito de medición, movimiento que puede ser una fuente de ruido, el alambre fue colocado a lo largo del eje del cilindro de elastómero. Se comprobó que otras configuraciones daban lugar a movimientos indeseables del cableado.

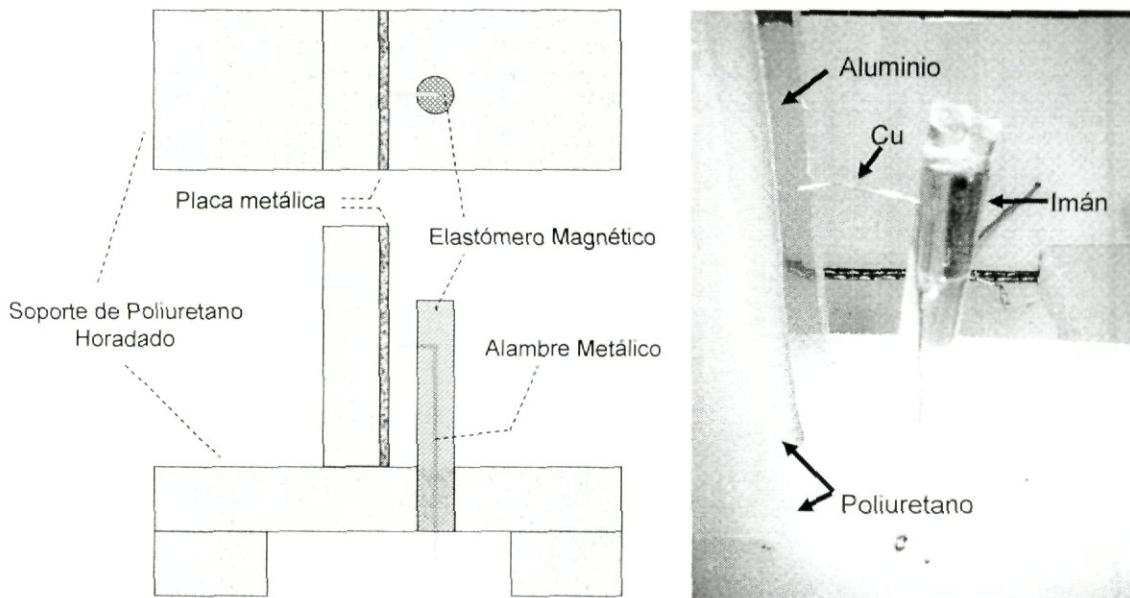


Fig. 3.2. Izquierda: Vista esquemática superior y lateral del soporte para placa metálica y poste de elastómero. Derecha: Fotografía del dispositivo.

b) Respuesta del elastómero magnético al campo magnético aplicado. Como se muestra en la Fig. 3.1, el elastómero estará fijado en un soporte y se espera que se deforme bajo la acción del campo magnético aplicado. La formación y ruptura del contacto eléctrico depende de que la amplitud de la deformación del elastómero sea suficiente para que los dos conductores (*i.e.*, la placa metálica y el alambre) se toquen. Por otro lado, la velocidad de formación y ruptura del contacto es otra variable importante, por lo cual se requiere también que el elastómero sea lo suficientemente sensible al campo aplicado de tal forma que la frecuencia se pueda controlar de manera precisa.

c) Campos magnéticos de baja intensidad. Otro punto a considerar es que, para lograr las amplitudes de movimiento necesarios para que se realice el contacto, no se requiera de campos magnéticos muy elevados, es decir, se desea obtener el desplazamiento mecánico necesario usando el campo magnético más débil que sea posible. Esto es por razones prácticas. Por una parte, campos elevados requieren de corrientes elevadas en la bobina, lo cual produce que el sistema (bobina, amplificador) se caliente, limitando así la duración del experimento. Por otra parte, algunas piezas, componentes y conectores del sistema, responden a campos magnéticos aplicados, lo cual produce movimiento o vibraciones mecánicas que se traducen en un mayor ruido en la medición eléctrica.

d) Orden de magnitud del voltaje aplicado. Las mediciones deben ser realizadas a voltajes aplicados bajos. Esto es por varias razones, una de ellas es el calentamiento y la posibilidad de dar lugar a la formación de un arco eléctrico entre los dos conductores. Adicionalmente, se sabe que mientras más bajo sea este potencial más cerca nos encontramos del régimen en el cual el modelo de Landauer es válido. Por otra parte, se debe trabajar a potenciales lo suficientemente elevados como para asegurar que los cambios de voltaje medido, asociados a cambios del cuanto de conductancia, sean lo suficientemente grandes como para eliminar la incertidumbre introducida por el ruido del sistema de medición.

3. B. Metodología

Con el objeto de validar el funcionamiento de nuestro dispositivo, la primera prueba que se llevo a cabo, consistió en la verificación del establecimiento del contacto eléctrico entre los electrodos.

Para esto, se dispuso todo el montaje y se procedió a accionar el elastómero magnético mediante la acción del electroimán. Cuando el campo magnético actúa sobre el elastómero, éste se desplaza a partir de su posición de equilibrio describiendo un movimiento de vaivén en el cual, durante medio ciclo, el alambre se acerca al electrodo fijo, formándose así el contacto.

Se aplica en todo momento una diferencia de potencial constante entre los extremos del contacto. La corriente resultante es amplificada y convertida a señal de voltaje. La señal de voltaje es registrada con un osciloscopio (*i.e.*, señal de voltaje en función del tiempo), almacenada en medio magnético, y convertida a archivo de datos.

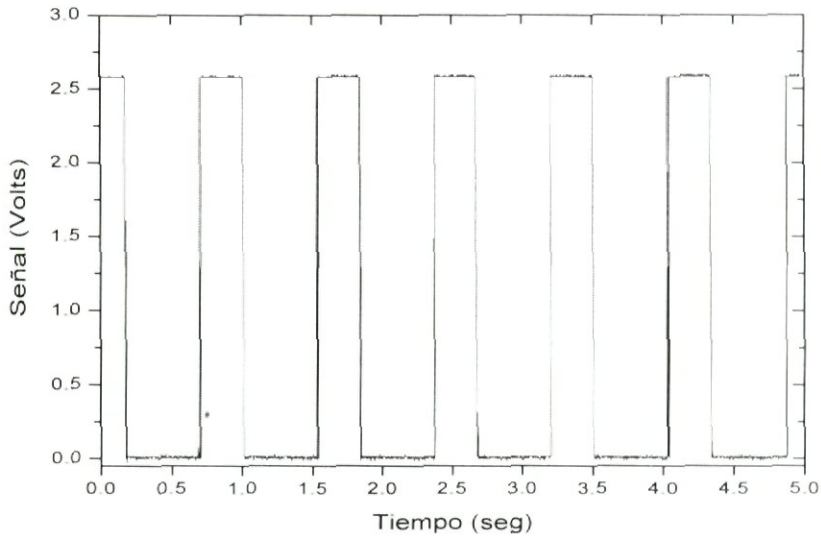


Figura 3.3. Señal de voltaje registrada en el osciloscopio en función del tiempo durante la formación y rompimiento del contacto. La frecuencia de formación del contacto es de 1.2 Hz.

Fue empleada en todo momento una señal sinusoidal en el generador de funciones, de manera que el campo magnético aplicado al elastómero presenta una variación sinusoidal dependiente del tiempo. Como punto de partida, con un voltaje aplicado arbitrario, se tomó una frecuencia de 1 Hz en el generador de funciones y un tiempo de barrido de 5 seg en el osciloscopio. En estas condiciones la señal de voltaje observada (Fig. 3.3) va de 0 Volts, correspondiente a la ausencia de contacto, a un valor finito, correspondiente al contacto macroscópico.

La Fig. 3.4, muestra la señal registrada en el osciloscopio durante un intervalo arbitrario de tiempo en el cual el contacto es formado y roto de manera periódica. Como se puede observar, el voltaje medido cambia de manera periódica y abrupta entre un voltaje de 0 V y un valor finito, de alrededor de 8 V^\dagger . Los resultados mostrados en la Fig. 3.4, muestran claramente que el sistema de accionamiento mecánico utilizado, permite llevar a cabo la formación del contacto eléctrico entre los electrodos.

Analizando las gráficas de la Fig. 3.4, pueden distinguirse cuatro etapas: ausencia de contacto (valor cero en el voltaje), contacto macroscópico (valor finito máximo en el voltaje) y dos etapas intermedias (valores de voltaje intermedios entre el valor máximo y cero), correspondientes a la formación y rompimiento del contacto.

[†] Como ya se indicó en el capítulo 2, el voltaje máximo que puede ser registrado viene dado por el voltaje de alimentación del amplificador operacional empleado en el circuito. El valor máximo del voltaje es de alrededor de 8Volts cuando la alimentación es de 9 V.

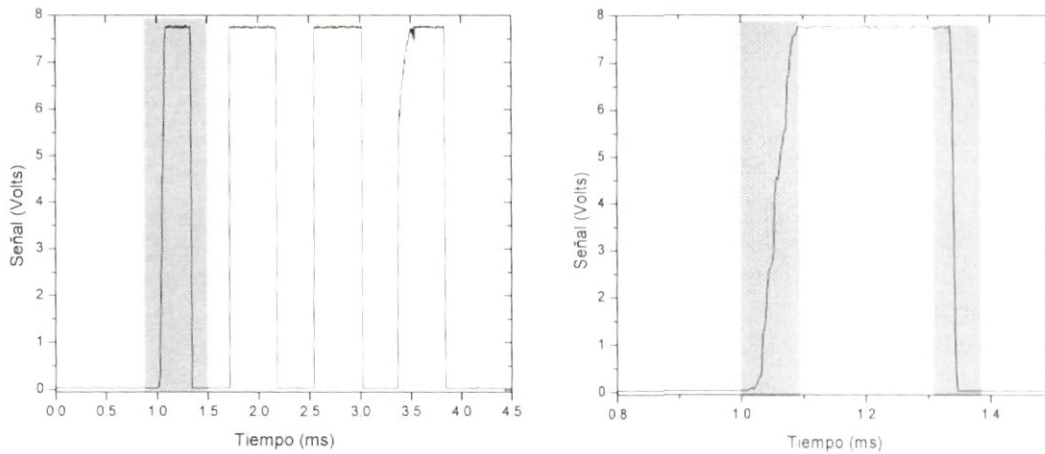


Fig.3.4. Izquierda: Formación y rompimiento periódicos del contacto. Derecha: Acercamiento mostrando las cuatro etapas de la evolución del contacto.

Pero más importante, en estos resultados ya se puede observar que tanto la formación como la ruptura del contacto no ocurren de manera instantánea sino que pasan por distintos “estados” (Fig. 3.5). Son estos estados intermedios los que nos interesan.

Vale la pena discutir en este contexto lo que corresponderá al marco físico que se considerará en lo siguiente.

En efecto, al acercar dos conductores microscópicos hasta que se toquen físicamente y lleguen a establecer el contacto eléctrico entre ellos, se debe observar que este contacto físico debe empezar en alguna parte.

De manera que la realización de nanocontactos, nanoconstricciones, o contactos atómicos, tendrá lugar en los primeros instantes de la formación del contacto, así como en los instantes finales de la ruptura del contacto. Esquemáticamente, esto corresponde a los valores bajos de voltaje en las trazas medidas durante la formación y ruptura del contacto, como se muestra en la Fig. 3.5.

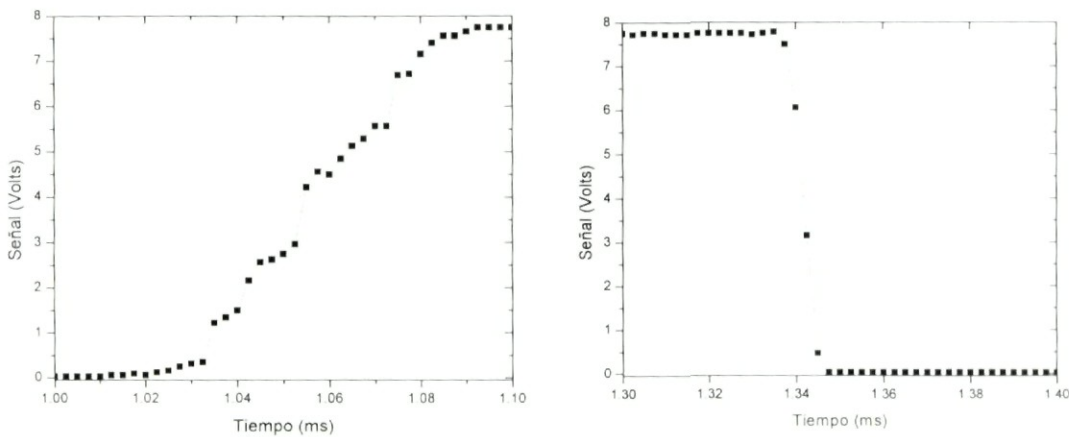


Fig.3.5. Izquierda: Formación del contacto. Derecha: Rompimiento del contacto.

