

28
43

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
Facultad de Ciencias

**ESPECTROSCOPIA POR TUNELAJE
ELECTRONICO INELASTICO: EFECTO DE LA
TEMPERATURA EN LA POSICION DEL PICO
A 117 MV.**

T E S I S

Que para obtener el titulo de:

F I S I C O

P r e s e n t a :

**FRANCISCO JAVIER
SANTOS GARCIA.**

Enero 1984



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

INTRODUCCION	2
CAPITULO I: ANTECEDENTES TEORICOS	5
I.1 Teoría de Tunelaje Inelástico	8
I.2 El Pico a 117 mv	27
CAPITULO II: PARTE EXPERIMENTAL	31
II.1 Fabricación de la Junta	33
II.2 Medición de σ y $d\sigma$	40
II.3 Mediciones con Campo Magnético	48
CAPITULO III: RESULTADOS EXPERIMENTALES Y ANALISIS DE DATOS	
DATOS	53
III.1 Resultados Obtenidos	56
III.2 Calibración de $d\sigma$	68
CAPITULO IV: DISCUSION DE RESULTADOS	83
IV.1 Discusión y Posible Explicación (Modelo)	85
IV.2 Simulación del Fenómeno	89
CAPITULO V: CONCLUSIONES	99
BIBLIOGRAFIA	104

INTRODUCCION

INTRODUCCION

La Espectroscopia por Tunelaje Electrónico Inelástico (ETEI) mide el espectro vibracional de una pequeña cantidad de moléculas orgánicas localizadas en el aislante de una junta Metal-Aislante-Metal. Un modo vibracional de energía $h\nu$ (h =constante de Planck y ν =frecuencia) se detecta como un ligero cambio en la característica eléctrica de la junta a un voltaje V , es decir, un espectro de tunelaje, (curva $d^2 I/dV^2$ vs V), tiene un pico a $V=h\nu/e$ que corresponde al modo vibracional de frecuencia ν .

La medición del espectro de tunelaje, generalmente se hace con la junta en un baño de helio líquido (4K), por la razón que se explicará en el Capítulo I. Sin embargo, se ha observado que el pico a 117 mv para juntas de aluminio-óxido de aluminio-plomo a 4K, aparece desplazado de este valor cuando se mide a 77K; además la posición del pico deja de ser simétrica para polarizaciones positiva y negativa; esta asimetría puede llegar a ser de hasta 15 mv. Tenemos dos parámetros que pueden dar origen a este corrimiento: la temperatura y la resistencia de la sobre capa (ya que a 4K el plomo es superconductor y a 77K normal). El presente trabajo tiene como objetivo investigar que

parámetro provoca los corrimientos observados y se propone un modelo de tales corrimientos por efecto de la temperatura.

En el Capítulo I se presenta una introducción a ETEI y una breve revisión a la teoría respecto a la posición, ancho e intensidad de los picos. La segunda sección trata de la información que se tiene acerca del pico a 117 mv.

En el Capítulo II, se describe el proceso de fabricación de una junta y algunos de los aparatos empleados en este proceso. En seguida se describen la técnica de medición y su base teórica, así como los aparatos y configuración utilizada. En la última sección se da una breve explicación de las mediciones en presencia de un campo magnético.

En el Capítulo III se presentan los resultados, se describe el procesamiento de datos para obtener la posición de los picos y se mencionan las posibles fuentes de incertidumbre. Se explica asimismo la calibración de los espectros de tunelaje.

En el Capítulo IV se discuten los resultados obtenidos en el capítulo anterior y se propone un modelo para explicar los corrimientos observados. En base al modelo propuesto, se presenta una simulación del corrimiento hecho en calculadora.

Finalmente en el Capítulo V se presentan las conclusiones de esta tesis y algunas sugerencias para futuras investigaciones.

CAPITULO I
ANTECEDENTES TEORICOS

CAPITULO I

Con el desarrollo de la Mecánica Cuántica se descubrieron algunos efectos hasta entonces desconocidos, entre estos uno de los más interesantes es el paso de partículas a través de regiones clásicamente prohibidas, conocido como Efecto Túnel. Este efecto está presente en diferentes ramas de la Física Moderna y tiene aplicaciones muy importantes, por ejemplo, en la tecnología que se usa en la fabricación de transistores, diodos y otros dispositivos electrónicos.

En este capítulo, en la primera sección se da una breve introducción a la Espectroscopia por Tunelaje Electrónico Inelástico (ETEI *); continúa la sección con una revisión en forma muy general de la teoría de esta espectroscopia. En la segunda sección se presenta

una breve discusión sobre la información que se encuentra en la literatura acerca del pico a 117 mv.

* conocida en inglés como IETS, en esta tesis usaremos sus iniciales en español ETEI.

I.1 TEORIA DE TUNELAJE INELASTICO

Una de las aplicaciones recientes (1) del Efecto Túnel es la Espectroscopia por Tunelaje Electrónico Inelástico (ETEI), técnica por la cual se mide el espectro vibracional de una pequeña cantidad de moléculas orgánicas en el aislante de un dispositivo metal-aislante-metal, llamado junta túnel cuando el espesor del aislante es lo suficientemente pequeño (ver figuras 1.1).

El estudio de ETEI se inicia en 1966 cuando Jaklevic y Lambe, usando una técnica de segunda derivada para ver cambios muy pequeños en las propiedades eléctricas de juntas metal-aislante-metal, como una función del voltaje, encontraron picos a energías características de vibraciones moleculares. Identificaron estos picos comparando su espectro (d^2I/dV^2 vs V) con el espectro infrarrojo de ciertos compuestos orgánicos simples presentes en el óxido aislante, provenientes del sistema de vacío en que prepararon sus juntas, principalmente del aceite de la bomba de vacío.

La teoría de ETEI explica la posición, anchura e intensidad de los picos, siendo más complicado explicar la intensidad ya que depende de los detalles de la interacción electrón-molécula.

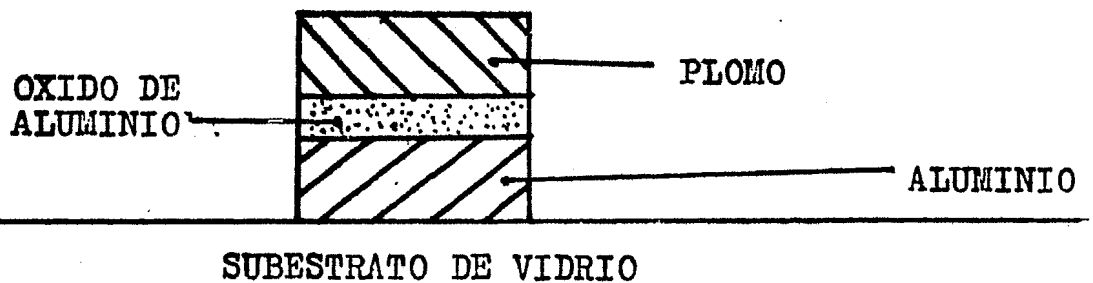
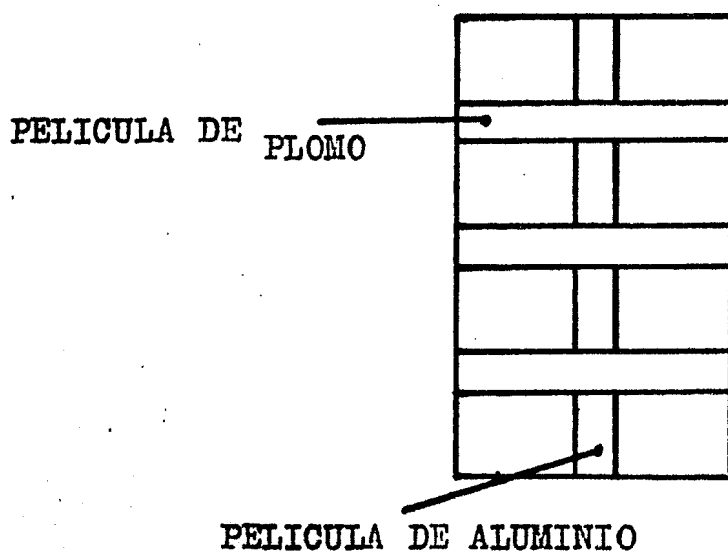


Figura 1.1 Arriba: tres juntas túnel formadas por películas delgadas de aluminio y plomo sobre un subestrato de vidrio. Abajo: corte transversal de una junta túnel.

POSICION DE LOS FICOS

Cuando en una junta túnel un electrón pasa por tunelaje de un metal al otro a través de la barrera (ver figura 1.2), puede hacerlo sin perder energía, es decir elásticamente; pero puede suceder que al pasar por la barrera interactúe con alguna molécula de contaminante presente en ésta, excitando un modo vibracional de energía $h\nu$ y esto se detecta como un ligero cambio de pendiente en la característica eléctrica de la junta (gráfica I vs V) a un voltaje $v = h\nu/e$. El electrón pierde en este proceso una cantidad $h\nu$ de energía.

La situación la podemos ver idealizada en la figura 1.2(a) (a temperatura $T=0$), donde no hay tunelaje, debido a que no hay estados desocupados en un metal al nivel de estados ocupados en el otro metal. Cuando se aplica un voltaje de polarización a través de la junta (ver figuras 1.2(b) y 1.3), es decir, entre los dos metales, los niveles de Fermi ya no coinciden y se inicia el tunelaje. Si un electrón que tunelea del metal A al metal B lo hace elásticamente, sigue el camino 1, si en cambio interactúa con alguna molécula perdiendo una energía $h\nu$, sigue el camino 2 siempre y cuando el voltaje de polarización sea tal que $eV > h\nu$, y encuentre un estado desocupado en el metal B.

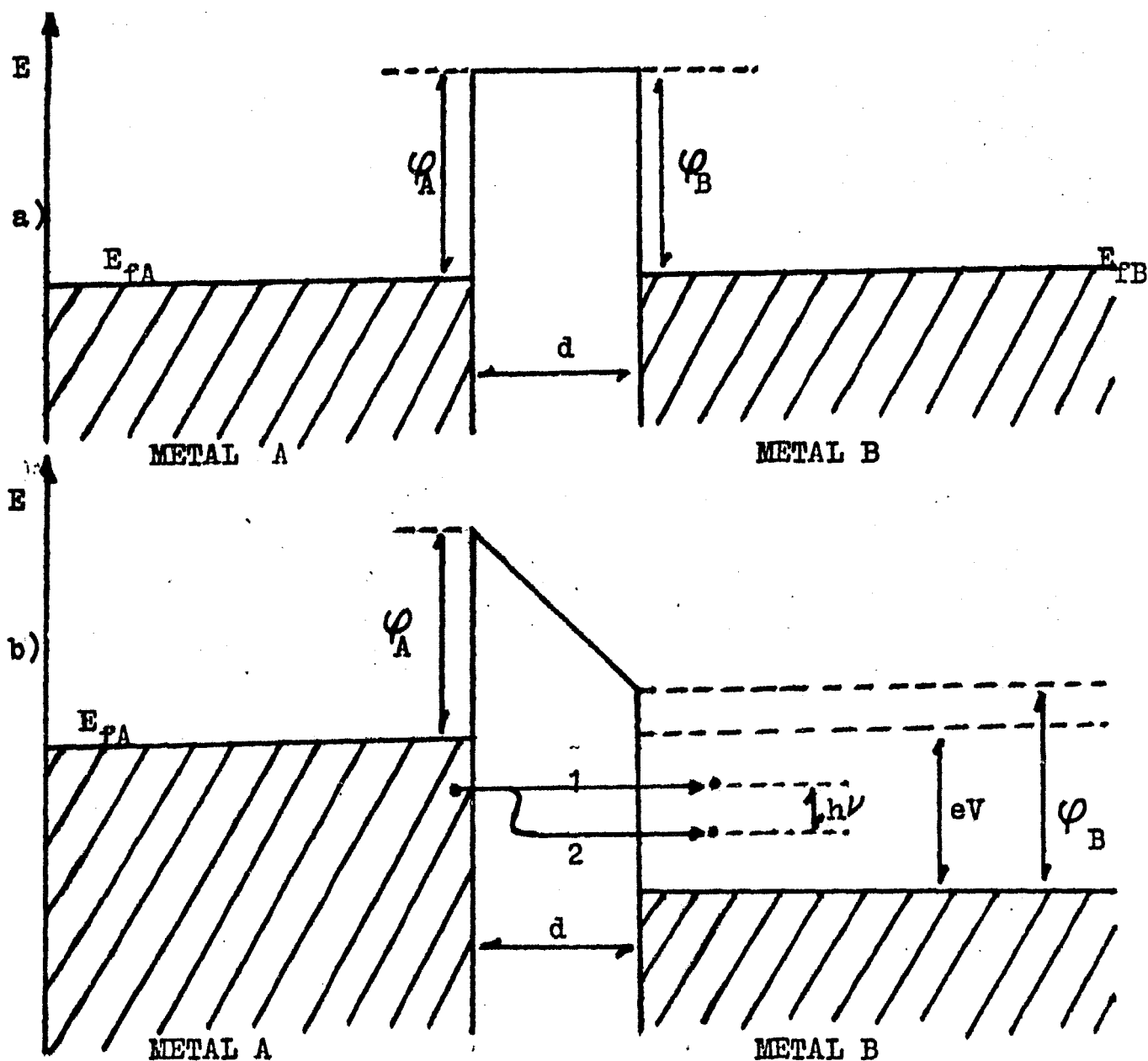


Figura 1.2 a) A temperatura $T=0$, no hay estados desocupados a nivel de estados ocupados en el otro metal, por lo tanto no hay tunelaje. b) Al aplicar una diferencia de potencial, un electrón del metal A puede tunellear al metal B elásticamente (camino 1), o bien, puede interactuar con una molécula en la barrera, perdiendo $h\nu$ de energía (camino 2) si $eV=h\nu$.

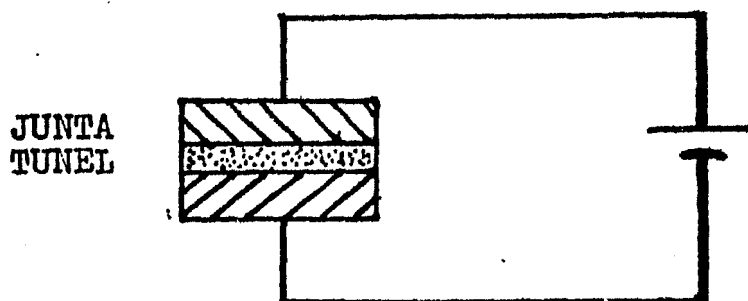


Figura 1.3 Para que se inicie el tunelaje en una junta se aplica una diferencia de potencial.

Si graficamos la corriente a través de la junta contra el voltaje de polarización (figura 1.4(a)), vemos que la corriente aumenta (en forma lineal aproximadamente) al aumentar el voltaje hasta que $V=hV/e$, que es cuando se inicia el tunelaje inelástico y se abre un nuevo camino de tunelaje; la corriente elástica se incrementa por una pequeña contribución inelástica, por lo que habrá un cambio de pendiente en la gráfica a $V=hV/e$.

Esta es una descripción idealizada del fenómeno, en la práctica es más usual y conveniente medir la conductancia diferencial (o dinámica), $\sigma(V)=dI/dV$, que graficándola contra el voltaje, en teoría nos dá un "escalón", (ver figura 1.4(b)), y volviendo a derivar obtenemos un pico en $V=hV/e$, (ver figura 1.4(c)). Este es el origen de los picos en ETEI. Teóricamente el cambio porcentual en la conductancia es de aproximadamente 1% (2), que es lo observado experimentalmente.

En las juntas túnel, la corriente puede deberse, además de a tunelaje, a la formación de puentes metálicos debidos a imperfecciones en la misma barrera. El hecho de que la corriente de tunelaje depende exponencialmente del espesor de la barrera aislante y que ningún otro mecanismo de conducción es tan sensible a este parámetro de la junta, y por otro lado la forma de la curva σ vs V , (ver figura 1.5), nos permite asegurar que para barreras suficientemente

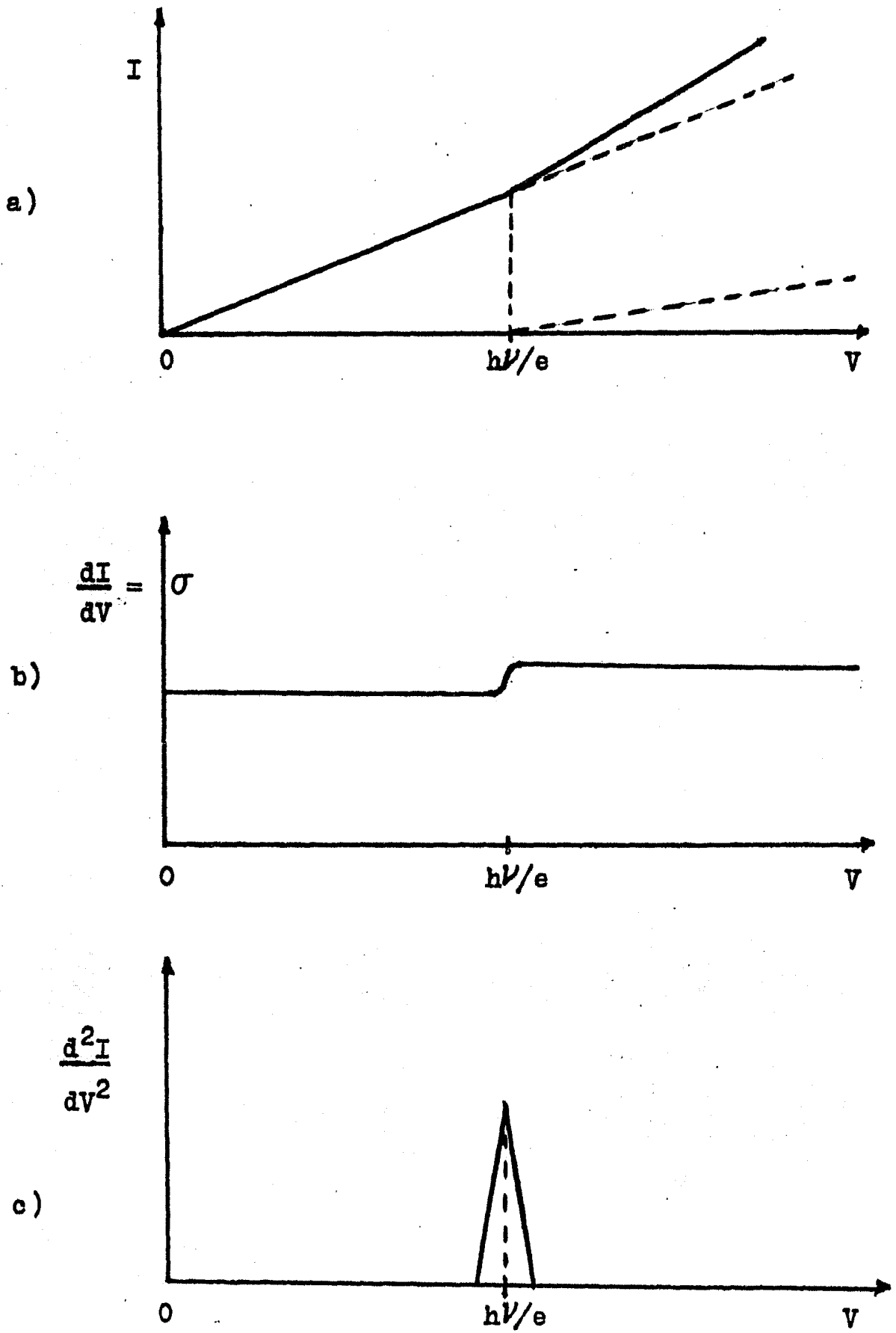


Figura 1.4 Características de corriente correspondientes al proceso descrito en la figura 1.2 b).

angostas, la corriente eléctrica se debe a tunelaje (a $T < 100K$).

Las gráficas σ vs V y d^2V/dI^2 vs V se obtuvieron para voltaje positivo y negativo (ver figura 1.5 y 1.6) respecto al metal base; en ambos casos la posición de un pico correspondiente a un modo vibracional de energía $h\nu$ es, en valor absoluto, $V = h\nu/e$; esto se basa en la conservación de energía y es independiente del mecanismo de la interacción electrón-molécula (2), por lo que la posición del pico debe ser la misma para voltaje positivo y negativo, es decir, debe ser simétrico en posición (ver figura 1.6).

CONTRIBUCIONES AL ANCHO NATURAL DE LOS PICOS

El ancho natural de los picos se ve incrementado por la temperatura (ensanchamiento térmico) y por el voltaje de modulación (ensanchamiento instrumental) que se introduce en la medición de la característica de la junta (ver sección II.2).

