

Universidade Estadual de Campinas Instituto de Física "Gleb Wataghin"

Dissertação de Tese de Mestrado

Efeitos Quânticos no Transporte Elétrico em Nanoestruturas Metálicas

Este exemplar corresponde à coleção final da tese de mestrado defendida pelo aluno Varlei Rodrigues e aprovada pela Comissão Julgadora
30 de abril de 1999



Aluno:
Varlei Rodrigues^(I e II)

Orientador:
Dr. Daniel Mario Ugarte^(I)

Banca Examinadora:
Prof. Dr. Antonio Ricardo Droher Rodrigues^(I)
Prof. Dr. Leandro Russovski Tessler^(II)

^(I)Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS) - CNPq/MCT

^(II)Instituto de Física "Gleb Wataghin" (IFGW) - UNICAMP

Instituto de Física "Gleb Wataghin"

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Secretaria de Pós-Graduação

CAIXA POSTAL 6165

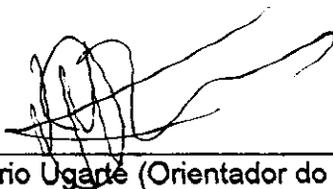
CEP 13083-970 – Campinas-SP - Brasil

Tel: (019) 788-5305

Fax: (019) 289-2424

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE VARLEI RODRIGUES APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN", DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 28/01/99.

COMISSÃO JULGADORA:



Prof. Dr. Daniel Mario Ugarte (Orientador do Candidato) - LNLS



Prof. Dr. Antônio Ricardo Dröber Rodrigues - LNLS



Prof. Dr. Leandro Russovski Tessler – IFGW/UNICAMP

Resumo

Sistemas de dimensões nanométricas são de grande interesse tanto para estudos em física básica devido aos efeitos quânticos, quanto às áreas tecnológicas, no desenvolvimento de novos componentes. Um destes sistemas são os nanofios metálicos, onde a condutância (G) é dada por múltiplos inteiros de um quanta (G_0), independente do material.

O objetivo desta trabalho é a construção de um instrumento para o estudo do transporte de elétrons em nanoestruturas metálicas. A montagem escolhida é baseada na quebra mecanicamente controlada de junções (MCBJ), operando em ultra-alto-vácuo (UHV). Basicamente, o seu funcionamento consiste em gerar nanofios pelo contato entre duas superfícies limpas obtidas *in situ*, em UHV.

O equipamento foi projetado e construído, alcançando a pressão de $5,4 \cdot 10^{-10}$ mbar, e uma precisão nas medidas de condutância da ordem de $\sim 10^{-4} G_0$, que associado a novos processos de tratamento de dados implementados, permitirá um estudo detalhado do fenômeno.

O bom desempenho do instrumento já permitiu, em resultados preliminares, observar novos e interessantes efeitos, ainda não citados ou previstos. Por exemplo, a diferença na dinâmica entre os nanofios gerados esticando-se ou comprimindo-se os nanocontatos. Outro resultado notável, obtida devida a estabilidade alcançada pela montagem, é o possível controle na formação e evolução estrutural do nanofio.

Em resumo, o MCBJ construído permite realizar estudos mais aprofundados do comportamento da condutância em nanofios metálicos. O seu bom desempenho permitiu observar, em resultados ainda preliminares, novos efeitos, que abrem estimulantes linhas de trabalho.

Abstract

Nanometric systems have attracted great interest both for basic studies due to quantum effects, and for technological areas due to its potential use in new devices. Among these systems, metal nanowires show a electronic transport characterized by a conductance being an integer multiple of a conductance quanta (G_0).

The aim of this work is the construction of a dedicated instrument to study the electron transport in metallic nanostructures. The apparatus is based in the Mechanically Controllable Break Junction technique, operating in ultra-high-vacuum. Briefly, nanowires are generated from two clean superficies obtained *in situ*.

The equipment has already attained a pressure of $5,4 \cdot 10^{-10}$ mbar and a conductance measurement precision of $\sim 10^{-4} G_0$, that associated to new implemented data treatment, will allow the development of detailed study of metal nanowire conductance.

The instrument performance has been extremely good, and it has already revealed novel and interesting effects in the produced preliminary results. For example, we observed a remarkable different behavior if the nanowire deformation is obtained by stretching or compressing the nanocontacts. Another notable result is an apparently controlled formation and structural evolution of the nanowire, that we attribute to the very good mechanical stability of the system.

In summary, the developed MCBJ will allow us to study metal nanowire conductance behavior with great detail. Moreover, preliminary results show us new effects that open exciting possibilities of works.

Índice

1. Introdução	1
2. Quantização da condutância	4
2.1. Teoria	4
2.2. Observação	11
2.3. Resultados típicos	15
2.4. Objetivo	18
3. Quebra Mecanicamente Controlada de Junções	20
3.1. Concepção	21
3.2. Câmara de vácuo.....	22
3.3. Passante mecânico.....	24
3.4. Piezo-atuador.....	28
3.5. Porta-amostras.....	28
3.6. Sistema de medida e aquisição.....	29
3.7. Protótipo do MCBJ	31
3.8. Tratamento de dados.....	33
3.9. Sumário.....	35
4. Resultados Preliminares	38
4.1. Parâmetros do experimento	38
4.2. Quebra <i>in situ</i>	39
4.3. Medidas de condutância	40
4.4. Discussão	45
4.4.1. Desempenho da montagem	45
4.4.2. Curvas medidas	47
4.5. Perspectivas	48
5. Conclusão	50
6. Agradecimentos	52
7. Referências	54
Apêndice 1	56

1. Introdução

O desenvolvimento de novas técnicas, que permitem estudos de estruturas de tamanhos cada vez menores, tem aberto amplas e promissoras possibilidades para a ciência e a tecnologia. Em sistemas de dimensões nanométricas, os efeitos quânticos tornam-se relevantes possibilitando tanto pesquisa básica, como o desenvolvimento de novos componentes. Por exemplo, em fios com diâmetros da ordem do comprimento de onda dos elétrons de condução manifesta-se claramente o comportamento ondulatório dos elétrons; como consequência, o condutor comporta-se como um guia de ondas, com canais de transmissão associados aos níveis de energia permitidos. Assim, a condutância passa a variar de forma discreta, segundo a equação:

$$G = nG_0 \quad G_0 = \frac{2e^2}{h} = \frac{1}{12,9} \frac{1}{k\Omega} \quad (1.1)$$

onde e é a carga do elétron, h a constante de Planck e n (inteiro) o número de canais com energia menor que a energia do nível de Fermi, E_F , (canais ocupados). Este comportamento é chamado de quantização da condutância.

Esse efeito foi primeiramente observado em gases de elétrons bidimensionais, gerados em heteroestruturas semicondutoras^[1]. Mais recentemente, este fenômeno também foi verificado em constrições e fios metálicos nanométricos^[2-10]. Os experimentos geralmente consistem em realizar medidas de condutância em nanocontatos enquanto variamos as suas dimensões. Mudando a seção transversal do nanocondutor alteramos a energia dos canais, que pode se tornar maior ou menor que E_F , variando conseqüentemente o número de canais ocupados (n). As curvas de condutância dos nanocontatos apresentam patamares separados por saltos múltiplos inteiros de G_0 (figura 1.1).

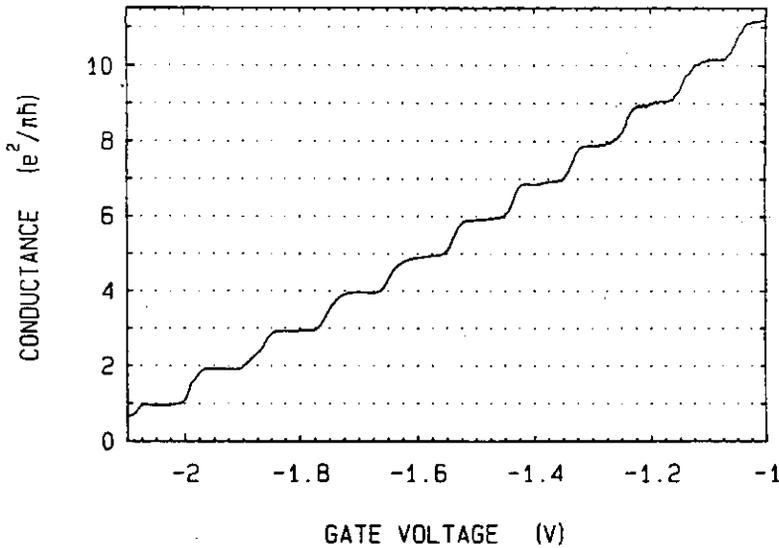


Figura 1.1. Curva de condutância medida em uma constrição feita em um gás de elétrons bidimensional gerado em uma heteroestrutura semicondutora. Na abcissa está a tensão que varia a largura do nanocontato. Podemos observar neste gráfico os patamares de condutância nos múltiplos de G_0 e os saltos entre eles^[1].

Os nanofios metálicos têm apresentado também patamares de condutância com valores que não correspondem aos múltiplos inteiros de G_0 ^[11-16]. Até o momento, entretanto eles têm sido pouco analisados, ou mesmo ignorados. Da mesma maneira, a influência da tensão aplicada no nanocontato tem sido pouco estudada.

O objetivo deste trabalho foi desenvolver um instrumento onde nanocontatos metálicos fossem gerados e modificados para o estudo de sua condutância. A técnica escolhida é a quebra mecanicamente controlada de junções^[7] (MCBJ) em ultra-alto-vácuo (UHV). Nela, um fio do material de interesse é quebrado, *in situ*, e subsequentemente as partes separadas são reaproximados, criando um nanocontato cuja seção transversal pode ser variada pelo controle da aproximação/afastamento.

Nesta tese, descrevemos o projeto e construção deste experimento e as suas características; e a implementação de sistemas de medida, aquisição e análise automática da evolução da condutância nos nanofios. Também apresentamos os resultados das primeiras medidas, onde pôde ser avaliado o ótimo desempenho do instrumento. Através deste trabalho, podemos agora estudar com rigor e eficiência o comportamento da condutância destes sistemas e analisar a origem de algumas anomalias e desvios medidos. Além disso, é importante ressaltar que através de análises preliminares já foi possível observar efeitos que ainda não foram citados ou previstos, embora a sua confirmação requereira estudos mais aprofundados.

2. Quantização da condutância

Neste capítulo introduzimos o efeito da quantização da condutância e os fenômenos associados que motivaram o tema desta tese. A seção 2.1 apresenta uma descrição teórica da quantização da condutância. Na seção 2.2 são mostrados o método de observação usualmente empregado e os instrumentos usados. A seguir, na seção 2.3 são discutidos os resultados tipicamente obtidos. Por último, com base nas informações deste capítulo delineamos o trabalho proposto e desenvolvido nesta tese.

2.1. Teoria

O transporte de corrente em um condutor pode ser descrito pela lei de Ohm^[17]:

$$I = GV \tag{2.1}$$

onde I é a corrente que percorre o condutor quando sujeito a diferença de potencial V . A constante de proporcionalidade G é denominada condutância e é característica de cada sistema. O inverso da condutância é chamado de resistência R , que é a grandeza usualmente empregada.

$$R = \frac{1}{G} \quad (2.2)$$

Em alguns casos simples, o comportamento da condutância pode ser facilmente relacionado com a geometria do condutor. Consideremos, por exemplo, um fio metálico de seção transversal uniforme, com área A , e comprimento, L_z , figura 2.1, Intuitivamente esperamos que a condutância cresça com o aumento da seção transversal do condutor e que decresça com o aumento do comprimento. Estas duas relações são verificadas e podem ser expressas matematicamente como^[17]:

$$G = \sigma \frac{A}{L_z} \quad (2.3)$$

onde σ é uma constante característica do material, denominada condutividade elétrica.

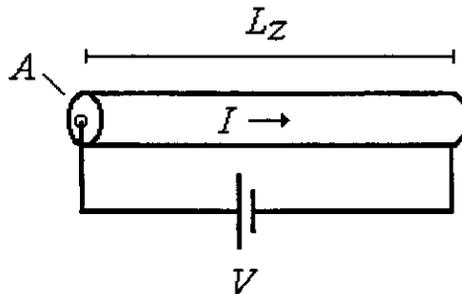


Figura 2.1. Fio metálico de seção transversal uniforme, com área A , e comprimento, L_z . A diferença de potencial V provoca a corrente I .

Na interpretação dada à lei de Ohm, a relação entre corrente e tensão tem origem no espalhamento sofrido pelos elétrons que estão transportando carga no condutor^[17]. Esta explicação da condução de elétrons nos metais se aplica muito bem para casos macroscópicos, mas o que devemos esperar quando diminuimos suas dimensões para valores da ordem do nanômetro? Neste caso, dois valores característicos do condutor devem ser analisados: o comprimento de onda dos elétrons de condução ($\lambda_{\text{elétron}}$) e o livre caminho médio dos elétrons (λ_{lcm}):

- A) Quando o diâmetro do condutor é da ordem de $\lambda_{\text{elétron}}$ (alguns nanômetros para metais como Au, Cu entre outros)^[18], o comportamento ondulatório dos elétrons torna-se preponderante. Neste caso, a condução de elétrons ocorre analogamente ao transporte de ondas eletromagnéticas em guias de ondas, onde o condutor é o guia. Devido a um efeito de confinamento, no nanofio ocorre a discretização do momento transversal permitido para os elétrons de condução, gerando canais equivalentes aos modos de um guia de onda.
- B) Em condutores com comprimento muito menor que λ_{lcm} (dezenas de nanômetros para os metais)^[18], o espalhamento ocorre principalmente nas interfaces e bordas do condutor. Estes sistemas são chamados condutores balísticos e neles a condutividade é basicamente determinada pela densidade de elétrons de condução, pela sua geometria e, principalmente, é independente do material^[19].

Para realizarmos uma análise mais detalhada^[5,19] consideremos, por razões de simplicidade, um condutor infinito e de seção transversal retangular, figura 2.2. Os elétrons estarão sujeitos a um potencial $V(x, y, z)$, que pode ser aproximado por:

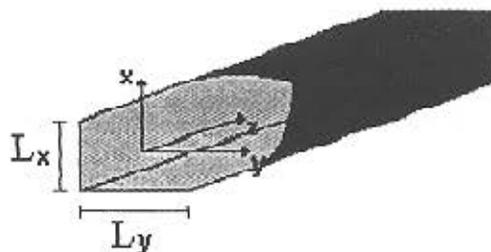


Figura 2.2. Aproximação do condutor por um fio infinito, de seção transversal retangular.

$$V(x, y, z) \begin{cases} = V(z) & \begin{cases} -\frac{L_x(z)}{2} < x < \frac{L_x(z)}{2} \\ -\frac{L_y(z)}{2} < y < \frac{L_y(z)}{2} \end{cases} \\ \rightarrow \infty & \text{for } (x, y) \text{ outside the rectangle} \end{cases} \quad (2.4)$$

Usando o método da separação de variáveis^[20], podemos escrever a solução da equação de Schrödinger para um elétron neste condutor como:

$$\Psi(x, y, z) = \sum_n \chi_{z,n}(x, y) \phi_n(z) \quad (2.5)$$

e a energia correspondente:

$$E = E^z + E_n^\perp \quad (2.6)$$

onde E^z pode assumir um contínuo de valores e

$$E_n^\perp = \frac{\hbar^2}{8\mu} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2(z)} + \frac{n_y^2}{L_y^2(z)} \right) \quad (2.7)$$

onde μ é a massa efetiva do elétron, \hbar é a constante de Planck, n_x e n_y são valores inteiros, indicados simplesmente por n . Isto representa a discretização

de E_n^\perp devido a quantização do momento transversal do elétron, como efeito do confinamento transversal imposto pelo contorno do condutor.

Rescrevendo a equação da função de onda do elétron, temos:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + E_n^\perp(z) \right) \phi_n(z) = E \phi_n(z) \quad (2.8)$$

que é uma equação unidimensional (1D) na direção da corrente, z . As soluções para os diferentes valores de E_n^\perp definem canais 1D de transmissão.

Três considerações usadas neste desenvolvimento devem ser ressaltadas: i) aproximação do elétron livre, onde o efeito dos núcleos dos átomos que compõem o nanofio é desprezado; ii) aproximação do elétron independente, os elétrons não interagem entre si e iii) os canais correspondentes aos diferentes momentos transversais permitidos não se correlacionam.

De forma resumida, quando consideramos o confinamento transversal imposto aos elétrons que compõem nossa corrente em um condutor, obtemos que o momento transversal permitido é quantizado ($E_n^\perp(n_x, n_y)$), gerando canais de transmissão.

Consideremos agora a contribuição de cada canal para a condutância. Para isto vamos usar o formalismo de Landauer-Büttiker^[21-23], onde a condutância de um fio é interpretada em termos da probabilidade de transmissão dos elétrons.

Neste modelo, o sistema é descrito por dois reservatórios de elétrons, cada um em equilíbrio térmico e caracterizados pelos potenciais eletroquímicos μ_1 e μ_2 . Eles são ligados entre si por um condutor 1D (que representa cada canal, indexado por i), cuja probabilidade de transmissão T_i caracteriza completamente a passagem de elétrons de um reservatório para outro (figura 2.3).

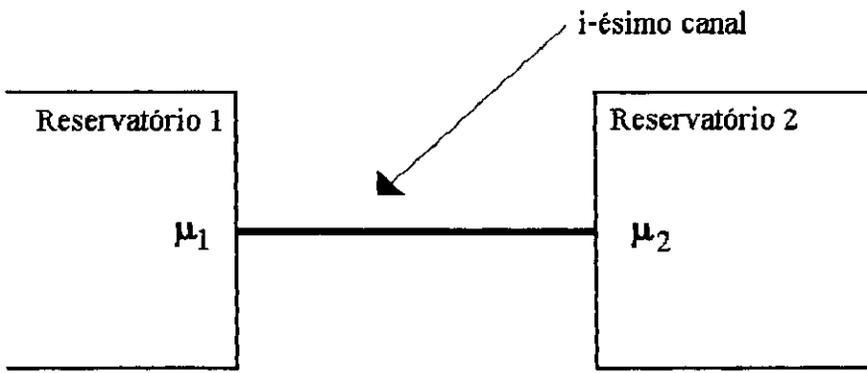


Figura 2.3. Modelo usado na descrição da condutância no formalismo de Landauer-Büttiker. Dois reservatórios de elétrons, com potenciais eletroquímicos μ_1 e μ_2 são ligados por um condutor unidimensional.

A densidade de estados em um sistema 1D é:

$$g(E_F) = \frac{2}{h v_F} \quad (2.9)$$

que é tomada em torno da energia do nível de Fermi, E_F . Aqui v_F é a velocidade dos elétrons no nível E_F e é considerada a degenerescência do spin (fator 2).

A corrente por estado é dada por:

$$I_i = e v_F T_i \quad (2.10)$$

da onde podemos definir uma densidade de corrente:

$$I_i(E_F) = g(E_F) I_i = \frac{2e}{h} T_i \quad (2.11)$$

que se origina da diferença entre os potenciais eletroquímicos e pode ser representado em termos de uma diferença de potencial:

$$\Delta E = \mu_1 - \mu_2 = eV \quad (2.12)$$

Com isso, a corrente será:

$$I_i = I_i(E_F)\Delta E = eV \frac{2e}{h} T_i = \frac{2e^2}{h} VT_i \quad (2.13)$$

Usando a definição de condutância (expressão 2.1):

$$G_i = \frac{I_i}{V} = \frac{2e^2}{h} T_i \quad (2.14)$$

e estendendo esta equação para os vários canais que podem ser ocupados e que não interagem entre si, temos:

$$G = \sum_i G_i = \frac{2e^2}{h} \sum_i T_i \quad (2.15)$$

Os canais ocupados são aqueles cuja energia transversal (E_n^\perp) é menor que a energia do nível de Fermi^[19]. Disto já podemos concluir que se $E_n^\perp(z) > E_F$, então este canal está desocupado, conseqüentemente $T_i = 0$.

Como nossos condutores são supostos balísticos, como já indicado em B), os elétrons podem, em média, passar através do condutor sem sofrer espalhamento e portanto com transmissão total para os canais ocupados: $T_i = 1$ para $E_n^\perp(z) < E_F$.