3. C. Optimización del experimento y observación de las escaleras de conductancia

Una vez que se verificó que el sistema electromecánico permite la formación periódica del contacto, se procedió a encontrar las condiciones experimentales óptimas que permiten la observación de las escaleras de conductancia.

De lo discutido en la sección anterior, el problema que nos interesa es el de poder medir con suficiente resolución (temporal) los procesos que llevan a la formación y ruptura del contacto eléctrico. Esto implica poder determinar las condiciones experimentales adecuadas, las cuales se reducen, esencialmente, a encontrar las frecuencias de formación y ruptura de contacto adecuadas, así como el tiempo de barrido del osciloscopio.

En lo que se refiere a las frecuencias de formación y ruptura del contacto, éstas dependen directamente de la frecuencia con la cual el elastómero lleva al alambre a formar el contacto. Esto a su vez, depende de la intensidad y frecuencia del campo magnético que actúa sobre el elastómero. En la práctica se ha observado que la *intensidad* del campo magnético no juega un papel importante. Esto es debido a que la configuración inicial o de reposo, que define la distancia entre el alambre y la placa metálica, se ajusta manualmente y por lo general sólo se requiere que esta separación no sea grande. La restricción importante con respecto al uso del electroimán es su eventual calentamiento. De manera que se ha buscado trabajar con potencias pequeñas con el fin de evitar dicho calentamiento. En base a lo que se explicó en el Cap. 2 (sección del montaje del electroimán), la potencia depende únicamente del voltaje de operación de la bobina; voltaje controlado por el generador de funciones. Entonces el problema de determinar la intensidad adecuada del campo magnético es simplemente el de encontrar un rango de voltajes de alimentación que reduzcan o retarden tanto como sea posible el sobrecalentamiento del sistema. Una vez encontrado este rango de voltajes, la distancia inicial o de equilibrio entre el alambre y la placa metálica puede ser elegida empíricamente para un elastómero dado.

Con esto en mente, fueron realizadas una serie de mediciones cuyo objeto fue el de comparar la deflexión del elastómero en función del voltaje de alimentación de la bobina; lo cual se realizó usando elastómeros con diferentes características magnéticas. Sobre la base de estas mediciones, se observó que elastómeros con imanes permanentes lograban deflexiones lo suficientemente grandes con voltajes lo suficientemente bajos como para permitir la operación del imán, durante períodos de alrededor de una hora, sin constatar un calentamiento excesivo, ni del imán, ni del amplificador. Cabe señalar que, una vez determinado el rango de voltajes óptimos para minimizar el sobrecalentamiento, tanto el valor preciso del voltaje de alimentación como la distancia inicial entre los electrodos son parámetros secundarios y en la práctica fueron ajustados de manera empírica.

Otro parámetro importante es la frecuencia del campo magnético, ya que ésta define la frecuencia con la cual los electrodos (cable y placa metálica) entran en contacto. El contacto eléctrico será formado independientemente de la frecuencia que se utilice, sin embargo cualitativamente se puede esperar que entre más alta sea la frecuencia, más rápido ocurrirá el evento de formación (o ruptura) del contacto.

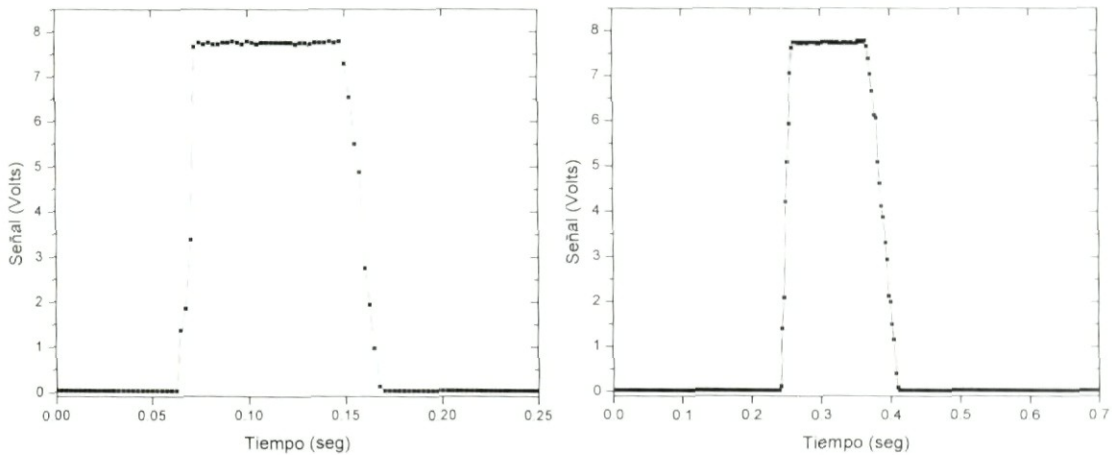


Fig.3.6. Señal registrada con el osciloscopio configurado en una escala de tiempo de 500 ms. La señal corresponde a una frecuencia de formación del contacto de 600 mHz (izquierda) y 500 mHz (derecha).

La limitante en este caso es la resolución temporal del sistema de adquisición de datos, en este caso, el osciloscopio. El problema consiste entonces en encontrar los reglajes de frecuencia del contacto y la ventana temporal del osciloscopio. Esto es, se desea encontrar las combinaciones adecuadas que permitan la observación de un evento (formación o ruptura del contacto) cuya duración sea del mismo orden que la ventana temporal del osciloscopio. En la Fig. 3.6 se muestran las trazas de voltaje contra tiempo medidas en el osciloscopio para dos diferentes frecuencias de formación del contacto, utilizando en ambos casos una escala de tiempo de 500 ms. Como se puede apreciar, para estos valores particulares, la señal medida no necesariamente muestra una variación escalonada del voltaje. Sin embargo, en estas curvas se puede notar que el ascenso y descenso correspondientes a la formación y ruptura del contacto está formado por tramos que presentan pendientes distintas, lo cual apunta en la dirección deseada.

Por otra parte, las mediciones realizadas usando bajas frecuencias muestran que para las constantes de tiempo consideradas para el osciloscopio, las trazas de voltaje no contienen un número suficiente de puntos (Fig. 3.7).

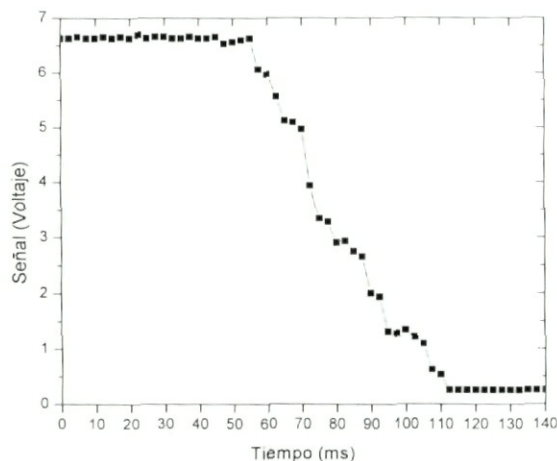


Fig.3.7. Señal registrada con el osciloscopio configurado en una escala de tiempo de 500 ms. La señal corresponde a una frecuencia de formación del contacto de 61 mHz.

Lo anterior, puede resultar en trazas de voltaje que no presenten de manera clara y convincente las escaleras de conductancia. O bien, en algunos casos se alcanzan a apreciar saltos abruptos de voltaje, pero con un número insuficiente de puntos como para poder hacer una estimación a partir de ellas. Por lo cual los tiempos de barrido, o constante de tiempo, del osciloscopio fueron reducidos.

En base a lo discutido, se encontró que las condiciones adecuadas para la observación de un comportamiento escalonado de la señal corresponden a tiempos de barrido del orden de los milisegundos y, por otro lado, a frecuencias de formación del contacto (frecuencia de señal del generador de funciones) inferiores a 1 Hz. En particular, tiempos de barrido de 2 ms y 5 ms resultaron empíricamente los más adecuados.

La Fig. 3.8 muestra cuatro gráficas correspondientes a eventos de formación del contacto. Las frecuencias de formación de contacto son de 60 mHz (gráfica I), 500 mHz (gráfica II), y 600 mHz (gráficas III y IV), obtenidas en una escala de tiempo de 2 ms. En las cuatro gráficas puede apreciarse un comportamiento escalonado de la señal en función del tiempo.

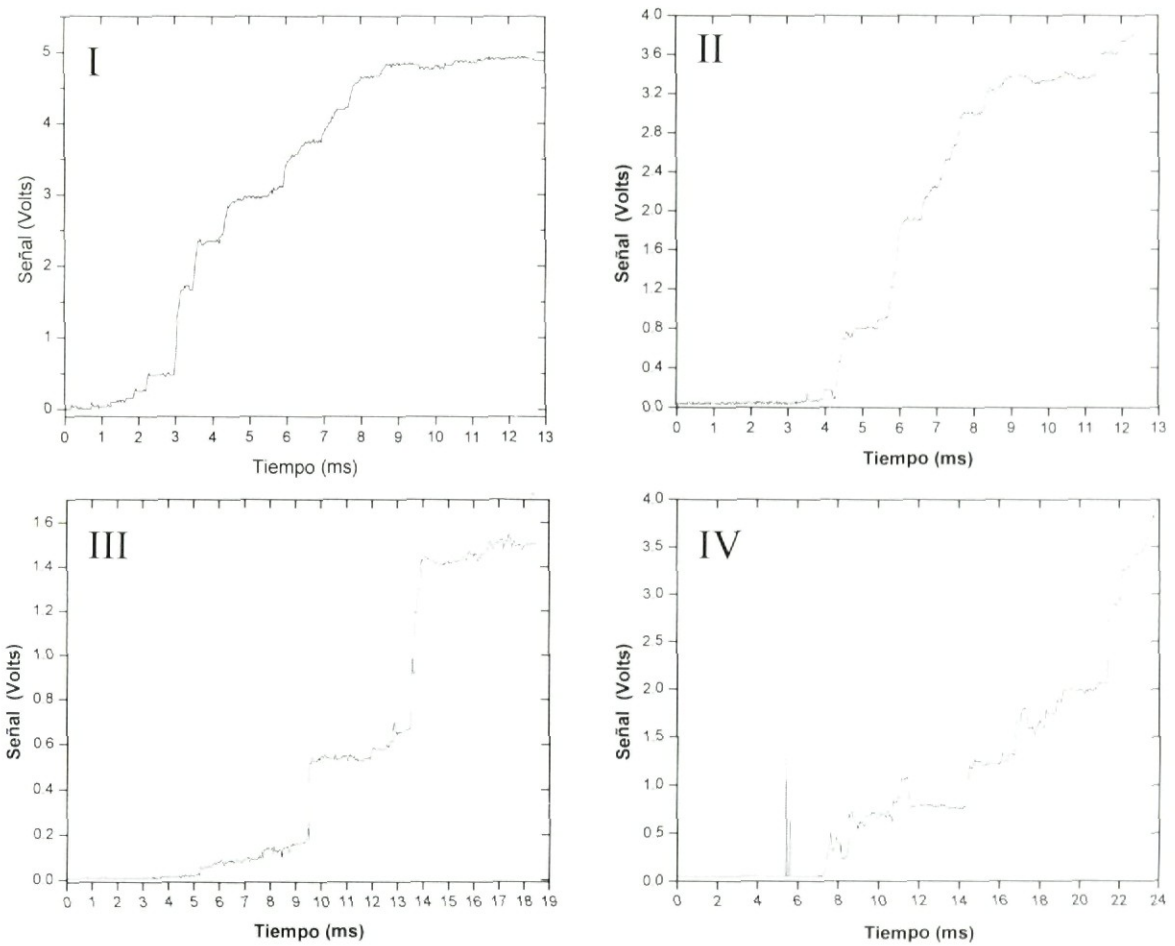


Fig. 3.8. Evolución de la señal de voltaje durante la formación del nanocontacto. Las gráficas I, II, III y IV corresponden a cuatro diferentes eventos.