El efecto de la temperatura fue primero discutido por Lambe y Jaklevic (1). Su tratamiento lo hacen para un modo vibracional de ancho natural despreciable a una energía $h\nu$. La corriente electrónica inelástica se puede escribir como (3):

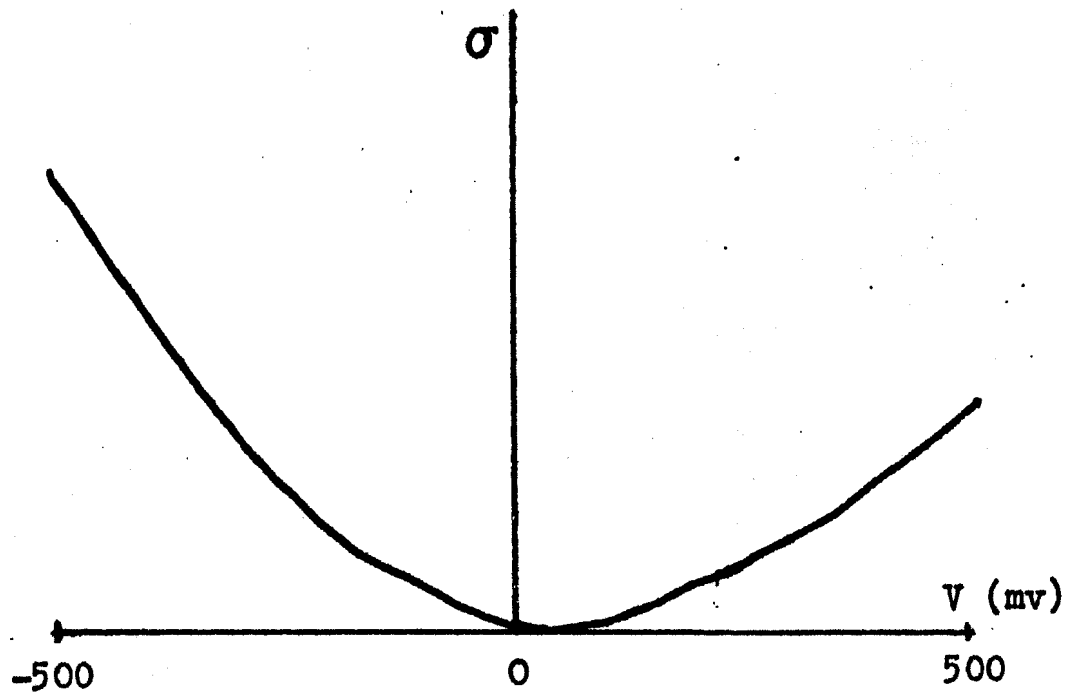


Figura 1.5 Característica σ vs V de una junta túnel obtenida experimentalmente.

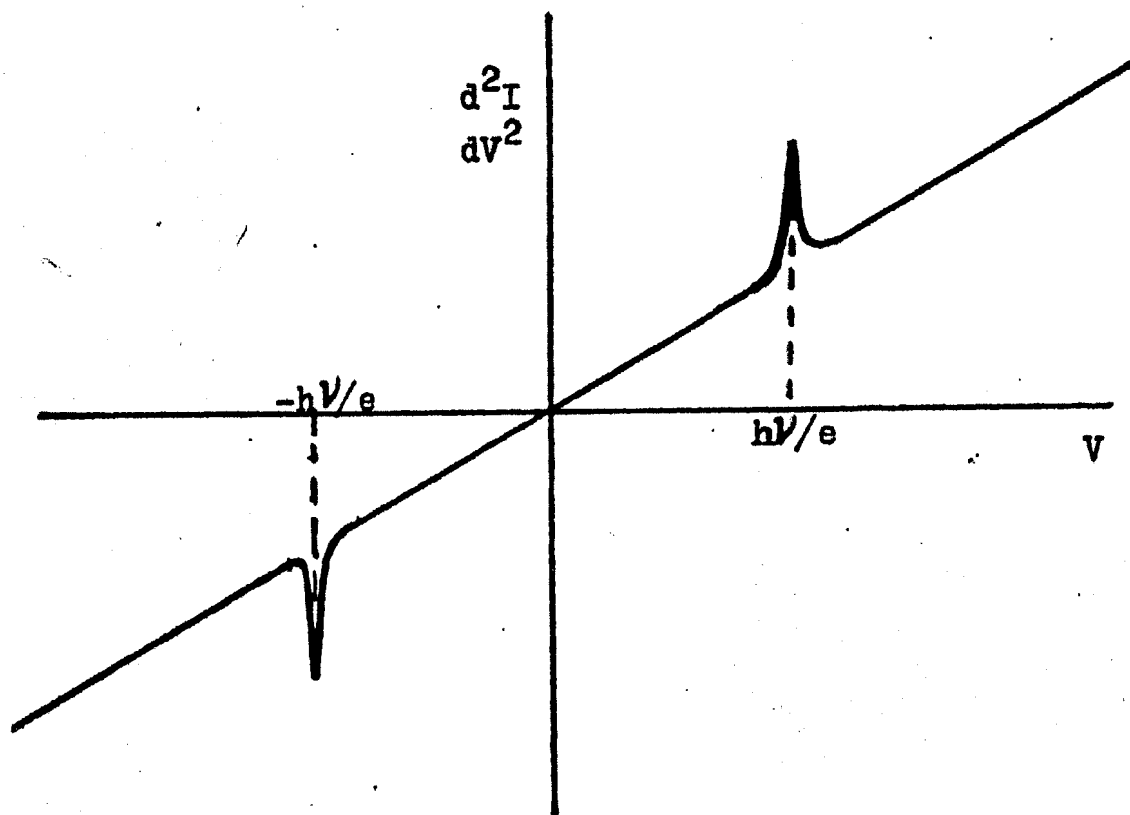


Figura 1.6 Espectro idealizado. La posición de un pico debe ser la misma para las dos polarizaciones.

$$I_i = C \int_{-\infty}^{\infty} f(E) (1 - f(E + eV - h\nu)) dE \quad (1.1)$$

(i = inelástica)

donde los detalles del acoplamiento electrón-molécula, densidades de estados, coeficiente de transmisión, que son prácticamente independientes de E, están contenidos en el parámetro C y la integral se realiza sobre las funciones de Fermi de los dos metales (f(E)).

Esta integral expresa analíticamente la probabilidad de que los electrones puedan tunear desde un estado lleno en uno de los electrodos (metal A) a un estado desocupado en el otro electrodo (metal B de la figura 1.2(b)) o viceversa.

Evaluando la integral (ecuación 1.1), empleando la distribución de probabilidad de Fermi definida por

$$f(E) = 1 / (1 + \text{EXP}(E/KT))$$

se obtiene

$$I_i = C (eV - h\nu) \frac{e^{(eV - h\nu)/KT}}{e^{(eV - h\nu)/KT} - 1}$$

Derivando I_i con respecto al voltaje se tiene que:

$$\frac{dI_i}{dV} = eC \left\{ \frac{(eV - h\nu)/kT}{(e^{(eV - h\nu)/kT} - 1)^2} + \frac{e^{(eV - h\nu)/kT}}{e^{(eV - h\nu)/kT} - 1} \right\}$$

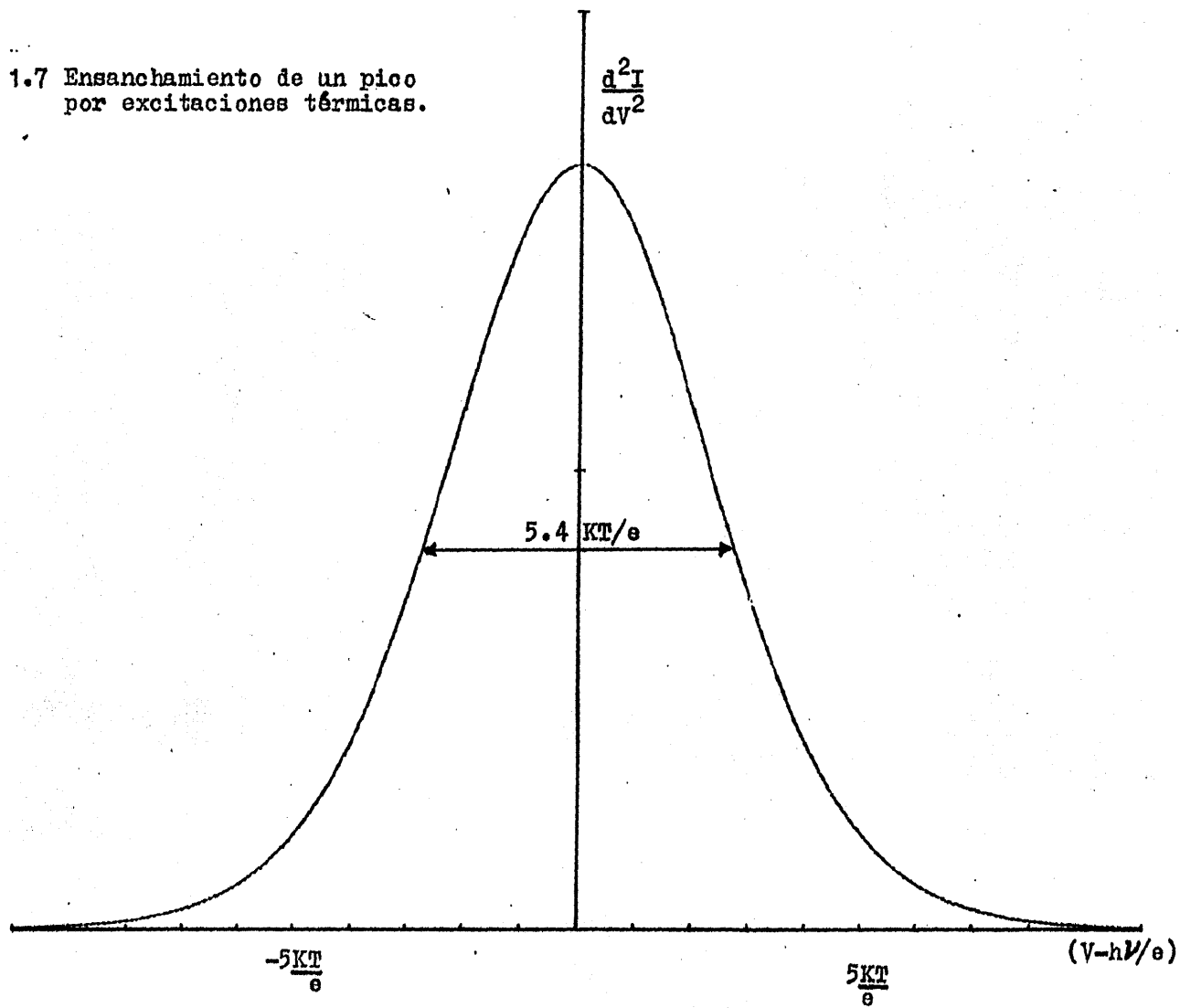
haciendo una segunda derivación, tomando $x = (eV - h\nu)/kT$, se obtiene:

$$\frac{d^2 I_i}{dV^2} = C \frac{e^2}{kT} e^x \left\{ \frac{(x - 2)e^x + (x + 2)}{(e^x - 1)^3} \right\}$$

Al graficar esta función (ver figura 1.7), se tiene a mitad de la altura un ancho máximo de $5.4kT/e$. Este resultado fue confirmado experimentalmente por Jennings y Merrill (4).

La otra contribución al ensanchamiento de los picos se introduce, como se dijo antes, en la técnica de medición, la que además del voltaje de polarización d. c., requiere de un voltaje de modulación a. c., como se verá en el Capítulo II. Este voltaje a. c. tiende a promediar la estructura producida por efectos inelásticos, lo que se traduce en un ensanchamiento de los picos.

Figura 1.7 Ensanchamiento de un pico por excitaciones térmicas.



81

Este efecto fué discutido analíticamente por Klein y colaboradores (5). En su discusión suponen que el voltaje de modulación es $eV_w \cos \omega t$ y que $F'(eV)$ es la segunda derivada exacta ($d^2 I/dV^2$) sin ensanchamiento. Con esto la corriente se puede escribir como una función del voltaje total:

$$I = F(eV + eV_w \cos \omega t)$$

donde $I = F(eV)$ es la característica de la junta y eV_w es la amplitud de modulación a la frecuencia ω .

La corriente a la frecuencia del segundo armónico promediada en un período es:

$$I_{2\omega} = \frac{2}{\tau} \int_0^{\tau} F(eV_0 + eV_w \cos \omega t) \cos 2\omega t dt$$

Sustituyendo la nueva variable $\mathcal{E} = eV_w \cos \omega t$, tenemos:

$$\frac{\pi e^2 V_w^2}{2} I_{2\omega} = \int_{-eV_w}^{eV_w} F(eV_0 + \mathcal{E}) (2\mathcal{E}^2 - e^2 V_w^2) (e^2 V_w^2 - \mathcal{E}^2)^{-1/2} d\mathcal{E}$$

integrando por partes dos veces, obtenemos:

$$\frac{\pi}{2} e^2 V_w^2 I_{2w} = \int_{-eV_w}^{eV_w} F''(eV_0 + \mathcal{E}) \frac{(e^2 V_w^2 - \mathcal{E}^2)^{3/2}}{3} d\mathcal{E}$$

Entonces aparece la cantidad experimentalmente medida $G^* = (4/V_w^2) I_{2w}$ como una convolución (ó), de la segunda derivada exacta F'' , con una función instrumental ϕ . Así la expresión para G^* es:

$$G^* = F'' * \phi \quad (1.2)$$

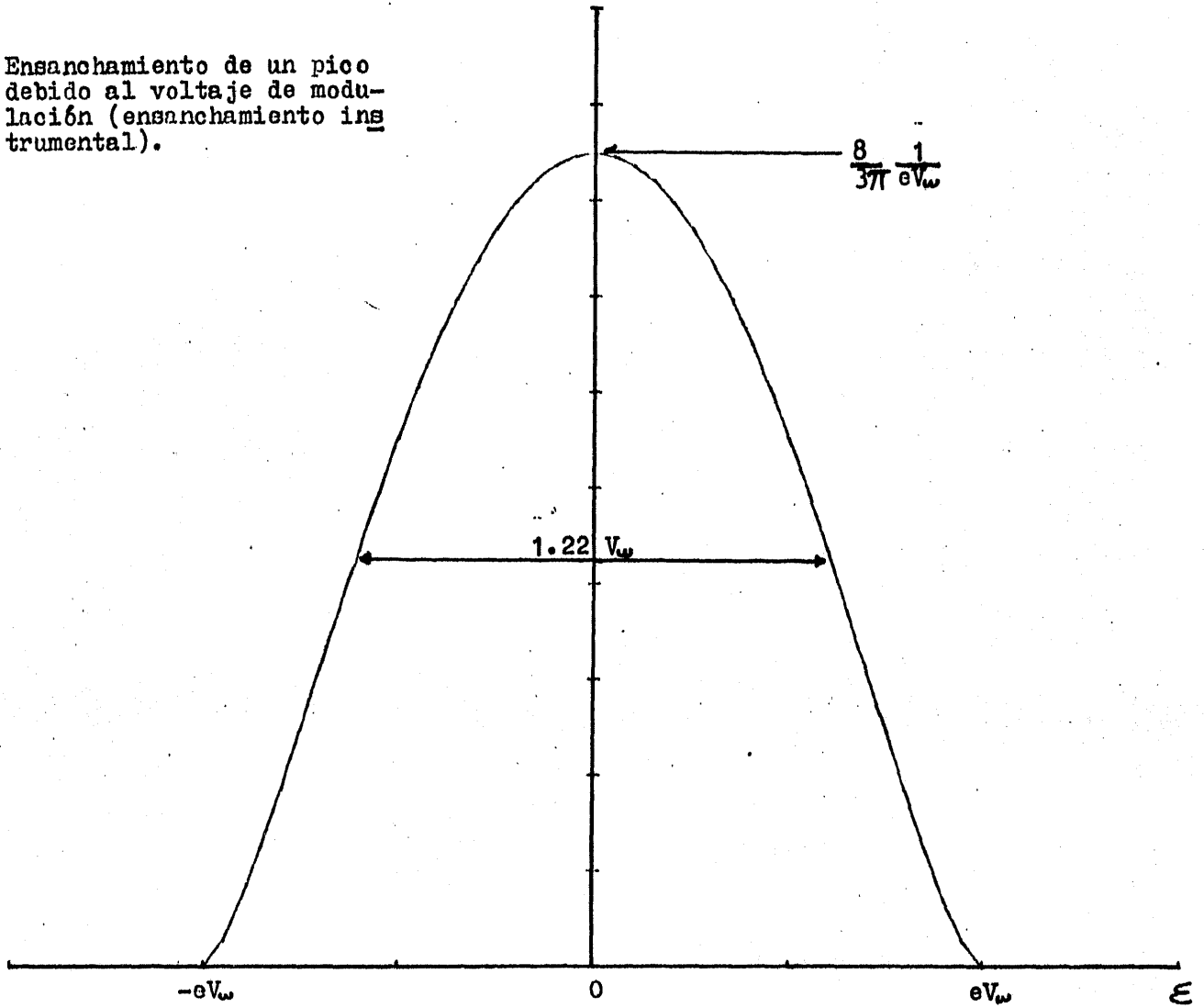
donde

$$\phi(\mathcal{E}) = \frac{8}{3\pi} \frac{1}{(eV_w)^4} (e^2 V_w^2 - \mathcal{E}^2)^{3/2} \text{ para } |\mathcal{E}| < eV_w$$

$$\text{y } \phi(\mathcal{E}) = 0 \text{ para } |\mathcal{E}| > eV_w$$

Grificando esta función instrumental ϕ se tiene que el ancho a mitad de la altura es $1.22 eV_w$, y que es cero fuera del intervalo $-eV_w, eV_w$ (ver figura 1.8). Por lo tanto, de la

Figura 1.8 Ensanchamiento de un pico debido al voltaje de modulación (ensanchamiento instrumental).



ecuación 1.2 se ve que la d^2I/dV^2 (ó G'') experimentalmente medida tiene un ancho a mitad de la altura de $1.22 eV_w$ debido al voltaje de modulación.

Las dos contribuciones al ancho de los picos (térmica e instrumental) se puede disminuir. El ensanchamiento térmico se reduce bajando la temperatura, por esto las mediciones se hacen generalmente a 4K. El ancho debido al voltaje de modulación presenta algunos problemas para reducirlo: en términos del valor cuadrático medio, $\Delta V = V_w / \sqrt{2}$, el ancho a mitad de la altura es $1.7\Delta V$; si se quiere hacer este ancho comparable al térmico a 1K ($=0.46$ mv) se requiere que $\Delta V \approx 0.27$ mv y a 4K ($=1.86$ mv) debe ser $\Delta V \approx 1.1$ mv; para hacer mediciones con estos voltajes de modulación se requiere una constante de tiempo muy grande en el aparato de medición; como la señal del segundo armónico varía aproximadamente con el cuadrado del voltaje de modulación y el cociente señal/ruido varía con la raíz cuadrada de la constante de tiempo, se tardaría una semana o más para obtener un sólo espectro.

INTENSIDAD DE LOS PICOS

Las intensidades de los picos en ETEI, dependen de los detalles de la interacción electrón-molécula, por lo tanto son mucho más difíciles de calcular.

La primera teoría para intensidades fué desarrollada por Scalapino y Marcus (7); ellos aproximaron la interacción electrón-molécula en términos de un sólo electrón que tunelea e interactúa (interacción coulombiana) con el campo dipolar (y la imagen) de una molécula de impureza en el aislante pero cercana a la interface aislante-metal. Esta teoría da como resultado que las intensidades relativas en un espectro de tunelaje deben ser las mismas que las de un espectro de infrarrojo. Experimentalmente se ha encontrado que aunque los picos intensos en el espectro infrarrojo generalmente corresponden a picos intensos en los espectros de tunelaje, la proporcionalidad, es decir la intensidad relativa, no es exactamente la misma. Además, aparecen picos en el espectro de tunelaje que están completamente ausentes en el espectro infrarrojo.

Lambe y Jaklevic (1) propusieron otros mecanismos para la interacción electrón-molécula. Generalizaron la teoría de Marcus y Scalapino para incluir la interacción a través de la polarizabilidad de la molécula. El electrón induce un momento dipolar en la molécula e interactúa con él. Esta teoría tiene serias dificultades, como por ejemplo: supone que la componente transversal del momento del electrón se conserva no tomando en cuenta que la dispersión inelástica producida por una impureza, cambia el momento transversal del electrón. Otra dificultad es que no incluye el efecto de la pérdida de

energía del electrón que excita una vibración molecular, sobre la probabilidad de tunelaje del electrón.

El formalismo que ha dado los mejores resultados es el del Hamiltoniano de Transferencia, originalmente introducido por Bardeen (8), para explicar el comportamiento de $\sigma(V)$ cuando al menos uno de los electrodos de la junta es superconductor. Kirtley, Scalapino y Hansma (9) introdujeron dentro de este formalismo, un potencial de interacción local empírico:

$$U_{INT} = \sum_i \frac{e^2 Z_i}{|R_i - \bar{r}|}$$

en donde R_i y Z_i son la posición del i -ésimo átomo y la carga parcial correspondiente, respectivamente. Las cargas parciales resultan de la distribución de densidad de carga de los electrones ligados. Esto les permitió describir la interacción a distancias comparables a las longitudes interatómicas, distancia en la que la aproximación dipolar ya no funciona.