Então, podemos escrever:

$$G = nG_0 \quad (2.16)$$

onde

$$\sum_i T_i = n \quad \text{e} \quad G_0 = \frac{2e^2}{h} \left(= \frac{1}{12,9k\Omega} \right) \quad (2.17)$$

com n um inteiro igual ao número de canais ocupados ($E_n^{\downarrow}(z) < E_F$).

Resumidamente, em um condutor metálico qualquer, onde $L_z \ll \lambda_{lcm}$ e $A^{1/2} \sim \lambda_{el\acute{e}tron}$, o valor da condutância é dado por um múltiplo inteiro de G_0 . É importante notar que este quanta de condutância corresponde a um valor de resistência de fácil observação (12,9 k Ω).

Na próxima seção são apresentadas as técnicas experimentais usualmente empregadas para a observação da condutância em nanofios metálicos.

2.2. Observação

Num nanofio metálico, somente os canais com energia E_n^{\downarrow} menor que E_F estão ocupados e contribuem a condutância. Dado que o número e posição destes canais em relação ao nível de Fermi dependem basicamente da geometria do condutor, poderíamos observar a quantização da condutância fazendo medidas em sistemas de diferentes seções transversais. Entretanto a obtenção destas estruturas nanométricas com forma e tamanho suficientemente controlados não é possível com a tecnologia atualmente disponível^[24,25].

A maneira usualmente utilizada para se observar este efeito é realizar medidas de condutância em fios nanométricos enquanto variamos as suas dimensões. Mudando a seção transversal do nanocondutor alteramos a posição em energia dos canais de transmissão. Durante o processo, a energia dos níveis pode tornar-se maior ou menor que aquela do nível de Fermi, variando conseqüentemente o número de canais ocupados (n). As medidas de condutância são realizadas geralmente em função do parâmetro que mede a variação de sua seção transversal. Particularmente, no nosso experimento as curvas são obtidas pela digitalização de um sinal através de um osciloscópio, e conseqüentemente, em função do tempo. Na figura 2.4 temos uma representação simplificada de quando ocorre a ocupação de um canal (figuras 2.4a e 2.4b) ou a desocupação (figura 2.4c e 2.4d). Assim sendo, o que observamos

nas curvas de condutância são patamares separados por saltos abruptos cuja altura é um múltiplo inteiro de G_0 .

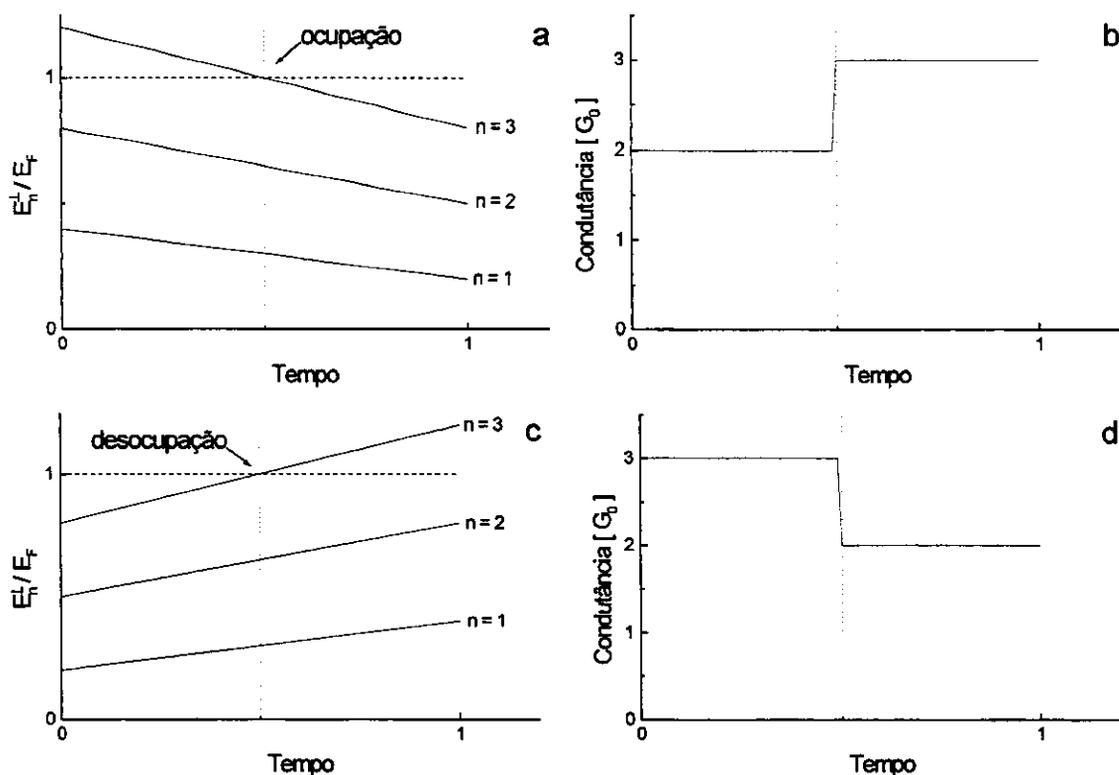


Figura 2.4. Em a) é mostrado a variação da energia dos canais de transmissão enquanto deformamos o nanofio, promovendo a ocupação de um canal. Isto se reflete em um salto de G_0 na condutância, representada em b). Em c) e d) é mostrado a desocupação de um canal.

Os primeiros experimentos que demonstraram a quantização da condutância não foram feitos com contatos metálicos pontuais, e sim com gases de elétrons confinados bidimensionalmente (2D) em heteroestruturas semicondutoras^[1]. Nestes sistemas o nanofio é gerado por constrições obtidas pela aplicação de potenciais elétricos. Analogamente ao descrito acima, nas curvas de condutância verifica-se patamares nos valores múltiplos inteiros de G_0 , separados por saltos (figura 1.1).

Mais recentemente, o mesmo fenômeno foi verificado em nanofios metálicos, utilizando experimentos baseados em microscópios de tunelamento (STM – Scanning Tunneling Microscope)^[2-6]. Eles consistem em pressionar sua

ponta de prova (metálica) contra uma amostra (metálica), fazendo com que ela se ligue aos átomos do substrato. Quando a ponta é afastada se formam fios nanométricos, figura 2.5. Estes nanofios são esticados ou comprimidos, mudando a sua seção transversal e provocando a ocupação/desocupação dos canais. Estes experimentos têm sido realizados em uma variedade de condições, tais como baixa e alta temperatura, no vácuo e no ar.

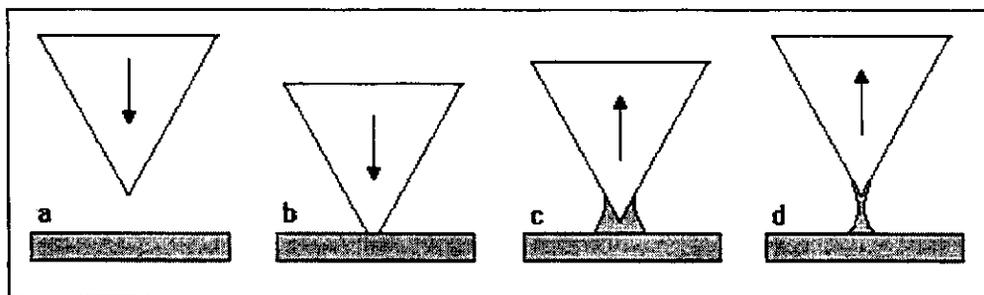


Figura 2.5. Um nanofio metálico é gerado pela compressão da ponta do STM sobre um substrato de metal, a) e b), e o subsequente afastamento, c). O nanofio é deformado afastando-se/aproximando-se a ponta da substrato, d).

Uma segunda maneira de gerar os nanocontatos metálicos é chamada de quebra mecanicamente controlada de junções (MCBJ - Mechanically Controllable Break Junction)^[7-10], figura 2.6. Nele, um filamento do material de interesse é preso em dois pontos a um substrato flexível. Depois o fio é fragilizado por um pequeno corte (sem romper o fio) entre estes pontos. Pela aplicação de uma força mecânica externa (movimento grosso) o substrato é curvado, quebrando o fio. Subsequentemente, as partes separadas são reaproximados, criando um nanocontato cuja seção transversal pode ser variada pelo controle da aproximação/afastamento através de um movimento fino (usualmente realizado por piezo-elementos).

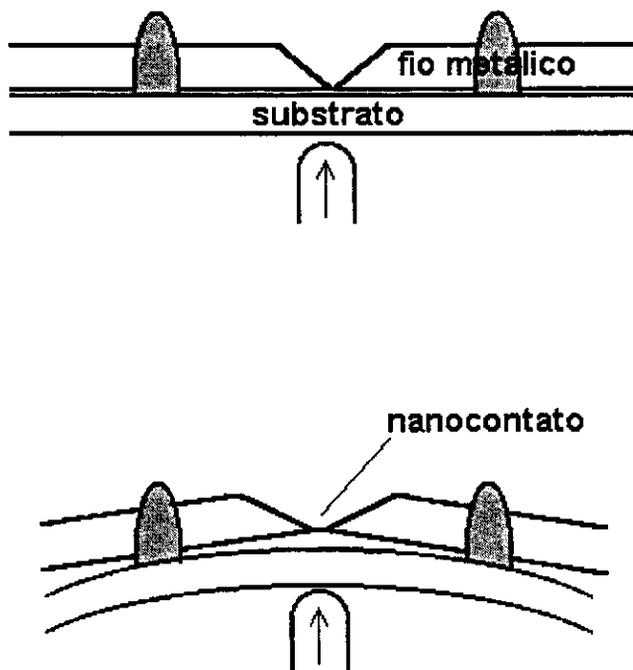


Figura 2.6. Esquema de funcionamento de um MCBJ. O substrato onde está fixado um fio da amostra é curvado, fazendo com que o fio se quebre em um lugar previamente fragilizado. Após a quebra as partes separadas são reaproximadas, formando um nanocontato.

Por último, um método bastante interessante para se produzir nanocontatos é a geração espontânea de estruturas nanométricas entre fios metálicos macroscópicos justapostos^[26,27]. Este experimento consiste na formação do nanofio pelo contato entre dois fios, onde vibrações mecânicas induzem a deformação (técnica dos fios vibrando).

Os experimentos com metais e com heteroestruturas semicondutoras apresentam diferenças importantes. Nos metais a diferença entre os níveis de energia transversais, E_n^\perp , é da ordem do eV, que é muito maior que $k_B T_{amb}$ (\sim meV) e portanto o experimento pode ser realizado à temperatura ambiente. Além disso, resultados interessantes têm sido obtidos no ar. Por outro lado, os experimentos com as heteroestruturas semicondutoras são mais difíceis de se realizar porque a diferença entre os níveis de energia dos semicondutores é da

ordem de alguns $\text{meV}^{[5]}$, requerendo baixa temperatura (~ 4 K) e ultra-alto-vácuo.

Os aspectos básicos que diferenciam as técnicas apresentados são: a) a estabilidade do nanocontato gerado e b) o controle em sua deformação. Na técnica dos fios vibrando, o tempo típico de medida é da ordem de μs e a sua deformação ocorre de forma quase aleatória, pois é provocado por vibrações mecânicas^[26,27]. Os experimentos com STM e MCBJ apresentam desempenhos semelhantes, com tempo de estabilidade do nanocontato de $\text{ms-s}^{[2-10]}$. Em ambos, a deformação é controlada por piezo-elementos. Entretanto, no MCBJ o movimento fino é intermediado por um substrato, que funciona como uma redução e também torna a montagem mecanicamente mais estável^[7].

Resumindo, a quantização da condutância tem sido observada pela indução da ocupação/desocupação de canais de condução, provocados pela variação do perfil do condutor. Os sistemas geralmente usados são constrições em gases 2D de elétrons e nanofios metálicos. A escolha do segundo para os estudos desta tese se deve à sua maior flexibilidade (temperatura e pressão). Os experimentos usuais para a obtenção dos nanocontatos são MCBJ, STM e técnica dos fios vibrando.

A próxima seção apresenta alguns resultados experimentais que ilustram a observação da quantização da condutância.

2.3. Resultados típicos

As medidas da condutância em nanofios metálicos têm sido feitas em nanocontatos onde variamos a sua seção transversal. Devido à quantização, nas curvas de condutância (em função do tempo no nosso caso) deveremos observar patamares, localizados nos múltiplos inteiros de G_0 e separados por saltos abruptos, que ocorrem quanto há ocupação/desocupação de canais. Outra representação geralmente empregada é a contagem do aparecimento de cada valor de condutância em uma única medida (histogramas simples). Nestes gráficos, na posição dos patamares devemos observar picos de contagem.

Alguns exemplos são apresentados na figura 2.7; eles foram obtidos com a técnica dos fios vibrando.

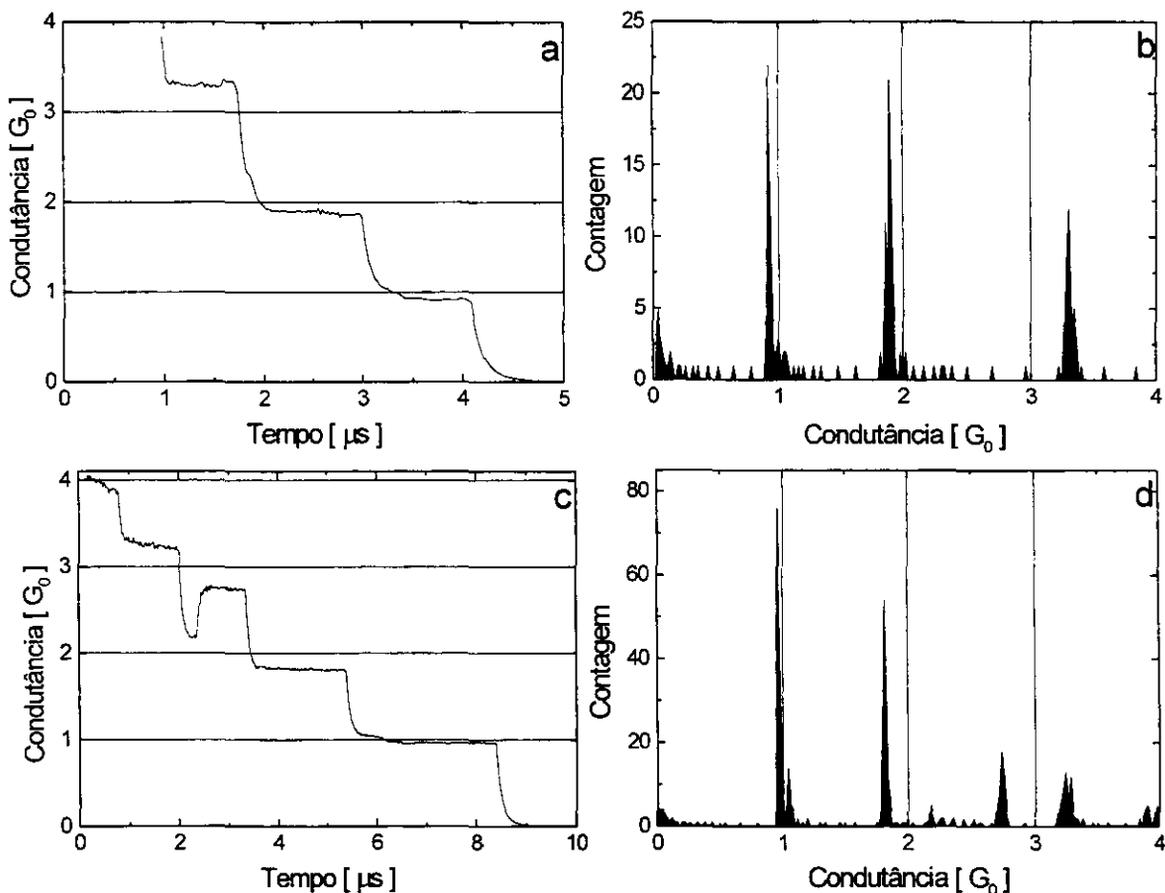


Figura 2.7. As curvas a) e c) correspondem a condutância medida em nanocontatos gerados em experimento usando a técnica dos fios vibrando. Em b) e d) são representados as curvas a) e c), respectivamente, em forma de histograma.

Através de uma simples inspeção se observa que as curvas apresentam patamares e saltos, mas os seus perfis são diferentes (não similares). Este é o resultado típico que se obtém em todos os trabalhos encontrados na literatura^[2-16] e decorre do procedimento experimental empregado. A evolução da condutância é dada pela ocupação e desocupação de canais que é determinada pela variação da forma do nanofio (evolução estrutural). Cada curva de condutância que obtemos corresponde à medida em um novo nanofio, cuja evolução estrutural durante a deformação provavelmente seja diferente. Isto se reflete nas medidas de condutância como uma não repetitividade do perfil das

curvas (não similares), apesar de se verificar a existência dos patamares e saltos. Devemos destacar que temos dois processos ocorrendo simultaneamente: rearranjos estruturais e ocupação/desocupação de canais.

Devido à esta dificuldade não é possível determinar o comportamento genérico da condutância diretamente das medidas de uma só curva. A solução usualmente empregada é a construção de histogramas de condutância globais, que se obtêm medindo um grande número de curvas e adicionando linearmente os histogramas correspondentes à cada uma^[28]. Um exemplo é mostrado na figura 2.8. O aparecimento de picos próximos aos inteiros tem sido considerado a prova da quantização da condutância^[29,30].

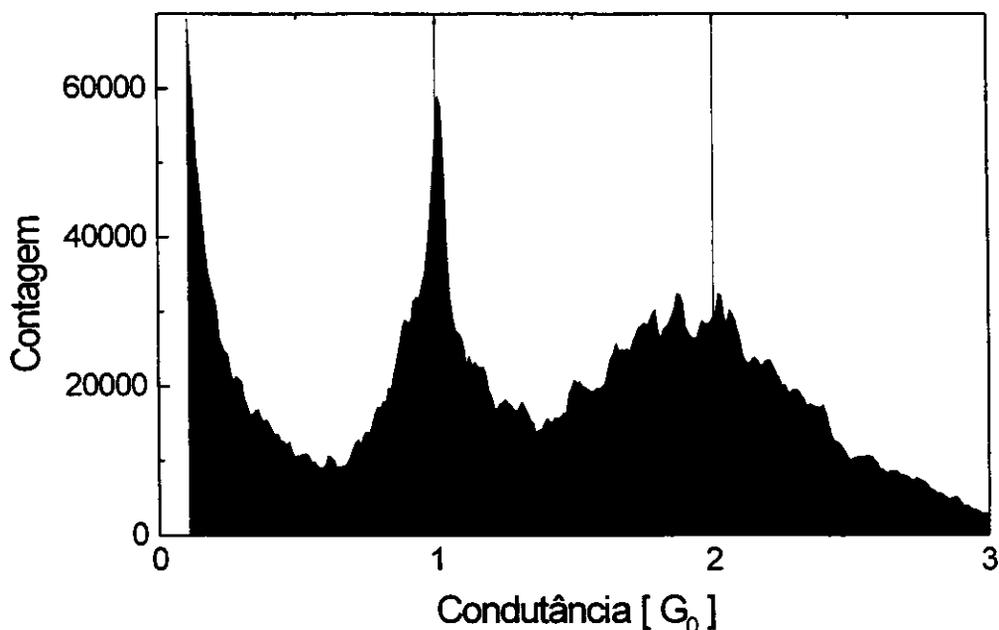


Figura 2.8. Histograma global de uma série de 2000 curvas. Podemos verificar um pico estreito em torno de $1 G_0$ e outro mais largo em $2 G_0$

Também nas medidas apresentadas na figura 2.7 podemos observar patamares de condutância que não correspondem aos múltiplos inteiros de G_0 , resultado já citado na literatura^[11-16]. Este efeito tem sido justificado como resultado (não compreendido) de impurezas/contaminação^[29] ou ajustados por uma resistência clássica ($100-1000\Omega$) em série com o sistema^[13,19,32], que corrige os picos nos histogramas globais (geralmente deslocados). No entanto, previsões teóricas mostram que impurezas/contaminação destroem a

quantização e portanto não poderiam gerar patamares deslocados dos múltiplos do quanta^[31]. As correções feitas com resistências clássicas em série não se justificam pois, para metais, uma resistência como a usada só poderia ser gerada por um sistema nanométrico e portanto no regime quântico^[12].