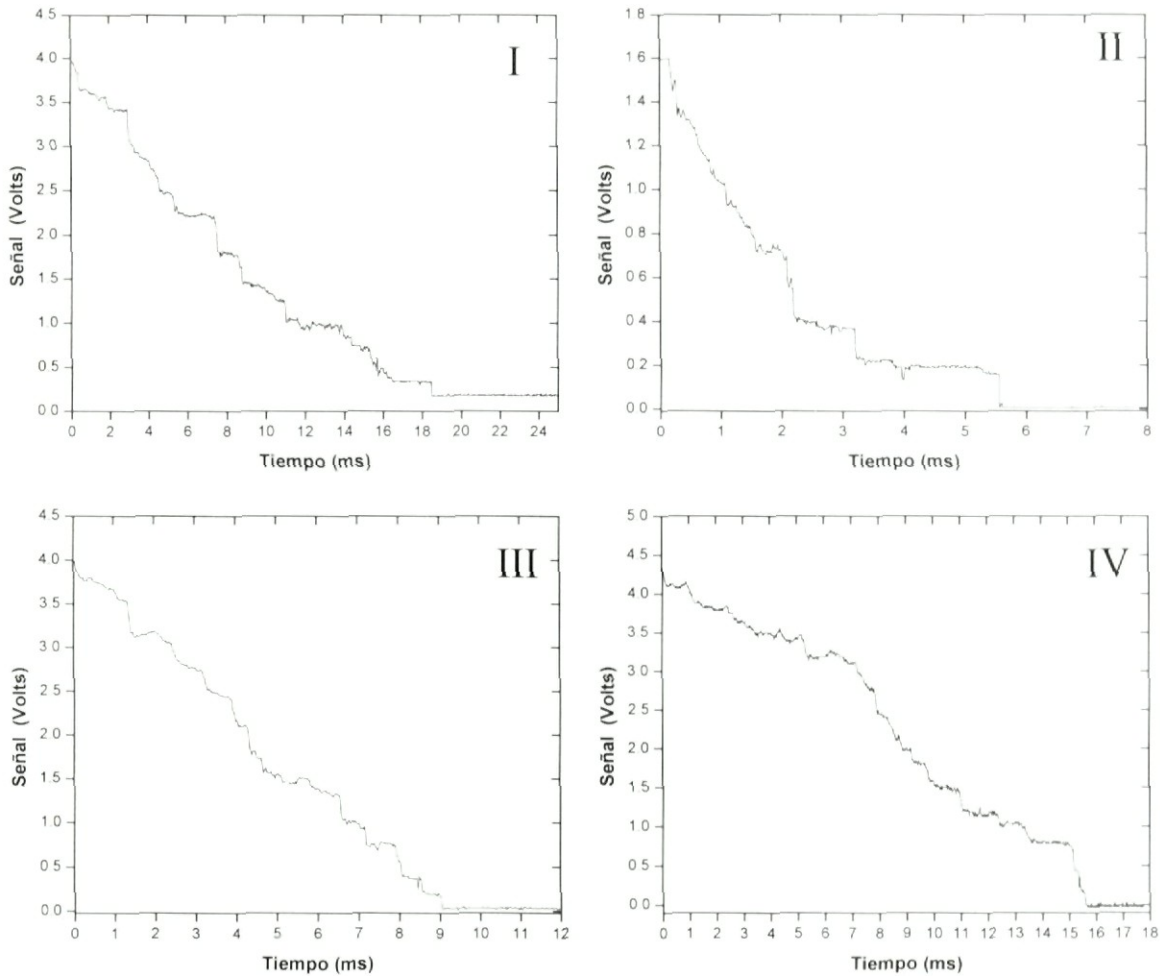


Fig. 3.9. Evolución de la señal de voltaje durante el rompimiento del nanocontacto. Las gráficas I, II, III y IV corresponden a cuatro diferentes eventos.

La Fig. 3.9 muestra cuatro gráficas correspondientes a eventos de ruptura del contacto. Las frecuencias de formación de contacto son de 230 mHz (gráfica I), 600 mHz (gráfica II), 170 mHz (gráfica III) y 61 mHz (gráfica IV), obtenidas en una escala de tiempo de 2 ms. En las cuatro gráficas puede apreciarse un comportamiento escalonado de la señal en función del tiempo.

Como lo muestran las Figs. 3.8 y 3.9, las condiciones experimentales que se han adoptado permiten la observación del comportamiento escalonado del voltaje. Estos resultados son la evidencia experimental de que se están observando contactos eléctricos formados por pocos átomos.

Un parámetro importante para realización del experimento es el voltaje aplicado V_{ap} entre los electrodos macroscópicos. Por una parte, éste definirá el incremento de voltaje medido ΔV correspondiente a un salto equivalente al cuanto de conductancia. Este último es proporcional al voltaje aplicado (Ec. 2.8), de manera que para voltajes aplicados pequeños, los cambios en el voltaje medido serán pequeños, y viceversa. Desde un punto de

vista práctico, la selección de V_{ap} debe ser tal que nos proporcione el mejor compromiso entre la incertidumbre introducida por el ruido de fondo del sistema de medición y al mismo tiempo una clara identificación de los saltos de conductancia. Existen también razones de fondo que dan una gran importancia a este parámetro. Una de ellas es el posible calentamiento del contacto y electrodos debido a corrientes elevadas lo cual puede resultar en resistencias que varían en el tiempo y que podrían ocasionar que el voltaje medido correspondiente a un cuanto de conductancia varíe en el curso de una medición. Por otra parte, y como se señaló en el Cap. 1, el modelo de Ladauer está basado en suposiciones cuya validez sólo puede ser garantizada a temperatura cero y sólo para electrones en el nivel del Fermi. Bajo la acción de un voltaje de bias y a temperaturas finitas, puede haber desviaciones con respecto al modelo, la cuales serán evocadas más adelante.

Con el objeto de fijar el valor de voltaje aplicado más adecuado para nuestro sistema, se procedió a realizar una serie de mediciones en las cuales se observaron las escaleras de conductancia a diferentes valores del voltaje aplicado. Resultados representativos de esta serie de mediciones son mostradas en la Fig. 3.10.

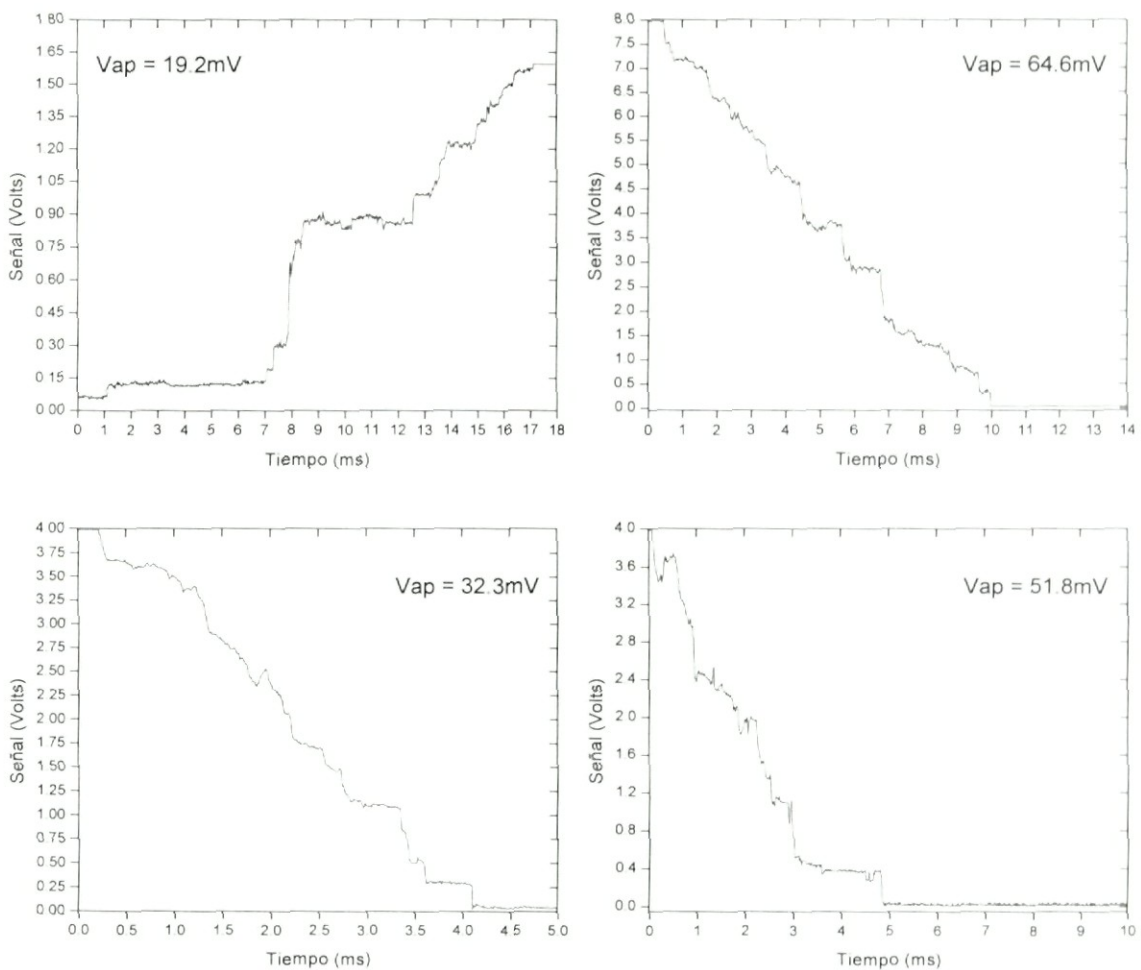


Fig.3.10. Observación de escaleras de conductancia para diferentes valores del voltaje aplicado entre los electrodos.

En estos resultados no se observan diferencias significativas en cuanto a la observación de escalones. La presencia de éstos es independiente del valor de V_{ap} , al menos en el rango en el cual se trabajó ($0 < V_{ap} < 100$ mV).

Por lo anteriormente expuesto se optó por un valor de voltaje aplicado de 25.9 mV. Por una parte, a este valor de voltaje aplicado, un salto de voltaje en la señal medida (equivalente a un cuanto de conductancia) equivale a 200 mV.

Dado que el ruido está por debajo de los 2 mV, el cociente señal/ruido se mantiene elevado. Por otra parte, el número de escalones de conductancia que se pueden medir está dado por el voltaje umbral (7-8 V), de manera que con un V_{ap} de 25.9 mV, es posible observar, en principio, $8000 / 200 = 40$ escalones.

3. D. Conductancia en nanocontactos

Como se acaba de discutir, cuando las mediciones son realizadas utilizando los parámetros adecuados, la señal de voltaje que corresponde a la formación o ruptura del contacto, muestra un comportamiento caracterizado por una variación escalonada del voltaje en función del tiempo. Este comportamiento es consistente con la formación de contactos atómicos y con la posible aparición de efectos de cuantización de la conductancia en el contacto. Sin embargo, la observación de escaleras de voltaje *per se* no es prueba irrefutable de la existencia de contactos atómicos. Antes de poder concluir que se trata efectivamente de contactos atómicos, los resultados deben de ser analizados en el contexto adecuado, esto es, dentro del marco de la teoría de Landauer y deben ser comparados con otros resultados experimentales obtenidos en sistemas y condiciones experimentales similares.

En este sentido, se procedió a convertir la señal de voltaje medido a conductancia. De manera que las curvas experimentales de $V_M(t)$ describan la variación temporal de la conductancia, esto es, $G = G(t)$.

La conversión del voltaje en conductancia se llevó a cabo considerando que el voltaje medido esta relacionado con la corriente I que pasa por el contacto por la Ec. (2.6), y que a su vez, la corriente en el contacto esta relacionada (por la ley de Ohm!) con el voltaje aplicado V_{ap} , y la resistencia del contacto R (o su conductancia $G = 1/R$) mediante la Ec. (2.7). De manera que al combinar estas dos relaciones y resolviendo para la conductancia se obtiene:

$$G = 10^{-5} \frac{V_M}{V_{ap}} .$$

Con lo cual se obtiene la conductancia en Siemens. Finalmente, la conductancia ha sido normalizada por $G_0 = 12.9 \text{ k}\Omega^{-1}$ con el fin de obtener la conductancia en términos de nG_0 .