Con esta teoría se pueden hacer cálculos de las intensidades de los picos para diferentes polarizaciones $V \gg 0$ y $V < 0$, y se explica una diferencia entre ellas que había sido observada experimentalmente mucho antes de la explicación teórica. De manera muy sencilla, la explicación de ésta diferencia es como sigue: considérese un electrón que tunelea del metal 2 al metal

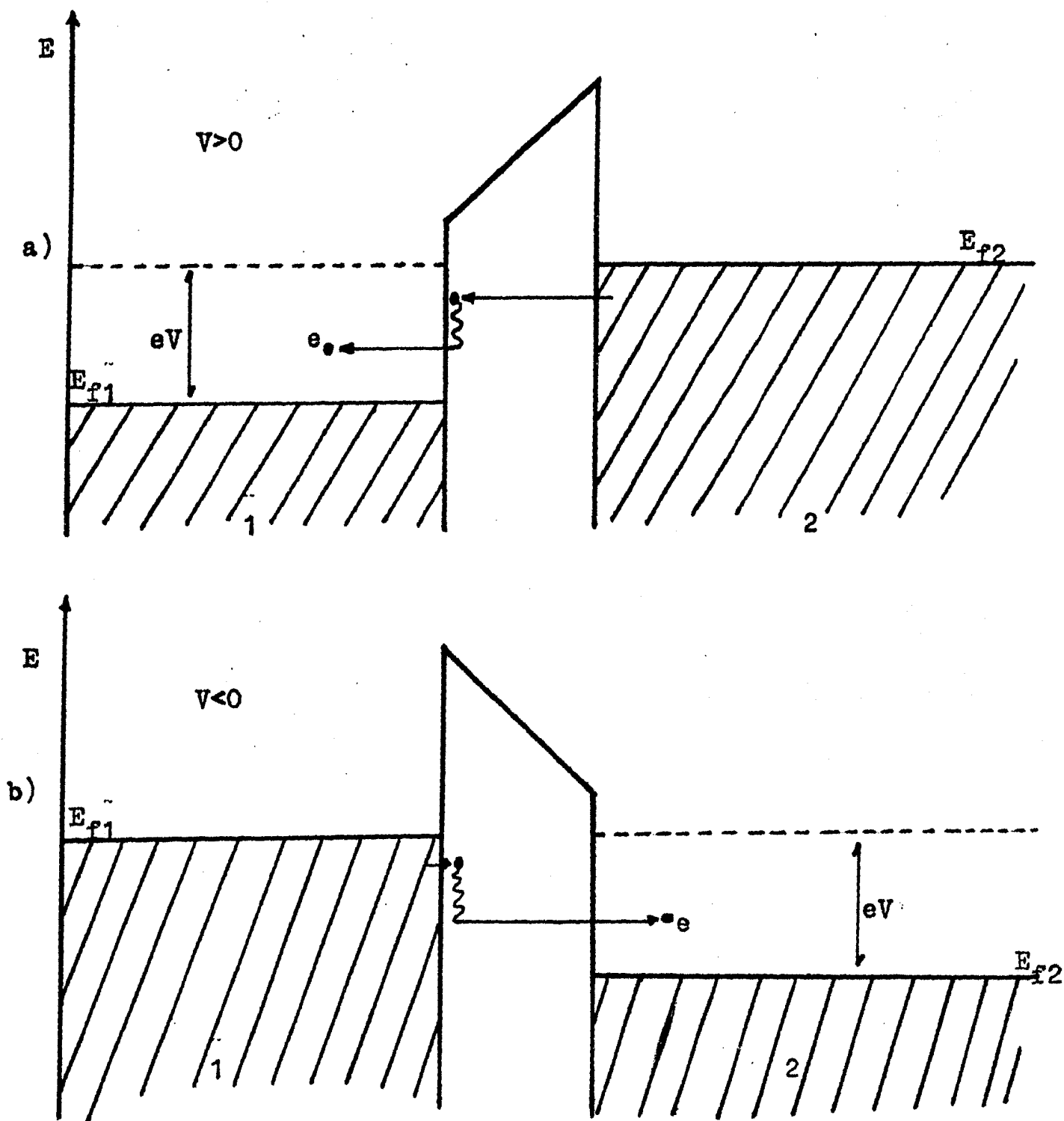


Figura 1.9 Diagrama de energía de un electrón que tunela del metal 2 al metal 1 en (a) y del metal 1 al metal 2 en (b), interactuando con una molécula en el aislante cercana al metal 1. Se toma el voltaje V con respecto al metal 2.

1 (ver figura 1.9(a)) e interactúa con la molécula cercana al electrodo 1 recorriendo la mayor parte de la barrera antes de perder energía; puesto que la probabilidad de tunelaje aumenta exponencialmente con la energía, el electrón tendrá mayor probabilidad de tunelear que otro electrón en sentido contrario, debido a que éste último pierde energía antes de cruzar la barrera (ver figura 1.9(b)). Por lo tanto la intensidad, relacionada con cambios de polaridad y por tanto con cambios de corriente, será mayor en el caso $V > 0$ y menor cuando $V < 0$.

I.2 EL FICO A 117 MV

En los espectros de tunelaje de juntas aluminio-óxido de aluminio-plomo, en la región de 30 a 500 mv, sobresalen tres picos más o menos prominentes, a 37, 117 y a 450 mv (ver figura 1.10). El más notorio, objeto de estudio de esta tesis, es el de 117 mv, que corresponde a la vibración de torsión (bend) de la liga O-H en alúmina hidratada, o en hidróxido de aluminio, en combinación con otros modos vibracionales del óxido de aluminio. Algunos autores (1) sitúan a éste pico en 120 mv, otros en 116.5 (5). Haciendo mediciones muy cuidadosas de la posición de este pico, Magno y Adler (10), encontraron diferencias de hasta 4.5 mv para diferentes juntas, 116.2 mv en una, 114.2 y 112.7 mv en otras, lo que implica que la estructura del hidrato es ligeramente diferente para cada junta. El OH que da origen a este pico, se introduce durante la formación del óxido, o bien, se adsorbe en la superficie del óxido antes de depositar la sobrecapa.

Los picos de OH están presentes en casi todos los espectros de ETEI debido a que el agua es una impureza residual común en las cámaras de vacío, donde se fabrican las juntas; además el agua parece jugar un papel importante en el crecimiento de las capas de óxido (10).

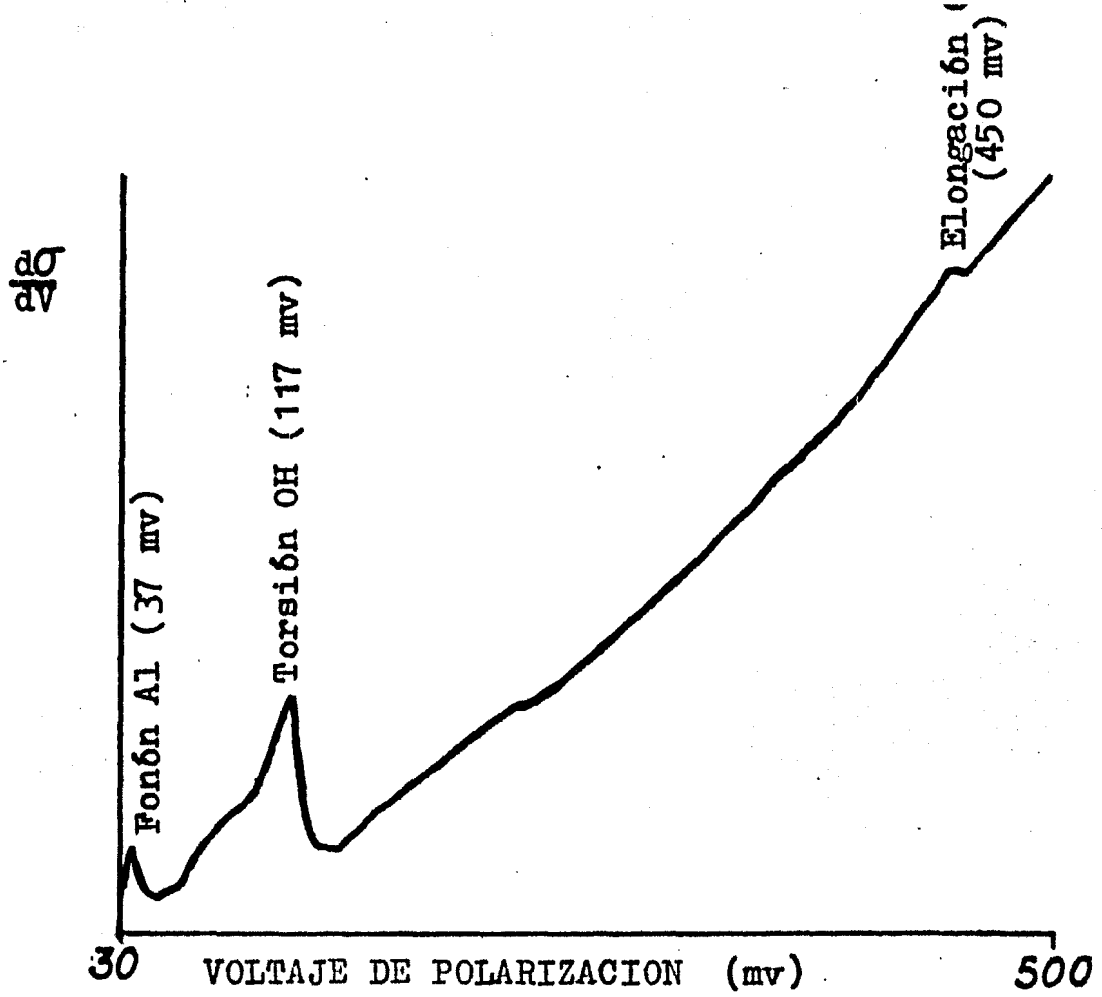


Figura 1.10 Espectro de tunelaje de una junta de Al-Ox.Al-Pb (dI/dV en unidades arbitrarias)

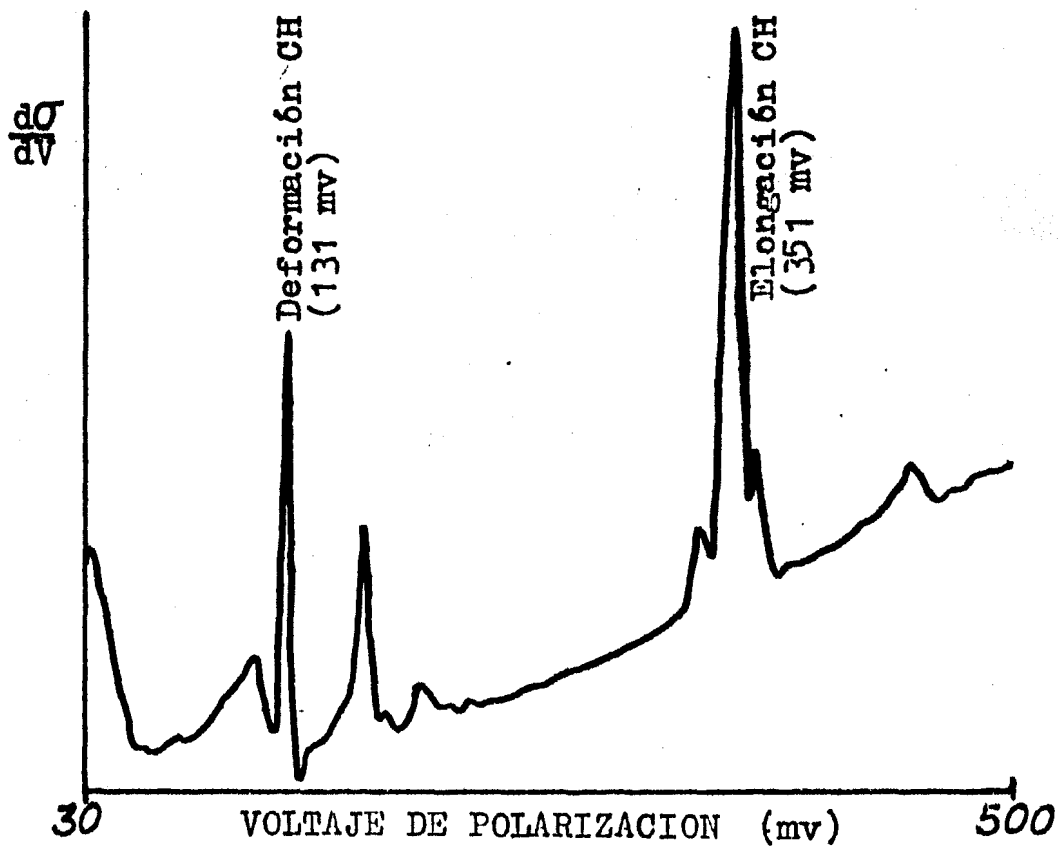


Figura 1.11 Espectro de una junta envenenada con ácido fórmico.

Lewis (11), Vadder (12) y Takamura (13) atribuyeron originalmente éste pico (117 mv) a la elongación (stretch) perpendicular a la capa de óxido, del Al-O. La intensidad del pico varia según la muestra, dependiendo de la cantidad de moléculas (OH ó Al-O) que estén presentes en la junta.

A aproximadamente 75 mv aparece un pequeño pico, que se le identifica con un modo O-H de torsión, y también varia en intensidad dependiendo de la muestra. Vadder y Vermilyea (12) asocian el pico de 75 mv con una vibración en el plano de la capa de óxido.

Entre los picos que estan a 75 mv y 117 mv aparece una "Joroba", que algunas veces llega ser tan intensa como el pico a 117 mv; es posible que esta joroba se deba a varios modos cuyos picos estén muy cercanos entre sí. Esta joroba es de intensidad diferente para cada junta pero siempre más intensa para una polaridad, lo cual quiere decir, que las moléculas que lo producen deben estar en el aislante muy cercanas a uno de los metales (como se explicó al final de la sección anterior).

El pico que está aproximadamente a 37 mv, corresponde al fonón longitudinal de Al (14), proveniente de procesos inelásticos que ocurren en el electrodo y no en la barrera. El pico a 450 mv se debe a vibraciones de elongación

(stretch) de grupos O-H más o menos libres en la superficie del óxido. Este pico, como el de 117 mv, aparece debido a la presencia de agua en la campana de vacío.

En general, no es mucho lo que se ha escrito acerca del pico a 117 mv, debido a que la mayoría de las veces, a las juntas recién fabricadas se les agregan contaminantes deliberadamente, con lo que en los espectros aparecen nuevos picos que se identifican con los contaminantes agregados y esto es de mayor interés, ya que es por lo que se convierte en una técnica de espectroscopia, aplicable a otras ramas de la ciencia (15).

Un ejemplo de un espectro de una junta contaminada, deliberadamente, con ácido fórmico se muestra en la figura 1.11; aquí aparecen nuevos picos, muy sobresalientes, uno a 131 mv debido al modo C-H de deformación, y otro a 351 mv debido al modo C-H de elongación (16).

Resumiendo lo que se ha dicho en esta sección, podemos decir que: 1) para juntas de aluminio-óxido de aluminio-plomo aparece un pico muy prominente entre 112 mv y 120 mv, dependiendo su posición dentro de este intervalo, de la estructura del hidrato en cada junta; 2) en general es aceptado que se debe a la vibración de torsión del O-H asociado con hidróxido de alúmina.

CAPITULO II
PARTE EXPERIMENTAL

CAPITULO II

PARTE EXPERIMENTAL

En la primera sección de este capítulo se describe la fabricación de las Juntas túnel y los aparatos requeridos para tal fin. En la segunda sección se describen la técnica y los circuitos de medición de las características de σ y $d\sigma/dV$. Las técnicas de fabricación y medición son las usadas convencionalmente y han sido descritas por muchos autores (17,18,19), por tanto la discusión en las dos primeras secciones de este capítulo será muy breve.

Finalmente, en la tercera sección se describen los aparatos y el procedimiento de medición de las características de σ y $d\sigma/dV$ en presencia de un campo magnético intenso, el cual destruye la superconductividad de la sobrecapa de plomo a temperatura de helio líquido (4K).

II.1 FABRICACION DE LA JUNTA

Las juntas túnel se fabrican sobre sustratos de algún material aislante; en este trabajo se utilizaron sustratos de vidrio (portamuestras para microscopio cortados al tamaño adecuado) limpios y recocidos para soportar cambios bruscos de temperatura, (desde temperatura ambiente hasta 4K).

Las películas delgadas que forman la junta se depositan sobre el sustrato en una evaporadora al alto vacío, libre de contaminantes orgánicos, ya que de otro modo aparecerían picos en los espectros de las juntas así fabricadas, debidos a esos contaminantes. La evaporadora utilizada cuenta con una trampa fría para impedir el paso hacia la campana, donde se fabrica la junta, de hidrocarburos y otros contaminantes orgánicos provenientes del sistema de vacío.

Una vez que se ha cortado, limpiado y recocido el sustrato, se sueldan, alambres que servirán de contactos para las mediciones (ver figura 2.1). En seguida se coloca dentro de la evaporadora y a una presión de alrededor de 10^{-6} Torr, se evapora una película de aluminio (electrodo o base, figura 2.2(a)).

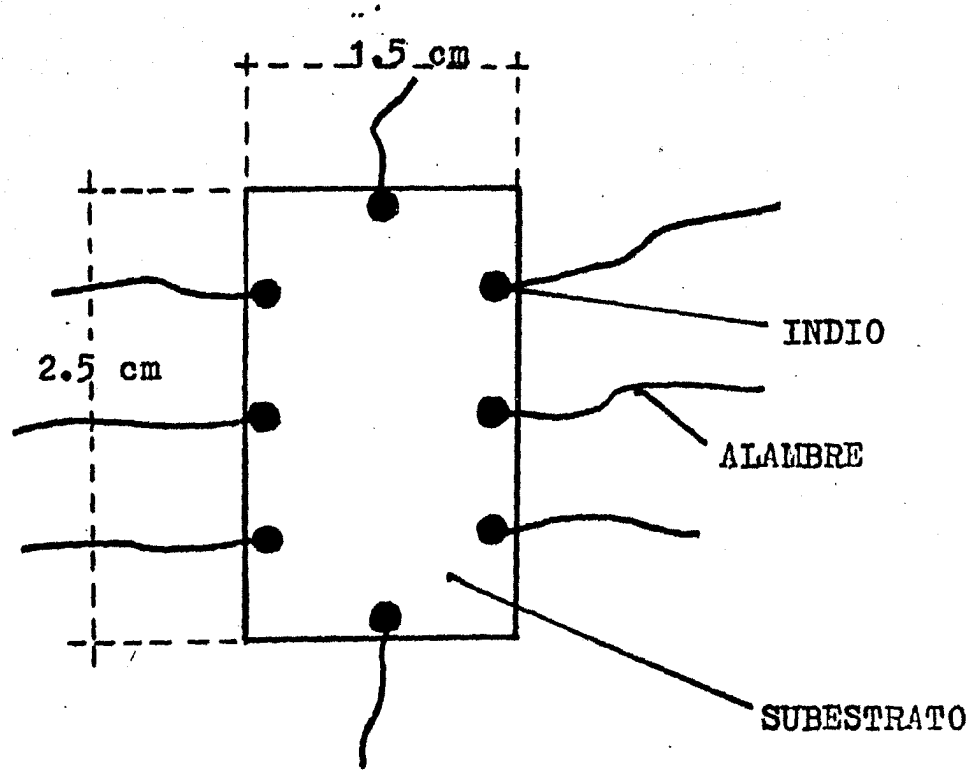


Figura 2.1 Sobre el sustrato de vidrio se sueldan alambres que servirán de contactos en las mediciones.

El espesor de las películas evaporadas se controla midiéndolo durante la evaporación con un medidor de espesores comercial (SLOAN) del tipo de oscilador de cuarzo (20). De esta manera al llegar al espesor deseado durante la evaporación, se cubre la muestra con una pantalla para evitar que se siga depositando material en ella.

El aluminio se evapora colocando una pequeña cantidad de éste sobre un filamento tungsteno. Se hace pasar una corriente intensa por el filamento, que al calentarse funde y evapora el aluminio colocado sobre él. La pureza del aluminio usado es mayor de 99.95%.

En la figura 2.2 se muestra de forma esquemática la fabricación de la junta.