2.4. Objetivo

O objetivo deste trabalho é a construção de uma montagem que permita estudar contatos metálicos de dimensões nanométricas, onde fenômenos quânticos tornam-se preponderantes. Em particular, pretendemos observar nestes experimentos o comportamento da condutância dos nanofios metálicos.

Em linhas gerais, as funções do equipamento do qual nos ocuparemos pode ser dividido em três partes:

- a) gerar e manipular o nanofio;
- b) realizar as medidas;
- c) adquirir e armazenar os dados.

Além disso, necessitamos implementar sistemas de tratamento e análise de dados.

Para gerar e manipular o nanofio optamos pela montagem de um MCBJ baseado em piezo-elementos e operando em ultra-alto-vácuo (UHV). Nesta técnica o nanocontato é obtido pela quebra de um fio previamente fragilizado e pela subsequente reaproximação das partes separadas (movimento grosso). Como a quebra será realizada em UHV, os nanofios serão gerados a partir de superfícies limpas.

A pressão que desejamos alcançar é de $\sim 10^{-10}$ mbar, permitindo efetuar algumas horas de medidas (aproximadamente 6 h) antes que uma monocamada de moléculas de gás se deposite na superfície que gera o nanocontato^[33]. A estabilidade mecânica da montagem deve permitir que o nanocontato gerado tenha um tempo de duração de pelo menos alguns ms, valor obtido por instrumentos análogos em outros laboratórios.

Uma das dificuldades nos estudos da quantização da condutância em nanofios metálicos tem sido uma clara tendência em se aumentar o número de curvas obtidas (~ 900000)^[28], melhorando a análise estatística. Entretanto não se verifica uma melhora na qualidade e precisão das medidas ($\Delta G \sim 10^{-2} G_0$)^[12], o que faz parte de nossas metas.

A próxima seção descreve em detalhe o projeto e construção do experimento, bem como o desempenho de cada parte. Esta seção também inclui o desenvolvimento de um programa para o tratamento e análise dos dados.

3. Quebra Mecanicamente Controlada de Junções

Neste capítulo descrevemos o instrumento projetado e construído para estudar a quantização da condutância em nanofios metálicos. Ele é constituído de um sistema de quebra mecanicamente controlada de junções, operado em ultra-alto-vácuo. Na seção 3.1 apresentamos os conceitos globais do equipamento. Cada parte da montagem é vista em detalhe nas seções seguintes (3.2 à 3.6). A seguir, descrevemos uma montagem simplificada do MCBJ que opera no ar (seção 3.7); trata-se de um protótipo do aparelho e que foi usado para avaliar os mecanismos propostos e testar os instrumentos de medida e processos de análise. Na seção 3.8 apresentamos um sistema de tratamento de dados automatizado, que foi implementado e testado. Por último, na seção 3.9 resumimos os aspectos principais do instrumento.

3.1. Concepção

O MCBJ consiste em um mecanismo onde um nanofio metálico é gerado pela quebra, *in situ*, de um fio macroscópico previamente fragilizado e pela posterior aproximação das partes separadas. Na figura 3.1 mostramos esquematicamente todo o conjunto da montagem experimental.

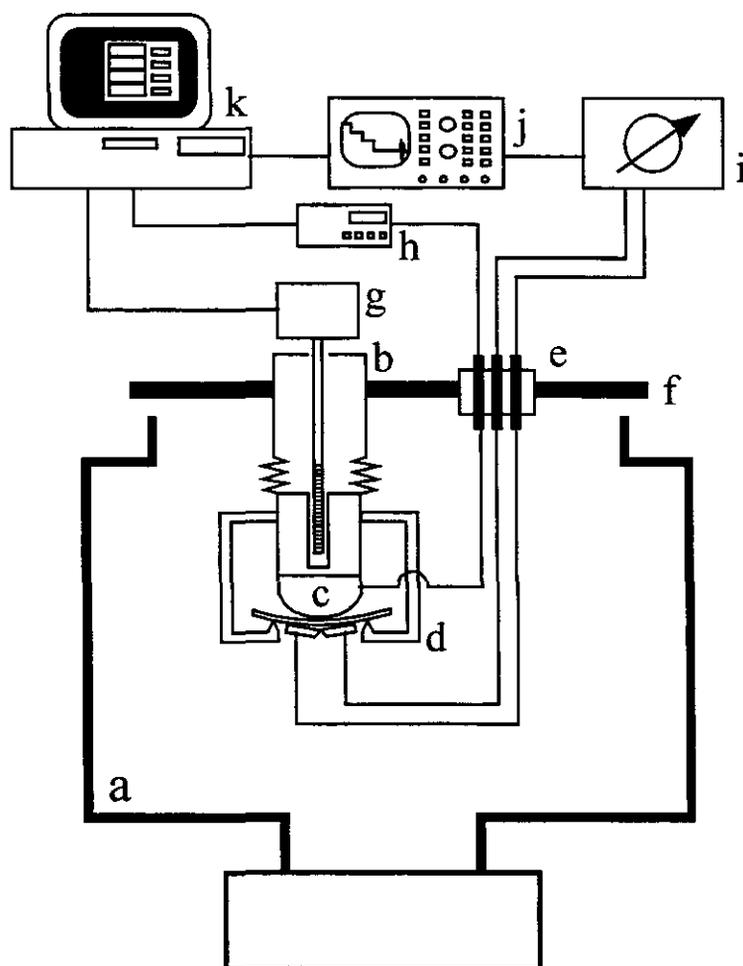


Figura 3.1. Esquema da montagem experimental.

- a) Câmara de vácuo e sistemas de bombeamento;
- b) Transdutor mecânico (passante): realiza o movimento grosso que quebra o fio e reaproxima as partes separadas ;

- c) Piezo-elemento: fixo na ponta móvel do passante mecânico, é ele que realiza o movimento fino, responsável pela deformação do nanocontato;
- d) Porta-amostra: suporta o substrato onde é fixado o fio metálico;
- e) Passantes elétricos: para as medidas de condutância e alimentação do piezo;
- f) Flange superior: onde são montados os passantes ;
- g) Motor de passo: controlado pelo sistema Local Control, é ele que movimenta o passante mecânico;
- h) Fonte de tensão de alimentação do piezo;
- i) Instrumento de medida da condutância do nanofio;
- j) Osciloscópio digital: responsável pela aquisição e digitalização dos dados;
- k) Microcomputador: centraliza o controle do experimento e armazenamento dos dados.

Cada uma das partes é descrita em detalhe nas seções seguintes deste capítulo.

3.2. Câmara de vácuo

Como descrito acima, o nanofio será gerado a partir de superfícies obtidas pela quebra de um fio macroscópico, *in situ*, em ultra-alto-vácuo, garantindo a sua limpeza. A pressão desejada é de $\sim 10^{-10}$ mbar, permitindo efetuar algumas horas de medidas (aproximadamente 6 h) antes que uma monocamada de moléculas de gás se deposite na superfície que gera o nanocontato. A figura 3.2 mostra esquematicamente a câmara de vácuo onde será montado o MCBJ.

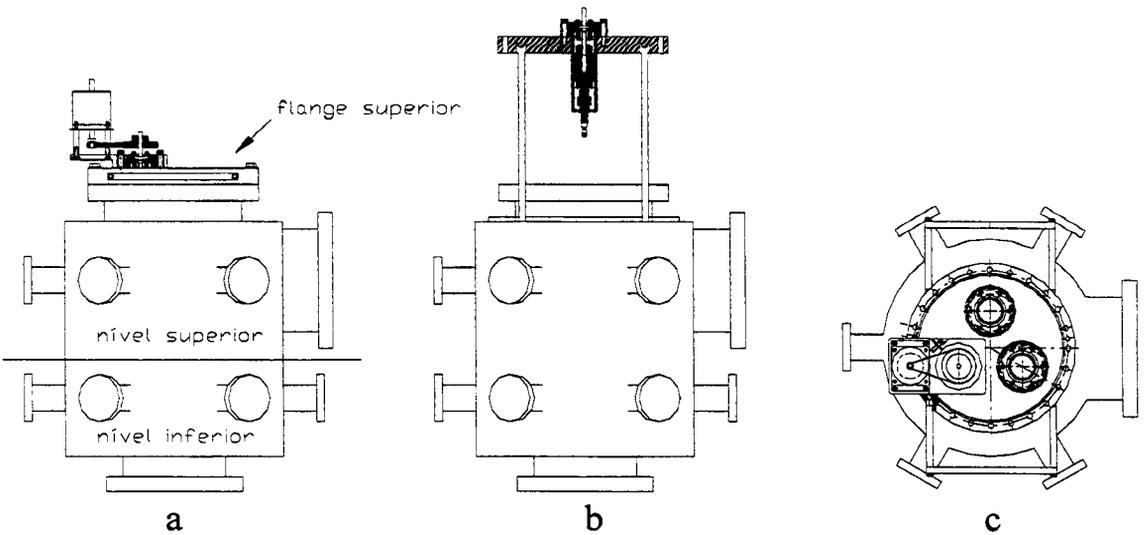


Figura 3.2. Esquema da câmara de vácuo. a) vista lateral, b) vista lateral com a flange superior aberta, c) vista superior.

No esquema pode ser observado que esta câmara é, conceitualmente, separada em três partes: nível superior, nível inferior e flange superior.

Todos os equipamentos do sistema de vácuo (bombas e medidores) estão montados no nível inferior. Uma bomba iônica de velocidade de bombeamento de 100 l/s é conectada à flange inferior (uma CF150). Nas flanges laterais (CF40) são conectados:

- a) um sistema de bombeamento primário composto de uma válvula metálica, um conjunto de bomba turbo de velocidade 260 l/s e uma bomba tipo diafragma com vazão de 2 m³/h;
- b) um medidor de pressão tipo Pirani e um tipo cátodo-frio.

As flanges do nível superior (5 CF40 e uma CF100) não estão sendo usadas, mas destinam-se a conexões e modificações futuras do MCBJ.

Na flange superior (uma CF200) estão embutidas 3 flanges CF40, onde são montados (figura 3.2c):

- a) o passante mecânico;

- b) um passante elétrico de 20 vias para UHV, que destina-se, inicialmente, à alimentação do piezo-atuador;
- c) um conjunto de 3 conectores para cabos coaxiais (conectores BNC), montados em uma flange CF40. Através deles são realizadas as medidas de condutância.

O objetivo de localizar todas estas ligações na flange superior é de poder remover o MCBJ sem desconectá-las

Na figura 3.2b pode também ser observada a existência de hastes na câmara e de alças na flange superior. Elas foram introduzidas para sustentá-la logo acima da sua saída, facilitando a manipulação.

As peças da câmara foram construídas e montadas no LNLS. Um tratamento de eletropolimento foi aplicado objetivando uma maior limpeza de sua superfície. Todo o sistema foi montado e submetido a um tratamento térmico. A pressão final alcançada foi de $5.4 \cdot 10^{-10}$ mbar, o que corresponde a faixa de pressão estabelecida no projeto, permitindo um tempo de operação de ~ 1 hora até que se forme uma monocamada de gás sobre a amostra.

3.3. Passante mecânico

Para quebrar o fio, *in situ*, foi projetado e construído um passante mecânico, descrito esquematicamente na figura 3.3.

1) O movimento é feito por um motor com 400 passos por volta.

2) Uma redução de 8:1 liga o motor ao restante da montagem.

3 e 4) Sistema de conversão rotação/translação, composto de um conjunto de porca e parafuso com 0,5 mm por passo. O eixo 3 (parafuso) é rodado pelo motor enquanto a bucha roscada 4 (porca) só tem liberdade de translação.

5) Caneta fixa na bucha 4. Ela translada a sua ponta para curvar o substrato e quebrar o fio.

6) Um "bellows", responsável por separar a parte que está na atmosfera (itens 1 à 4, 12 e parte do 5) da parte que está no vácuo. É ele também que

garante a rigidez do sistema aos movimentos de rotação da bucha 4 e da caneta 5.

7 e 8) Na ponta da caneta temos um piezo-atuador. Para que seja evitado contatos elétricos entre a alimentação do piezo e o restante da montagem, eles são separados pelas cerâmicas 7 e 8.

9) Piezo-atuador.

10) Para que a ponta da caneta que toca o substrato seja centrada, temos na cerâmica 8 um capuz com a forma de meia esfera.

11) Todo este sistema é suportado por um tubo em uma flange CF40.

12) Uma bucha esférica faz com que a caneta deslize suavemente pelo tudo da CF40, sem folga.

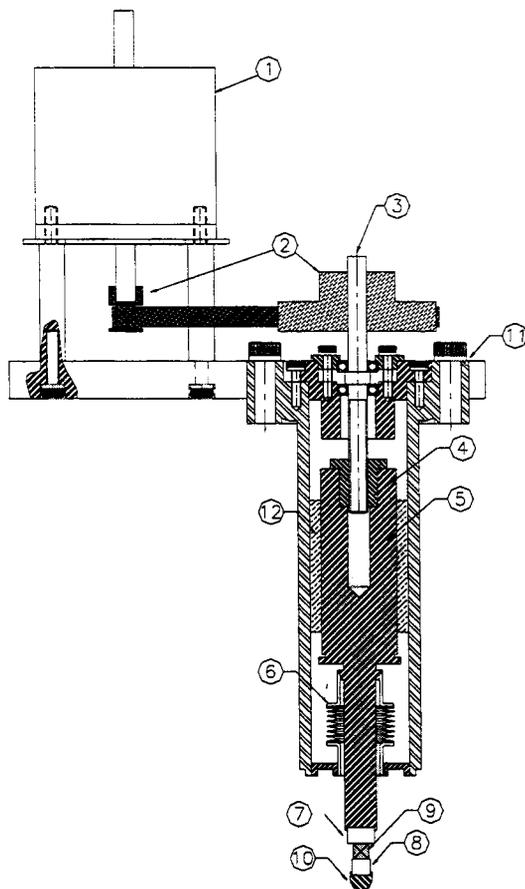


Figura 3.3. Desenho esquemático do passante mecânico do MCBJ, que funcionará no vácuo. A montagem consiste em motor de passo e primeiro sistema de redução (1 e 2), sistema de conversão de movimento rotacional para translacional (3-5), piezo-atuador (9) e estrutura do aparato (6-8, 10-12).

O controle do motor e o monitoramento da posição do passante são feitos pelo computador utilizando um sistema desenvolvido no LNLS, denominado Local Control (Loco).

Considerando o número de passos por volta do motor (400), a redução do conjunto de polias (8:1) e o comprimento do passo no parafuso (0.5 mm), o deslocamento da ponta é de $\sim 0.150 \mu\text{m}/\text{passo}$. O curso total da ponta é de 10 mm, o que corresponde à ~ 66000 passos.

A caracterização do passante foi feita usando um relógio comparador, onde a menor escala é de $1 \mu\text{m}$. Na figura 3.4 está representado a medida da posição da ponta do passante em função do número de passos, para o seu curso total. As medidas foram realizadas percorrendo-se o total do comprimento do parafuso continuamente (ida e vinda) 4 vezes, com cada ponto obtido de 6 em 6 passos. Por uma regressão linear podemos verificar a linearidade do movimento e a razão deslocamento/passos, sendo obtido $\sim 0.154 \mu\text{m}/\text{passo}$, o que concorda com o esperado. O valor alcançado para passantes análogos comerciais é de $0.190 \mu\text{m}/\text{passo}$ e portanto conseguimos um desempenho $\sim 25\%$ superior.

No detalhe da figura há um trecho amplificado da curva. Nele podemos ver que as posições medidas correspondem à regressão linear, dentro da barra de erro.

Na curva da figura 3.5 é representada a dispersão da média das posições. Isto pode ser considerado como uma medida do erro cometido quando abandonamos uma posição e a ela retornamos, pelo mesmo número de passos.

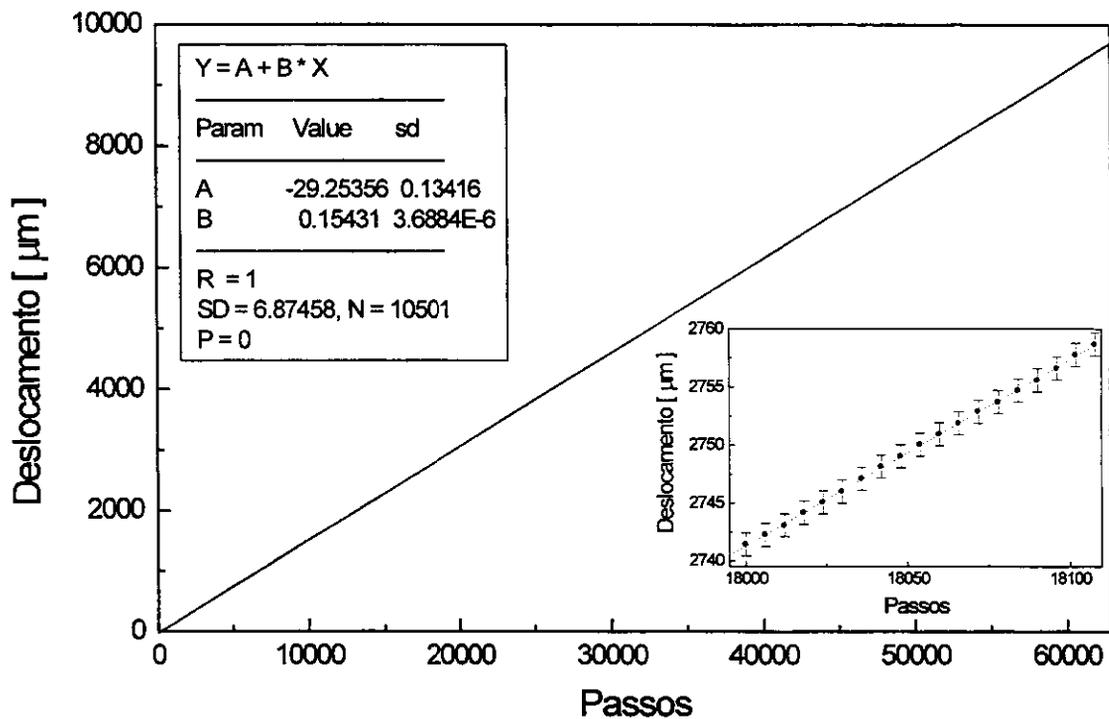


Figura 3.4. Deslocamento da ponta do translador mecânico em função do número de passos. A regressão linear resulta numa razão de 0.154 µm/ passo. No detalhe, um trecho da curva que mostra que a linearização se encontra dentro da barra de erro.

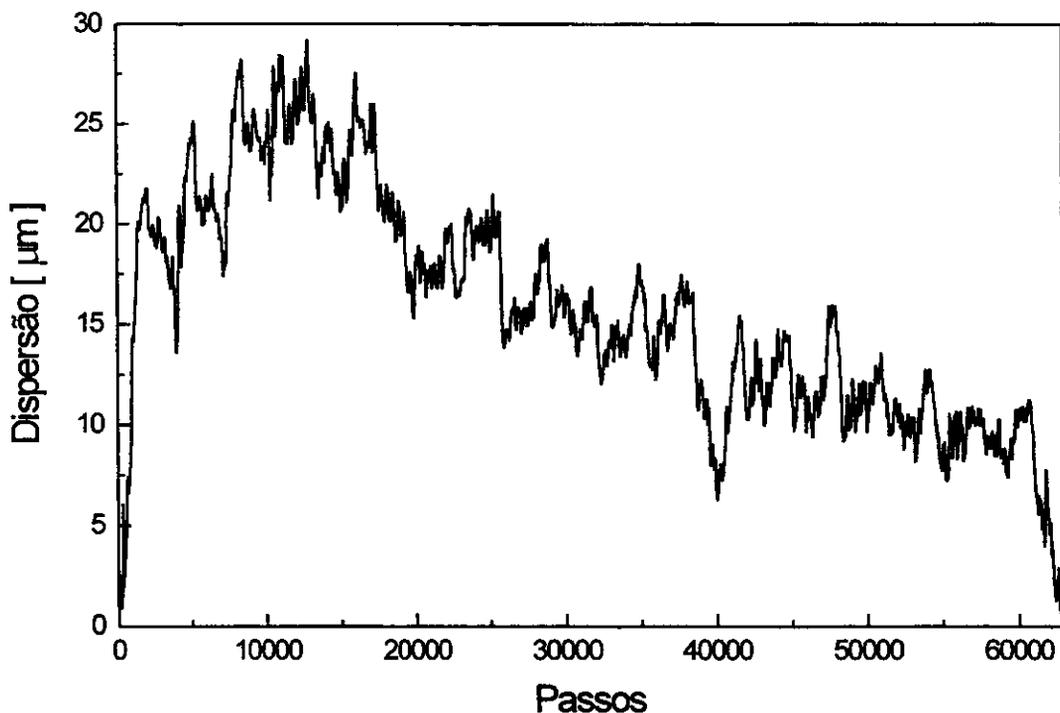


Figura 3.5. Dispersão na medida da posição da ponta do translador. Isto reflete o erro que se obtém deixando uma posição e retornando a ela pelo mesmo número de passos.