La conversión de voltaje medido a conductancia arroja valores de conductancia con valores correctos y en el rango esperado para contactos atómicos. Al observar los ejemplos mostrados en la Fig. 3.11 y en la Fig. 3.12, se reconocen una serie de mesetas en la gráfica, que son casi horizontales para los valores más bajos de la conductancia, pero que a veces presentan una pendiente (positiva o negativa) para valores mayores de la conductancia (tamaños de contacto más grande). En los extremos de estas mesetas, se observan saltos abruptos, en los cuales la conductancia varía en una cantidad del orden del cuanto de conductancia G_0 . A pesar de la aparente coincidencia de las mesetas con múltiplos enteros de la conductancia, dicha coincidencia es lejos de ser perfecta, y en algunos casos completamente ausente. Una excepción marcada a esta regla es la posición del primer escalón, que aparece con mucha frecuencia y muy seguido coincide con $1G_0$.

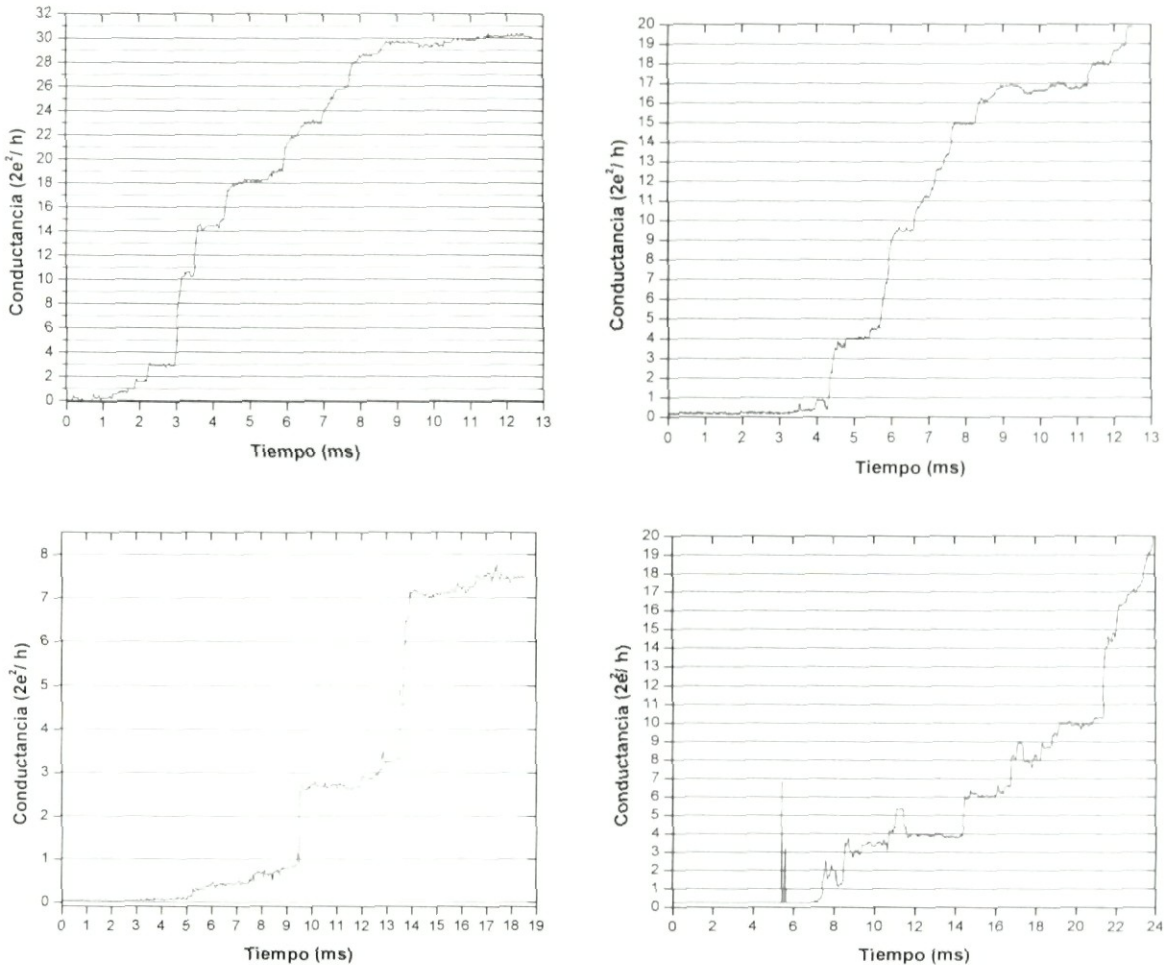


Fig. 3.11. Evolución experimental de la conductancia durante la formación del nanocontacto. La conductancia aparece en unidades del cuanto de conductancia $G_0 = 2e^2/h$.

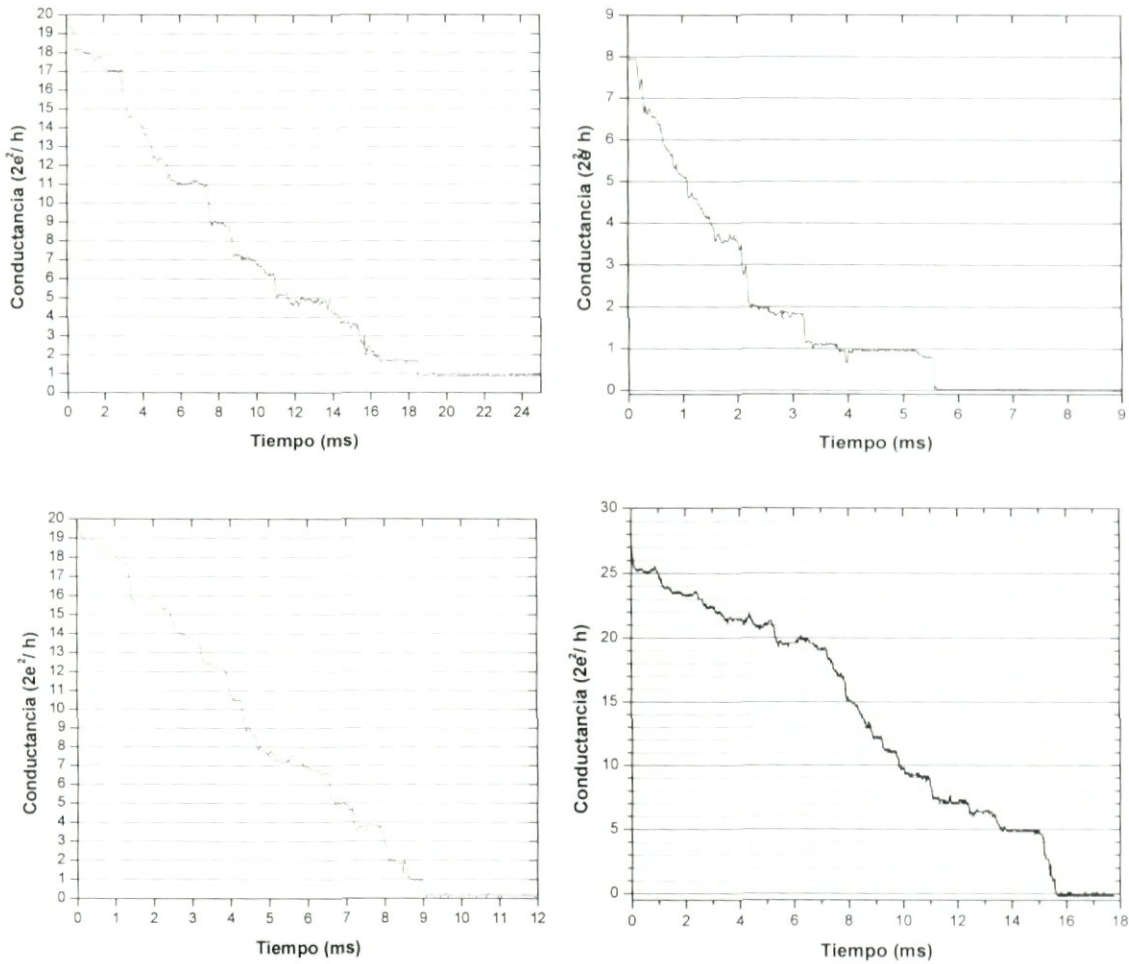


Fig. 3.12. Evolución experimental de la conductancia durante el rompimiento del nanocontacto. La conductancia aparece en unidades del cuanto de conductancia $G_0 = 2e^2/h$.

Por otra parte, y dado el gran volumen de resultados que existen en la literatura, se observa que las curvas de conductancia medidas durante la formación o bien la ruptura del contacto entre dos electrodos metálicos macroscópicos, y a pesar de las diferentes condiciones usadas para realizar la medición, las principales características de las curvas de conductancia medidas son similares.

Con el objeto de poder tener más elementos para entender o confirmar la naturaleza atómica de las mediciones de conductancia mostradas en la Fig. 3.11 y en la Fig. 3.12, se han tomado de la literatura algunas curvas de conductancia representativas y que han sido obtenidas ya sea en sistemas equivalentes o bien sistemas parecidos medidos en condiciones equivalentes. Estas curvas se presentan en la Fig. 3.13.

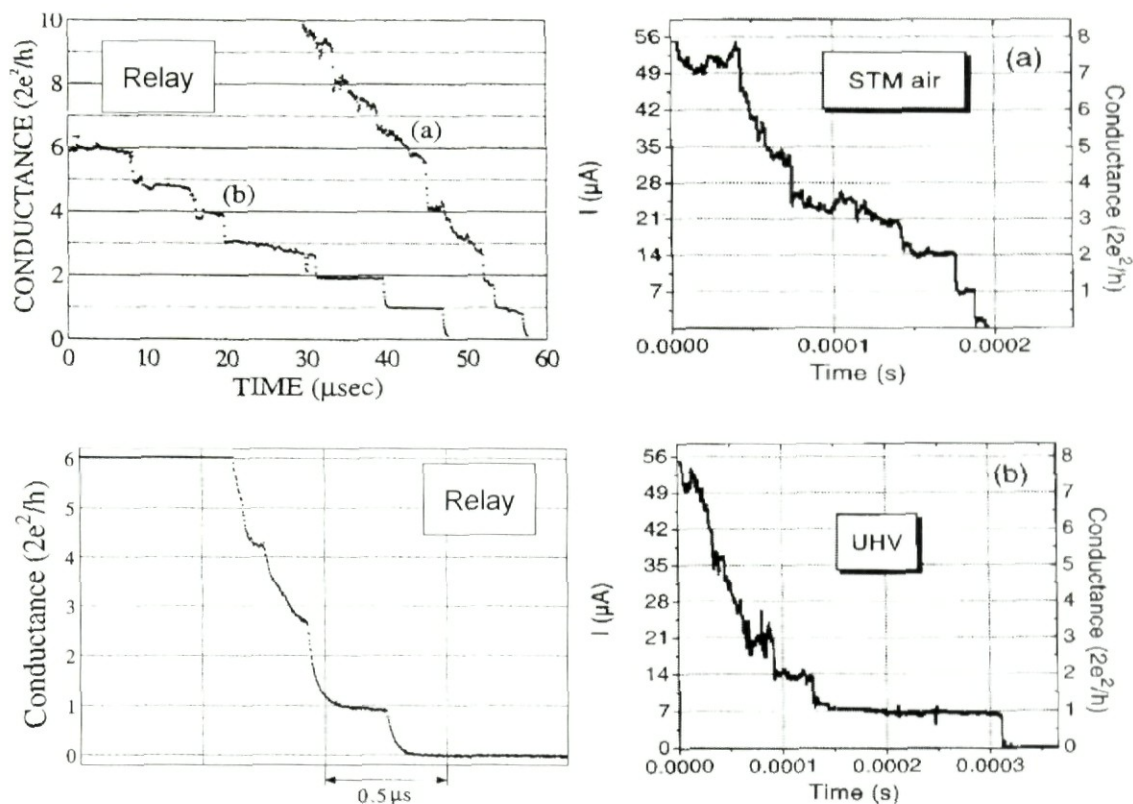


Fig. 3.13. Curvas de conductancia obtenidas en sistemas similares. Izquierda: Contactos de tipo relay: AuCo_5 (arriba), Au (abajo). Derecha: Empleando Cu en STM: En aire (arriba), UHV (abajo). [49-51].

Comparando estas curvas con las que hemos medido, se puede constatar que a pesar de que la variación de la conductancia no es idéntica, nuestras curvas presentan un comportamiento escalonado que es similar.

En particular, se observa que la duración de las mesetas, del orden de unos cuantos milisegundos, es parecido a lo reportado en otros estudios. En nuestro caso, se han observado escaleras de conductancia que cubren todo el espectro hasta $30 G_0$. Finalmente, se resalta nuevamente el hecho de que el ruido del sistema de medición está por debajo de los 2 mV, que es pequeño comparado con la amplitud de los saltos de conductancia observados, recordando que $1 G_0$ equivale a 200 mV.