Una vez evaporada la película de aluminio, se oxida su superficie; de esta manera el óxido de aluminio que se forma, servirá de barrera aislante. El procedimiento es el siguiente: se introduce a la campana de la evaporadora (donde se encuentra la junta) una mezcla de helio y oxígeno a una presión de 40 mTorr aproximadamente; a continuación se establece una diferencia de potencial entre dos electrodos dentro de la campana (~ 800 volt), produciéndose un plasma que contiene iones de oxígeno; en presencia de este plasma, durante 70 segundos aproximadamente se forma un óxido del

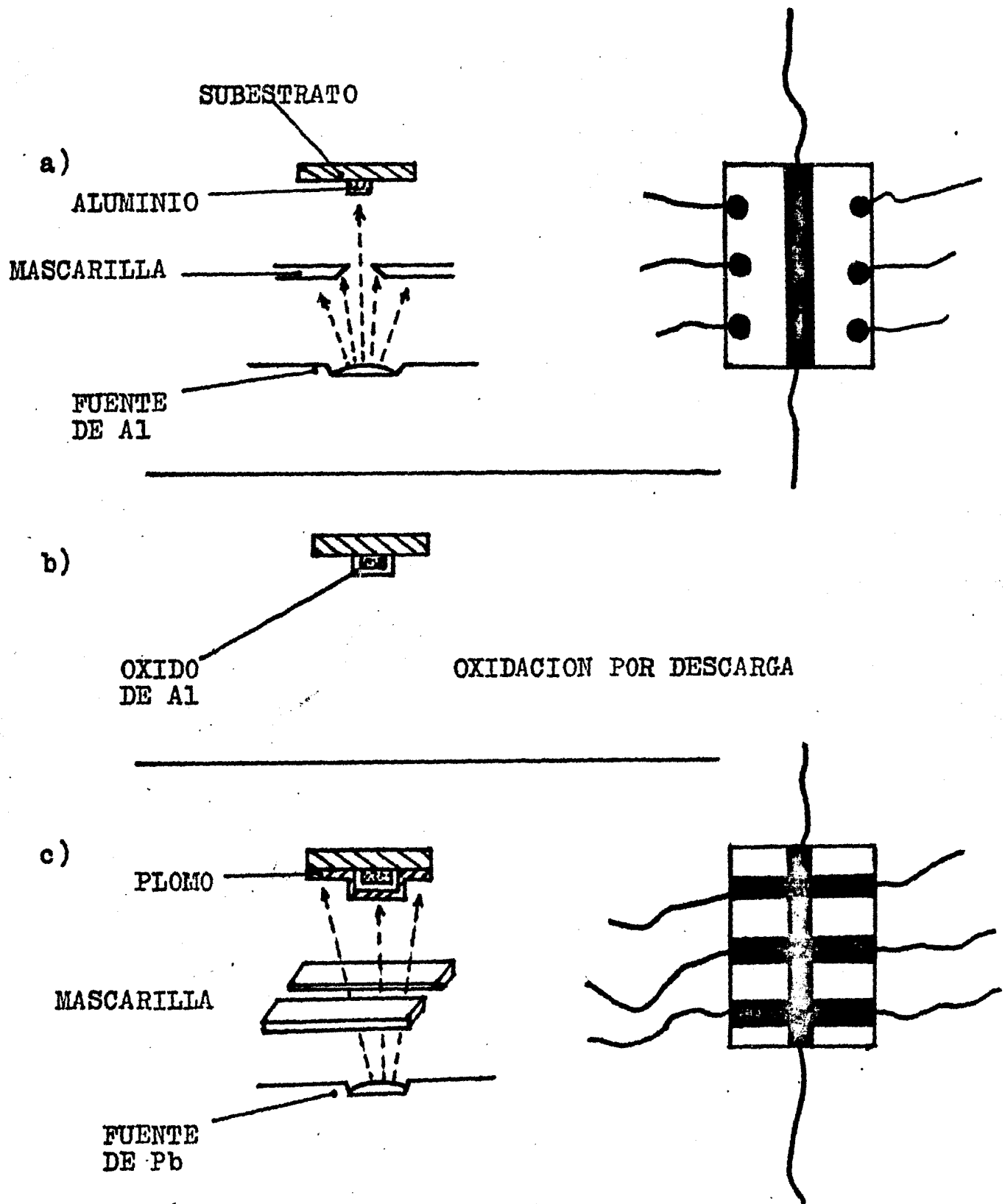


Figura 2.2 Se muestra esquemáticamente, del lado izquierdo, la fabricación de una junta túnel dentro de la evaporadora y el aspecto del sustrato en cada paso en el lado derecho. La mascarilla que forma la película de Pb tiene tres ranuras como la de la figura, que forman tres películas perpendiculares a la de Al.

espesor adecuado para las mediciones (~ 20 A, ver figura 2.2(b)).

Durante la oxidación, los parámetros de presión, voltaje y tiempo de oxidación se pueden variar de diferente manera dando el mismo espesor del óxido. Para este trabajo generalmente utilizamos los valores mencionados en el párrafo anterior debido a que con ellos se obtuvieron los mejores resultados dada la geometría que se tiene en la evaporadora (distancias, etc.).

En seguida se hace vacío nuevamente ($\sim 10^{-6}$ Torr) para depositar la película de plomo (contraelectrodo o sobrecapa). El procedimiento es similar al del aluminio; se coloca una pequeña cantidad de plomo (~ 3 g) sobre un pequeño recipiente de tantalio, por el que se hace pasar la corriente intensa que fundirá y evaporará el plomo. La pureza del plomo es mayor de 99.97%.

En general, es conveniente que los electrodos sean angostos en la región de la junta para minimizar la posibilidad de que existan imperfecciones en el área de la junta, y para que tengan una resistencia eléctrica lo más alta posible, lo cual como se verá más adelante, es muy importante para este trabajo.

La evaporadora utilizada tiene los mecanismos necesarios para

realizar todo el proceso de fabricación de la junta sin tener la necesidad de abrir la campana y hacer vacío en cada paso. Tiene seis diferentes mascarillas para evaporar cada película, que se pueden intercambiar desde afuera de la campana, así en un mismo sustrato se pueden fabricar hasta cinco juntas con diferentes espesores de la sobrecapa. También se puede seleccionar desde fuera, la fuente del material que se quiere evaporar.

Una vez terminada la junta se saca de la evaporadora y se mide la resistencia de cada película a temperatura ambiente; si las resistencias de los electrodos son adecuadas (idealmente deben ser: $R(Al) < 20 \Omega$ y $R(Pb) < 1,500 \Omega$), se coloca en un portamuestras (ver figura 2.3), se introduce en nitrógeno líquido y se mide la resistencia a través de la junta (R_j).

Si la junta se deja a la temperatura ambiente en contacto con la atmósfera, la condensación del agua presente en ésta, destruye en pocos minutos la película de plomo, además de cambiar rápidamente las características de la junta. Manteniendo la junta sumergida en nitrógeno líquido (a 77K) se puede conservar por períodos muy largos, incluso meses, sin que se alteren sus características.

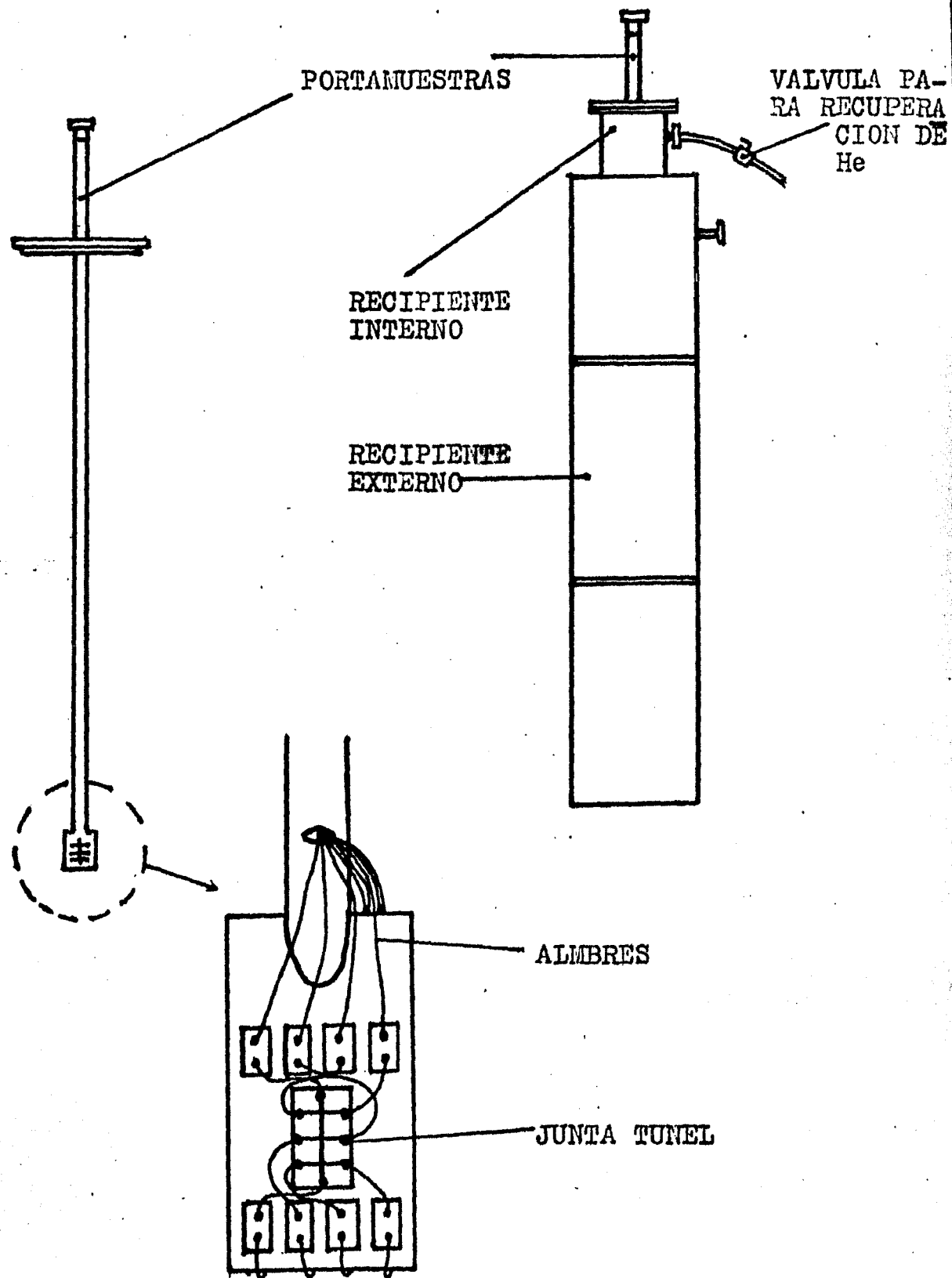


Figura 2.3 Se muestra el dewar, el portamuestras y en detalle, el lugar donde se coloca la junta túnel, indicando cómo se conecta.

II.2 MEDICION DE σ Y $d\sigma$

La obtención del espectro de tunelaje empieza con una medición de la resistencia a través de la junta (R_j) a 4K ó 77K. Las juntas útiles para este trabajo son las que tienen R_j entre 10Ω y $10^3\Omega$. Las juntas cuya resistencia no esté dentro de este intervalo pueden mostrar conductancia no debida a tunelaje si $R_j < 10\Omega$, o bien, puede ser sumamente difícil obtener su espectro de tunelaje si $R_j > 10^3\Omega$, debido al ruido.

La obtención del espectro de tunelaje consiste en medir la conductancia diferencial ó dinámica, definida por $\sigma = dI/dV$, en función del voltaje de polarización, y la pendiente de esta curva en cada punto, es decir $d\sigma/dV$, que en función del voltaje de polarización es a lo que se le llama espectro de tunelaje. A las curvas σ vs V y $d\sigma/dV$ vs V se les llama características de tunelaje.

Al aplicar una diferencia de potencial entre los electrodos de una junta túnel, el valor R_j de la junta cambia ligeramente, por lo tanto es un elemento débilmente alineal. La dificultad de amplificar estas desviaciones alineales, está en la alta resolución y estabilidad requerida (19), por lo que es conveniente usar la técnica de modulación (21,22,31). Con esta técnica se puede

emplear un amplificador lock-in, sintonizable a la señal ω y a 2ω , para obtener directamente las mediciones de las derivadas deseadas.

En la medición de la característica se aplica a la junta una intensidad de corriente con una componente directa I_0 y una muy pequeña corriente de modulación $i = i_0(\cos \omega t + x \cos 2\omega t)$, donde x es la fracción de distorsión armónica del segundo armónico producida en el oscilador utilizado. Si se mantiene constante la corriente de modulación i , la caída de voltaje se puede desarrollar en una serie de Taylor de la siguiente manera:

$$V(I) = D_0 + D_1 i_0 (\cos \omega t + x \cos 2\omega t) + \frac{1}{2} D_2 i_0^2 (\cos \omega t + x \cos 2\omega t)^2 + \dots \quad (2.1)$$

donde se ha usado la notación $D_0 = V(i_0)$, $D_1 = dV/dI$ y $D_2 = d^2V/dI^2$.

Desarrollando, eliminando términos y reagrupando se tiene que:

$$V(I) = D_0 + (i_0 D_1 + \frac{1}{2} x i_0^2 D_2) \cos \omega t + (\frac{1}{4} i_0^2 D_2 + x i_0 D_1) \cos 2\omega t + \frac{1}{2} x i_0^2 D_2 \cos 3\omega t + \frac{1}{4} x^2 D_2 i_0^2 \cos 4\omega t + \dots$$

como i_0 y x son cantidades muy pequeñas, $(1/2)x i_0^2 D_2$ es despreciable frente a $i_0 D_1$, por tanto la componente de la señal a la frecuencia w es proporcional a la derivada D_1 , mientras que la componente a $2w$ lo es a D_2 (aunque involucra el término $x i_0 D_1$, que no se puede despreciar). Estas son las cantidades que se desean medir, los términos de $3w$ en adelante son despreciables ya que, como se dijo antes i_0 es una cantidad muy pequeña.

El voltaje de modulación que se aplica a la junta también alimenta el canal de referencia del detector lock-in, el cual mide con mucha sensibilidad la caída de voltaje en la junta, discriminando las señales con diferente frecuencia a w . Esta caída de voltaje es proporcional a la resistencia de la junta túnel. En la práctica lo que se mide es la diferencia de caída de potencial (en función del voltaje de polarización) entre la junta túnel, y una resistencia R_d (variable) conocida y ajustada muy cerca del valor R_j . La resistencia de la junta se calibra fácilmente sustituyendo la junta por una caja de resistencias.

La señal generada a la frecuencia $2w$ se puede asociar directamente a $d\sigma/dV$ (23) por medio de la ecuación:

$$\frac{d\sigma}{dV} = -\sigma^3 \frac{d^2 V}{dI^2} \quad (2.3)$$

donde σ^3 casi no varia en el intervalo de voltaje de interés. La calibración de $d\sigma/dV$ no es tan directa como la de σ ; sin embargo, se puede realizar con ayuda de una computadora y verificar comparando su integral con σ (la característica medida y calibrada directamente (24)), como se describirá en el siguiente capítulo.

En la figura 2.4 se muestra un diagrama de bloques de los aparatos utilizados en la medición de σ y $d\sigma/dV$. El módulo fuente C. D. proporciona el voltaje de polarización a la junta, que se varía lentamente por medio de un potenciómetro cuyo eje es girado por un motor de velocidad variable. El módulo MOD/REF alimenta al puente con la onda senoidal (de frecuencia w) que proviene del oscilador de audio, al mismo tiempo este módulo proporciona la señal de referencia (a frecuencia w ó $2w$) al amplificador lock-in. El oscilador alimenta al módulo MOD/REF con la señal a frecuencia $w=1000$ Hz y amplitud ajustable de 0 a 10 volts.

El amplificador lock-in mide el potencial (rms) proveniente del puente, a una frecuencia w ó a $2w$, que se aplica al canal "señal" y cuya fase se ajusta por comparación con la del canal "referencia". La salida (c. d.) del lock-in se

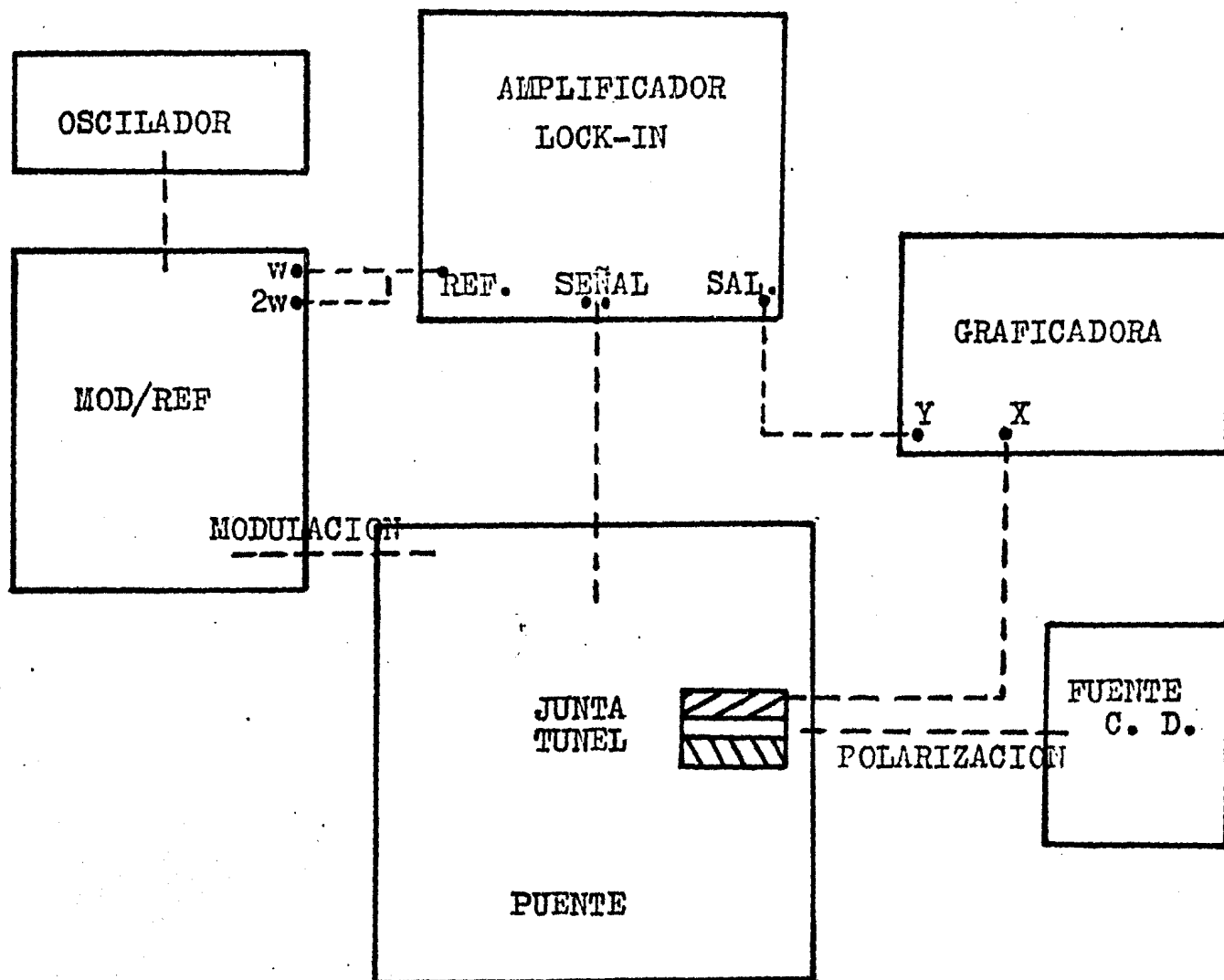


Figura 2.4 Diagrama de bloques de la configuración de aparatos utilizados en las mediciones.

conecta a la entrada "y" de la graficadora.

La señal en el eje "y" de la graficadora es un voltaje proporcional a la resistencia R de la junta (con el lock-in sintonizado a ω), ó a d^2V/dI^2 (con el lock-in sintonizado 2ω); la señal en el eje "x" es proporcional al voltaje de polarización V , tomado entre los dos electrodos de la junta (contacto No.2 y tierra en la figura 2.5).

Por último, el módulo PUENTE, representado en detalle en la figura 2.5, consiste en un puente arreglado para hacer mediciones al estilo de "cuatro terminales", evitando con ésto que se tomen mediciones erróneas debido a los cambios de resistencia de las películas metálicas que forman la junta. Las resistencias de los contactos (r_1) de la junta misma, se muestran explícitamente en la figura 2.5. La corriente c.d.+c.a. pasa a través de los contactos r_1 y r_4 . R_d es la resistencia variable de 0Ω a $110K\Omega$, con la cual se balancea el puente. El voltaje de polarización se aplica al conectar la fuente C. D. a dos brazos de la junta; la modulación se alimenta a través del puente a los mismos brazos de la junta, como se indica en esta figura. La señal sale de los contactos 1 y 2 directamente ó a través de condensadores (no mostrados en la figura) cuando se necesita bloquear c. d. al preamplificador del lock-in.