3.4. Piezo-atuador

O movimento que curva o substrato para deformar os nanofios é realizado por um piezo-elemento, fixo na ponta do passante. O piezo-elétrico que utilizamos é um atuador comercial (Morgan Matroc 70037-2 PZT-4S) e o seu deslocamento é de 8,5 nm/Volt.

A fonte de alimentação usada (Keithley 487) disponibiliza uma faixa de tensão de -300 a 300 V, com incremento de 1 mV. Com ele temos um deslocamento do piezo de 2.55 à -2.55 μm com passo de 0.085 Å.

Na configuração usada no MCBJ, a direção de aproximação/afastamento das partes do fio quebrado é aproximadamente perpendicular à direção de deslocamento do atuador. Esta mudança é realizada pelo substrato, que funciona como uma redução que grosseiramente é estimada em algumas centenas. Por isso, a deformação de nanofios em um MCBJ é controlada e estável.

3.5. Porta-amostras

O porta-amostras tem a função de sustentar o substrato onde é fixado o fio metálico que será utilizado para gerar o nanocontato (esquemático na figura 3.6).

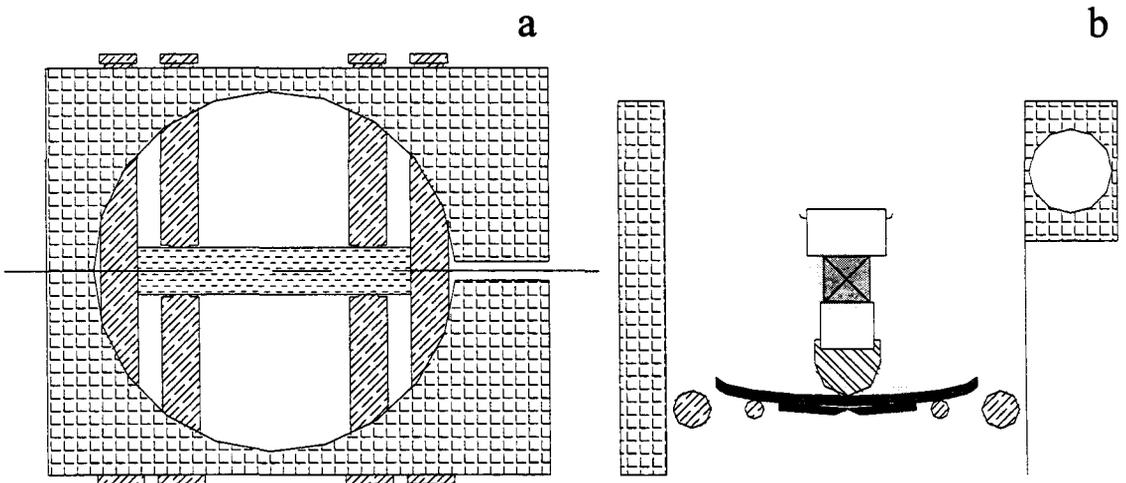


Figura 3.6. Esquema do porta-amostras. Em a) uma vista superior. Em b) um corte na montagem, onde é visto o substrato, a amostra e a ponta do passante mecânico.

No instrumento, ele fica fixo em relação a ponta do passante. Ele sustenta o substrato por dois pontos de apoio e contra o piezo, para que se deforme (figura 3.6b).

Esta peça é feita em aço inox e foi banhada em prata, para que a sua superfície não venha a colar com o resto da montagem, também feita em aço inox, por estarem em UHV.

3.6. Sistema de medida e aquisição

Os mecanismos do MCBJ discutidos até o momento são responsáveis por gerar e deformar o nanofio. Nesta seção descrevemos os componentes que realizam as medidas e a aquisição das curvas de condutância.

Quando uma diferença de potencial (V) é aplicada ao nanocontato é obtida uma corrente (I) e a condutância (G) deste sistema é definida como a razão I/V . Para realizar as medidas de I e V foi usada a montagem esquematizada na figura 3.7, onde um amperímetro submete o nanofio a uma tensão e mede a corrente gerada, ambas sendo monitorados por um osciloscópio.

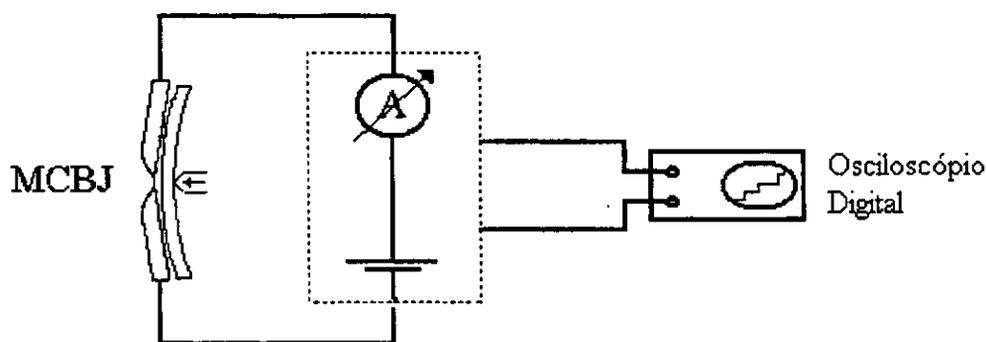


Figura 3.7. Esquema do sistema de medida e aquisição das curvas de condutância.

O amperímetro usado foi desenvolvido no LNLS para ser empregado especificamente nesta montagem e é esquematizado na figura 3.8. Nele a tensão aplicada no nanocontato é ajustável, variando de 0 a 2 Volts. A corrente

medida é convertida, proporcionalmente, em tensão, com ganho variável (0 a 12 Volts). O instrumento empregado para aquisição de V e da tensão proporcional a I é um osciloscópio digital de 500 MHz, com 4 canais e uma amostragem de 2 GS/s (Tektronix TDS540C).

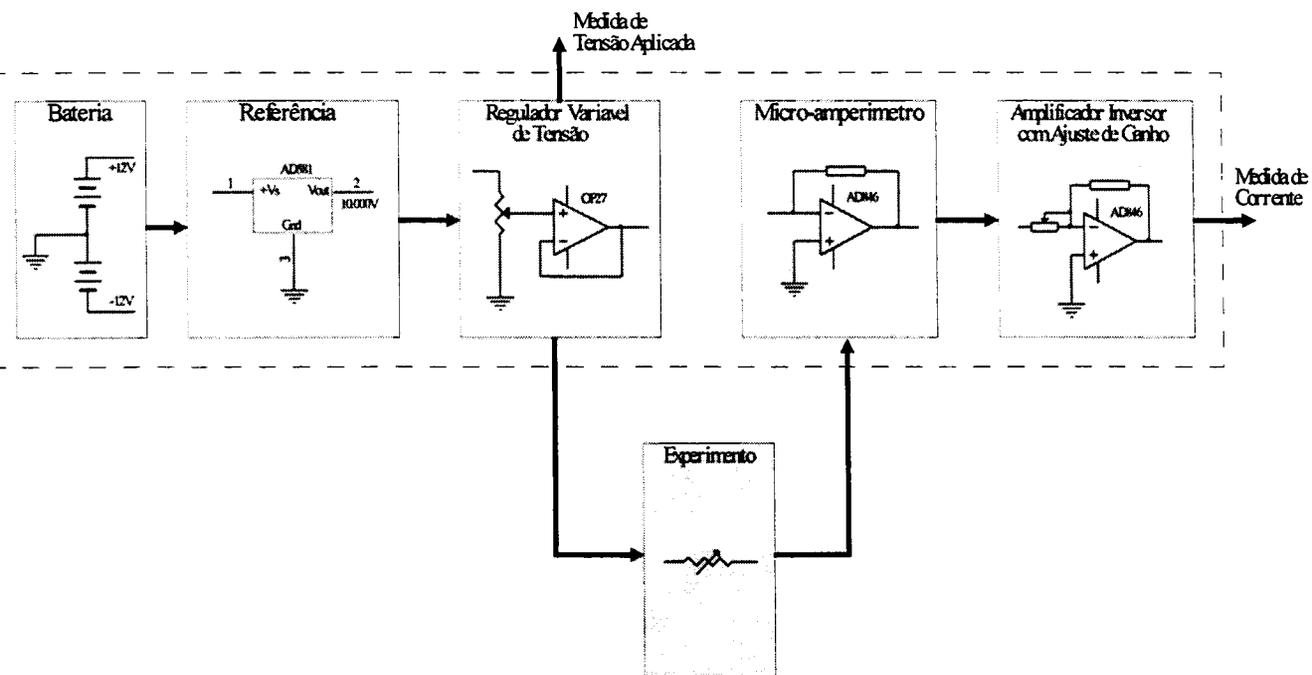


Figura 3.8. Esquema do amperímetro desenvolvido no LNLS.

Com o objetivo de caracterizar o amperímetro foram feitas medidas de condutância em um condutor de resistência variável ($R = 1/G$). A tensão aplicada foi de 100 mV e o ganho ajustado para que uma corrente de 10 μ A gere uma tensão de saída de 200 mV. Os resultados são representados na figura 3.9, onde em a) podemos ver a linearidade entre a condutância aplicada e a medida e em b) o erro absoluto obtido.

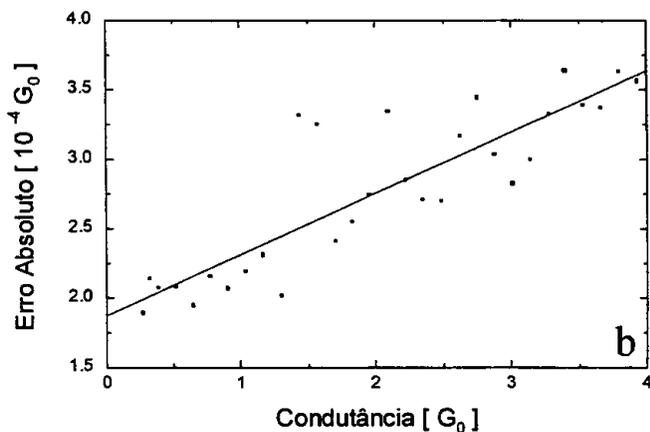
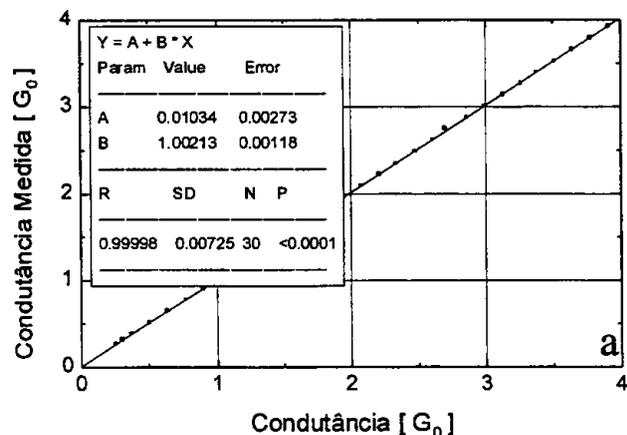


Figura 3.9. a) Curva de linearidade da medida de condutância utilizando o amperímetro. b) Erro absoluto na medida.

O parâmetro importante desta caracterização é o erro absoluto. Ele nos indica a contribuição da eletrônica de medida na largura dos patamares (ou picos). Na medidas de condutância, o valor do erro em nosso instrumento é de $\sim 10^{-4} G_0$, enquanto que o valor alcançado em outros experimentos é de $\sim 10^{-2} G_0$ ^[12].

A variação de um patamar de condutância para outro é dado pela ocupação/desocupação de canais de transmissão, que ocorre quanticamente, ou seja de forma abrupta. Por isso, é importante que o sistema de medida seja rápido e possa acompanhar esta variação, dentro da escala de tempo da medida. Em experimentos preliminares, foram obtidos tempos de $\sim 1 \mu s$ para saltos na condutância de $\sim 1 G_0$.

3.7. MCBJ no ar

Antes de finalizar a descrição do instrumento, apresentamos o protótipo do MCBJ que opera no ar e que foi usado como plataforma de desenvolvimento do sistema definitivo. Com ele foram estudados e testados:

- a) os elementos mecânicos;
- b) as eletrônicas de medida;

3.8. Tratamento de dados

Como verificação da quantização deveremos observar patamares nas medidas de condutância em função do tempo (nosso caso). Sendo eles localizados nos múltiplos inteiros de G_0 e separados por saltos abruptos. Para uma melhor visualização dos resultados são construídos histogramas (simples) de valores de condutância de cada curva, onde, na posição dos patamares devemos observar picos de contagem (seção 2.3). Como as curvas não apresentam perfis idênticos, o comportamento global da condutância é obtido em histogramas globais que se obtém pela simples adição dos histogramas simples. No entanto, este procedimento apresenta alguns problemas:

- a) Devido aos níveis de ruído das medidas ($\Delta G \sim 10^{-2} G_0$ nos experimentos da literatura), os picos próximos dos inteiros são bastante largos (largura à meia altura $\sim 0.3-0.5 G_0$).
- b) Os patamares múltiplos inteiros e de n menores ($n = 1,2$) aparecem mais frequentemente. Isto dificulta a observação de possíveis subestruturas, bem como a existência dos patamares correspondentes aos não inteiros.

Uma solução para esta dificuldade é não mais considerar histogramas de condutância, mas sim de patamares. As vantagens deste processo são:

- a) As medidas que não se referem aos patamares não são incluídas nos histogramas;
- b) O processo de localizar o patamar e medir o seu valor reduz os ruídos transferidos para o histograma;
- c) As diferenças no comprimento do patamar não interferem no resultado do histograma.

Além disso, podemos determinar a altura dos saltos pela diferença entre patamares consecutivos, em cada curva individualmente.

Para a construção deste tipo de histograma foi implementado um programa que automaticamente reconhece os patamares nas curvas de condutância. O procedimento que empregamos pode ser descrito como segue:

- a) Localização da posição dos saltos, feita através dos picos na derivada das curvas de condutância em função do tempo;

- b) Verificação da existência de patamares antes e depois dos saltos. Neste processo, os critérios que definem um patamar são: i) um comprimento mínimo; ii) dispersão na média de seu valor inferior a um valor pré-definido. Isto garante a sua planicidade e um erro máximo no valor da condutância.
- c) contagem de todos os patamares localizados construindo um único histograma;
- d) no item b) a partir da existência de um patamar antes e depois do salto podemos calcular a sua altura.

Na figura 3.11 temos 4 exemplos de curvas de condutância obtidas com o MCBJ no ar (seção 3.7), onde este procedimento foi aplicado.

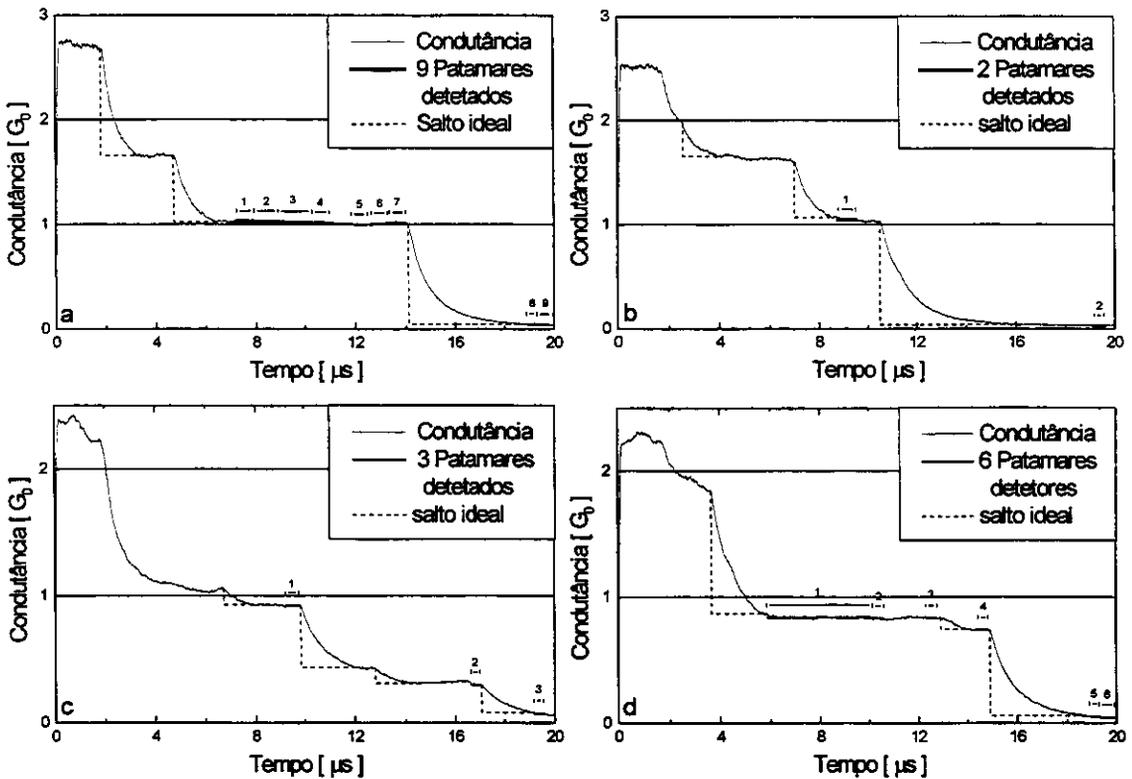


Figura 3.11. Curvas de condutância onde foi aplicado o programa de detecção de patamares e de medida de seu valor. Os saltos ideais abruptos são indicados.

O programa de reconhecimento de patamares funcionou satisfatoriamente. No entanto, através de uma inspeção nestas curvas vemos

que alguns patamares não foram detectados e outros foram divididos em vários segmentos. Isto ocorreu devido à qualidade das medidas, que apresentaram patamares e saltos muito arredondados (os saltos ideais abruptos são indicados), dificultando a sua localização. Este procedimento ainda não foi usado em dados obtidos com o MCBJ no vácuo, mas considerando as medidas preliminares incluídas na seção 4.3 (com saltos abruptos) é esperado um perfeito funcionamento do programa.

Na figura 3.12a mostramos um histograma global dos patamares e na figura 3.12b um de condutância de 2000 medidas de uma série. Em ambos temos um pico pronunciado em torno de $\sim 1 G_0$. Isto reflete a eficácia do programa de procura de patamares e também a validade dos resultados do histograma global de condutância.

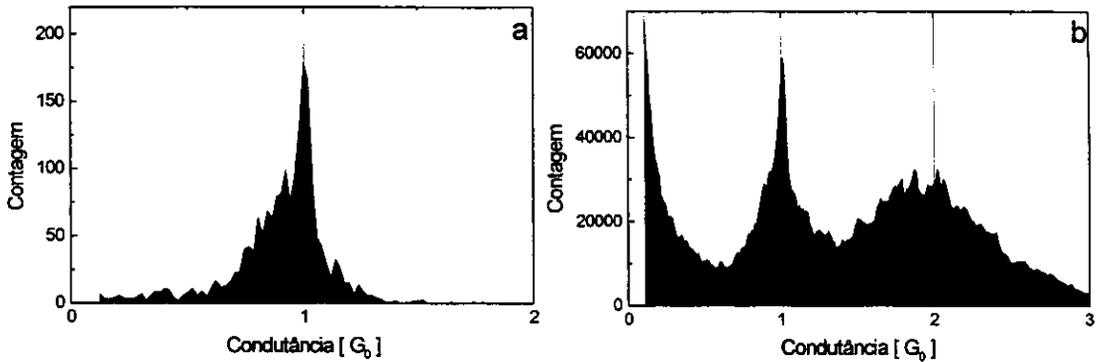


Figura 3.12. a) Histograma global de patamares e b) de condutância para a série de 2000 curvas medidas com o MCBJ no ar.