El comportamiento escalonado de la conductancia durante la formación y ruptura del contacto, así como los valores de conductancia medidos son consistentes con otros resultados encontrados en la literatura, lo cual nos hace suponer que las curvas de conductancia observadas corresponden, o ponen en evidencia, la formación de contactos atómicos.

A partir de estos resultados, se desea poder determinar el origen de los saltos observados en la conductancia. Con este fin se deben tomar en cuenta los diversos fenómenos y/o procesos que pudieran resultar en el comportamiento observado. En este sentido, se sabe

que estos fenómenos en contactos atómicos metálicos por lo general no corresponden a efectos de cuantización de la conductancia, sino a procesos relacionados con la configuración atómica del contacto y los reajustes que este sufre durante los procesos de formación o ruptura del contacto.

Es interesante subrayar que durante mucho tiempo y antes de llegar a tener una interpretación clara de las escaleras de conductancia en nanocontactos metálicos, se argumentaba que la observación de escaleras en la conductancia era sinónimo de cuantización. Esto dio origen a un largo y muy animado debate en cuanto al origen de las escaleras de conductancia observadas en contactos metálicos.

La principal razón es que según el modelo de Landauer, es posible observar efectos de cuantización de la conductancia en sistemas metálicos a temperatura ambiente. Como se discutió anteriormente, en un conductor eléctrico cuyas dimensiones son mucho más pequeñas que la longitud de coherencia de fase, la conductancia lineal G , está dada en términos de la expresión de Landauer

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_n T_n,$$

donde los T_n describen la probabilidad de transmisión para cada modo del conductor, y donde la suma corre sobre todos los modos ocupados. Esta expresión corresponde al límite de temperatura cero.

En el caso de contactos atómicos metálicos la expresión de Landauer es aplicable y el número de canales involucrados es pequeño. Esto se puede ver del hecho de que la longitud de onda de Fermi en metales es del orden del diámetro atómico, $\lambda_F \cong 5 \text{ \AA}$. Esto implica que el corrimiento de energía entre modos cuánticos en metales es $\pi^2 \hbar^2 / 2m\lambda_F^2 \sim 1 \text{ eV}$, lo cual es suficientemente grande para dar lugar a la observación de efectos cuánticos a temperatura ambiente. El número de canales de conductancia relevantes en un solo átomo puede ser estimado como $N = (k_F a / 2)^2$. Para el caso del cobre se tiene que $(k_F a / 2)^2 = 0.83$, que es un valor cercano a 1, sugiriendo que un solo átomo corresponde a un solo canal de conducción [25].

A priori no se puede esperar que la conductancia en contactos de tamaño atómico este dada por simples múltiplos del cuanto de conductancia. La función de onda de los electrones dentro del contacto serán parecidas a las funciones de onda atómicas, y su acoplamiento con las funciones de onda de los electrodos debe influenciar de manera apreciable las probabilidades de transmisión para los modos cuánticos como se discutió en el Cap. 1.

Como se señaló en el Cap. 1, la interpretación de las escaleras de conductancia es, aún hoy en día, tema de debate. En efecto, un gran número de estudios han mostrado que la observación de escaleras de conductancia no es evidencia de que la conductancia este cuantizada. Actualmente se ha alcanzado un consenso de que las escaleras de conductancia reflejan la naturaleza atómica del contacto, sin embargo la interpretación precisa de los

escalones de conductancia no se puede hacer únicamente bajo la suposición de efectos de cuantización de la conductancia. Por el contrario, existe una cantidad abrumadora de resultados que indican y sugieren fuertemente que el origen de las escaleras de conductancia está ligado principalmente a procesos de reajuste o reconfiguración dinámica de los átomos en el contacto.

En este sentido se presenta a continuación un análisis de nuestros resultados vistos desde la óptica de reconfiguraciones atómicas en el contacto.

Como se discutió en algunos de los primeros artículos en el tema [55,56], la dinámica de la conductancia del contacto alrededor de los escalones sugiere fuertemente una interpretación en términos de reajustes atómicos, que resultan en una variación tipo escalera del diámetro del contacto y por lo tanto de la conductancia. Para apoyar esta interpretación, evidencias importantes pueden ser obtenidas únicamente del comportamiento dinámico de la conductancia alrededor de los escalones.

La primera observación es que los saltos entre dos mesetas son tan inclinados que las pendientes no pueden resolverse experimentalmente en una escala temporal del orden de 1 ms, lo cual sugiere que corresponden a saltos muy rápidos de la conductancia. Esto está en contradicción con los resultados de cuantización de la conductancia en sistemas semiconductores, para los cuales los saltos son graduales y muy bien definidos (Fig. 1.4).

Más aún, las trazas de conductancia son diferentes en cada medición. Esto es independientemente de que se trate de la formación o bien de la ruptura del contacto, todas las curvas son diferentes. Esto es de esperarse, ya que no se tiene control sobre el arreglo estructural de los átomos en el contacto, y cada vez que el contacto es formado o separado, la forma del contacto evoluciona siguiendo diferentes secuencias estructurales. Esto también es coherente con el hecho de que prácticamente en todas las curvas que se han medido se observa que no aparecen todos los escalones, lo cual sugiere que el tamaño del contacto no varía de manera simple y continua.

Estas observaciones (aunadas a otras similares realizadas a bajas temperaturas) claramente no son consistentes con la idea de que el radio del contacto varía suavemente y cuya conductancia muestra escalones que resultan directamente de efectos de cuantización. Una manera más natural de interpretar nuestros resultados, así como aquellos medidos en otros sistemas metálicos, es de considerar un modelo que describe el contacto como teniendo una configuración atómica estable durante la duración de la meseta, para la cual la energía total se encuentra en un mínimo local. En los saltos de conductancia, el mínimo local de energía para otra configuración es más bajo que el del estado presente debido al estrés aplicado sobre el contacto. Cuando la barrera de energía entre los estados viejo y nuevo es grande comparada con la energía térmica.

En este contexto sobresale otra característica del sistema, y que es que al observar con detalle las mesetas, se observa que con mucha frecuencia, la conductancia no es constante. En muchos casos se observa que varía ligeramente durante el tiempo que dura la meseta correspondiente. En algunos casos se llega a observar que el valor de la conductancia en

una meseta presenta fluctuaciones que llegan a ser del orden de $1 G_0$, como se muestra en la Fig. 3.14. Aquí se puede apreciar que, por ejemplo entre los escalones 3 y 4, la conductancia fluctúa alrededor de $0.5 G_0$ durante toda la duración de la meseta y vuelve, casi instantáneamente a un valor cercano a $3 G_0$ antes de saltar definitivamente a $4 G_0$. Mas aun, entre los escalones 4 y 5 (asi como entre 8 y 9) se aprecian fluctuaciones cortas de la conductancia que son del orden de G_0 .

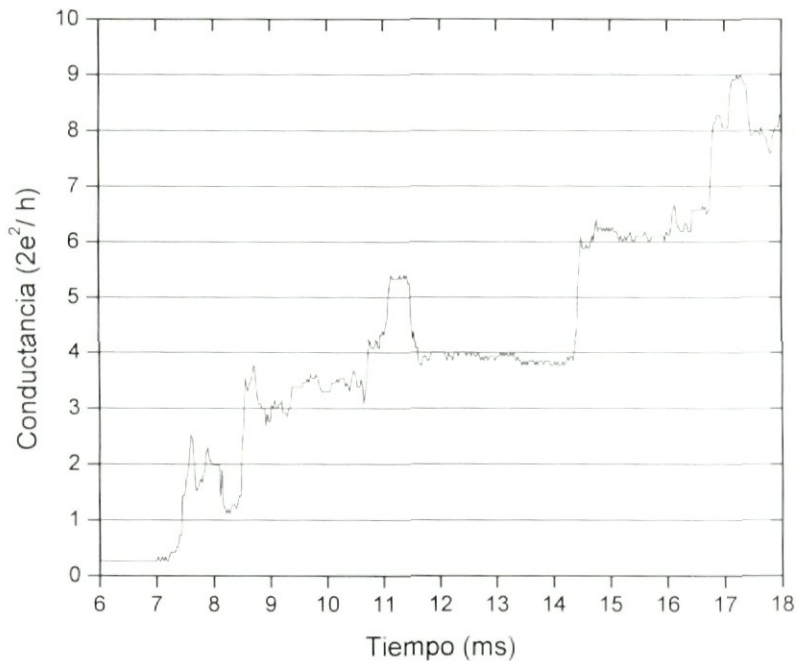


Fig. 3.14. Variaciones en la conductancia.

Las longitudes de las mesetas son bastante irregulares. Esto es igualmente observado en otros sistemas e incluso a bajas temperaturas. La altura de los escalones es del orden del cuanto de conductancia, pero no se puede establecer una correlación clara entre la posición de las mesetas y los valores enteros de G_0 . Esto es, que los valores medidos de la conductancia rara vez coinciden exactamente con múltiplos enteros de G_0 . Sin embargo, de los resultados existentes en la literatura, se observa que los dos primeros escalones, a veces el tercero, son una excepción y sus valores seguidos coinciden con valores enteros de G_0 , pero esto únicamente en metales simples (Au, Ag, Cu e incluso Li, Na y K). Aún así, esto es consistente con la interpretación de reacomodo atómico del contacto, en el que el tamaño del contacto cambia aproximadamente en una cantidad que corresponde al área de un átomo y, como se mencionó anteriormente, un átomo contribuye con aproximadamente $1 G_0$ a la conductancia, aún en la aproximación semiclásica.

Considerando las características de las curvas observadas, se puede concluir que las observaciones realizadas corresponden efectivamente a contactos atómicos. Las características de las escaleras de conductancia están en buen acuerdo con la interpretación

de procesos que resultan de la configuración y reacomodo de los átomos que forman el contacto.

En este caso, las curvas de conductancia reflejan el hecho de que, para el caso de la formación, el contacto inicia con un átomo y progresivamente se agregan otros átomos dando lugar a un aumento de la conductancia. El hecho de que la conductancia aumente de manera escalonada, indica que los átomos se van agregando al contacto de manera progresiva. Dado que, como se menciono anteriormente, cada átomo contribuye con aproximadamente $1 G_0$ a la conductancia, los saltos aparecen con mucha frecuencia en valores cercanos a enteros de $1 G_0$. Por otra parte, el hecho de que cada curva de conductancia es distinta, indica que la forma del contacto es distinta en cada evento y que adicionalmente la formación del contacto se lleva a cabo, en cada evento, siguiendo una serie de procesos de reacomodo distintos. Más aún, el hecho de que se observa con mucha frecuencia (prácticamente en todas las curvas) que algunos escalones no aparecen, sugiere que en estos procesos algunas configuraciones cambian por más de un átomo.

En el caso de la ruptura del contacto, el proceso se puede visualizar de la misma manera, iniciando por un contacto grande el cual reduce su tamaño de manera progresiva a medida que el contacto es estirado resultando en una disminución gradual de la conductancia. De manera general, se observa que para valores de alta conductancia, ésta varía de manera casi continua sin presentar de manera clara un gran número de escalones. Sin embargo, conforme se llega a valores relativamente bajos de la conductancia (debajo de $10 G_0$), se observa más frecuentemente la ocurrencia de saltos. Los cuales, y de manera análoga a los observados durante la formación del contacto, varían en una cantidad cercana a $1 G_0$ y de igual manera, seguido se obtienen escaleras incompletas.

Una propiedad importante que se ha observado, y sobre la cual se ahondará en la próxima sección, es que el escalón mas bajo, correspondiente a $1 G_0$, se observa en prácticamente todas las curvas medidas. Lo cual, a reserva de darle una interpretación mejor fundada más adelante, es coherente con la idea de que aún si los procesos de reacomodo atómico y la configuración exacta del contacto varían de un evento a otro, el primer (el último) contacto durante la formación (ruptura) del contacto entre los electrodos se lleva a cabo por un sólo átomo, lo cual sugiere que un sólo átomo proporciona un sólo canal de conducción y el cual contribuye con una conductancia de aproximadamente $1 G_0$. Se puede ver que de no ser así, en principio se deberían de observar muchos contactos para los cuales el escalón mas bajo de conductancia presentaría valores más pequeños que $1 G_0$.