Todo el equipo descrito esta instalado en un bastidor

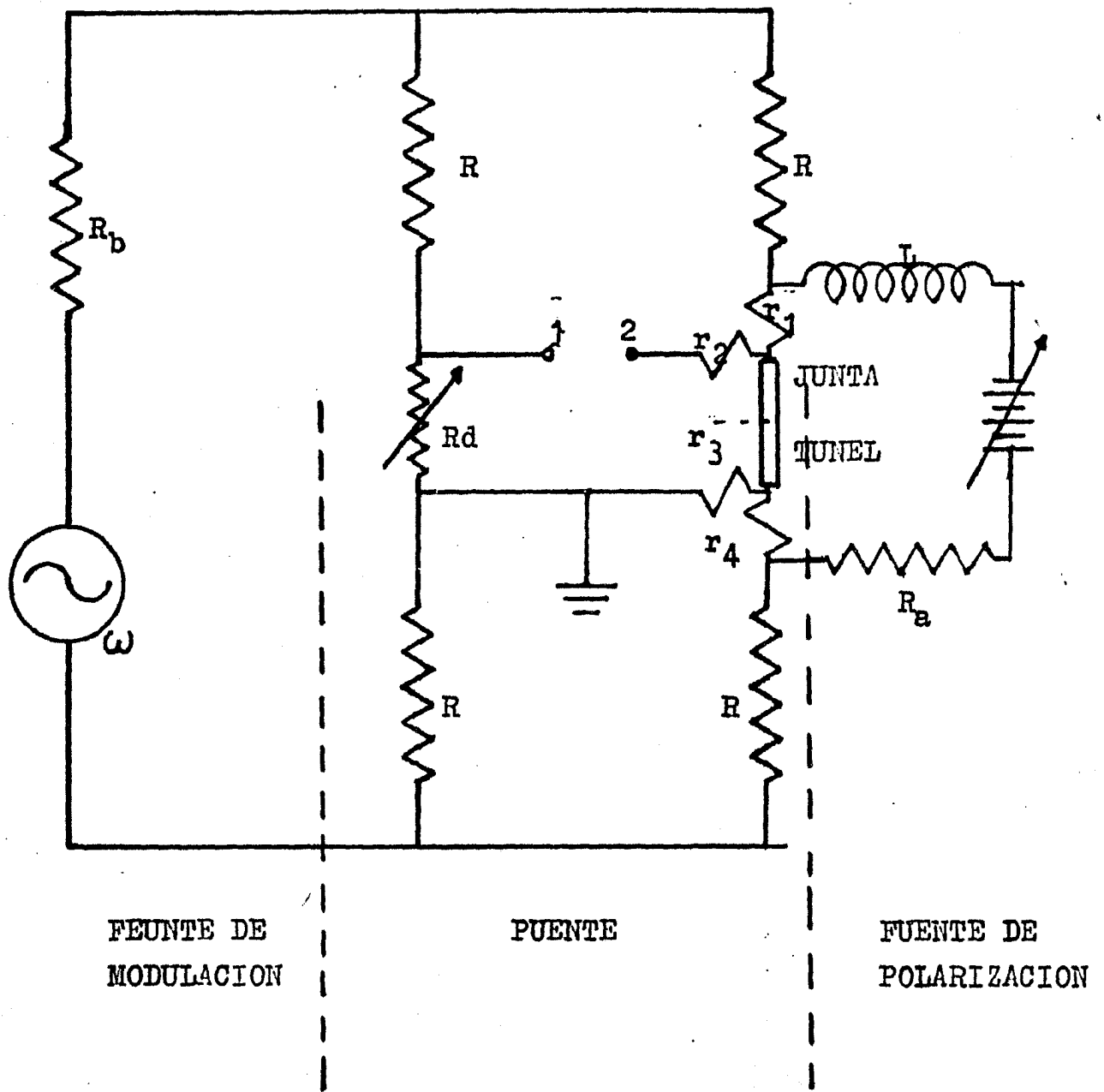


Figura 2.5 Puente de "cuatro terminales". Las r_i representan las resistencias de las películas que forman la junta y sus contactos.

móvil, con el chasis de la graficadora y el del oscilador aislados de él. El cableado es completamente blindado. La tierra externa se conecta al chasis del puente. Además se ha instalado en el bastidor un regulador de voltaje en serie con un transformador de aislamiento para alimentar el amplificador, el oscilador y la graficadora. Tanto el motor para barrer polarización, así como el osciloscopio empleado para ajustar el nivel de modulación, se alimentan desde afuera del bastidor.

A excepción del recipiente (dewar) que contiene a la junta, todo el dispositivo se encuentra encerrado en una caja de Faraday de gran tamaño, con el fin de disminuir lo más posible el ruido, que en mediciones de $d\sigma/dV$ vs V representa, tal vez, el mayor problema debido a que los voltajes involucrados son muy pequeños (μV).

Todo este dispositivo permite, por tanto, determinar la resistencia diferencial y su derivada sin que sea necesario amplificar la parte lineal de la resistencia diferencial. Se tiene una sensibilidad global de dos partes en 10^5 , en mediciones de dV/dI (23).

Las mediciones se hacen primero a temperatura de nitrógeno líquido (77K), en un dewar apropiado. Posteriormente se extrae el nitrógeno líquido del recipiente interno del dewar y se le transfiere helio líquido, para repetir las mediciones a 4K.

II.3 MEDICIONES CON CAMPO MAGNETICO

A la temperatura de helio líquido, la sobrecapa de plomo de la junta se vuelve superconductor ya que su temperatura de transición es de 7.22K en ausencia de campo magnético. En las mediciones a 77K la resistencia de la sobrecapa es finita. Las diferencias observadas entre los espectros tomados a 4K y a 77K podrían deberse, además de a la temperatura, a este efecto. Para resolver este problema se midió σ y $d\sigma/dV$ (a una misma junta), a 77K, a 4K con sobrecapa superconductor y a 4K con sobrecapa de resistencia finita. Esta última medición se logra introduciendo la junta en un campo magnético intenso (25, 26), así se destruye la superconductividad de la película de plomo y su resistencia se vuelve finita, del orden de la que tiene a 77K. El campo crítico del plomo, es decir, la intensidad de campo magnético a $T=0K$ a la que el plomo deja de ser superconductor, es de 803 gauss.

El dewar y la bobina utilizadas para este fin se muestran en la figura 2.6. El dewar esta montado sobre un armazón de madera y se encuentra, junto con la fuente que controla el campo, afuera de la caja de Faraday.

El proceso de medición de las características es el mismo

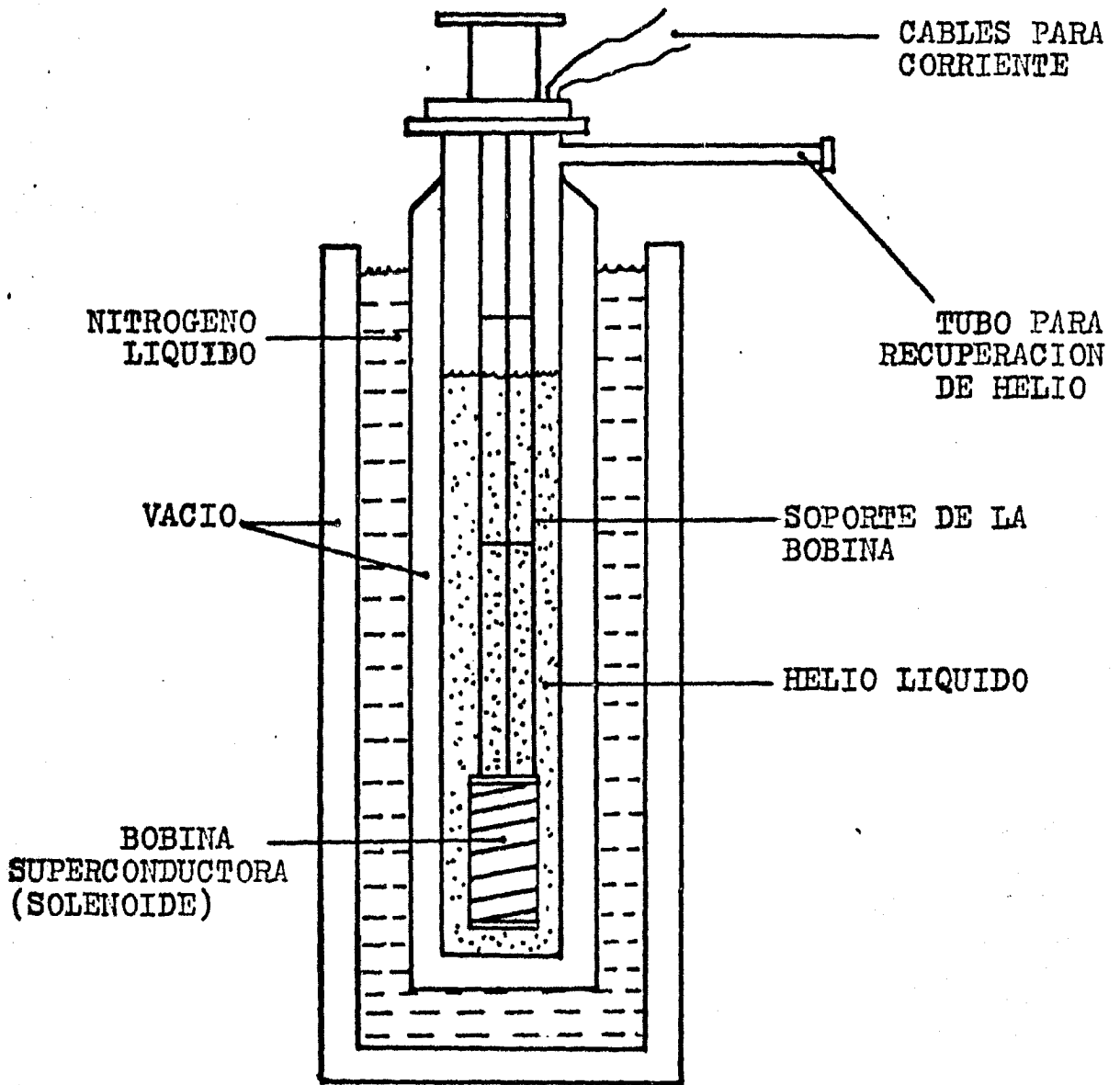


Figura 2.6 Corte transversal del dewar (similar al de la figura 2.3) con la bobina superconductora dentro de él.

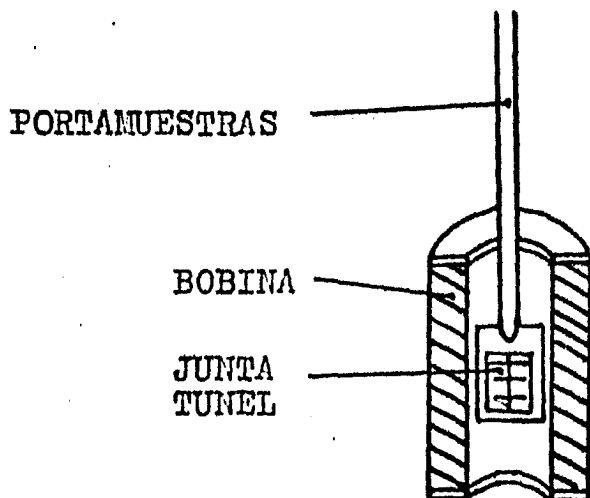


Figura 2.7 Detalle de la bobina superconductora con la junta dentro de ella.

y con los mismos aparatos que los descritos en la sección anterior, la única diferencia está en que en este caso la junta se coloca dentro de la bobina superconductora (ver figura 2.7), por la cual se hace pasar una corriente intensa (10 amp) durante toda la medición, para mantener un campo magnético de 12.2 Kgauss en el centro de la bobina, que nos asegura que la resistencia de la sobrecapa es finita.

En la figura 2.8(a) se muestra en forma simplificada el circuito que crea y mantiene el campo magnético. Una vez que se tiene a la junta dentro de la bobina (solenoides) en un baño de helio líquido, se ponen a funcionar las fuentes 1 y 2; la corriente proporcionada por 2 al disipar energía en la resistencia, mantiene a una temperatura mayor la parte A del circuito y por tanto en estado normal, mientras que la bobina donde se encuentra la junta está en estado superconductor; entonces la corriente proporcionada por 1 circulará por el solenoide (ver figura 2.8(b)). Cuando ya se tiene la intensidad de campo deseada, se desconecta la fuente 2 con lo que A se vuelve superconductor, entonces se puede desconectar 1 y la corriente queda circulando persistentemente en el circuito (ver figura 2.8(c)) con las fuentes apagadas. En estas condiciones se realizan las mediciones de las características.

Para saber a qué intensidad de corriente (y por tanto de campo magnético) se tiene en estado normal la sobrecapa de la

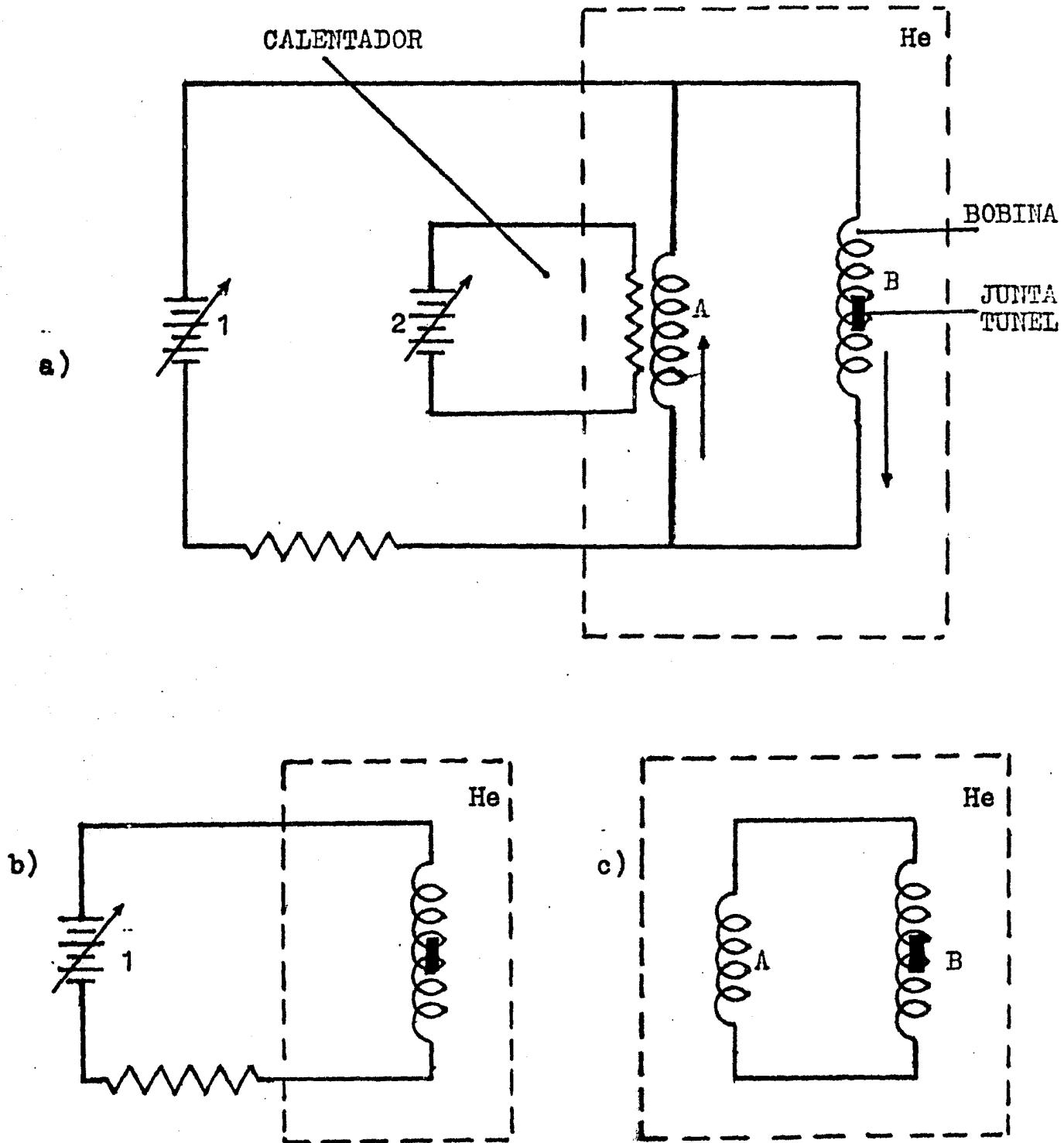


Figura 2.8 a) Circuito completo con el que funciona la bobina;
 b) con las dos fuentes prendidas la corriente proporcionada por 1 no circula por A;
 c) al apagar las fuentes la corriente queda circulando por A y B persistentemente.

Junta, se monitorea su resistencia mientras se aumenta gradualmente la corriente. La transición se observó a una corriente de 4.7 amp que da un campo en el centro del solenoide de 5.7 Kgauss aproximadamente. Es conveniente hacer notar que no teníamos forma de saber en que parte del solenoide se encontraba la junta, por lo que la intensidad de campo real sobre la película de plomo lo desconocemos; esto no es problema porque lo único que nos interesa es que la sobrecapa sea normal al hacer las mediciones.

Junta, se monitorea su resistencia mientras se aumenta gradualmente la corriente. La transición se observó a una corriente de 4.7 amp que da un campo en el centro del solenoide de 5.7 Kgauss aproximadamente. Es conveniente hacer notar que no teníamos forma de saber en que parte del solenoide se encontraba la junta, por lo que la intensidad de campo real sobre la película de plomo lo desconocemos; esto no es problema porque lo único que nos interesa es que la sobrecapa sea normal al hacer las mediciones.

CAPITULO III
RESULTADOS EXPERIMENTALES
Y ANALISIS DE DATOS

CAPITULO III

RESULTADOS EXPERIMENTALES Y ANALISIS DE DATOS

En los capitulos precedentes se ha dicho que ETEI estudia el espectro $d\sigma/dV$ vs V de juntas túnel; sin embargo, con la técnica de medición usada en estos estudios, lo que se obtiene directamente del puente es una señal proporcional a d^2V/dI^2 , mientras que la teoría esta hecha en términos de la variable $d\sigma/dV=d^2I/dV^2$. Este problema es sencillo de resolver ya que:

$$\frac{d\sigma}{dV} = \frac{d^2 I}{dV^2} = - \left(\frac{dI}{dV} \right)^3 \frac{d^2 V}{dI^2} = -\sigma^3 \frac{d^2 V}{dI^2} \quad (3.1)$$

La calibración de $d\sigma/dV$ es muy importante para hacer cálculos de intensidades relativas de los picos y de parámetros de la barrera (27). Sin embargo, las posiciones

de los picos pueden ser medidas sin necesidad de calibrar; la ecuación 2.1 muestra que toda estructura que aparezca en $d\sigma/dV$ aparecerá en d^2V/dI^2 , puesto que σ es una función suave que además casi no varía en los intervalos de voltajes de interés.

La primera sección de este capítulo comienza con una discusión acerca de los tipos de juntas utilizadas, es decir, las ventajas de los metales con que se fabricaron las juntas; se describe también el proceso para determinar la posición del pico que aparece alrededor de 117 mV, y se discuten los principales efectos observados experimentalmente en este trabajo, las tablas de resultados y las posibles fuentes de error.

En la segunda sección se explica lo que involucra una calibración de $d\sigma/dV$ vs V , la importancia de calibrar los espectros en ETEI, y se describe el procedimiento de calibración en detalle. Finalmente se presenta el resultado de calibrar $d\sigma$ para una junta de las fabricadas para este trabajo.

III.1 RESULTADOS OBTENIDOS

Los materiales usados en los electrodos de una junta túnel tienen diversos efectos en las características de un espectro inelástico que han sido discutidos por muchos autores (2, 5, 30). Las juntas que se usan para obtener espectros en ETEI utilizan la mayoría de las veces, aluminio y plomo para formar los electrodos. El aluminio se usa como capa base por la facilidad con que puede creerse un óxido sobre él, de calidad y espesor adecuados para ETEI. El plomo es el metal que se usa con mayor frecuencia como contraelectrodo pues las juntas fabricadas con él producen espectros más intensos, es el que menos perturba el espectro vibracional del contaminante y es de los metales que menor daño causan al óxido durante la fabricación de la junta. Las razones por las que el plomo funciona como contraelectrodo mejor que cualquier otro metal son desconocidas; sin embargo, se sugiere que se deba a los siguientes factores:

a) Su gran radio iónico le impide difundirse en forma importante entre las moléculas del contaminante y el óxido.

b) Es relativamente inerte químicamente.

c) Evapora a una temperatura bastante baja por lo que minimiza el calentamiento de la junta durante su fabricación y por lo tanto, los daños y otras interacciones con las moléculas del contaminante son mínimos.

En la figura 3.1 se muestran los espectros de tunelaje de una junta obtenidos a 4K y a 77K.

Para éste trabajo se fabricaron alrededor de treinta juntas. De éstas sólo a catorce se les logró medir σ ó $d\sigma$ por diferentes razones, entre otras, a que se perdía continuidad en alguna de las películas al introducirlas en nitrógeno líquido (por rotura del sustrato o de los contactos del portamuestras) o bien a que durante la medición de las características alguna variación en la línea de corriente externa, a pesar de tener regulador, quemaba la junta. Otra razón es que en ocasiones resultaban muy "ruidosas" como para poder medir $d\sigma$.