3.9. Sumário

O instrumento proposto para o estudo do efeito de quantização da condutância em nanofios metálicos é a quebra mecanicamente controlada de junções. Nele um fio é quebrado, *in situ*, em ultra-alto-vácuo, gerando superfícies limpas onde serão produzidos nanocontatos. A deformação destas estruturas é induzida através de movimentos realizados por um piezo-elemento. As medidas de condutância são feitas com o auxílio de um amperímetro, sendo digitalizadas e armazenadas por um osciloscópio. Todos os mecanismos foram projetados e

construídos, e o sistema está em plena operação. Na figura 3.13 é mostrada uma foto da montagem.

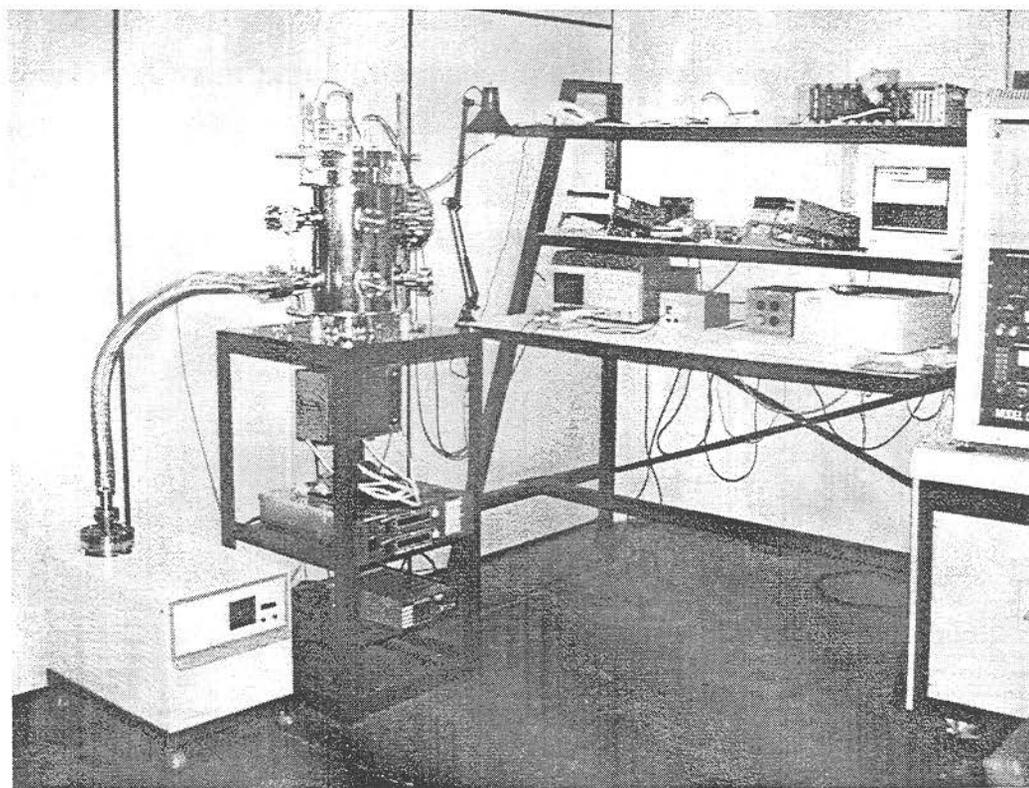


Figura 3.13. Foto do instrumento construído para o estudo da quantização da condutância em nanofio metálicos.

A pressão alcançada na câmara é de $5.4 \cdot 10^{-10}$ mbar, possibilitando um tempo de ~ 1 hora até que uma monocamada de gás se deposite na superfícies geradas pela quebra.

O sistema de quebra, composto de um passante mecânico, foi projetado e construído integralmente no LNLS. Ele permitiu um deslocamento de $\sim 0.154 \mu\text{m}/\text{passo}$ do motor, 25% menor que o obtido por passantes comerciais análogos ($0.190 \mu\text{m}/\text{passo}$). O piezo instalado para realizar o movimento fino é um atuador comercial de $8.5 \text{ nm}/\text{Volt}$.

As medidas de condutância, realizadas pelo sistema implementado ofereceram uma precisão de $\sim 10^{-4} G_0$, permitindo realizar estudos mais aprofundados, pois os valores até o momento obtidos eram de $\sim 10^{-2} G_0$.^[12]

Também foi desenvolvido procedimentos para tratamento de dados baseados na detecção de saltos e determinação dos valores dos patamares.

Com este instrumento em funcionamento, nanofios podem ser gerados e deformados de forma controlada e em ambiente limpo. As medidas de condutância, com precisão superior a atualmente alcançada, possibilitarão um melhor entendimento dos fenômenos de transporte elétrico em nanoestruturas metálicas.

No próximo capítulo são descritos e discutidos os primeiros experimentos realizados.

4. Resultados Preliminares

Neste capítulo apresentamos os primeiros resultados obtidos com o instrumento desenvolvido nesta tese, um MCBJ operando em UHV. Estas medidas tiveram como principal objetivo avaliar o desempenho da montagem. A seção 4.1 apresenta detalhes do experimento; a seguir são descritas as diversas etapas da operação: quebra do metal, *in situ*, (seção 4.2), obtenção das primeiras curvas de condutância (seção 4.3) e discussão sobre o desempenho do experimento e análise preliminar das curvas (seção 4.4). Por último, são apresentadas na seção 4.5 as perspectivas decorrentes.

4.1. Parâmetros do experimento

Nesta seção são descritas as diversas etapas do experimento e a definição dos parâmetros iniciais:

- a) O metal usado como amostra foi um fio de ouro, com diâmetro de 75 μm e pureza de 99.99%, e o substrato uma placa de acrílico de 28 x 5 x 1 mm.

O ouro foi fixado no substrato com cola epóxi comercial (Araldite). O corte que fragiliza a amostra foi feito usando um estilete comum e controlado através de um microscópio estereoscópico, com aumento de 45 x.

- b) A pressão na câmara era de 5.4×10^{-10} mbar e a temperatura ambiente.
- c) O circuito usado para a medida foi o amperímetro descrito na seção 3.6. A diferença de potencial aplicada ao nanocontato foi de 100 mV. A saída do amperímetro (diretamente proporcional à corrente) foi ajustada em 200 mV para uma corrente de $10 \mu\text{A}$ ($1,27 G_0$).
- d) Para a aquisição foi usado um osciloscópio digital, que media tanto a tensão proporcional à corrente (canal 1) como a tensão aplicada ao nanocontato (canal 2). A faixa de tensão medida pelo canal 1 foi de 0 a 600 mV (condutância de 0 a $3 G_0$) e as curvas obtidas com 5000 pontos. A resolução da medida depende da escala de tempo usada e é indicada nas curvas mostradas na seção 4.3.

Com o experimento preparado e os parâmetros das medidas ajustados, foi feita a quebra, *in situ*, do fio metálico. O procedimento empregado e o desempenho obtido neste processo são descritos na seção seguinte.

4.2. Quebra *in situ*

A idéia básica do MCBJ é que os nanofios são gerados pelo contato provocado entre duas superfícies limpas, obtidas pela quebra, em UHV de um fio do material de interesse.

Para a quebra usamos o movimento grosso, realizado pelo passante mecânico, que curva o substrato, quebrando o fio. A razão de deslocamento da ponta foi de 1 passo/100 ms (1 passo $\sim 0,15 \mu\text{m}$).

Para controlar o movimento e o rompimento do fio foi usado o comportamento da corrente. Enquanto havia contato, a corrente saturava o amperímetro e quando a corrente fosse à zero a tensão de saída seria zero. Baseado nisto, o osciloscópio foi ajustado para disparar a medida quando a

tensão do canal 1 (proporcional a corrente) passasse por 100 mV no sentido decrescente. A cada passo do motor era verificado se a medida havia sido disparada, situação na qual o mecanismo era paralisado, caso contrário, um novo passo era dado.

A quebra foi obtida com sucesso após 40 minutos, o número de passos necessários foi de ~ 10000 , portanto um deslocamento da ponta de ~ 1.5 mm. A figura 4.1a mostra uma imagem do fio montado no substrato e 4.1b o detalhe da região quebrada. Elas foram obtidas no microscópio eletrônico de varredura JSM 5900LV do Laboratório de Microscopia Eletrônica do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron.

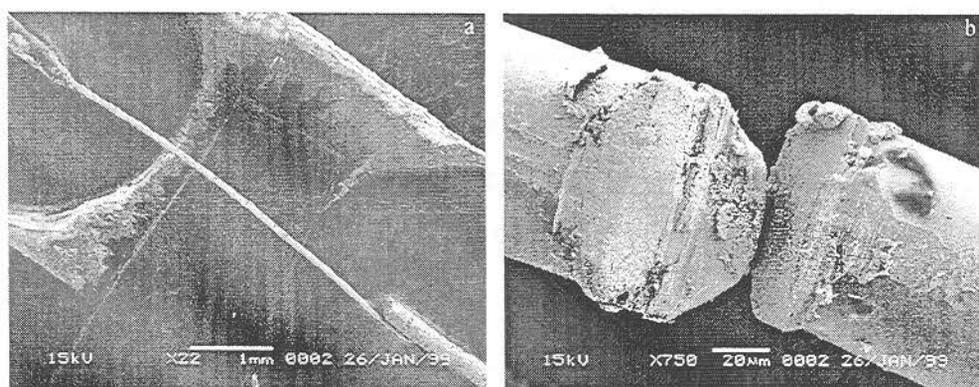


Figura 4.1. Imagem da amostra obtida por microscopia eletrônica de varredura após a sua quebra. O microscópio usado foi um JSM 5900LV. a) amostra de fio de ouro montada no substrato. b) detalhe da região fragilizada e posteriormente quebrada.

4.3. Medidas de condutância

Uma vez que foi quebrado o fio, pela aproximação e afastamento das partes separadas os nanofios puderam ser gerados.

Quando as partes estão inicialmente separadas o contato é obtido pela aproximação controlada. Isto provoca um aumento na condutância, que nos primeiros estágios deve corresponder à condução através de nanofios. O procedimento de aproximação e o comportamento da condutância esperados no estabelecimento do contato estão representados na figura 4.2.

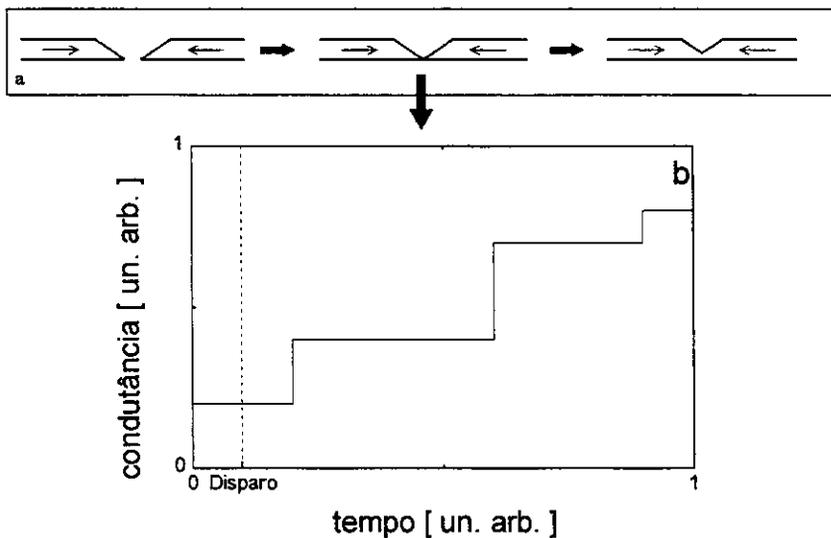


Figura 4.2. Um esquema do procedimento usado para gerar o nanofio no modo aproximação é mostrado em a). Em b) temos uma ilustração do comportamento da condutância neste modo.

Por outro lado, se as partes estão em contato e as afastamos, devemos observar uma diminuição da condutância. No limiar da separação, a condução deve ser realizada também através de nanofios e apresentar o efeito de quantização (figura 4.3).

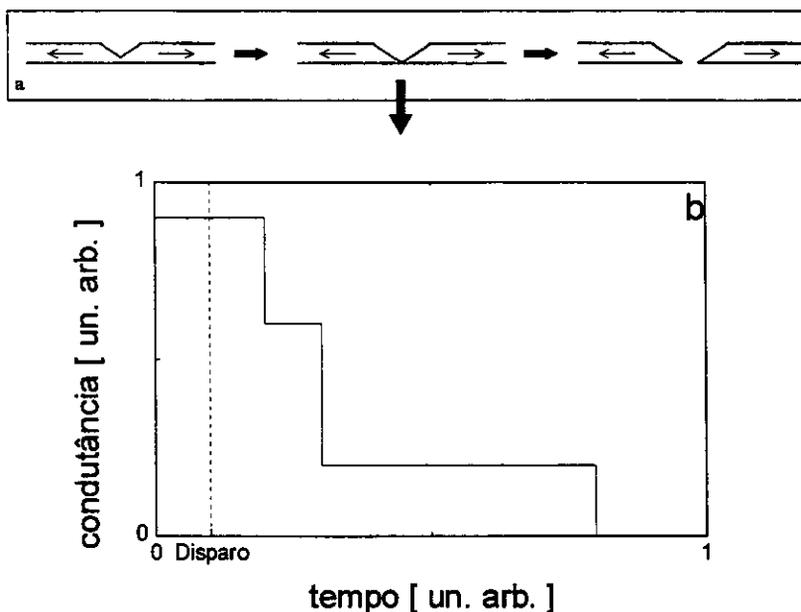


Figura 4.3. Um esquema do procedimento usado para gerar o nanofio no modo afastamento é mostrado em a). Em b) temos uma ilustração do comportamento da condutância neste modo.

Estas duas maneiras de gerar e modificar nanocontatos foram usadas separadamente em cada conjunto de medidas (séries), da onde definimos dois modos de operação: aproximação e afastamento.

No modo aproximação, inicialmente não existe contato e portanto a corrente medida é zero; aproximando as partes se obtém o contato e a corrente cresce até o limite de saturação do amperímetro, quando o contato já é macroscópico. No procedimento para a medida, a tensão aplicada ao piezo era reduzida a passos constantes e em tempos regulares. O disparo do osciloscópio foi ajustado para ocorrer quando a tensão do canal 1 passasse por um valor pré-definido, no sentido crescente. O tempo total da curva foi ajustado para acompanhar a evolução da condutância entre 0 e $\sim 3 G_0$. Para isto se supôs que este tempo seria característico de cada série e o ajuste foi feito usando as primeiras curvas. Voltaremos a este ponto quando discutirmos o desempenho da montagem. A cada passo do piezo era verificado se o osciloscópio havia disparado a medida, situação na qual o piezo era paralisado e as curvas (canal 1 e 2) transferidas para um arquivo, caso contrário, um novo passo era dado. Na figura 4.4 são mostrados alguns resultados obtidos para uma série de 53 curvas, onde o tempo total de medida foi de 500 ms, com uma resolução de $\sim 20 \mu\text{V}$, e a tensão de disparo de 100 mV.

No modo afastamento, inicialmente o contato é macroscópico e a corrente medida está no limite de saturação da eletrônica. Pelo afastamento das partes o contato diminui e com ele a corrente, até que não haja contato, quando a corrente chega a zero.

O procedimento de medida usado é o mesmo do modo aproximação, com a tensão do piezo sendo acrescida e o disparo da medida ocorrendo no sentido decrescente. A figura 4.5 mostra algumas curvas de uma série de 50 medidas, obtidas neste modo. Nelas, o tempo total de medida foi de 500 μs , a resolução de $\sim 150 \mu\text{V}$ e a tensão de disparo de 550 mV.

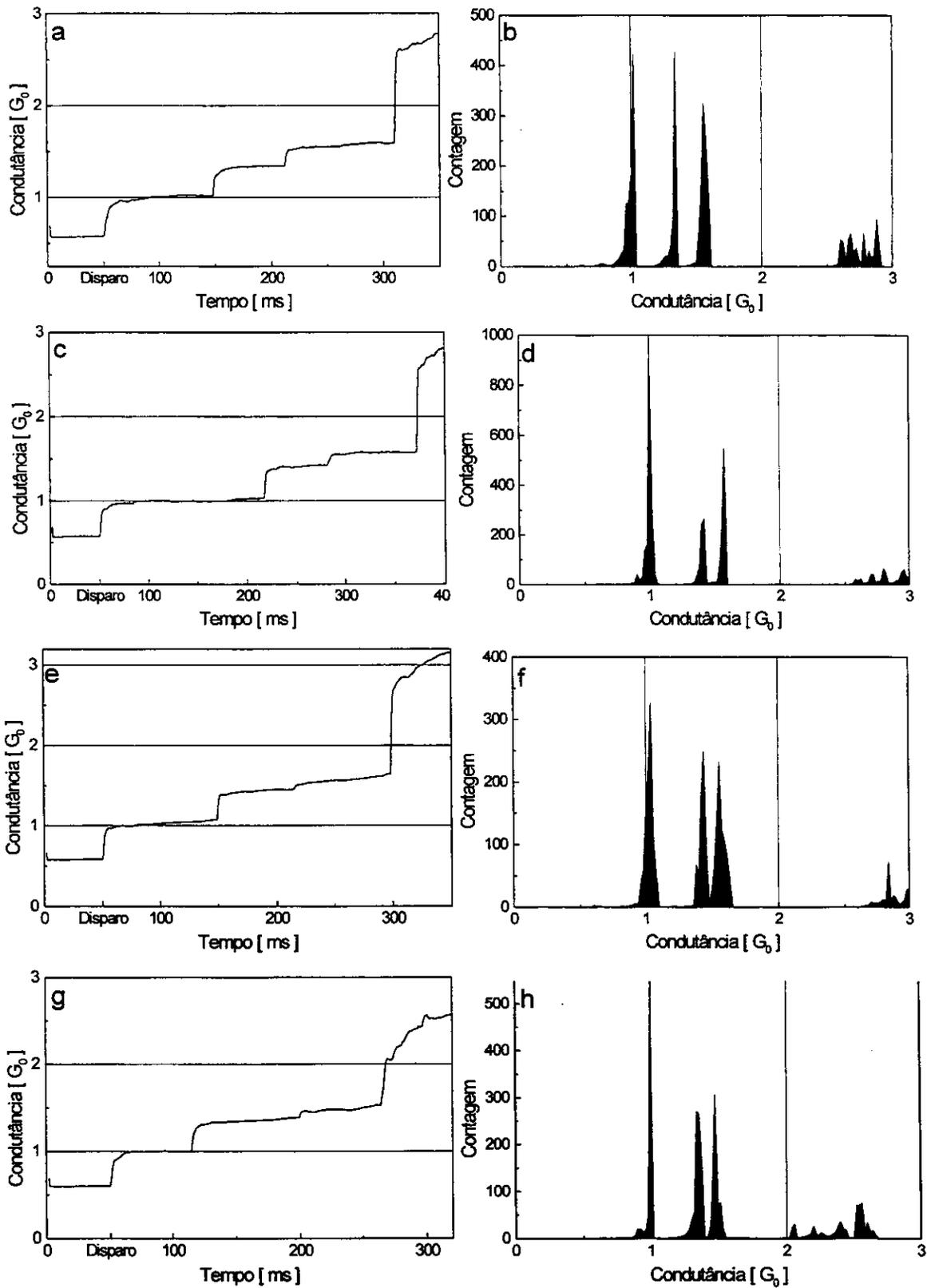


Figura 4.4. Curvas de condutância e respectivos histogramas obtidos no modo aproximação.