En relación a las desviaciones de los valores medidos de la conductancia con respecto a múltiplos enteros de G_0 , existen numerosos mecanismos que han sido evocados en la literatura. Los más comunes relacionan los efectos de *backscattering* que resultan por una parte de la diferencia de impedancia entre el contacto y los reservorios, y por otra de los defectos o impurezas en el contacto. Esta interpretación ha sido ampliamente cuestionada, principalmente sobre la base de que no es posible considerar separadamente los reservorios del contacto. Así mismo, durante los primeros años de estudio de estos sistemas, se propuso

que estas desviaciones resultaban de una resistencia en serie que aparece en la transición (o unión) entre los reservorios y el contacto, sin embargo existen argumentos fuertes que contradicen esta suposición. En particular, la resistencia del contacto es muy elevada (del orden de $13 \text{ k}\Omega$) con respecto a la resistencia de los reservorios, los cuales se suponen como conductores Óhmicos, de manera que esta resistencia es despreciable. Por otra parte, a partir de ajustes realizados con el fin de extrapolar el valor de esta resistencia, se encuentran resistencias que pueden llegar a ser hasta de 500Ω , lo cual es grande. Por ultimo, a menudo se observa que, al hacer este tipo de correcciones, los valores de la conductancia corregida se ajusta bien para algunos valores, pero no para otros, es decir, no hay un valor de esta resistencia que lleve simultáneamente la conductancia a los valores correctos para todos los escalones.

El papel que juegan las impurezas y contaminantes es sin duda importante. Varios reportes han sugerido que valores semienteros de la conductancia aparecen con mayor frecuencia cuando hay contaminantes. En nuestro sistema basado en cobre, se debe esperar que haya formación de óxidos en la superficie. Esto podría justificar hasta cierto punto el hecho de que se observan con frecuencia mesetas de conductancia con valores semienteros de G_0 . Sin embargo, y como será discutido en la siguiente sección, por la naturaleza de los contactos fabricados mediante el golpeteo repetido entre los electrodos macroscópicos, suponemos que estas impurezas son eliminadas de la región del contacto al cabo de un cierto tiempo. En efecto, empíricamente se ha observado que para observar el comportamiento escalonado de la señal, es necesario dejar a los electrodos golpeándose durante un cierto tiempo, esto es común en experimentos de este tipo, y se dice que el contacto necesita ser *entrenado*. Es durante este tiempo de entrenamiento que suponemos que las superficies son evacuadas de óxidos que pudieran estar presentes en la punta del alambre y en lugar de contacto de la superficie del otro electrodo.

Por último y con el fin de validar nuestros resultados, se ha procedido a realizar mediciones en contactos fabricados a partir de otros materiales. Los resultados presentados hasta este momento han sido obtenidos utilizando un alambre de cobre y una placa de aluminio comprimido que corresponde a una aleación a base de aluminio. El hecho de que se utilice una aleación complica mucho la interpretación de resultados ya que al tratarse de contactos atómicos, o más aún, de un contacto que involucre un solo átomo, es natural preguntarse con que átomo (o átomos) de la aleación se realizó el contacto. Dada la imposibilidad de poder conocer esos detalles a partir de las mediciones de conductancia, además de querer verificar que los resultados observados hasta aquí no son producto de algún otro artefacto del sistema de medición o bien del montaje, se han realizado mediciones utilizando otros electrodos. En total se han medido contactos entre dos electrodos de cobre, y de manera similar se han realizado contactos utilizando la placa de aluminio comprimido y un alambre de latón (aleación cobre-zinc).

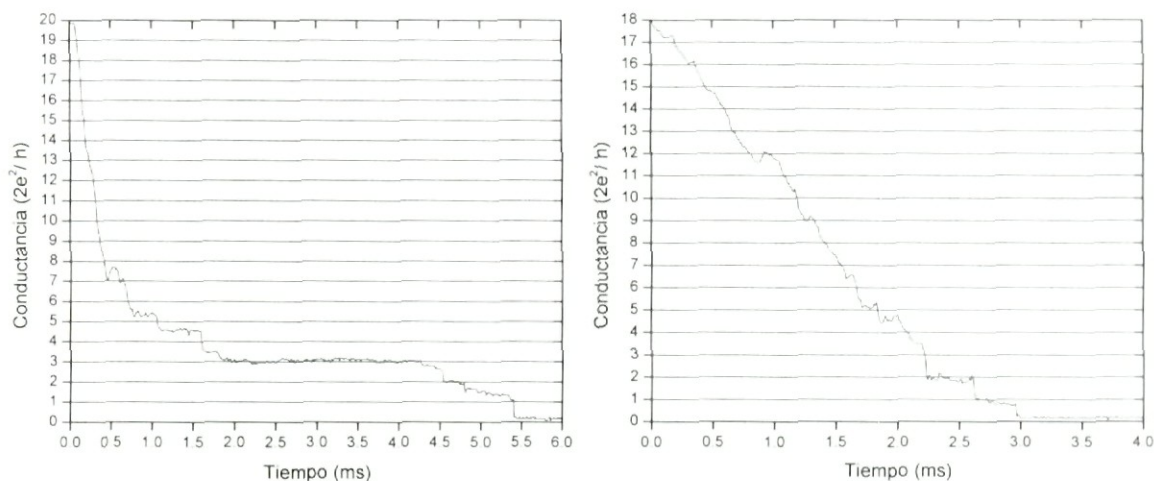


Fig. 3.15. Curvas de conductancia obtenidas en contactos formados entre dos electrodos de cobre.

La Fig. 3.15 muestra dos curvas de conductancia obtenidas en contactos realizados entre dos electrodos de cobre. Como se puede observar, para este sistema se observan curvas de conductancia cuya variación temporal es de forma escalonada. En base a lo discutido anteriormente, para este caso se observa que no aparecen dos curvas de conductancia idénticas. Los tiempos característicos de las mesetas son comparables a los observados en los contactos cobre-aluminio y también se observan las fluctuaciones de la conductancia a lo largo de una meseta. La ventaja de este sistema, es que elimina la incertidumbre de no saber que tipo de átomos participan en el contacto. Como se vera en la siguiente sección, este sistema Cu-Cu, arroja resultados que son consistentes con los reportados en la literatura para el mismo sistema. Más aún, gracias a estos resultados se ha podido explicar e interpretar los resultados del sistema cobre-aluminio.

Por último, la Fig. 3.16 presenta dos curvas de conductancia medidas entre un alambre de latón y la placa de aluminio. Como se puede constatar, aun en el caso de contactos entre dos aleaciones, se observa la variación escalonada de la conductancia. En este sistema en particular formado por dos electrodos a base de aleaciones diferentes, no se ha realizado un estudio más detallado ya que no se espera poder obtener resultados claros así como tampoco una interpretación fácil o directa. Sin embargo, los resultados de la Fig. 3.15 arrojan un resultado muy importante. El hecho de poder observar la variación escalonada de la conductancia demuestra que ni el sistema electrónico de alimentación y medición así como tampoco el montaje (refiriéndonos al cableado y a los electrodos) tienen influencia en los resultados lo cual valida nuestra técnica de medición y nos asegura que los resultados obtenidos en los otros sistemas, corresponden bien a contactos formados por pocos átomos.

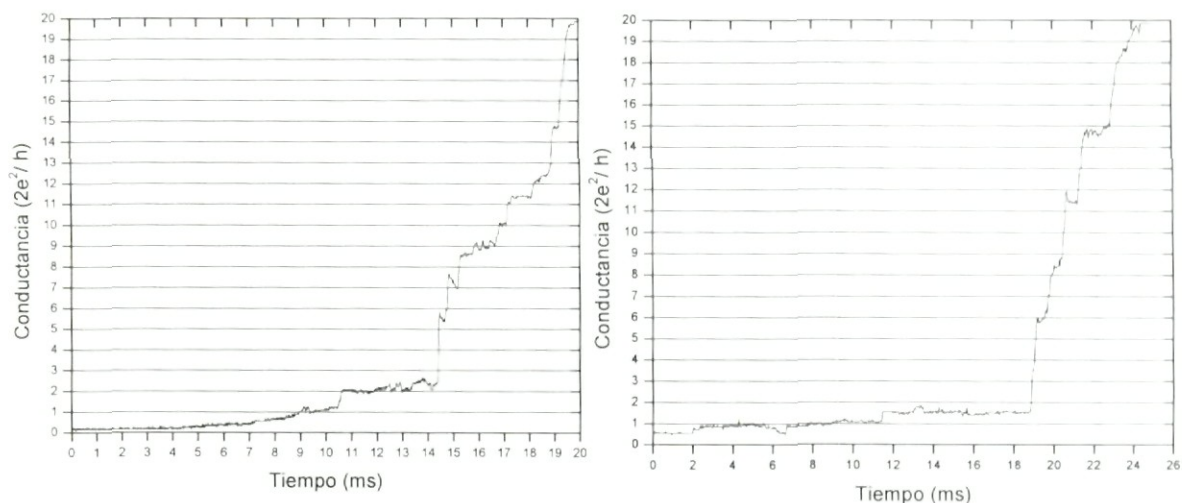


Fig 3.16. Curvas de conductancia medidas en contactos formados entre un alambre de latón y una placa de aluminio comprimido.

Así pues, el conjunto de los resultados presentados en esta sección nos llevan a concluir que a partir de nuestro sistema experimental se ha logrado fabricar y medir la conductancia en contactos formados por pocos átomos. Los resultados obtenidos están en buen acuerdo con lo que se espera para la variación de la conductancia en nanocontactos. Además, estos resultados son coherentes con la interpretación de que los saltos de conductancia resultan no de la cuantización de esta última, sino de la variación gradual de la configuración atómica en el contacto.

3. E. HISTOGRAMAS DE CONDUCTANCIA

De la discusión anterior es claro que los contactos muestran una gran variedad de comportamientos (las curvas siempre son diferentes), efecto en el que la estructura atómica del contacto es muy importante. El método utilizado, al igual que la mayoría de los experimentos mecánicos reportados, no permite conocer de manera detallada cómo se forma el contacto a escala atómica. Aún así, se desea saber si efectos de cuantización de la conductancia ocurren o no. Sin embargo, y en vista de las características de las mediciones, es muy difícil poder hacer una distinción objetiva del comportamiento escalonado de la conductancia como resultado del cambio en el tamaño del contacto debido a la estructura atómica o bien como resultado de la cuantificación de la conductancia. En este sentido se ha vuelto costumbre realizar un histograma de la conductancia a partir de un gran número de datos. El método explota la gran dispersión de los datos que resultan de muchas configuraciones atómicas posibles, y asume que todas las configuraciones posibles, o tamaño efectivo de los contactos, son igualmente probables. El razonamiento detrás de esto es que al suponer todas las configuraciones atómicas posibles como igualmente probables, la aparición de picos en el histograma centrados en valores enteros de G_0 debe corresponder a efectos ligados a la cuantización de la conductancia en contactos cuyo tamaño puede relacionarse directamente con el número de átomos en el contacto.

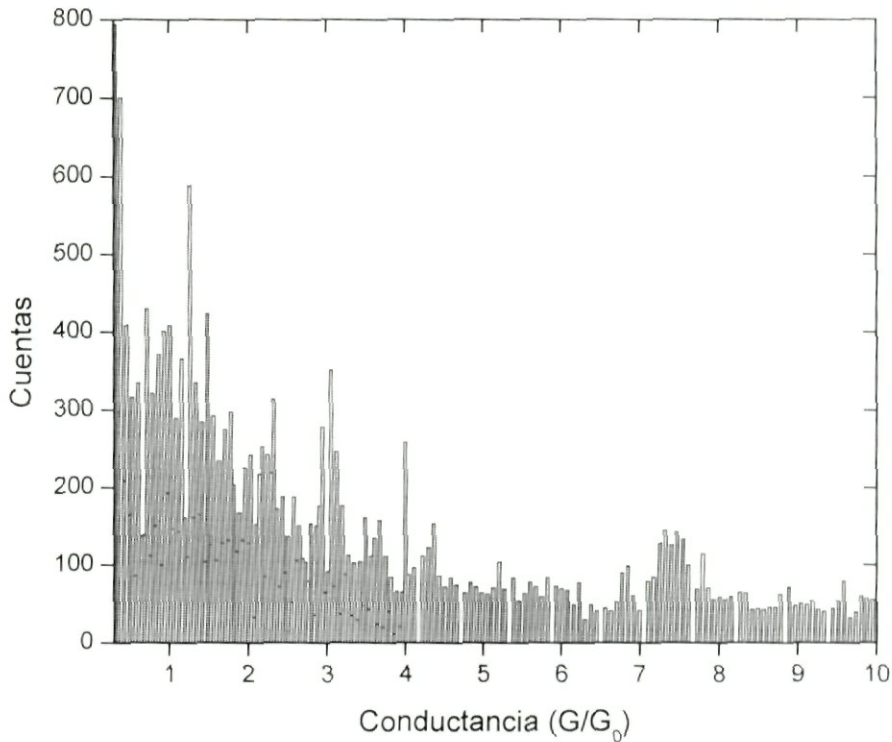


Fig. 3.17. Histograma de conductancia para contactos de cobre medidos en aire a temperatura ambiente usando un voltaje bias de 25.9 mV.