En la tabla 3.1 aparece una lista de las juntas y las mediciones que se les hicieron. De estas mediciones se seleccionaron las que tenían σ y $d\sigma$ no muy ruidosas para determinar la posición del pico principal (alrededor de 117 mV). Esto se hizo con una calculadora HP-9830, primero utilizando un programa para digitalizar los datos obtenidos

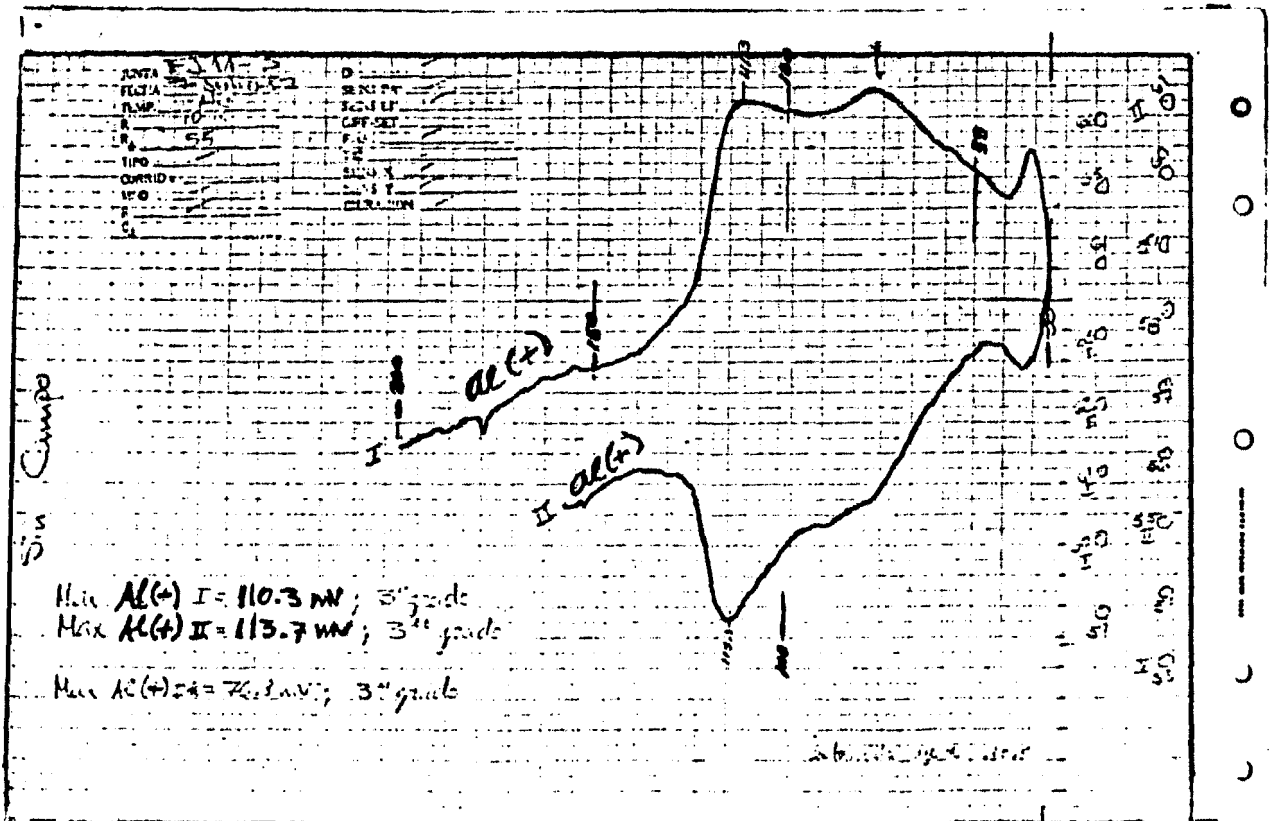
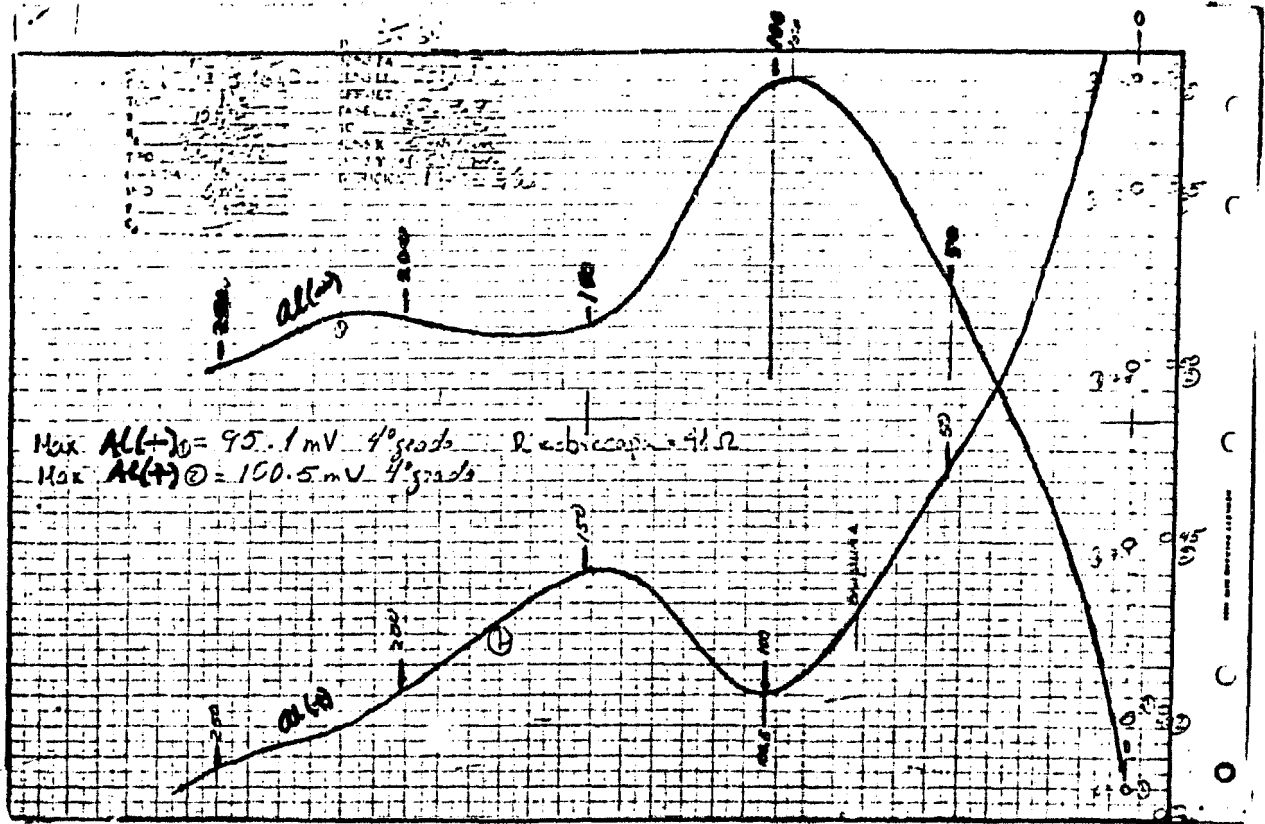


Figura 3.1 Se muestran las gráficas tal como se obtienen en la graficadora (a 77 K arriba y a 4 K abajo). La escala en el eje "X" es la misma, mientras que la escala en "Y" es diferente para cada curva.

NUM. DE JUNTA	TIPO	77 K		4 K		4K CON CAMBI	
		σ	$d\sigma$	σ	$d\sigma$	σ	$d\sigma$
FJ 02 - 5	Al-Oxido Al-Pb	X	X				
FJ 03 - 3	Al-Oxido Al-Pb	X	X				
FJ 04 - 2	Al-Oxido Al-Pb	X					
FJ 05 - 2	Al-Oxido Al-Pb	X	X				
FJ 05 - 3	Al-Oxido Al-Pb	X					
FJ 06 - 1	Al-Oxido Al-Pb	X	X				
FJ 07 - 2	Al-Oxido Al-Pb	X	X	X	X		
FJ 07 - 3	Al-Oxido Al-Pb	X	X				
FJ 07 - 5	Al-Oxido Al-Pb	X					
FJ 11 - 3	Al-Oxido Al-Pb	X	X		X		X
FJ 13 - 3	Al-Oxido Al-Pb	X	X	X		X	X
FJ 14 - 3	Al-Ox. Al-Pb Sn	X	X	X	X		
FJ 15 - 3	Al-Ox. Al-Pb Sn	X	X	X	X	X	X
FJ 15 - 4	Al-Oxido Al-Pb	X	X	X	X	X	X

Tabla 3.1 Lista de juntas túnel, tipo (materiales con que se fabricaron) y mediciones que se le hizo a cada junta (X). Para formar la sobrecapa de algunas juntas se empleó una aleación de plomo y estaño, con el fin de aumentar su resistencia; esto no se logró ni tampoco hubo diferencias con los espectros de otras juntas.

en forma gráfica, en un intervalo de 20 a 30 mv alrededor del pico; después otro programa que ajusta un polinomio de hasta noveno grado a la porción de la curva digitalizada (el polinomio de máximo grado que se logró ajustar fue de quinto, aunque la mayoría fue de cuarto y tercer grado, debido a la forma de la curva). Aun así la aproximación fue bastante buena (un ajuste típico se presenta en la figura 3.2). Las posiciones de los picos así obtenidas junto con la resistencia de la sobrecapa, la diferencia en la posición y la temperatura de medición aparecen en la tabla 3.2

Las principales fuentes de incertidumbre en la determinación de la posición del pico provienen del ruido principalmente, así como del ensanchamiento (ancho térmico más una pequeña cantidad de ancho instrumental en mediciones a 77K), de la velocidad de barrido del voltaje y de la constante de tiempo del lock-in. La incertidumbre producida por éstas dos últimas se pueden reducir con una combinación adecuada de ellas.

Algunas mediciones se repitieron varias veces (2 ó 3), en esos casos se hizo un promedio de la posición para cada polaridad. Para todas las juntas se barrió el voltaje de polarización de altas a bajas energías y para algunas (FJ07-2, FJ07-3, FJ11-3, FJ15-3, FJ15-4) se barrió también de bajas a altas energías, en estas también se

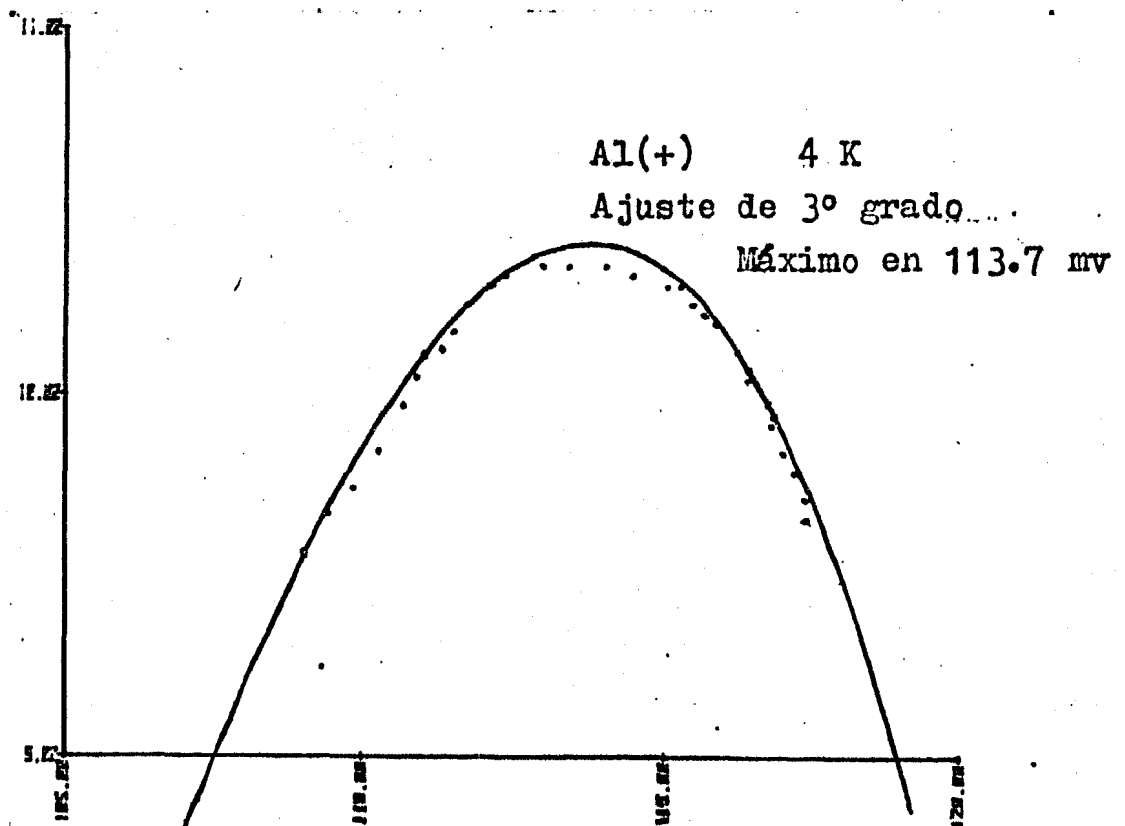
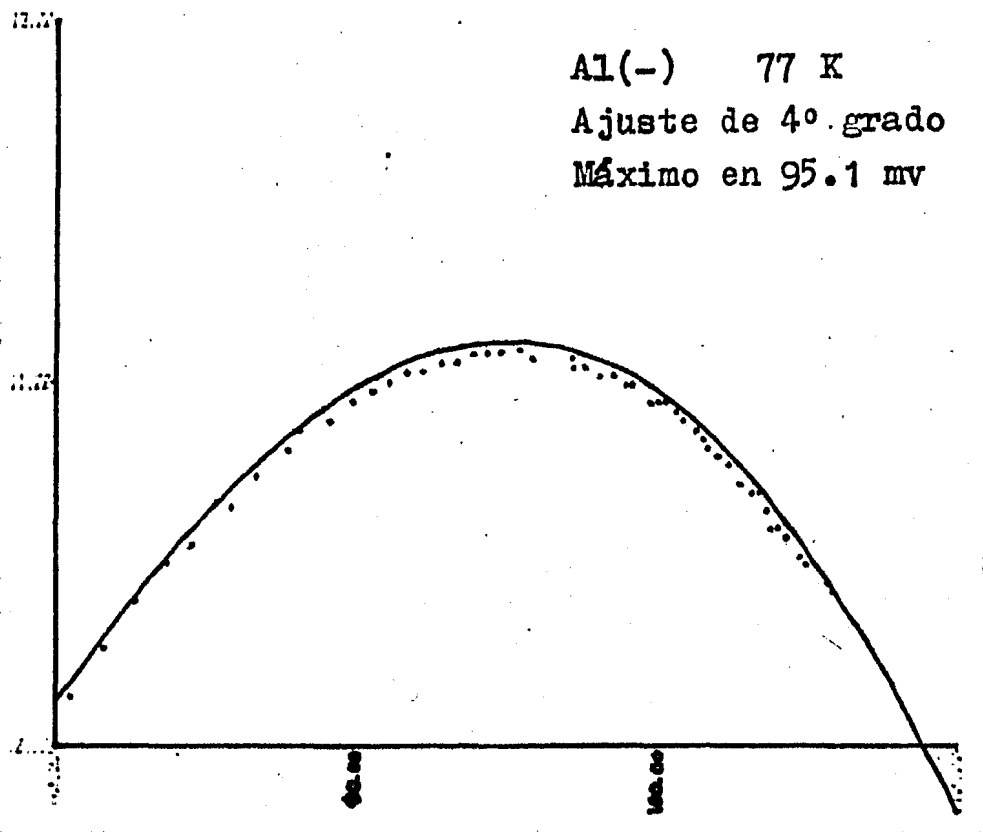


Figura 3.2 Ajuste típico para ubicar la posición del máximo del pico en el espectro de la junta FJ11-3.

Núm. de Junta	Tem. (K)	Posición Al(-) mv	del Pico Al(+) mv	Diferen Al(+)-Al(-)	117- -Al(-)	117- -Al(+)	Resistencia Sobreca
FJ 03-3	77	94 ± 3	103 ± 3	9	23	14	17
FJ 07-2	77	91 ± 3	104 ± 3	13	26	13	300
FJ 07-2	4	113 ± 2	115 ± 2	2	4	2	0
FJ 07-3	77	96 ± 2	107 ± 2	11	21	10	
FJ 11-3	77	95 ± 2	101 ± 2	6	22	16	41
FJ 11-3	4 ^c	105 ± 2	113 ± 2	8	12	4	14
FJ 11-3	4	110 ± 2	114 ± 3	4	7	3	0
FJ 13-3	77	101 ± 2	107 ± 2	6	16	10	145
FJ 13-3	4 ^c	108 ± 2	110 ± 2	2	9	7	45
FJ 14-3	77	86 ± 3	103 ± 3	17	31	14	166
FJ 14-3	4	116 ± 2	122 ± 2	6	1	-5	0
FJ 15-3	77	107 ± 3	114 ± 3	7	10	3	9.2
FJ 15-3	4 ^c	115 ± 2	117 ± 2	2	2	0	2.2
FJ 15-3	4	115 ± 2	118 ± 2	3	2	-1	0
FJ 15-4	77	104 ± 3	115 ± 3	11	13	2	6.4
FJ 15-4	4 ^c	112 ± 2	120 ± 3	8	5	-3	2.9
FJ 15-4	4	112 ± 2	119 ± 2	7	5	-2	0

Tabla 3.2 Resultados. En la 2º columna aparece la temperatura a la que se hicieron las mediciones; el superíndice (c) denota a las mediciones que se hicieron en presencia de un campo magnético. En la 3º y 4º columnas aparecen las posiciones del pico en estudio, para cada polaridad. En la 5º columna la diferencia en posición (asimetría). En la 6º y 7º columnas la diferencia con respecto a la posición que teóricamente deberían tener. En la 6º columna aparece la resistencia de la sobrecapa.

hizo un promedio para determinar la posición del pico. Se hizo este procedimiento para verificar que la velocidad de barrido (a una constante de tiempo dada) no provoca un efecto de retardo en la posición de los picos en el sentido del barrido.

Con las juntas que fueron medidas varias veces y en ambos sentidos de la polarización, se pudo estimar que la incertidumbre global no es mayor de 2 mv, salvo los casos en que las mediciones fueron muy ruidosas. Para esto se ajustaron polinomiales de diferentes grados a las curvas obtenidas experimentalmente y se encontró que la posición del pico, con las diferentes polinomiales, no varió mucho, el máximo siempre quedó dentro de la incertidumbre de 2 mv, a excepción como se dijo antes, de los casos ruidosos.