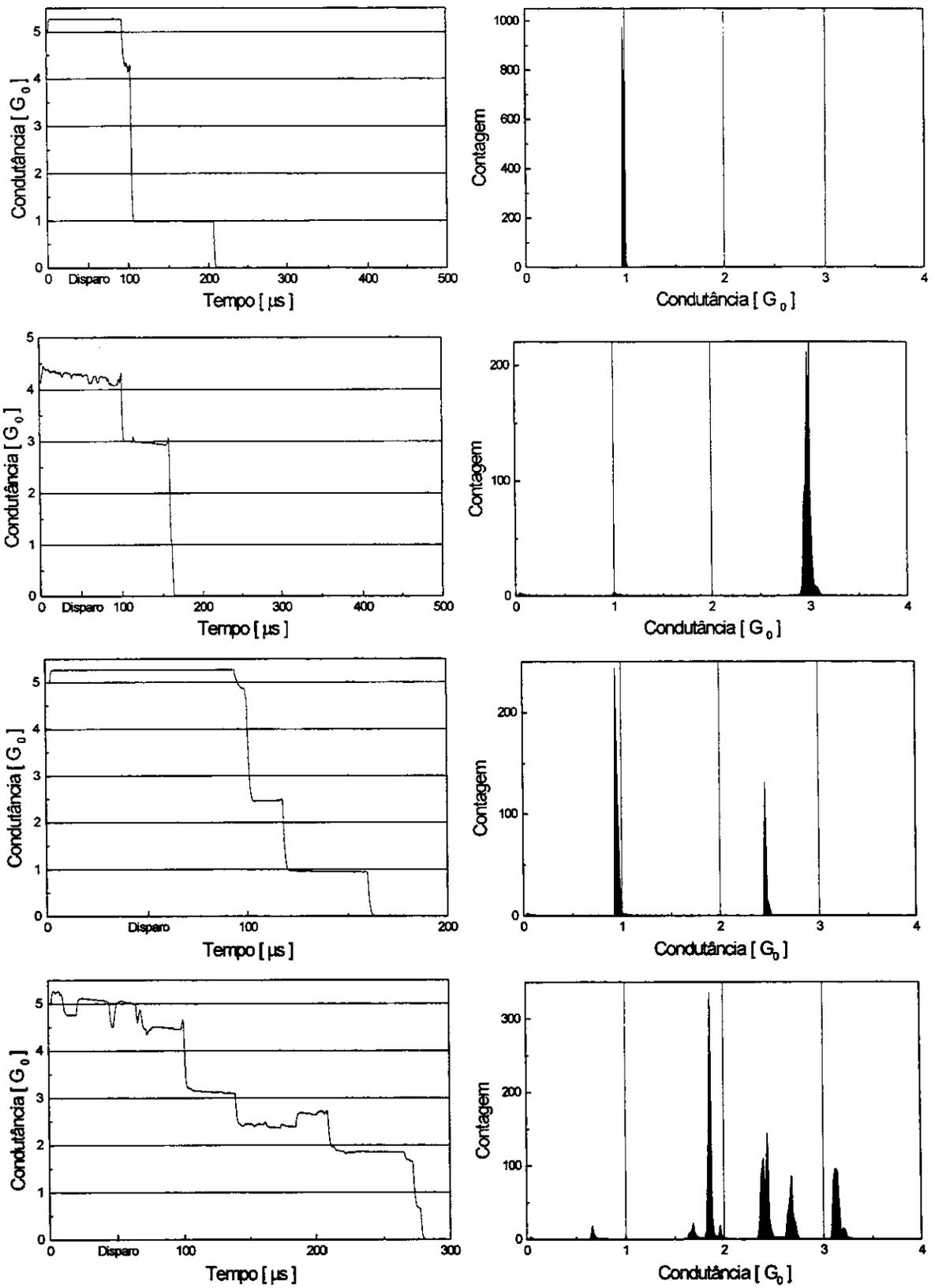


Figura 4.5. Curvas de condutância e respectivos histogramas obtidos no modo afastamento.

4.4. Discussão

O objetivo de nosso trabalho foi a construção de um MCBJ que opere em UHV e possibilite gerar nanofios metálicos para o estudo da quantização da condutância. Na seção 4.4.1 é discutido o desempenho da montagem com base nos resultados obtidos. Alguns aspectos importantes das curvas de condutância medidas são apresentados na seção 4.4.2.

4.4.1. Desempenho da montagem

Os experimentos preliminares (seção 4.3) nos permitiram avaliar vários parâmetros importantes que caracterizam o equipamento desenvolvido.

A preparação e montagem da amostra mostrou-se simples, consistindo em fixar um fio metálico em um substrato e posteriormente fazer um corte na região de quebra. Nesta etapa não há necessidade de ambientes especiais (vácuo ou temperatura) e os cuidados são com a limpeza e a qualidade das conexões elétricas. A principal dificuldade está no corte do fio, que geralmente é fino (75 μm de diâmetro em nossa amostra de ouro) e por isso se deforma no processo, podendo ainda se romper completamente.

O procedimento automatizado de quebra funcionou satisfatoriamente, ocorrendo em um tempo de ~ 40 minutos. Da mesma forma, o programa que integra o controle do movimento do piezo-atuador, o início da medida e a aquisição das curvas, funcionou perfeitamente. Com ele é possível a obtenção de uma série completa de curvas de condutância automaticamente.

O instrumento desenvolvido possibilita gerar nanocontatos a partir de superfícies limpas e medir a sua condutância. No entanto, para o estudo da condutância em nanofios estamos interessados em curvas cujo perfil ofereça informações sobre sua evolução com a deformação. Grosseiramente, podemos separar as medidas em dois tipos:

- a) Curvas onde o tempo de variação da condutância na faixa de interesse (alguns G_0) é da ordem do tempo total da medida, permitindo uma clara

visualização dos patamares e saltos (como exemplos as figuras 4.4 e 4.5), Chamaremos estes nanofios de estáveis.

b) transição abrupta entre contato/não contato e vice-versa (nanofios considerados instáveis).

Para uma determinada escala de tempo, consideramos que um nanofio foi gerado quando obtemos uma curva do tipo a).

Decorre da rápida discussão acima que um parâmetro importante do instrumento é a eficiência com que ele gera um nanofio estável. Em nossa montagem, tipicamente em uma série de 50 curvas, 45 correspondem à nanofios, portanto uma eficiência de 90%.

O tempo total característico de cada curva no dois modos de aquisição foi de:

a) Afastamento: 1000 - 500 ms

b) Aproximação: 1 - 0,5 ms

E o comprimento dos patamares foi proporcional a este tempo:

a) Afastamento: 100 - 50 ms

b) Aproximação: 0.1 - 0.01 ms

Estes valores correspondem aos tempos alcançados em instrumentos usados por outros grupos^[2-16].

O variação da condutância observada nas curvas é provocada pela ocupação/desocupação de canais que ocorre quando mudamos o perfil dos nanofios. Por isso, a notável semelhança do perfil das curvas de condutância obtidas no modo aproximação (figura 4.4), observada em toda aquela série (53 medidas), indica que a variação estrutural foi semelhante em todas as medidas, fato que não havia sido observado em outros experimentos. Este tópico será discutido novamente na seção seguinte.

Devemos ressaltar que o movimento do piezo é desligado quando a medida é iniciada e conseqüentemente a curva segue uma evolução não

induzida do nanocontato. Deste modo, os tempos obtidos e a semelhança na evolução estrutural de toda uma série indicam a superior estabilidade mecânica alcançada.

Em resumo, o instrumento desenvolvido gera nanofios e mede a sua condutância de forma automática e eficiente, oferecendo uma elevada estabilidade mecânica. Além disso, na seção 3.6 indicamos a melhora na precisão das medidas, permitindo agora um estudo mais aprofundado dos fenômenos de transporte em nanoestruturas metálicas.

4.4.2. Curvas Medidas

As curvas mostradas nas figuras 4.4 e 4.5 foram obtidas em experimentos preliminares, com o principal objetivo de avaliar o desempenho da montagem. No entanto, elas apresentaram comportamentos interessantes e que serão destacadas nesta seção. É importante ressaltar que, por se tratar de resultados preliminares, as análises somente indicam possíveis trabalhos a serem realizados e que deverão ser estudados com maior rigor para a sua confirmação.

Primeiramente, nestas curvas podemos observar patamares (picos nos histogramas) que não correspondem aos múltiplos inteiros de G_0 , cujo perfil não difere em nada daqueles que são múltiplos inteiros. Este problema já havia sido indicado na seção 2.3 como sendo um dos motivadores de nossa pesquisa.

A cada curva medida corresponde um novo nanofio e uma diferente evolução estrutural, provocando a não similaridade do perfil das curvas (seção 2.3). Isto é claro nas 50 medidas obtidas no modo afastamento (figura 4.5). Entretanto, as 53 curvas do modo aproximação (figura 4.4) mostram uma semelhança notável entre elas. Este fato até o momento não havia sido observado e nem previsto.

Comparando os dois modos pode-se concluir que a evolução em cada caso ocorre de maneira totalmente diferente, pois estes mostram tempos característicos que diferem de várias ordens de grandeza. Esta discrepância foi observada em todas as séries medidas. Isto pode ser resultado da maneira

como eles são gerados e deformados. No modo aproximação o contato é estabelecido abruptamente e deixado evoluir sem influência do piezo. Por outro lado, no modo afastamento o contato é destruído aos poucos, enquanto esticamos os nanofios e induzimos rearranjos. Uma outra explicação para esta marcante diferença pode ser a resposta do substrato aos movimentos do piezo-atuador, no entanto, isto nos parece improvável como justificativa para uma variação de 3 ordens de grandeza.

Uma outra diferença se observa nos saltos entre os patamares. As curvas medidas no modo afastamento apresentam transições abruptas (figura 4.5) enquanto que no modo aproximação temos os saltos arredondados (figura 4.4). É interessante correlacionar esta diferença com os tempos de cada modo. É esperado que a observação de qualquer efeito que se opusesse a transição abrupta (capacitância, por exemplo) fosse tanto mais evidente quanto menor a escala de tempo envolvida, mas o que se observa é o contrário.

Resumidamente, nestes resultados pudemos confirmar a existência de patamares de condutância que não correspondem a múltiplos inteiros de G_0 . A não similaridade das curvas de condutância foi observada na série obtida no modo afastamento (figura 4.5), mas surpreendentemente curvas de perfis similares foram observadas no modo aproximação (figura 4.4). Também não havia sido observado anteriormente, a marcante diferença nos tempos característicos e nos perfis dos saltos nas curvas obtidas por modos diferentes.

4.5. Perspectivas

O estudo dos efeitos quânticos na condutância de nanofios motivou o tema desta tese, o desenvolvimento de um MCBJ que opere em UHV. O experimento está em plena operação e após esta etapa de caracterização é possível definirmos quais as perspectivas de estudos.

O aparecimento de patamares múltiplos não inteiros do quanta de condutância é um dos problemas que propusemos inicialmente. Para seu estudo era necessário melhorar a precisão das medidas, que é da ordem de $10^{-2} G_0$ nos

trabalhos conhecidos. A precisão alcançada pela montagem foi de $\sim 10^{-4} G_0$, permitindo uma análise mais aprofunda de sua origem.

A melhora na precisão e o novo sistema de tratamento, associados à flexibilidade da eletrônica de medida, também permitiram o estudo da dependência da quantização da condutância com a tensão aplicada ao nanofio.

O bom desempenho alcançado pelo instrumento permitiu revelar efeitos ainda não observados. Apesar de tratar-se de resultados preliminares, eles abrem novas e estimulantes possibilidades de trabalhos futuros.

A não similaridade das curvas de condutância, devido às diferenças na evolução estrutural de cada nanofio é aceita correntemente. No entanto pudemos obter perfis relativamente parecidos em toda uma série medida em modo aproximação (53 medidas). Esta observação só foi possível devido à grande estabilidade do instrumento, indicando uma nova maneira de estudar experimentalmente a dinâmica de geração e deformação dos nanocontatos.

Da mesma forma, o estudo das inesperadas diferenças no perfil dos saltos e nos tempos característicos entre os modos aproximação e afastamento poderá ser realizado com o MCBJ no UHV.

Em resumo, já pudemos observar em curvas preliminares os problemas que inicialmente nos propusemos estudar. Além disso, devido ao bom desempenho do instrumento já foi possível a observação de novos efeitos. Estes fenômenos serão abordados em trabalhos futuros, com o auxílio da montagem desenvolvida, permitindo uma maior compreensão de suas origens.

5. Conclusão

O tema desta tese tem origem num estágio de iniciação científica que foi desenvolvido no LNILS. Motivados pela possibilidade de observar efeitos quânticos em um experimento simples, decidimos verificar a quantização da condutância usando a técnica dos fios vibrando^[26]. Devido à simplicidade do experimento e os interessantes resultados alcançados decidimos transferir os conhecimentos adquiridos, redigindo um artigo^[26] destinado a Revista Brasileira de Ensino de Física (apêndice 1). Mas, a principal consequência desta etapa foi o estímulo de aprofundarmos o entendimento dos efeitos quânticos que ocorrem no transporte eletrônico em sistema nanométricos, desenvolvendo para isso um experimento específico, iniciando uma tese de mestrado.

Desta forma, a proposta deste trabalho foi a construção de um instrumento para o estudo da quantização da condutância em nanofios metálicos. A montagem escolhida é baseada na quebra mecanicamente controlada de junções, operando em ultra-alto-vácuo, cuja concepção é voltada

exclusivamente para o estudo em nanocontatos metálicos. Atualmente, apenas 2 grupos no mundo possuem este tipo de instrumento.

Um dos principais motivadores deste desenvolvimento foi o de analisar mais detalhadamente os desvios observados no comportamento da condutância dos nanocontatos. Para isto, era necessário melhorar a precisão das medidas que vinham sendo realizadas ($\sim 10^{-2} G_0$)^[12]. O valor obtido foi de $\sim 10^{-4} G_0$, que associado ao programa implementado de detecção de patamares, permite estudos aprofundados dos problemas propostos.

Com base nos valores dos tempos característicos das curvas de condutância (ms) e na semelhança da evolução dinâmica dos nanofios medidos em modo aproximação (53 curvas), a estabilidade mecânica do instrumento pode ser considerada superior àquela de outras experiências. Além disso, a pressão alcançada foi de $5.4 \cdot 10^{-10}$ mbar, que permite estudos em superfícies limpas pelo tempo de ~ 1 hora.

O excelente desempenho obtido nos experimentos preliminares da montagem também permitiu observar resultados ainda não citados ou previstos, como a diferença entre os nanofios gerados no modo aproximação e no modo afastamento. A similitude na geração e variação estrutural dos nanofios, se reflete na semelhança das curvas de condutância de uma mesma série, é também um fato notável.

O MCBJ construído permitirá realizar estudos inovadores no transporte elétrico em nanofios metálicos estáveis e com alta precisão, possibilitando uma maior compreensão de suas propriedades. O aumento do controle obtido na geração e deformação dos nanocontatos também nos proporciona ferramentas para o desenvolvimento de novos componentes, de dimensões nanométricas.

6. Agradecimentos

Sou grato ao Prof. Cylon E.T. Gonçalves da Silva, Diretor-geral da Associação Brasileira de Tecnologia de Luz Síncrotron, ao Prof. A. Ricardo D. Rodrigues, Diretor-geral do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, e ao Prof. Aldo Craievich, Diretor-científico na época do meu ingresso, que me receberam no laboratório desde o início de minhas atividades acadêmicas.

Agradeço também aos professores Peter Schulz e Leandro Tessler pelo apoio e estímulo e também ao prof. W.A. de Heer, que tanto nós ajudou com frutíferas discussões.

Ao Dr. Daniel Mario Ugarte, orientador deste trabalho, que não só contribuiu para minha formação profissional, como também para minha instrução pessoal, meus agradecimentos.

Meu reconhecimento à Evandro, Tamura, Joacir, Kyoshi, Reginaldo, James e Paulo César (membros do LNLS) que tanto contribuíram para o desenvolvimento deste instrumento. E de maneira geral, agradeço a toda a equipe do LNLS pelo apoio.

Aos meus companheiros e amigos Daniela, Julio e Noêmia, que sempre me apoiaram e estimularam durante todo o mestrado, meus sinceros agradecimentos.

Finalmente, minha eterna gratidão aos meus pais e minha esposa Renata, dos quais, o apoio foi determinante para este trabalho.

Agradeço à FAPESP (Proc. 96/8353-2, 96/12546-0) pelo suporte financeiro deste projeto.

7. Referências

- [1] B.J. van Wees et al., Phys. Rev. Lett. **60**, 848 (1988).
- [2] J.K. Gimzewski, R. Möller, Phys. Rev. B **36**, 1284 (1987).
- [3] J.I. Pasqual et al., Phys. Rev. Lett. **71**, 1852 (1993).
- [4] N. Agrait et al., Phys. Rev. B **48**, 8499 (1993).
- [5] L. Olesen et al., Phys. Rev. Lett. **72**, 2251 (1994).
- [6] J.I. Pasqual et al., Science **267**, 1793 (1995).
- [7] C.J. Muller, J.M. van Ruintenbeek, L.J. de Jongh, Physica C **191**, 485 (1992).
- [8] J.M. Krans et al., Phys. Rev. B **48**, 14721 (1993).
- [9] J.M. Krans, J.M. Ruintenbeck, Phys. Rev. B **50**, 17659 (1994).
- [10] J.M. Krans et al., Nature **375**, 767 (1995).
- [11] W.A. de Heer e D.Ugarte. Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop, Miraflores de la Sierra, Madri, Espanha, Setembro 23-27, vol. 340, p. 227-36, Fractionally quantized conductances in ballistic metal nanowires and carbon nanotube networks, 1996. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996.

- [12] W.A. de Heer et al., *Z. Phys. B* **104** (3), 469-473 (1997)
- [13] C.J. Muller et al., *Phys. Rev. B* **53**, 1022 (1996).
- [14] J.M. Krans et al., *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2146 (1995).
- [15] Z. Gai et al., *Phys. Rev. B* **53**, 1042 (1996).
- [16] C. Sirvent et al., *Physica B* **218**, 238 (1996).
- [17] Edward M. Purcell, *Curso de Física de Berkeley*, 3 ed., vol. 2 cap. 4, São Paulo, Editora Edgard Blücher Ltda.
- [18] Charles Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 6 ed., p. 134, 142 e 143, New York, John Wiley & Sons, 1986.
- [19] M. Brandbyge et al., *Phys. Rev. B* **52**, 8499 (1995).
- [20] George Arfken, *Mathematical Methods for Physicists*, 3 ed., p. 448, San Diego, Academic Press, Inc.
- [21] R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.*, **1**, 223 (1957).
- [22] E. Tekaman, S. Ciraci, *Phys. Rev. B*, **43**, 7145 (1991).
- [23] Joseph Callaway, *Quantum Theory of the Solid State*, 2 ed., p. 690, San Diego, Academic Press Inc., 1991.
- [24] Y. Kondo, K. Takayanagi, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3455 (1997).
- [25] H. Ohnishi, *Nature* **395**, 780 (1998).
- [26] J.L. Costa-Krämer et al., *Surf. Sci.* **342**, L1144 (1995).
- [27] V. Rodrigues e D. Ugarte, *Quantização da Condutância: Um Experimento Simples para o Ensino de Física*, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, aceito para publicação.
- [28] J.L. Costa-Krämer et al., *Phys. Rev. B* **55**, 12910 (1997).
- [29] A.I. Yanson et al., *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2157 (1997).
- [30] E. Bascones et al., *Phys. Rev. B* **57**, 2541 (1998).
- [31] G. Rubio, N. Agrait, S. Vieira, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2302 (1996).
- [32] H. van Houten, C. Beenaker, *Physics Today* **49**, 22(1996).
- [33] A. Roth, *Vacuum*, 2^a ed., p. 3, New York, North-Holland Publishing Company, 1982.