En este sentido se procedió a elaborar los histogramas de nuestras mediciones para los dos sistemas discutidos anteriormente, estos son, contactos cobre-cobre cobre-aluminio.

Los resultados para el caso de contactos cobre-cobre se muestran en la Fig. 3.17 y que ha sido elaborado a partir de cien curvas de conductancia que incluyen tanto la formación como la ruptura del contacto. Para este fin, se construyo una sola columna de datos brutos, esto es, sin tratar de ninguna manera y se escogió un ancho para cada barra equivalente a $0.2 G_0$.

Como se puede observar, en nuestro caso aparece claramente el pico justo arriba de $1 G_0$. Mientras que alrededor de $2 G_0$ también se observa un pico aunque este es mucho menos pronunciado que el de $1 G_0$. Más aún, alrededor de $3 G_0$ también se observa un pico cuya intensidad es ligeramente más grande que el del correspondiente a $2 G_0$. Más allá de $3G_0$ no se puede identificar la presencia de otros picos, salvo por uno centrado en $7.5 G_0$. Por último se debe hacer notar que el número de cuentas para valores no enteros de la conductancia es muy grande lo cual resulta en un ruido de fondo importante.

En comparación con otros resultados reportados sobre el Cu, se destaca el de Ono *et al* que utiliza un sistema tipo interruptor para poner una placa de Cu en contacto con un alambre, este también de Cu en condiciones ambientales (al aire y a temperatura ambiente). Su histograma presenta únicamente dos picos, bien definidos, centrados en 1 y $2 G_0$.

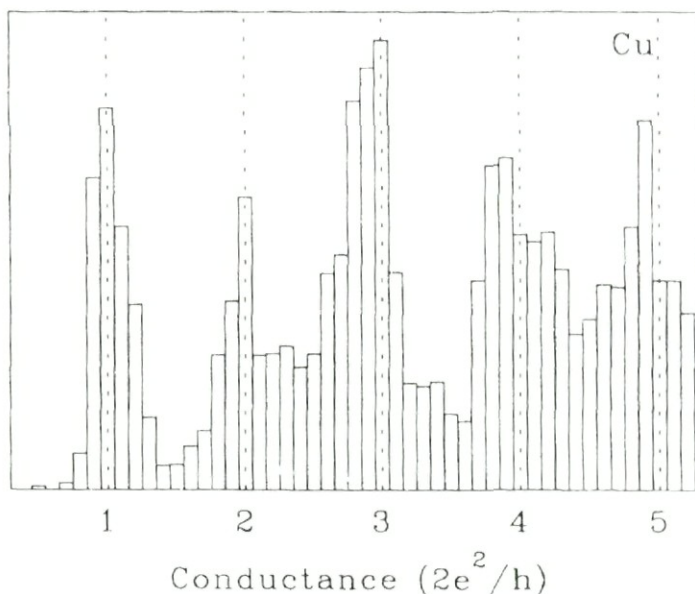


Fig. 3.18 Histograma de contactos Cobre-Cobre fabricados usando la técnica MCBJ a temperatura ambiente [57].

No obstante, dicho trabajo ha sido criticado ya que el histograma fue elaborado a partir de solamente 20 curvas.

Otros trabajos que involucran cobre han sido reportados pero las técnicas empleadas para fabricar los contactos así como las condiciones experimentales utilizadas difieren significativamente de las nuestras. A pesar de eso, estudios realizados en Cu muestran que los histogramas muestran un pico dominante en, o justo debajo de, $1G_0$. Más arriba de este pico, es muy común encontrar dos picos adicionales. A temperatura ambiente y al aire, estos picos son anchos y forman más o menos un solo pico ancho con dos máximos, los cuales, a bajas temperaturas, se diferencian mejor. Resultados muy similares son observados también en contactos de plata. Lo que es característico del Cu (y Ag), es que contrariamente al oro, para el cual la intensidad de los picos disminuye conforme aumenta G , el pico centrado alrededor de $3 G_0$ es más intenso que el de $2 G_0$. Como ejemplo, en la Fig. 3.18 se presenta un histograma reportado para nanocontactos Cu-Cu medidos a temperatura ambiente. A partir de los resultados de nuestro histograma, se puede observar que esta característica también es observada en nuestro sistema. Lo cual confirma que los resultados obtenidos en nuestro caso para los contactos Cu-Cu son correctos y están en buen acuerdo con los resultados existentes en la literatura.

Adicionalmente se ha realizado el histograma de las curvas de conductancia medidas en contactos entre el alambre de Cu y la placa de aluminio. Este histograma ha sido construido a partir de doscientas curvas sin tratar y sin hacer distinción entre la formación y la ruptura del contacto (Fig. 3.19).

El resultado inesperado es que se observan tres picos alrededor de 1, 2 y $3 G_0$. Adicionalmente se observa que el tercer pico, claramente debajo de $3 G_0$, es más pronunciado que el segundo. Lo sorprendente de este resultado es que estas características del histograma son propias de contactos Cu-Cu. En particular, la influencia de la placa de

aluminio, una aleación, no se hace visible. El hecho de que los resultados reflejados en el histograma coincidan con los que uno esperaría de contactos Cu-Cu, sugiere fuertemente que los contactos que se están obteniendo son en realidad contactos de cobre.

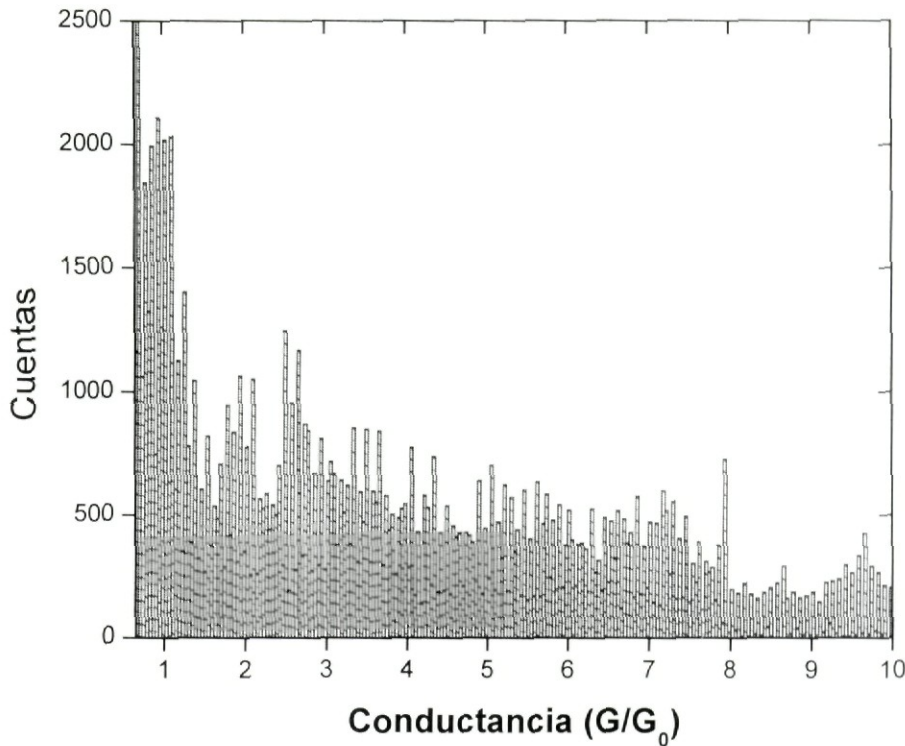


Fig. 3.19. Histograma de conductancia para contactos Cu-Al medidos en aire a temperatura ambiente, usando un voltaje bias de 25.9mV.

En este sentido, los trabajos de Landman en los que estudiaron la mecánica de las interacciones entre una punta y un sustrato han mostrado que en el caso de contactos entre diferentes metales, la mayor parte de la deformación plástica se lleva a cabo en el metal más suave [40,58,59]. En el proceso de formación de contactos, la mayor parte del salto al contacto se debe a los átomos del metal más suave, independientemente de que este sea parte de la punta o del sustrato (placa). Conforme la punta continua avanzando más allá de este punto (de contacto), una punta dura hará una indentación en el sustrato suave, mientras que una punta suave será aplanada contra un sustrato duro. Si el metal suave moja al metal duro, la constricción atómica que se forma al momento de la retracción consiste únicamente en átomos del metal suave. Posterior a la ruptura, un parche (patch) de átomos del metal suave quedará en la superficie del metal duro.

Al nivel del presente estudio, la determinación de las propiedades de mojado del Cu sobre la aleación a base de aluminio queda fuera de nuestro alcance. Sin embargo, hay varios elementos de nuestro estudio que sugieren que los resultados obtenidos para este sistema son consistentes con la formación de contactos cobre-cobre. Por una parte, los resultados que salen del histograma y por otra parte, el hecho de que durante las mediciones se observó que, para poder observar las escaleras de conductancia (voltaje), era necesario *entrenar* el contacto. Adicionalmente, se puede pensar que al tratarse de un pequeño parche

de Cu en el aluminio, sus propiedades electrónicas podrían llegar a tener una cierta influencia en los resultados. En este sentido, nosotros interpretamos el corrimiento del pico en $3 G_0$ hacia $2.6-2.7 G_0$ como producto de la influencia de la estructura electrónica del aluminio que tendrá tendencia a manifestarse de manera más importante en aquellos átomos de Cu que están en contacto físico con el aluminio.

Sobre la base de estos resultados y considerando que para los dos sistemas considerados se han obtenido resultados que corresponden a contactos atómicos cobre-cobre, se tiene que los valores de la conductancia y en particular la presencia del pico intenso en $1 G_0$ pone en evidencia contactos atómicos formados por un solo átomo de Cu. En efecto, numerosos trabajos han mostrado que para el caso de metales monovalentes, la transmisión esta dada por un solo canal el cual corresponde a los orbitales s presentes en el nivel de Fermi y el cual contribuye con aproximadamente $1 G_0$.

Capítulo 4: Conclusiones y perspectivas

En este trabajo nos hemos interesado en el estudio experimental de la conductancia eléctrica a través de contactos metálicos formados por pocos átomos (*i.e.*, contactos atómicos), siendo nuestro objetivo central el proponer y elaborar un método original para medir e identificar efectos de cuantización de la conductancia. La realización de estos objetivos requirió del desarrollo y montaje de varios dispositivos experimentales además de los desarrollos realizados en la fabricación y validación de nuevos materiales.

En una primera parte, fueron desarrollados novedosos materiales: elastómeros magnéticos. El trabajo realizado ha mostrado que estos materiales pueden ser utilizados como la base de actuadores mecánicos accionados por campos magnéticos. El trabajo realizado nos llevó a estudiar diferentes tipos y configuraciones de elastómeros magnéticos, y a desarrollar paralelamente un montaje experimental que se basó en el uso de un electroimán para proporcionar de manera controlable un campo magnético variable en el tiempo. En su versión final, se optó por el uso de imanes permanentes de NdFeB embebidos en la matriz elastomérica. Esta configuración nos proporcionó el mejor compromiso entre las necesidades de amplitud de movimiento, precisión del control de dicho movimiento y la intensidad del campo magnético necesario para obtener estas características.

Con el objeto de realizar las mediciones de la conductancia, se ha construido y validado un circuito electrónico. Este circuito fue concebido con la doble función de proporcionar un voltaje de alimentación estable y ajustable en un rango adecuado (0 a 107 mV), y de medir corrientes muy pequeñas, del orden de 1 μ A, convirtiéndolas a una señal de voltaje medible por un osciloscopio estándar.

Utilizando los diversos componentes del experimento, se demostró que haciendo uso del elastómero magnético como actuador mecánico, es posible observar el comportamiento discreto de la conductancia eléctrica al formar o bien al romper el contacto eléctrico entre dos electrodos macroscópicos.