Al hacerse las mediciones a 77K y a 4K (ver figura 3.1) de las posiciones en voltaje del pico a estudiar, se observaron los siguientes efectos:

- 1) el pico que a 4K ocurre a 117 mv aparece desplazado de su posición cuando se mide a 77K; este desplazamiento llega a ser mayor de 15 mv hacia bajas energías;
- 2) la posición del mismo pico a 77K, deja de ser simétrica para polarizaciones positiva y negativa (como lo es en mediciones a 4K); esta asimetría llega a ser de hasta

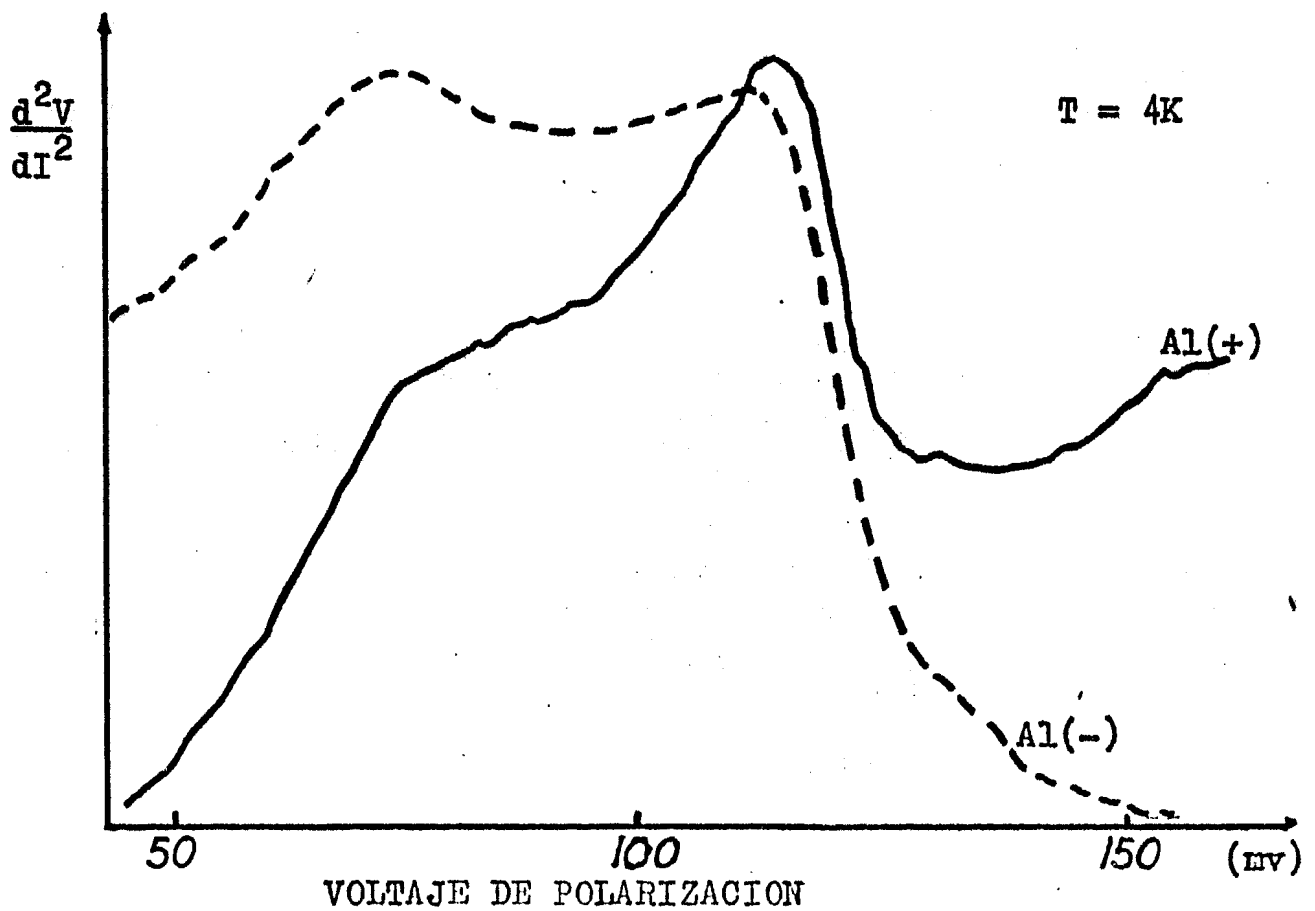
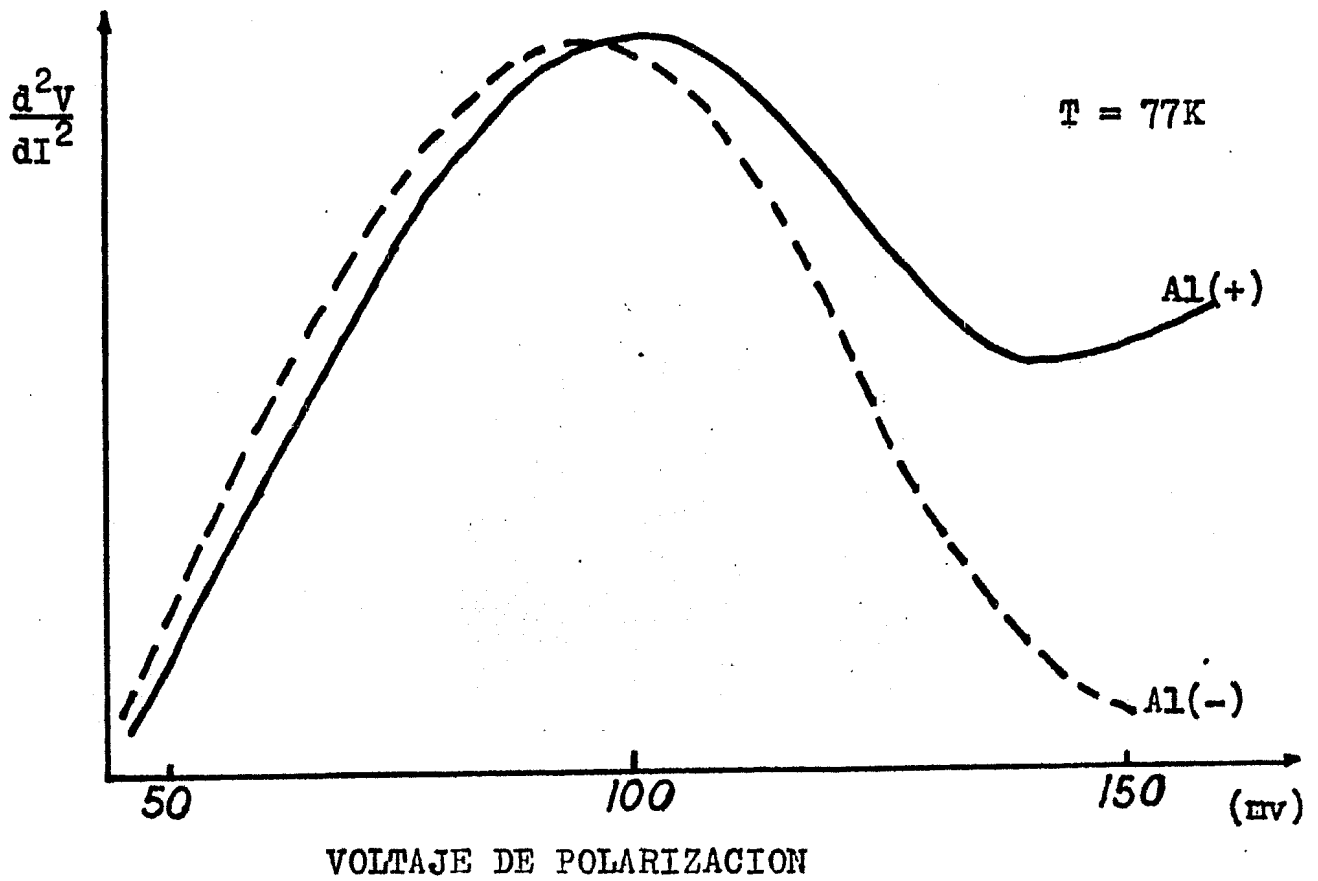


Figura 3.3 Comparación del pico en estudio para las dos polaridades; a 77K los dos picos se desplazan hacia bajas energías, se desplaza más el que tiene la joroba más grande (Al(-)) aumentando la asimetría en posición.

12 mv, (ver figura 3.3).

El primer efecto podría deberse a la resistencia de la sobrecapa (plomo en este caso), como recientemente se ha sugerido (28, 29), ya que a 4K la resistencia de la sobrecapa es diferente de cero (de 5 a 300Ω), y a 4K la sobrecapa es superconductora. Sin embargo, el efecto también podría deberse a la temperatura, que es el otro parámetro que varia. Para resolver esta cuestión, se repitieron algunas mediciones a 4K en presencia de un campo magnético intenso, como ya se explicó, con lo que la resistencia de la sobrecapa vuelve a ser normal, del orden de un tercio de la que tenía a 77K.

El segundo efecto probablemente se debe a la diferente forma del pico para Al(+) y Al(-), y esto a su vez se debe a que la molécula que produce el pico está más cerca de un metal que del otro; este efecto se discutirá más adelante.

En la figura 3.4(a) aparece una gráfica de temperatura contra posición del pico para cada polaridad. Se ve claramente el corrimiento del pico hacia bajas energías a 77K, siendo más evidente para Al(-) (voltaje negativo con respecto al Al); a 4K con y sin campo no se ve de manera clara que haya un corrimiento. En la figura 3.4(b) aparece graficada la temperatura contra la asimetría en posición,

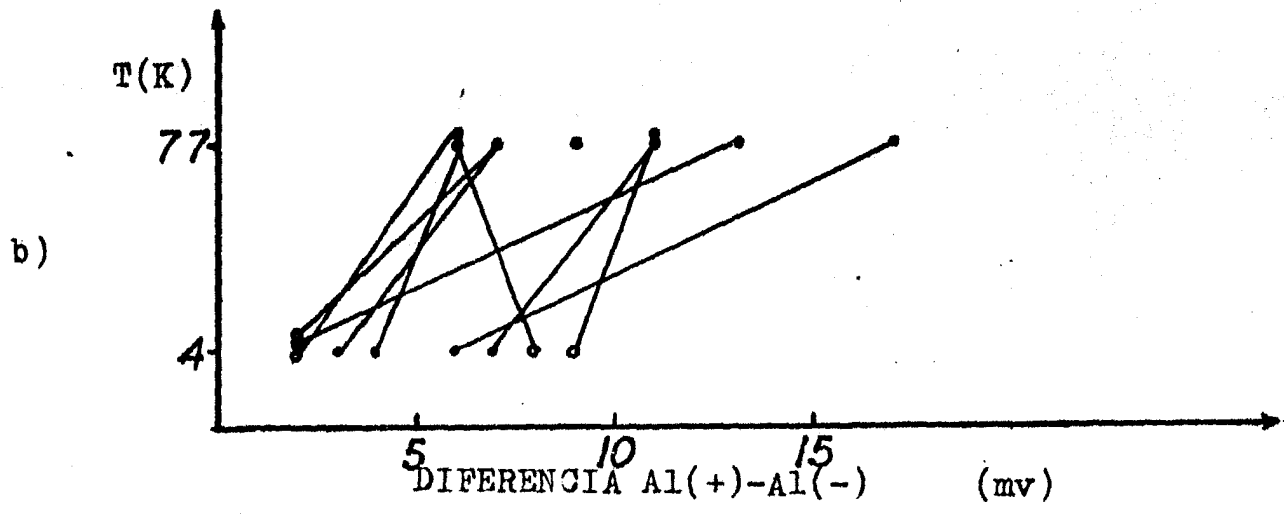
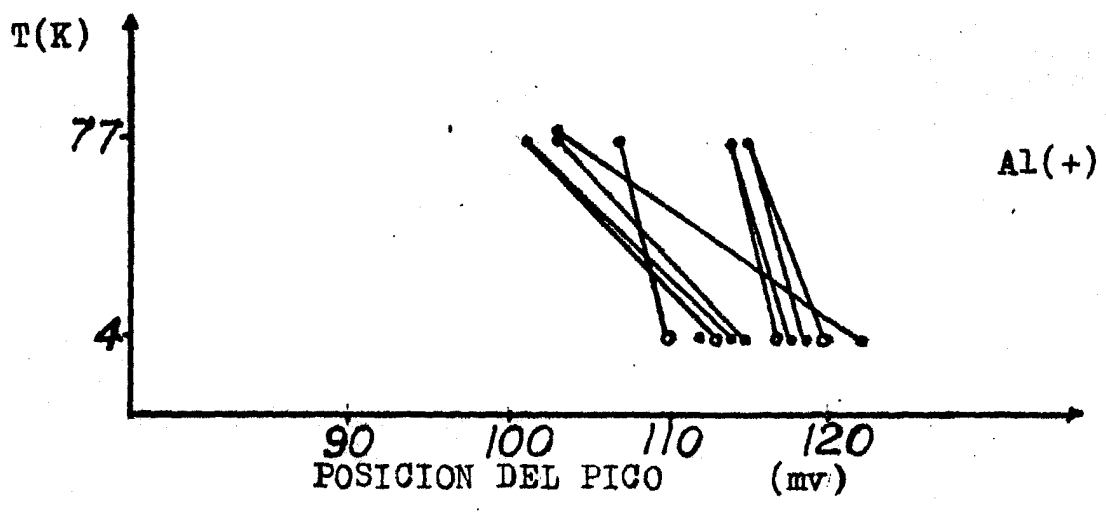
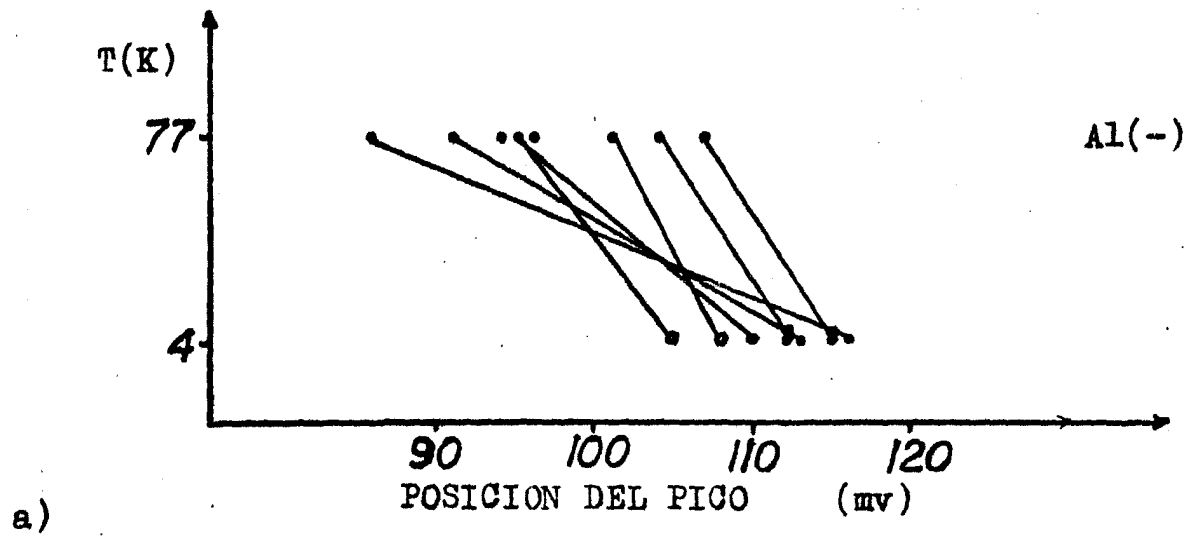


Figura 3.4 Se presentan en forma gráfica algunos datos de la tabla 3.2. Las líneas unen mediciones a una misma junta.
 (o) medición con campo magnético.

es decir, la diferencia entre las posiciones del pico para cada polarización en una misma junta. Esta asimetría es claramente mayor a 77K que a 4K (con campo y sin campo).

III.2 CALIBRACION DE $d\sigma$

Las excitaciones inelásticas se manifiestan como un pequeño cambio (menor al 2%) en la conductancia de la junta para un voltaje $V=h\nu/e$ donde ν es la frecuencia de excitación. El área bajo los picos en $d\sigma/dV$ es una medida directa del incremento en la conductancia debido a procesos inelásticos. Debido al pequeño tamaño de los cambios en la conductancia, la medición del área bajo los picos debe ser muy cuidadosa, para esto debemos primero calibrar $d\sigma$, es decir, debemos tener una escala de $d\sigma$ en unidades que no sean arbitrarias y que nos den la altura real de los picos, eliminando los efectos de algunos elementos del sistema de medición. Estos efectos es lo que llamamos distorsión armónica, y proviene de los amplificadores, osciladores, etc. y es comparable en magnitud a $d\sigma/dV$.

La calibración de σ vs V se realiza de una manera muy sencilla, como se vió en el capítulo anterior, simplemente se intercambia la junta por una caja de resistencias, registrando en la graficadora las desviaciones producidas en el detector lock-in por una resistencia conocida. La calibración de $d\sigma/dV$, sin embargo, no es tan simple y directa ya que además de involucrar la solución de una ecuación integral (no hay que olvidar que lo que se

mide es $d^2 I/dV^2$), es necesario restar la distorsión armónica.

Para medir la distorsión armónica, también hay que sustituir la junta por una caja de resistencias (sin cambiar ningún ajuste, es decir, amplificaciones, escalas, etc.), marcando las desviaciones en el eje "y" de la graficadora, producidas por una resistencia conocida. Estos datos se introducen en un programa que hace un ajuste lineal o cuadrático, según se desee, entre el valor de la resistencia dado en un punto y su distancia en centímetros desde el eje "x" (escogido arbitrariamente). Con estos datos y con los de σ vs V calibrados, se puede proceder a restar la distorsión armónica.

El procedimiento de restar la distorsión se ilustra en la figura 3.5 para un punto de V_0 y se describe a continuación. De la gráfica σ vs V , se obtiene el valor R_0 de la junta correspondiente a una polarización V_0 . Este valor R_0 en la gráfica de $d^2 V/dI^2$ vs V , da para V_0 el nivel ($Y_{2\omega}^0$) de distorsión armónica que se debe restar a la señal ($Y_{2\omega}$) que se obtiene directamente de la graficadora durante el experimento. Repitiendo este procedimiento para cada punto, obtenemos la curva $Y_{2\omega}^0$ de la figura 3.6.

Con la técnica de medición usada, según se vió en el capítulo anterior (ecuación 2.2), la componente de la

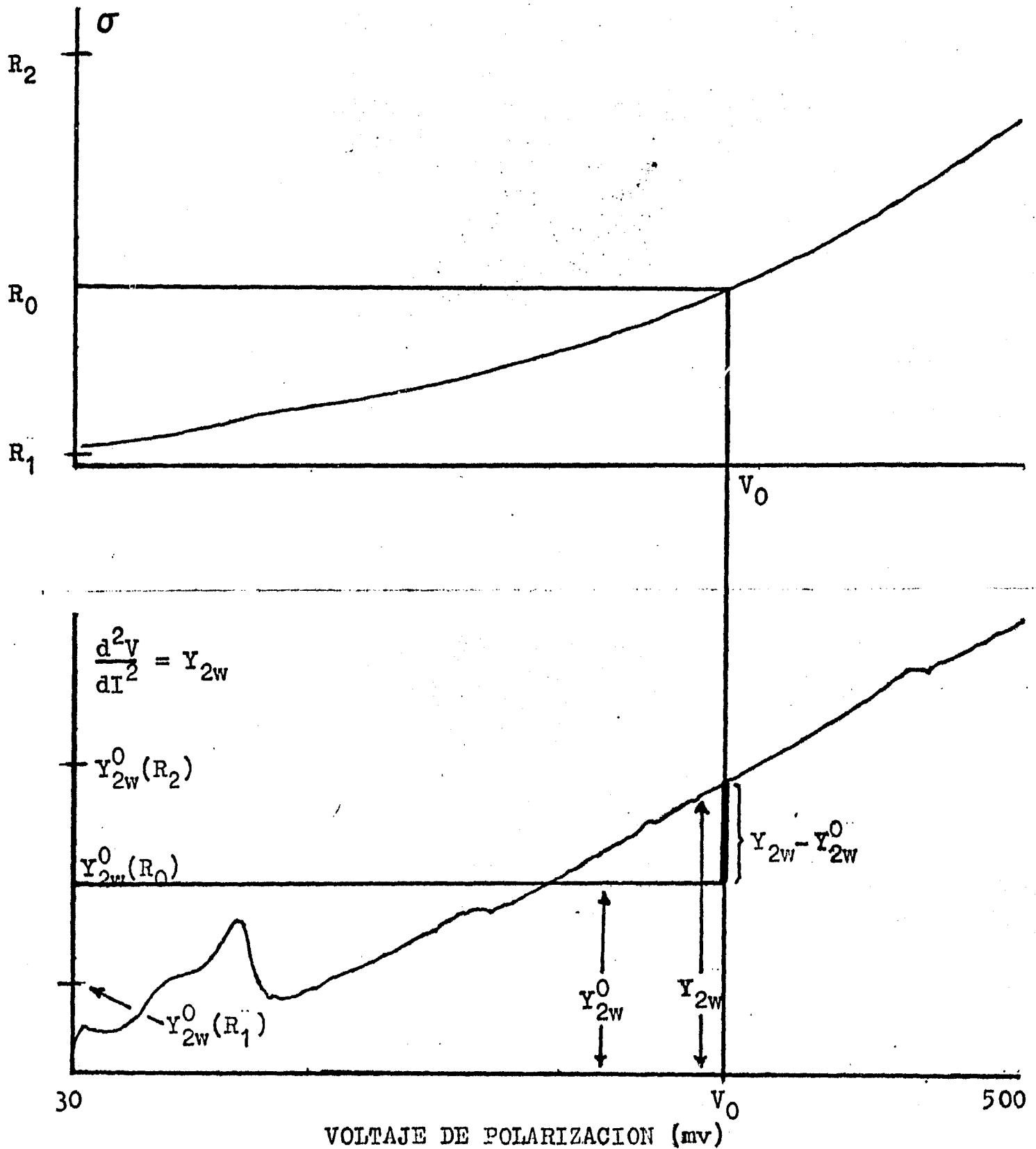
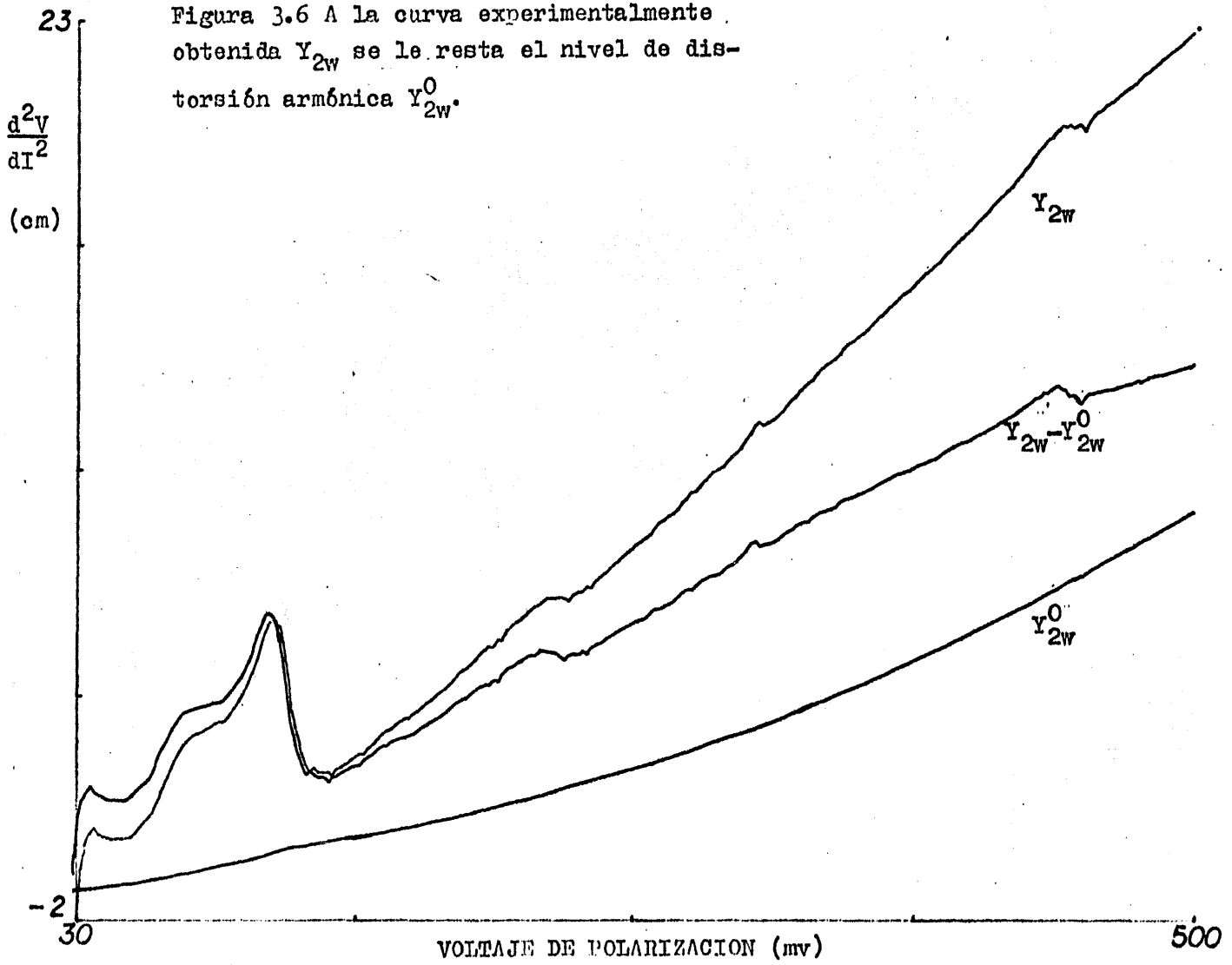


Figura 3.5 Se muestra el procedimiento para encontrar el nivel de distorsión armónica Y_{2w}^0 , que se tiene que restar a la señal Y_{2w} .