Apêndice 1

Quantização da Condutância: Um Experimento Simples para o Ensino de Física

(Conductance quantization: a easy experiment for the physics student lab)

Varlei Rodrigues e Daniel M. Ugarte

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - CNPq/MCT
Rua Giuseppe Máximo Scolfarom 10000, Guará, Campinas, SP, Brasil.
Caixa Postal: 6192, CEP: 13083-970

Email: varlei@lnls.br e ugarte@lnls.br

Resumo

A experimentação é de grande importância para o ensino de física, tanto na escola secundária quanto na superior. Através dela é possível estimular o interesse dos alunos, excitando sua curiosidade e sua intuição. Mas nem sempre é possível abordar os recentes avanços científicos, pois estes geralmente exigem equipamentos sofisticados e custoso. Nestes casos é de extrema importância o esforço para desenvolver experimentos simples e de baixo custo.

Em particular, um efeito quântico interessante é o comportamento da condutância em condutores nanométricos, que varia em saltos com valores múltiplos inteiros de um quanta. A observação pode ser feita com um experimento simples baseado na formação espontânea de contatos de dimensões nanométricas entre fios macroscópicos justapostos^[1]. Quando dois fios se tocam, entre eles formam-se contatos e portando podemos fazer passar uma corrente entre eles. Afastando um fio do outro, a área de contato entre eles diminui até dimensões atômicas e com ela podemos estudar propriedades elétricas de nanoestruturas.

Abstract

Experimentation is very important for physics courses, either in high school or university, because it stimulates the students curiosity and interest, developing a specific physical intuition. Unfortunately, these institutions seldom dispose of student laboratories dealing with recent scientific progress, which frequently involve expensive and advanced instruments. It would be desirable to develop cheap experimental set-ups in order to introduce students to late discoveries.

We describe here the analysis of conductance in nanometric conductors, which displays plateaus and steps whose values are multiples integer of a conductance quantum. This phenomenon can be observed with a simple experiment based on the spontaneous formation of nanometric contact points between two touching macroscopic metallic wires. By inducing mechanical vibrations, it is possible to vary the contact area which can attain nanometric dimensions and display quantum conductance effects.

I. Introdução

A experimentação para o ensino de mecânica quântica geralmente envolve medidas que necessitam de aparelhos bastante sensíveis, de condições especiais, como alto-vácuo e baixa temperatura, por isso são geralmente experimentos caros, trabalhosos e de difícil interpretação. A sua realização é de grande importância para os alunos, fornecendo-lhes uma visão dos recentes avanços científicos.

O experimento que propomos é baseado em um trabalho desenvolvido por Costa-Krämer^[1] e que utiliza a formação espontânea de estruturas nanométricas entre fios macroscópicos justapostos. Quando dois fios se tocam se formam contatos entre eles e podemos fazer passar uma corrente, ou seja um transporte efetivo de cargas. Nesta situação podemos interpretar que os elétrons se comportando corpuscularmente, ou seja, como partículas. A medida que diminuimos a área de contato para dimensões quase atômicas, o comportamento ondulatório dos elétrons se manifesta claramente e o condutor se comporta como um guia de ondas, com canais de transmissão associados à níveis de energia permitidos. Assim, a condutância (G) passa a variar de forma discreta, em múltiplos inteiros de um quanta G_0 .

O aparato experimental usado é simples, composto de um divisor de tensão resistivo, uma pilha convencional e um osciloscópio digital. O tratamento de dados necessário não envolve cálculos complexos e a interpretação do fenômeno é feita intuitivamente em analogia aos guias de ondas.

II. Quantização da Condutância

A corrente elétrica é um transporte efetivo de carga, que no caso dos metais é realizada pelos elétrons de valência. Na ausência de forças externas estes elétrons têm velocidades e direções aleatórias e portanto o transporte de carga é nulo. Quando um campo elétrico é aplicado, estes elétrons são acelerados na direção oposta ao campo (os elétrons possuem carga negativa) fazendo com que a média de suas

velocidades não seja nula, havendo assim transporte efetivo de carga, ou seja, corrente elétrica.

A maioria dos condutores segue a lei de Ohm onde a corrente I é diretamente proporcional a tensão aplicada V :

$$I = GV$$

A constante de proporcionalidade, G , é chamada condutância^[6]. O inverso da condutância é definida como resistência, R :

$$R = \frac{1}{G}$$

Nesta descrição, a condutância pode ser interpretada como a facilidade dos elétrons se moverem em um material sob o efeito de um campo elétrico, gerando corrente. Analogamente, a resistência seria a dificuldade de se obter esta corrente.

Em alguns casos simples, o comportamento da condutância pode ser facilmente relacionado com as dimensões do condutor; consideremos, por exemplo, um fio metálico de forma cilíndrica, figura 1; intuitivamente esperamos que a condutância cresça com o aumento da seção transversal do condutor, A ; da mesma forma podemos esperar que a condutância decresça com o aumento do comprimento, L_z . Estas duas relações são verificadas e podem ser expressas matematicamente como^[7]:

$$G = \sigma \frac{A}{L_z} \quad (01)$$

onde σ é uma constante característica do material.

Esta interpretação da condução de elétrons nos metais se aplica muito bem para casos macroscópicos, mas o que devemos esperar quando diminuirmos suas dimensões a níveis quase atômicos?

Na descrição dada pela lei de Ohm, a relação entre corrente e tensão tem origem no espalhamento sofrido pelos elétrons dentro do condutor^[7]. A distância média que um elétron consegue percorrer entre uma colisão e outra (dezenas de nanômetros para os metais)^[8] é chamada de livre caminho médio, λ_{cm} ^[7].

Em condutores com comprimento muito menor que o livre caminho médio dos elétrons ($L_z \ll \lambda_{\text{icm}}$), estes podem, em média, passar através do condutor sem sofrer colisões e nesta situação não se manifestaria uma resistência devido aos espalhamentos. Estes sistemas são chamados condutores balísticos. Neles não há dissipação de energia, que leva frequentemente ao aquecimento dos fios, e portando pode ser muito interessante para aplicações em eletrônica.

Se desejamos estudar outras mudanças no comportamento da condução de cargas em metais devemos levar em conta o caracter ondulatório dos elétrons. Sabemos da mecânica quântica que os elétrons manifestam se em algumas situações como partículas e em outras como onda, de comprimento $\lambda_{\text{elétron}}$. Por exemplo para os elétrons de condução nos metais (Au, Cu entre outros) o $\lambda_{\text{elétron}}$ é da ordem de nanômetros^[8]. Quando o diâmetro do condutor é da ordem do comprimento de onda dos elétrons de condução ($A^{1/2} \sim \lambda_{\text{elétron}}$) o comportamento ondulatório manifesta se claramente, levando a observação de novos fenômenos.

Na mecânica quântica o comportamento de uma partícula é dada por sua função de onda, obtida a partir da equação de Schrödinger. Esta equação depende do potencial que age sobre a partícula e sua solução determina os possíveis valores de energia do sistema. Neste caso o espectro de energias permitidas pode ser contínuo ou discreto, enquanto que na física clássica todo sistema pode assumir um contínuo de energias. Esta é uma das grandes mudanças introduziadas pela interpretação quântica da natureza.

No que se refere ao transporte elétrico em um fio precisamos resolver a equação de Schrödinger para um elétron em um potencial que descreve o condutor^[4,9]. Considerando simplifcadamente um condutor infinito de seção transversal retangular, figura 2, os elétrons estarão sujeitos a um potencial $V(x, y, z)$ do tipo:

$$V(x, y, z) \begin{cases} = V(z) & \left\{ \begin{array}{l} -\frac{L_x(z)}{2} < x < \frac{L_x(z)}{2} \\ -\frac{L_y(z)}{2} < y < \frac{L_y(z)}{2} \end{array} \right. \\ \rightarrow \infty & \end{cases}$$

A função de onda encontrada pode ser escrita da forma:

$$\Psi(x, y, z) = \sum_n \chi_{z,n}(x, y) \phi_n(z)$$

e a energia correspondente :

$$E = E^z + E_n^\perp$$

onde E^z pode assumir um contínuo de valores e

$$E_n^\perp = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2(z)} + \frac{n_y^2}{L_y^2(z)} \right),$$

onde μ é a massa efetiva do elétron, \hbar é a constante de Planck dividido por 2π , n_x e n_y são valores inteiros. Assim E_n^\perp só pode assumir valores discretos, a isto chamamos quantização. Como esta última componente da energia é a contribuição do momento transversal do elétron, podemos concluir que este é quantizado.

Intuitivamente podemos associar o condutor a um guia de ondas, com canais de transmissão bem definidos, determinados pelos momentos transversais permitidos (como é conhecido para os guias de ondas eletromagnéticas) e a condução análoga à transmissão de ondas através deste guia.

Se considerarmos este condutor como um fio quasi-unidimensional^[10], com canais de condução definidos pelos níveis de energia permitidos, podemos usar o formalismo de Landauer-Büttiker^[11,12]. Nesta descrição a condutância é interpretada como a probabilidade de transmissão dos elétrons pelo condutor e a condutância é dada por:

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_i T_i$$

onde e é a carga do elétron, h é a constante de Planck, T_i é a probabilidade de transmissão de um elétron pelo canal i e a somatória se estende a todos os canais ocupados, desconsiderando a influência de um no outro.

Se o condutor for balístico, $L_z \ll \lambda_{\text{espalhamento}}$, e desprezando os efeitos de reflexão nas interfaces^[13] (nos contatos) os elétrons podem passar através do condutor sem sofrer espalhamento, a transmissão é total e portanto:

$$T_i = 1$$

$$\sum_i T_i = n$$

e

$$G = nG_0 \quad G_0 = \frac{2e^2}{h} \left(= \frac{1}{12,9k\Omega} \right) \quad (02)$$

onde n , inteiro, representa o número de canais que contribuem para a condução.

Disto resulta que para um condutor metálico qualquer, onde $L_z \ll \lambda_{\text{espalhamento}}$ e $A^{1/2} \sim \lambda_{\text{elétron}}$, o valor da condutância é dado por um múltiplo inteiro de G_0 . É importante notar que este quanta de condutância corresponde a um valor de resistência de fácil observação (12,9 $K\Omega$). Na figura 3, comparamos qualitativamente a condutância em função da seção transversal na descrição clássica (ex. 01) e na quântica (ex. 02).

Num condutor real, a máxima energia dos elétrons é dada pela energia do nível de Fermi, E_F , portanto somente os canais com energia menor que E_F estão ocupados e contribuem para o valor da condutância. Dado que o número e posição dos níveis em relação ao nível de Fermi dependem basicamente da seção transversal do condutor, podemos observar os saltos de G_0 na condutância fazendo medidas em sistemas de diferente dimensões. Entretanto a obtenção destas estruturas de forma suficientemente controlada não é possível.

Os primeiros experimentos que demonstraram a quantização da condutância foram realizadas com gases de elétrons confinados bidimensionalmente em heteroestruturas semicondutoras^[2,3], onde eram geradas constrições usando potenciais elétricos. Subsequentemente o mesmo fenômeno foi observado em nanofios metálicos, utilizando experimentos baseados em microscópios por tunelamento (STM)^[4,5].

Os experimentos com STM consistem basicamente em pressionar sua ponta de prova contra uma amostra, fazendo com que se “molhe” com os átomos do substrato. Quando a ponta é afastada se formam fios nanométricos entre elas, figura 4. Estes nanofios são esticados, e como simultaneamente ao alongamento muda a seção transversal, altera se a posição dos canais de transmissão. Durante o processo, a

energia dos níveis pode tornar se maior ou menor que o nível de Fermi, variando o número de canais ocupados (n). As curvas representando a condutância dos nanofios durante o alongamento apresentam patamares separados por saltos com valores próximos a múltiplos inteiros de G_0 . Estes resultados foram obtidos em uma variedade de condições, tais como baixa e alta temperatura, no vácuo e no ar.

É importante ressaltar que nos metais a diferença entre os níveis de energia transversais, E_n^\perp , é da ordem de eV (equivalente a milhares de K)^[4], que é muito maior que $k_B T_{amb}$ (\sim meV) e portanto o experimento pode ser realizado à temperatura ambiente. Experimentos com heteroestruturas semicondutoras são mais difíceis de se realizar, pois precisam ser feitos à baixa temperatura (\sim 4 K) pois a diferença entre os níveis de energia dos semicondutores é da ordem de alguns meV^[4].

Dos experimentos com STM podemos verificar que o estudo da quantização da condutância em metais pode ser realizada no ar e à temperatura ambiente. Além disso, a resistência correspondente ao quanta de condutância, 12,9 k Ω , pode ser medido usando uma eletrônica simples (um divisor resistivo por exemplo). A única dificuldade do experimento é a formação do nanofio, o que requer instrumentos como o STM.

III. O experimento proposto

Um experimento simples para a formação de nanofios metálicos se encontra em uma montagem que utilizamos cotidianamente: fios macroscópicos justapostos. Quando dois fios se tocam, entre eles se formam contatos; a medida que afastamos um do outro esta área de contato diminui e no limite em que eles vão se separar formam se fios nanométricos. Podemos estudar o comportamento da condução em nanofios através da medida da condução no ponto de contato entre fios macroscópicos. Este experimento foi inicialmente proposto por J.L. Costa-Krämer et al^[1].

A variação de n é obtida pela variação na área de contato entre os fios, que podemos obter por exemplo com vibrações mecânicas. Com uma “batida na mesa” os fios começam a vibrar, se afastando e se aproximando continuamente, alongando e comprimindo o nanofio formada entre eles.

Nossas medidas foram realizadas com o auxílio do circuito^[14] esquematizado na figura 5, onde os fios justapostos equivalem a um resistor e os valores de R e da tensão aplicada V_T são conhecidos. Pela medida da queda de tensão em R , feita pelo osciloscópio, podemos determinar a resistência entre os fios, que é devido ao nanofio formado entre eles. Assim podemos determinar a condutância (inverso da resistência) de condutores metálicos nanométricos.

O valor de tensão, V , medido pelo osciloscópio é dado pela expressão:

$$V = \frac{RV_T}{R + R_c}$$

onde R_c é a resistência no contato entre os fios justapostos. Usando (01) temos:

$$R_c = \frac{1}{G} = \frac{R_0}{n} \quad \text{onde} \quad R_0 = \frac{1}{G_0} (\approx 12.9K\Omega)$$

Para valores de $R = 10 \text{ k}\Omega$ e $V_T = 100 \text{ mV}$, o valor de V_c varia em função de n como representado na figura 6. Para o circuito que usamos, quando o número de canais ocupados aumenta, a diferença de V entre um patamar e outro diminui (ver figura 6). Considerando a resolução do osciloscópio e o nível de ruído podemos predefinir até que transição poderemos distinguir os patamares claros e distintos. O nosso experimento foi otimizado para $n = 1, 2$ e 3 .

O valor de tensão aplicada aos nanofios varia com a mudança de n . Quanto maior for V_T maior será a diferença de voltagem aplicada nos nanocontatos para cada valor do condutância permitido. Para se evitar potenciais efeitos de não linearidade é necessário trabalhar com valores de tensão baixos, em nosso caso $V_T = 100 \text{ mV}$.

A capacitância do cabo que liga o osciloscópio ao resto da montagem influencia grandemente as medidas. Como a transição entre os patamares é da ordem de ns, a capacitância do cabo faz com que o salto seja arredondado e portanto não

abrupto. Esta dificuldade e a influência dos ruídos podem ser minimizados pela blindagem do circuito e a sua conexão direta no osciloscópio (ver figura 7).

Foram utilizadas varias configurações para justapor os fios e faze-los vibrar, tais como: um fio repousando sobre um substrato do mesmo material; dois fios suspensos tocando; dois fios suspensos por cordas de violão (para facilitar a oscilação). A montagem que se mostrou mais vantajosa foi baseada em um pêndulo (figura 8): um fio (eletrodo A) era suspenso por um fio condutor muito fino ($\phi \sim 40 \mu\text{m}$) e flexível, de tal modo que forme um pêndulo; o outro fio (eletrodo B) é fixado para que toque lateralmente o eletrodo A. Com vibrações mecânicas macroscópicas o pêndulo se movimenta, estabelecendo e quebrando contatos com o fio fixo, gerando e modificando os nanofios entre eles.

A grande diferença entre esta montagem e as outras é que nela basicamente a única força que influencia o movimento do pêndulo é a gravidade, isto acontece porque o fio usado é suficientemente fino e flexível para que a sua resistência ao movimento seja desprezível. Podemos então controlar facilmente a pressão de contato entre os dois eletrodos simplesmente girando a montagem em torno do eixo horizontal. Por este mecanismo nós procuramos a posição que permite um maior número de amostragens, com patamares claros e compridos.

A alimentação do experimento ($V_T = 100 \text{ mV}$) é feita pelo circuito da figura 9, onde temos uma pilha, $V_p = 1.5 \text{ V}$, um divisor de tensão resistivo, $R_1 = 100 \Omega$ e $R_2 = 1400 \Omega$, e um capacitor de $C = 1 \mu\text{F}$ (400V). A pilha era utilizada como fonte, o divisor de tensão era responsável por alimentar o circuito com a voltagem desejada e o capacitor mantinha este valor constante durante a medida. O uso do capacitor com esta função só foi possível porque o tempo de aquisição de uma curva é da ordem de μs enquanto que a constante de tempo do circuito RC de alimentação era de ms.

Os experimentos foram feitos com ouro e usando um osciloscópio TDK784A da Tektronics. Nas figuras 10a e 10b são apresentados duas curvas da variação da condutância em função do tempo e nas figuras 10c e 10d histogramas da contagem do número de vezes que cada valor de condutância foi obtida em cada uma das medidas.

Podemos observar nas figuras 10a e 10b que as curvas de condutância apresentaram patamares bem definidos, com duração da ordem de μs , enquanto os saltos são da ordem de ns. O valor da condutância em cada patamar pode ser analisada com o auxílio das linhas horizontais, correspondentes aos valores inteiros de G_0 (linhas verticais para os histogramas). Devemos notar que somente alguns patamares (ou picos para os histogramas) estão próximos à múltiplos inteiros de G_0 .

IV. Discussão

Como citado acima, as medidas de condutância obtidas com este experimento apresentam patamares claros e distintos, com transições abruptas entre eles. Este resultado implica que o valor da condutância não varia suavemente com a mudança das dimensões do condutor, mas em forma de saltos.

A análise dos resultados experimentais apresenta uma grande dificuldade: as curvas não são repetitivas. Isto é devido aos processos envolvidos e a forma como a medida é realizada: i) a condutância observada é dada pelo número de canais abaixo do nível de Fermi (canais ocupados); ii) o número de canais abaixo deste nível é dado pela seção transversal da nanoestrutura. Quando variamos a nanoestrutura, mudamos o número de canais ocupados e com isso medimos patamares e saltos na condutância. Mas como não temos controle na dinâmica da variação da área transversal do nanofio ela ocorre de forma diferente em cada medida e por isso o perfil das curvas de condutância não são idênticas.

Nós já observamos que uma excelente representação do comportamento da condutância são os histogramas com a contagem do número de vezes que cada valor de condutância é medido em cada curva (ver figura 10c e d). Mas este método se limitava ao resultado de somente uma curva, cujo perfil não é repetitivo e portanto não pode ser tomado como prova da quantização da condutância.

A solução normalmente empregada na bibliografia é a montagem de histogramas globais, onde são representados o acumulo das contagens obtida em cada curva de uma série de medidas (mesmas condições experimentais). Com estes

histogramas podemos representar o comportamento geral da condutância dos nanocondutores. Do ponto de vista estrutural podemos considerar estes histogramas como uma média do caminho adotado para a reestruturação do nanofio, refletido na condutância. Na figura 11 temos o histograma global obtido para uma série de 57 curvas, onde podemos observar claramente um pico em $G \cong 1G_0$ e um pico menor em um valor inferior à $2G_0$. Este perfil apresentando picos próximos a múltiplos inteiros de G_0 é considerado a verificação da quantização da condutância^[1].

No modelo usado, os saltos no valor da condutância são provocados pela ocupação de modos de transmissão de elétrons através do condutor (canais ocupados), cujo número varia devido às mudanças na seção transversal do nanofio. Temos assim dois fenômenos simultâneos: estrutural (rearranjos átomos) e eletrônico (variação dos modos de transmissão), Isto tem gerado algumas críticas a interpretação dos resultados experimentais.