Analizando un número grande de mediciones de eventos de formación y ruptura del contacto, se han identificado las principales características de las curvas de conductancia. Como son, por ejemplo, el hecho de que se observan con mucha frecuencia mesetas de conductancia en valores que no coinciden con múltiplos enteros de G_0 . Así mismo, cada curva de conductancia es distinta y se observan también fluctuaciones, a veces importantes, en la duración de una meseta de conductancia. Por último, las escaleras de conductancia, en prácticamente todas las curvas, no presentan todos los escalones. El análisis de estos resultados nos llevó a concluir que las características observadas dan como interpretación un comportamiento discreto de la conductancia que resulta no de la cuantización de ésta, sino de la configuración atómica y los procesos de reacomodo atómico en un contacto formado por pocos átomos.

El análisis estadístico de las mediciones realizadas en dos sistemas distintos nos ha permitido identificar y verificar que, para el caso de contactos obtenidos a partir de dos electrodos de cobre, nuestros resultados coinciden con otros resultados reportados en la literatura para el mismo sistema. En particular, se observan los picos centrados alrededor de $1 G_0$, $2 G_0$ y $3 G_0$, comúnmente observados en este sistema, y la intensidad del pico en $3 G_0$ es más grande que el de $2 G_0$, que corresponde a otra característica de los contactos de Cu reportados por otros grupos. Más aun, el análisis estadístico de la conductancia medida entre un electrodo de Cu y otro a base de una aleación de aluminio, arroja resultados idénticos a los esperados para contactos cobre-cobre. Esto es, se observan los picos en $1 G_0$, $2 G_0$ y $3 G_0$, siendo la intensidad de este último mayor que la del pico en $2 G_0$, lo cual ha sido interpretado como el resultado de la transferencia de átomos de Cu desde el electrodo de Cu al golpear el electrodo de la aleación.

Finalmente, el hecho de que la variación discreta de la conductancia es idéntica a la reportada en la literatura para el Cu, y similar a la reportada para otros materiales, y que ambos histogramas muestran un pico alrededor de G_0 , nos lleva a concluir que a partir de nuestro sistema de fabricación es posible obtener contactos atómicos (formados por pocos átomos) a temperatura ambiente y al aire libre, al llevar al contacto dos piezas metálicas de dimensiones macroscópicas.

Las perspectivas de este trabajo son numerosas, de importancia y actualidad. Por una parte, se pueden considerar una serie de modificaciones y mejoras al sistema actual de medición, así como al dispositivo. En particular, mejoras significativas podrían ser obtenidas a nivel de las mediciones y de la calidad de los histogramas, si el sistema fuera adaptado para trabajar en alto vacío. De los resultados reportados en la literatura, es claro que al trabajar en vacío se limita considerablemente la contaminación de los electrodos, resultando en curvas con menos ruido y con menos fluctuaciones de la conductancia. Otra extensión importante de este trabajo es el de poder utilizar otros materiales como electrodos. En particular, el uso de electrodos ferromagnéticos podría abrir opciones interesantes para el estudio de sistemas polarizados en los cuales la degeneración del espín es rota por lo que se espera que la conductancia ahora presente valores discretos en términos de $e^2 h$.

Por otra parte tomemos el uso de elastómeros magnéticos. Estos materiales son de gran interés para el desarrollo de sistemas mecánicos. Entre ellos figuran actuadores para articulaciones en robots y en un futuro, se considera el uso de estos materiales como sustitutos para músculos en prótesis. Por otra parte, en base a la propiedad de estos materiales de poder modificar su constante elástica bajo la acción de un campo magnético, existen algunas aplicaciones basadas en esta propiedad, como lo son, sistemas anti-vibraciones. El presente trabajo sienta un primer precedente en el uso de estos materiales y ha servido para establecer la metodología y los protocolos de fabricación de este tipo de materiales. Cabe señalar, que actualmente se están desarrollando sistemas de amortiguamiento inteligentes basados en elastómeros magnéticos en el laboratorio de materiales nanoestructurados del Insituto de Física de la UASLP.

Por otra parte se ha desarrollado un sistema de medición especialmente adaptado para medir transporte eléctrico en sistemas muy resistivos en los cuales se requiere aplicar voltajes pequeños y medir corrientes igualmente pequeñas. Al pensar en sistemas muy resistivos (además de materiales aislantes o semiconductores!), sobresalen varios sistemas importantes y que están al centro de una intensa actividad de investigación. Por ejemplo, el transporte a través de nanotubos de carbono, la electrónica molecular que se interesa a utilizar sistemas orgánicos (ADN, proteínas, entre otros) como sistemas para transportar información electrónica. Se destacan además, otros materiales conductores nanoestructurados, pues como se ha dicho anteriormente, la resistencia eléctrica es una propiedad fundamental para las aplicaciones electrónicas y figura como uno de los observables cuya intensidad aumenta al reducir las dimensiones, lo cual da un lugar privilegiado al transporte eléctrico como el método de medición por excelencia en sistemas nanoscópicos.

Referencias

- [1] R. Landauer, Y. Imry. Conductance viewed as transmission. *Rev. Mod. Phys.* **71**, S306-S312 (1999).
- [2] C. Dekker. Carbon nanotubes as molecular quantum wires. *Phys. Today* **May**, 22-28 (1999).
- [3] H. W. Fink, C. Schönenberger. Electrical conduction through DNA molecules. *Nature* **398**, 407-410 (1999).
- [4] D. Porath, A. Bezryadin, S. de Vries, C. Dekker. Direct measurement of electrical transport through DNA molecules. *Nature* **403**, 635-638 (2000).
- [5] A. Yu. Kasumov, M. Kociak, S. Gueron, B. Reulet, V. T. Volkov, D. V. Klinov, H. Bouchiat. Proximity-induced superconductivity in DNA. *Science* **291**, 280-282 (2001).
- [6] K. von Klitzing, G. Dorda, M. Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance. *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494-497 (1980).
- [7] B. J. van Wees, H. H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, C. T. Foxon. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.* **60**, 848-850 (1998).
- [8] D. A. WHaram, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, G. A. C. Jones. One-dimensional transport and the quantization of the ballistic resistance. *J. Phys. C* **21**, L209-L214 (1988).
- [9] J. K. Gimzewski and R. Möller. Transition from the tunneling regime to point contact studied using scanning tunneling microscopy. *Phys. Rev. B* **36**, 1284-1287 (1987).
- [10] U. Düring, O. Züger, D. W. Pohl. Observation of metallic adhesion using scanning tunneling microscope. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 349-352 (1990).
- [11] N. D. Lang. Resistance of one-atom contact in the scanning tunneling microscope. *Phys. Rev. B* **36**, 8173-8176 (1987).
- [12] J. Ferrer, A. Martin-Rodero, F. Flores. Contact resistance in the scanning tunneling microscope at very small distances. *Phys. Rev. B* **38**, 10113-10115 (1988).
- [13] S. Ciraci, E. Tekman. Theory of transition from the tunneling regime to point contact in scanning tunneling microscopy. *Phys. Rev. B* **40**, 11969-11972 (1989).

- [14] N. Garcia, L. Escapa. Elastic oscillatory resistances of small contacts. *Appl. Phys. Lett.* **54**, 1418-1420 (1989).
- [15] E. Tekman, S. Ciraci. Theoretical study of transport through a quantum point contact. *Phys. Rev. B* **43**, 7145-7169 (1991).
- [16] U. Landman, W. D. Luedtke, N. A. Burnham, R. J. Colton. Atomistic mechanisms and dynamics of adhesion, nanoindentation and fracture. *Science* **248**, 454-461 (1990).
- [17] A. P. Sutton, J. B. Pethica. Inelastic flow processes in nanometre volume of solids. *J. Phys. Condens. Matter.* **2**, 5317-5326 (1990).
- [18] E. Scheer, P. Joyez, D. Esteve, C. Urbina, M. H. Devoret. Conduction Channel Transmissions of Atomic-Size Aluminum Contacts. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3535 (1997).
- [19] H. E. van der Brom, J. M. Ruitenbeek. Quantum Suppression of Shot Noise in Atom-Size Metallic Contacts. *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1526 (1999).
- [20] B. Ludoph, M. H. Devoret, D. Esteve, C. Urbina, J. M. Ruitenbeek. Evidence for Saturation of Channel Transmission from Conductance Fluctuations in Atomic-Size Point Contacts. *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1530 (1999).
- [21] B. Ludoph, J. M. van Ruitenbeek. Thermopower of atomic-size metallic contacts. *Phys. Rev. B* **59**, 12290 (1999).
- [22] J. C. Cuevas, A. Levy Yeyati, A. Martin-Rodero. Microscopic Origin of Conducting Channels in Metallic Atomic-Size Contacts. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1066 (1998).
- [23] E. Scheer, N. Agraït, J. C. Cuevas, A. Levy, B. Ludoph., A. Martin Rodero, G. Rubio, J. M. van Ruitenbeek, C. Urbina. The signature of chemical valence in the electrical conduction through a single-atom contact. *Nature* **394**, 154 (1998).
- [24] J. C. Cuevas, A. Levy Yeyati, A. Martin-Rodero, G. Rubio Bollinger, C. Untiedt, N. Agraït. Evolution of Conducting Channels in Metallic Atomic Contacts under Elastic Deformation. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2990 (1998).
- [25] Nicolás Agraït, Alfredo Ley Yeyati, Jan M. Van Ruitenbeek. Quantum properties of atomic-sized conductors. *Physics Reports* **377**, 81-279 (2003).
- [26] A. G. M. Jansen, A. P. van Gelder and P. Wyder. Point contact spectroscopy in metals. *J. Phys. C.* **13**, 6073-6118 (1980).
- [27] N. Agraït, J. R. Rodrigo, S. Vieira. Conductance steps and quantization in atomic size-contacts. *Phys. Rev. B* **47**, 12345-12348 (1993).
- [28] N. Agraït, J. G. Rodrigo, C. Sirvent, S. Vieira. Atomic-scale connective neck formation and characterization. *Phys. Rev. B* **48**, 8499-8501 (1993).

- [29] C. Sirvent, J. G. Rodrigo, S. Vieira, L. Jurczyszyn, N. Mingo, F. Flores. Conductance step for a single-atom contact in the scanning tunneling microscope: noble and transition metals. *Phys. Rev. B* **53**, 16086-16090 (1996).
- [30] J. I. Pascual, J. Méndez, J. Gómez-Guerrero, A. M. Baro, N. García, V. Thien Binh. Quantum contact in gold nanostructures by scanning tunneling microscopy. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1852-1855 (1993).
- [31] J. I. Pascual, J. Méndez, J. Gómez-Herrero, A. M. Baro, N. García, U. Landman, W. D. Luedtke, E. N. Bogachek, H. P. Cheng. Properties of metallic nanowires: from conductance quantization to localization. *Science* **267**, 1793-1795 (1995).
- [32] U. Landman, W. D. Luedtke, B. E. Salisbury, R. L. Whetten. Reversible manipulations of room temperature mechanical and quantum transport properties in nanowire junctions. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1362-1365 (1996).
- [33] L. Olesen, E. Laegsgaard, I. Stensgaard, F. Besenbacher, J. Schiøtz, P. Stoltze, K. W. Jacobsen, J. K. Nørskov. Quantized conductance in an atom-sized point contact. *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2251-2254 (1994).
- [34] Zheng Gai, Yi He, Hongbin Yu, W. S. Yang. Observation of conductance quantization of ballistic metallic point contacts at room temperature. *Phys. Rev. B* **53**, 1042-1045 (1996).
- [35] M. Brandbyge, J. Schiøtz, M. R. Sørensen, P. Stoltze, K. W. Jacobsen, J. K. Nørskov, L. Olesen, E. Laegsgaard, I. Stensgaard, F. Besenbacher. Quantized conductance in atom-sized wires between two metals. *Phys. Rev. B* **52**, 8499-8514 (1995).
- [36] V. Rodrigues, T. Fuhrer, D. Ugarte. Signature of atomic structure in the quantum conductance of gold nanowires. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4124 (2000).
- [37] T. Kizuka, K. Yamada, S. Deguchi, M. Naruse, N. Tanaka. Cross-sectional time-resolved high-resolution transmission electron microscopy of atomic-scale contact and nanocontact-type scannings on gold surfaces. *Phys. Rev. B* **55**, R7398-7401 (1997).
- [38] T. Kizuka. Atomic process of point contact in gold studied by time-resolved high-resolution transmission electron microscopy. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4448-4451 (1998).
- [39] T. Kizuka. Atomistic visualization of deformation in gold. *Phys. Rev. B* **57**, 11158-11163 (1998).
- [40] Y. Kondo, K. Takayanagi. Gold nanobridge stabilized by surface structure. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3455-3458 (1997).
- [41] H. Ohnishi, Y. Kondo, K. Takayanagi. Quantized conductance through individual rows of suspended gold atoms. *Nature* **395**, 780-785 (1998).