As variações da seção transversal dos fios nanométricos ocorrem devido a rearranjos estruturais, variações da ordem das dimensões atômicas (que nessa ordem de grandeza também pode ser consideradas discretas). Devemos verificar se os saltos nas curvas da condutância ocorrem simplesmente devido à fatores estruturais ou devido às propriedades eletrônicas (guia de ondas). Como estes dois efeitos ocorrem simultaneamente no experimento, se torna difícil saber qual deles é responsável pelas patamares e saltos nas curvas de condutância.

Na interpretação feita em analogia com os guias de ondas encontramos que certos formatos da seção transversal permitem que alguns níveis sejam degenerados, ou seja, que exista mais de um canal associados ao mesmo nível. Quando a energia de um destes níveis degenerados se torna maior ou menor que o nível de Fermi devemos observar variações de αG_0 na condutância, onde α , inteiro e maior que um, é o número de degenerescência. Isto foi verificado experimentalmente em trabalhos desenvolvidos com quebra mecanicamente controlada de junções^[15] e portanto indica que a interpretação baseada no comportamento ondulatório dos elétrons de condução é correta.

Nas medidas apresentadas na figura 10, somente alguns patamares (ou picos para os histogramas) estão próximos à múltiplos inteiros de G_0 , enquanto que outros se encontram em posições intermediárias. Resultados análogos têm sido citados na literatura^[16,17,18] e atribuídos em alguns casos a impurezas e em outros a contaminação. Em ambos não ficam claros os critérios adotados para considerar uma medida como influenciada por impurezas ou contaminação. Devemos ressaltar que os patamares múltiplos inteiros e os múltiplos não inteiros de G_0 são indistinguíveis, diferindo somente pelo valor da condutância. Novamente, aqui resulta que a construção de histogramas globais é a solução mais indicada para a análise dos resultados.

V. Conclusão

Obtivemos a partir de uma montagem experimental simples e de fácil implementação um experimento capaz de mostrar qualitativamente e quantitativamente o caracter quântico da condutância em nanofios metálicos.

O experimento se compõe basicamente de uma rede de resistores e um osciloscópio digital. A análise dos resultados empregada é de fácil compreensão e consiste no estudo de uma pequena malha de resistores e na análise de histogramas tanto os simples como globais (pelo menos um série com 50 medidas). Assim, este experimento pode ser utilizado em laboratórios de ensino, obtendo resultados análogos aos obtidos com técnicas sofisticadas e de alto custo de implementação e operação.

Um ponto importante deste experimento são os valores de condutância múltiplos não inteiros de G_0 , obtidos juntamente com os múltiplos inteiros, o que estimula novos experimentos e estudos sobre as propriedades de fios nanométricas^[19].

VI. Agradecimentos

Sou grato a toda a equipe do LNLS que tanto contribuiu para o desenvolvimento deste trabalho, em especial a Edilson Tamura, do grupo de detectores, que gentilmente cedeu o osciloscópio usado nas medidas. Também agradeço ao prof. W.A. de Heer, que tem constantemente nos auxiliado com frutíferas discussões. Também agradecemos a Fapesp (proc. 96/8353-2) e a CNPq pelo suporte financeiro.

VII. Referências

- [1] - J.L. Costa-Krämer et al, Surf. Science Letter, 342, 1144 (1995).
- [2] - B.J. van Wees et al, Phys.Rev.Lett., 60, 848 (1988).
- [3] - H.van Houten, C. Beenaker, Physics Today, 49, 22 (1996).
- [4] - L. Olesen et al, Phys. Rev. B, 72, 2251 (1995).
- [5] - N. Agraït et al, Phyc. Rev. B, 47, 12345 (1993).
- [6] - Para de forma geral a condutância é uma função da tensão aplicada $I = G(V)V$
- [7] - Edward M. Purcell, Curso de Física de Berkeley, 3 ed., vol. 2 cap. 4, São Paulo, Editora Edgard Blücher Ltda.
- [8] - Charles Kittel, Introduction to Solid State Physics, 6 ed., p.134 e 143, New York, John Wiley & Sons, 1986.
- [9] - A.M. Bratkovsky et al, Phys. Rev. B, 52, 5036 (1995).
- [10] - L.J. Challis. Physics in less than three dimensions. Contemporary Physics, 3, 111-127 (1992).
- [11] - R. Landauer, IBM J. Res. Dev., 1, 223 (1957).
- [12] - E.Tekaman, S.Ciraci, Phys. Rev. B, 43, 7145 (1991).
- [13] - T.N. Todorov, G.A.D. Briggs, J.Phys.Condens. Matter, 6, 2559 (1994).
- [14] - W.A. de Heer , comunicação privada
- [15] - C.J. Muller et al, Nature, 375, 767 (1995)
- [16] - J.M. Krans et al, Phys. Rev. Let., 48, 14721 (1993).

[17] - G.Rubio et al, Phyc. Rev. Lett, 76, 2302 (1996).

[18] - C.J.Muller et al, Phyc. Rev. B, 48, 14721 (1993).

[19] - W.A. de Heer e D.Ugarte. Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop, Miraflores de la Sierra, Madri, Espanha, Setembro 23-27, vol 340, p. 227-36, Fractionally quantized conductances in ballistic metal nanowires and carbon nanotube networks, 1996. Anais: Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996.

Legendas:

Figura 1: Fio de forma cilíndrica sujeito a um potencial V .

Figura 2: Aproximação do condutor por um fio infinito, de seção retangular.

Figura 3: Comparação qualitativa da dependência da condutância da seção transversal na descrição clássica (linha descontínua) e na descrição quântica (linha contínua).

Figura 4: Descrição esquemática da formação de um nanofio na ponta de prova de um STM.

Figura 5: Esquema da montagem experimental proposta

Figura 6: Variação da tensão medida pelo osciloscópio em função do número de canais ocupados.

Figura 7: Experimento blindado e conectado diretamente no osciloscópio.

Figura 8: Montagem para a justaposição dos fios do material de interesse.

Figura 9: Fonte de alimentação do experimento.

Figura 10: a, b: medidas típicas do valor de condutância em função do tempo; c, d: representação em forma de histograma das curvas de condutância a e b.

Figura 11: Histograma global de uma serie de 57 medida feitas com amostra de fio de ouro. Podemos ver claramente um pico em G_0 e um em $2G_0$.

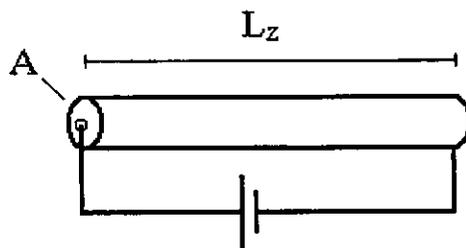


Figura 1

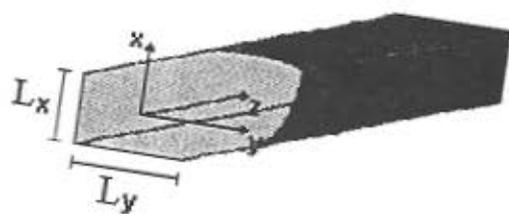


Figura 2

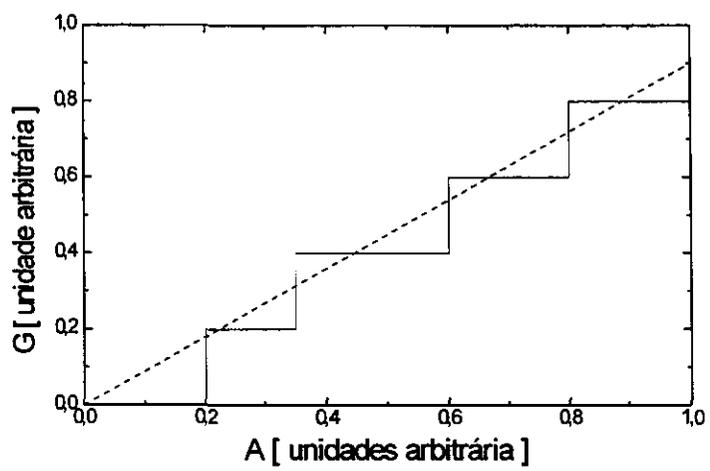


Figura 3

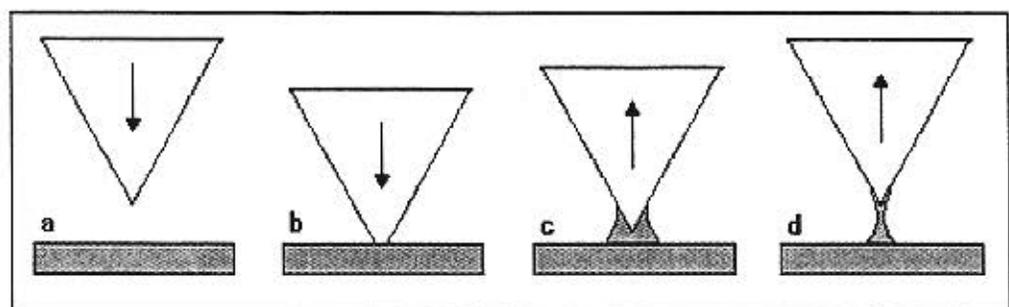


Figura 4

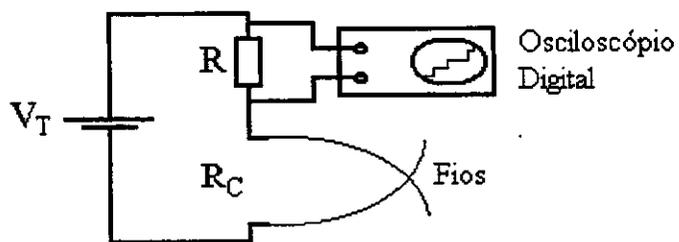


Figura 5

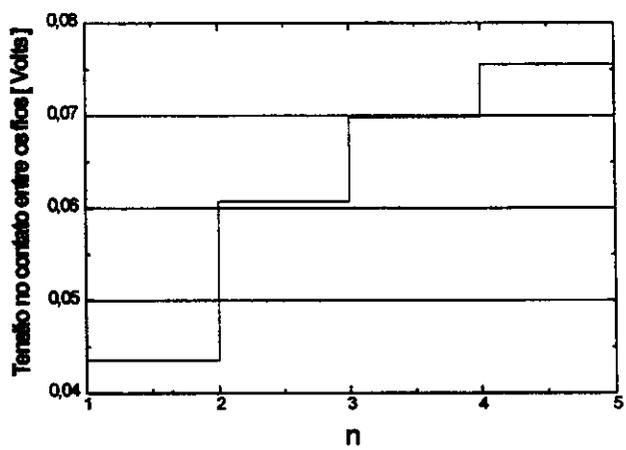


Figura 6

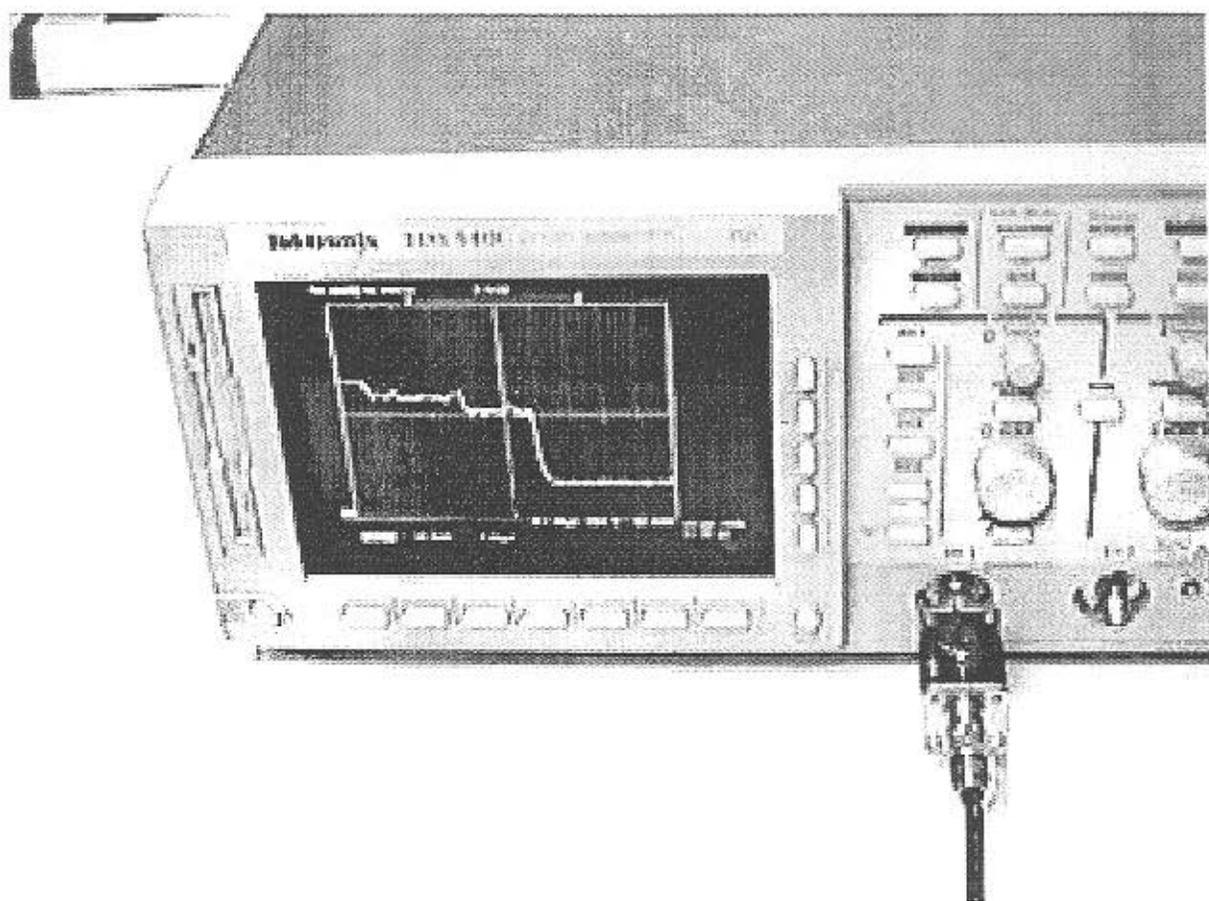


Figura 7

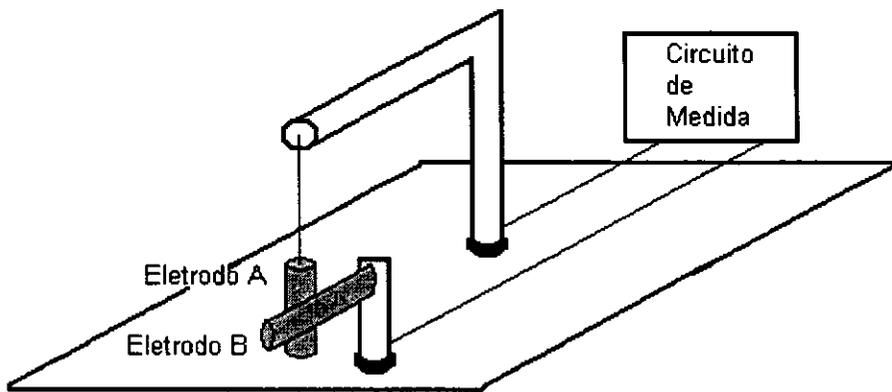


Figura 8

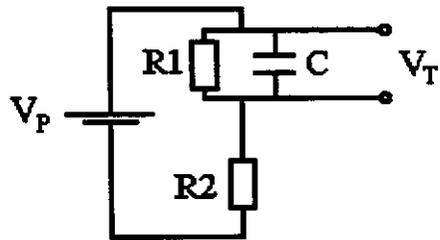


Figura 9

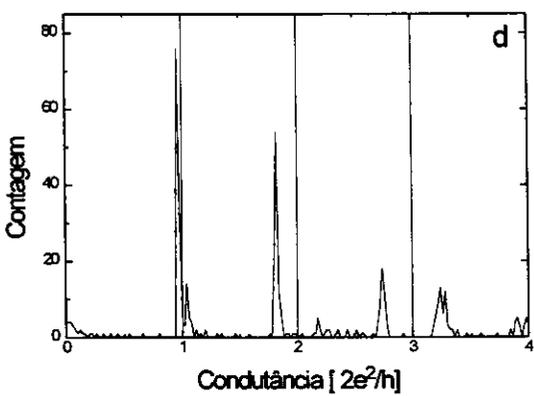
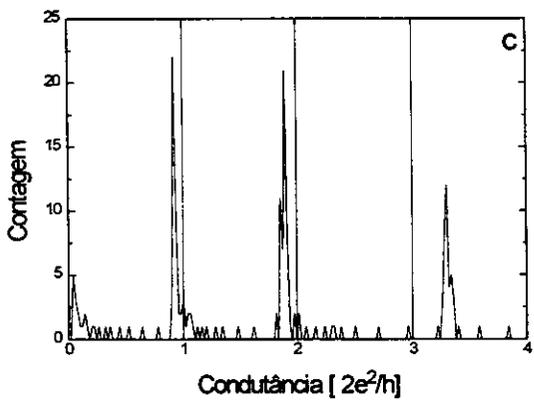
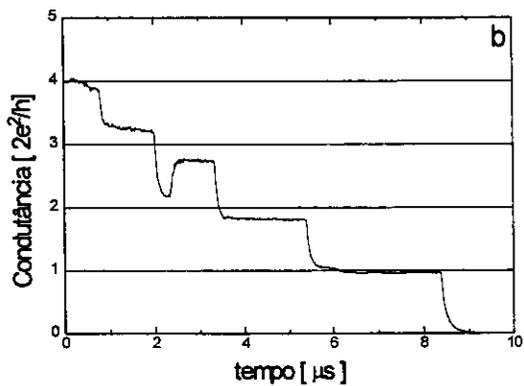
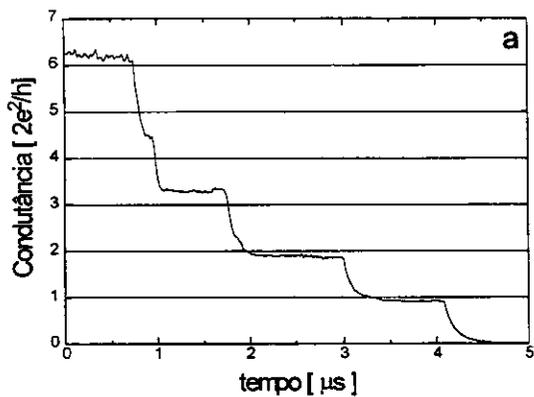


Figura 10

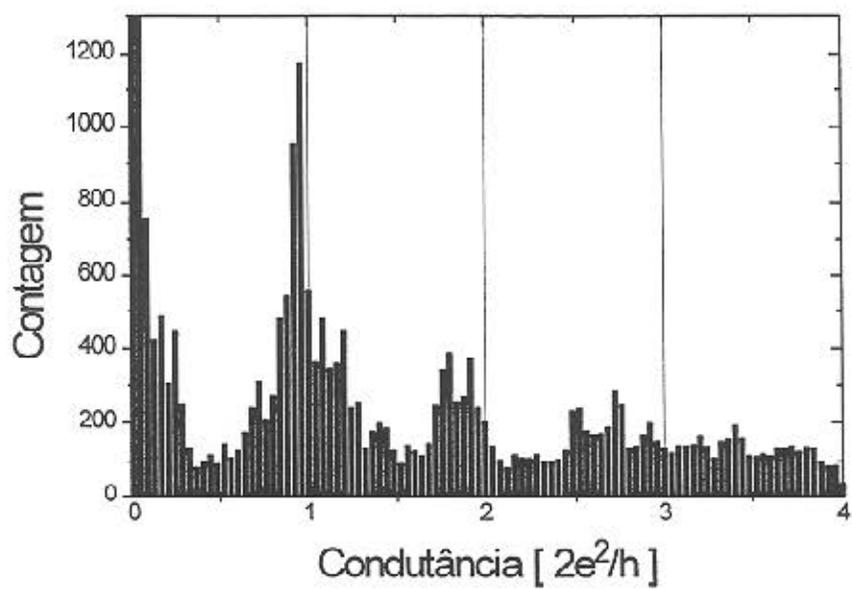


Figura 11