Figura 3.6 A la curva experimentalmente obtenida Y_{2w} se le resta el nivel de distorsión armónica Y_{2w}^0 .



señal a frecuencia 2ω es igual a una cantidad proporcional a d^2V/dI^2 más la distorsión armónica $(\chi i_0 dV/dI) + \delta$:

$$V(I) = D_0 + (i_0 D_1 + \frac{1}{2} \chi i_0^2 D_2) \cos \omega t + \\ + (\frac{1}{4} i_0^2 D_2 + \chi i_0 D_1 + \delta) \cos 2\omega t + \dots$$

donde $D_n = d^n V / dI^n$.

Entonces

$$Y_{2\omega} = \frac{1}{4} i_0^2 D_2 + \chi i_0 D_1 + \delta$$

es la cantidad obtenida experimentalmente donde $\chi i_0 D_1$ es la distorsión armónica a la salida del lock-in y δ la producida por el amplificador de la graficadora.

Cuando se sustituye la junta túnel por la caja de resistencias $R = dV/dI$ es constante, entonces d^2V/dI^2 es cero y sólo queda la distorsión armónica:

$$Y_{2\omega}^0 = \chi i_0 \frac{dV}{dI} + \delta$$

Por tanto, la distorsión armónica dada por los desplazamientos de la plumilla (en la graficadora), la tenemos en función de una resistencia conocida esto se hace a voltaje de polarización cero pero puede hacerse a cualquier otra polarización.

Para obtener la distorsión en función del voltaje de polarización ($Y_{2w}^{\circ}(V)$), se utiliza la gráfica de R vs V obtenida de la medición de σ vs V.

Entonces se tiene que la señal debida a la junta es:

$$\frac{1}{4} i^2 \frac{d^2 V}{dI^2} = Y_{2w} - Y_{2w}^{\circ}$$

Usando la ecuación 3.1 tenemos que:

$$C \frac{d\sigma}{dV} = -\sigma^3 (Y_{2w} - Y_{2w}^{\circ}) \quad (3.2)$$

donde el parámetro C que depende de V, se puede calcular en cada punto (ecuación 3.3) y hacer un promedio en todo el intervalo de voltaje con que se trabajó.

$$C = \frac{\int_{V_1}^{V_2} \sigma^3 (Y_{2w} - Y_{2w}^{\circ}) dV}{\sigma(V_2) - \sigma(V_1)} \quad (3.3)$$

El valor promedio de C y el de σ obtenido experimentalmente se sustituyen en la ecuación 3.2, y se obtiene $d\sigma/dV$ ($=Y_{2w}(\text{cal.})$).

Finalmente, para ver que tan buena es la calibración de $d\sigma$, se obtiene la curva σ vs V integrando de la ecuación 3.1:

$$\sigma(V) = \sigma(V_0) + \frac{1}{2} \int_{V_i}^{V_f} \sigma^3 (Y_{2w} - Y_{2w}^0) dV$$

y se compara con la curva σ vs V obtenida experimentalmente. Obsérvese que el resultado obtenido usando C promedio es suficientemente bueno de acuerdo con otros autores (27).

Todo el proceso de calibración, al igual que la determinación de las posiciones de los picos, se hizo con una calculadora HP-9830. En este proceso el primer paso es digitalizar las curvas σ vs V y d^2V/dI^2 vs V en el mismo intervalo. El siguiente paso es interpolar los puntos digitalizados de cada curva. La interpolación suaviza la curva, además nos da un punto cada determinada distancia en

mv (partición), dependiendo del tamaño del intervalo interpolado, que se pueden manejar como una matriz para hacer los cálculos. Para cada punto interpolado se utilizaron cinco puntos digitalizados en el caso de σ , y siete puntos digitalizados para $d\sigma$. El programa de interpolación usado hace un promedio pesado de los 5 ó 7 puntos digitalizados para determinar cada punto de interpolación.

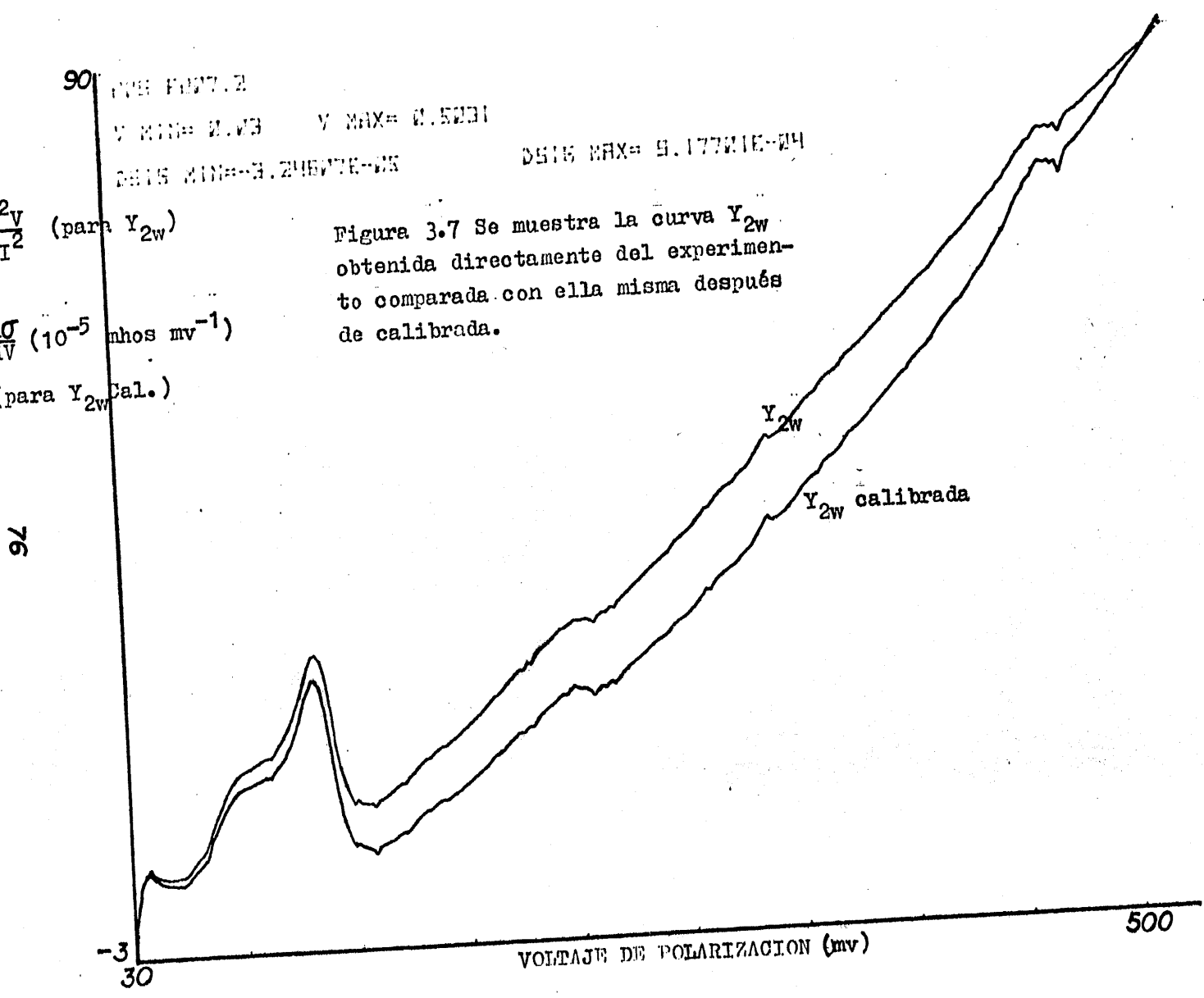
La calibración del espectro $d\sigma/dV$ vs V es importante en el cálculo de intensidades de los picos, ya que altera ligeramente la forma y la altura relativa de los picos; sin embargo, antes de poder comparar una curva calibrada con otra sin calibrar, no es claro que pueda influir en la posición de los picos, en particular para el pico a 117 mv por lo ancho sobre todo en mediciones a 77K. Por tal razón se calibró para la polarización positiva del espectro de una junta (FJ07-2) y se midió cuidadosamente la posición del pico en estudio.

En la figura 3.7, se muestra el espectro tal y como se obtiene de la graficadora (Y_{2w} experimental) a 4K, comparado con el espectro calibrado (Y_{2w} calibrada). En esta calibración se usaron 250 puntos y una partición de 1.9 mv para un intervalo de 30 a 500 mv. La escala en el eje 'Y' es arbitraria ya que se han encimado las curvas para efecto de comparación. Para la curva Y_{2w} experimental el pico esta a 113.6 mv, mientras que para la curva Y_{2w} calibrada

$\frac{d^2V}{dI^2}$ (para Y_{2w})
 $\frac{d\sigma}{dV}$ (10^{-5} mhos mv^{-1})
 (para Y_{2w} Cal.)

V MIN= 0.1V3 V MAX= 0.5201
 DENS MIN= 0.2087E-05 DENS MAX= 9.177E-04

Figura 3.7 Se muestra la curva Y_{2w} obtenida directamente del experimento comparada con ella misma después de calibrada.



VOLTAJE DE POLARIZACION (mv)

500

esta a 115.5 mv, la diferencia es menor de 2 mv que es la incertidumbre estimada en la determinación de las posiciones en la sección anterior.

En la figura 3.8 aparece la integral de la curva $Y_{2\omega}$ cal. (realizada con la calculadora) comparada con la obtenida directamente del experimento. Las dos curvas están en la misma escala y son muy parecidas, esto nos asegura que la calibración, aunque se puede mejorar, es suficiente para nuestros propósitos, ya que no se están midiendo intensidades ni parámetros de la barrera.

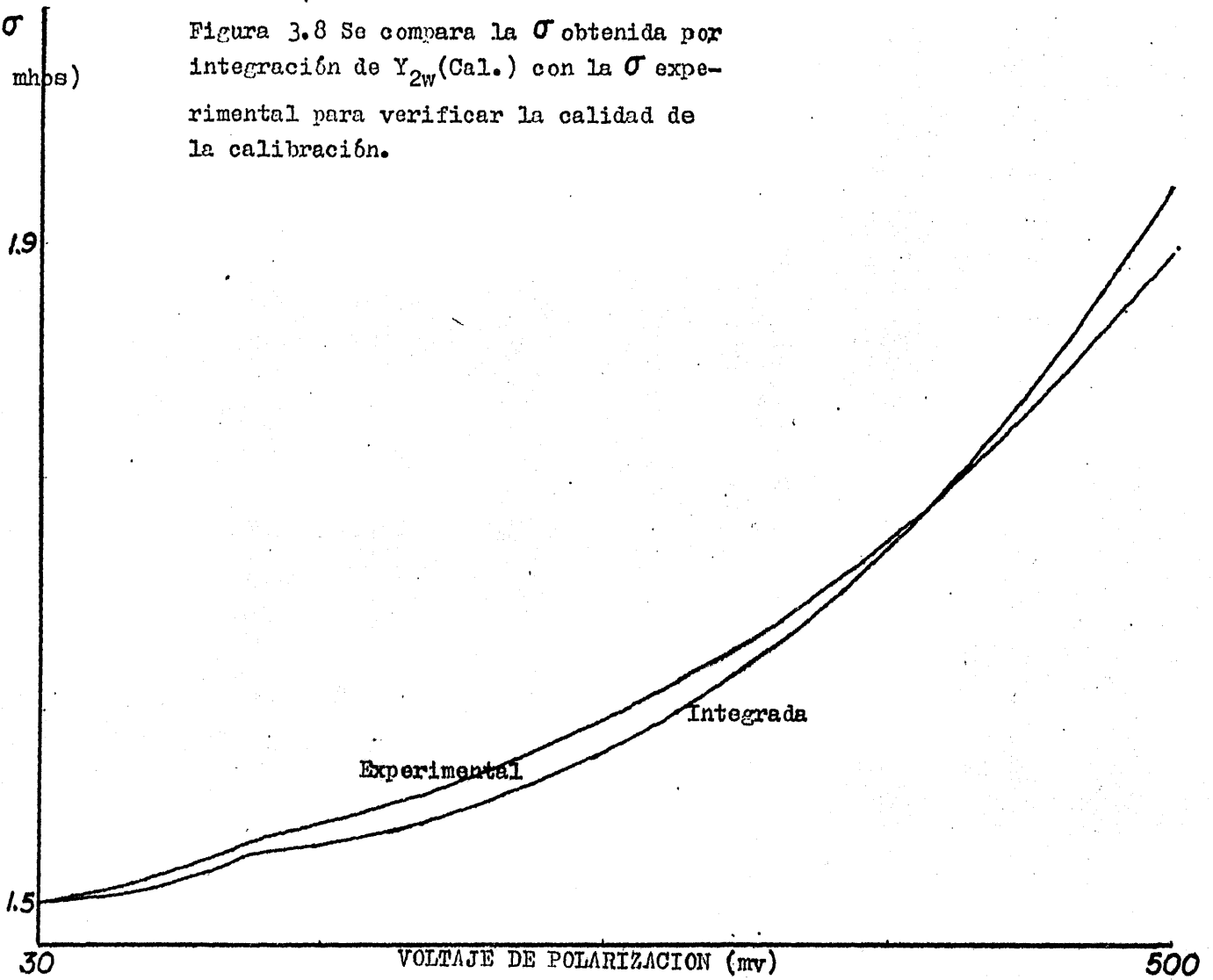
Para la misma junta FJ07-2A1(+), se tomó el espectro a 77K en el intervalo de cero a 200 mv, en el cual se digitalizaron 150 puntos y se usó una partición de 1.35 mv. En la figura 3.9 aparecen en una misma escala la curva $Y_{2\omega}$ experimental, la distorsión armónica $Y_{2\omega}^{\circ}$ y la resta de éstas dos curvas $Y_{2\omega} - Y_{2\omega}^{\circ}$; esta figura es análoga a la figura 3.5, que son las mismas curvas pero obtenidas a 4K. La posición del máximo del pico es 106.7 mv tanto para $Y_{2\omega}$ experim. como para la resta.

El resultado de la calibración de $Y_{2\omega}$ experim. aparece en la figura 3.10 (curva $Y_{2\omega}$ cal.) donde se ha encimado la curva $Y_{2\omega}$ experim. para compararlas. En esta figura se ve que la posición del pico es 106.7 mv, es decir la misma que para $Y_{2\omega}$ experim.

σ
(10^{-3} mhos)

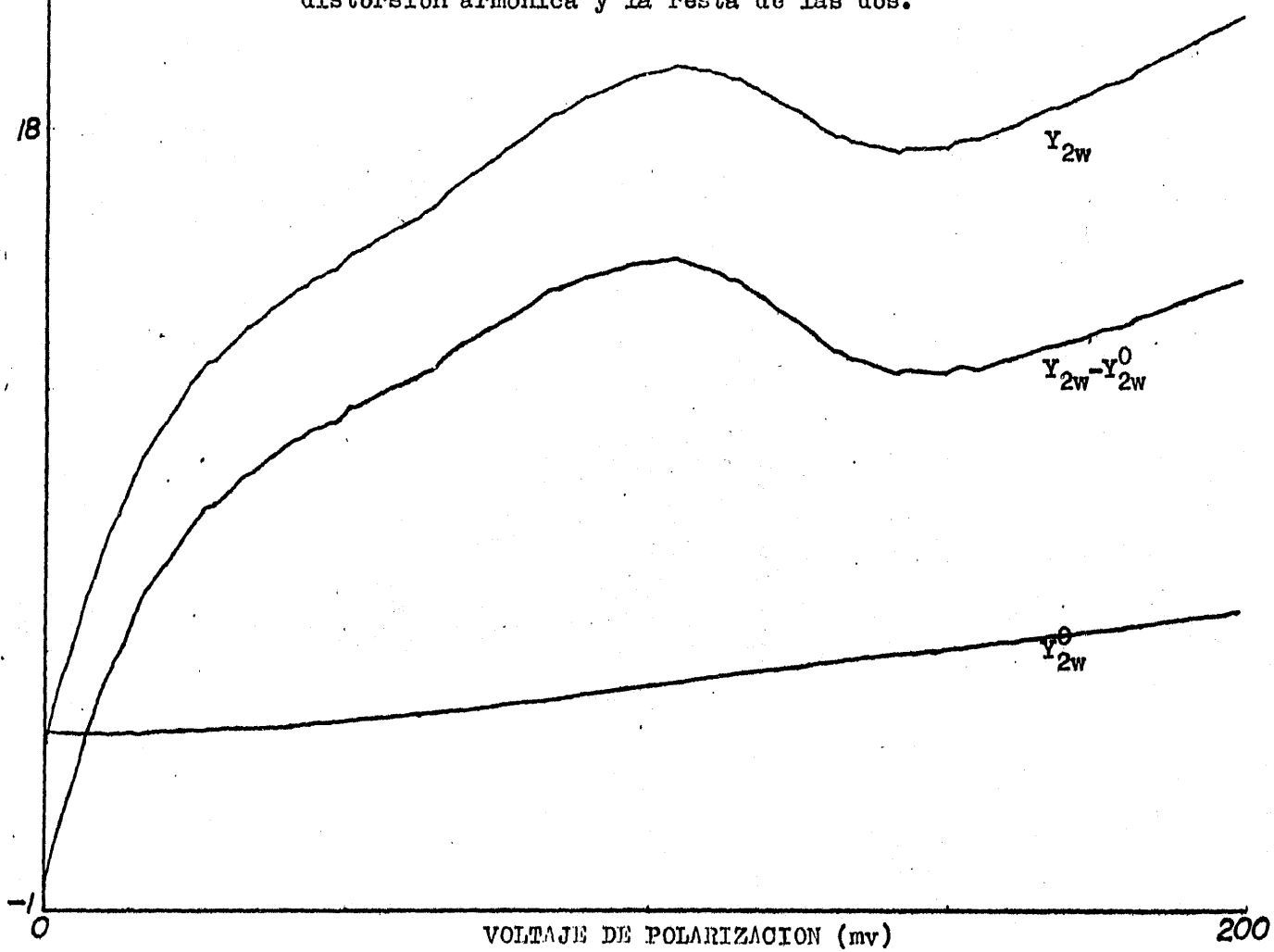
Figura 3.8 Se compara la σ obtenida por integración de Y_{2w} (Cal.) con la σ experimental para verificar la calidad de la calibración.

78



$\frac{d^2V}{dI^2}$
(cm)

Figura 3.9 Se muestra la curva Y_{2w} obtenida experimentalmente (a 77K), el nivel Y_{2w}^0 de distorsión armónica y la resta de las dos.



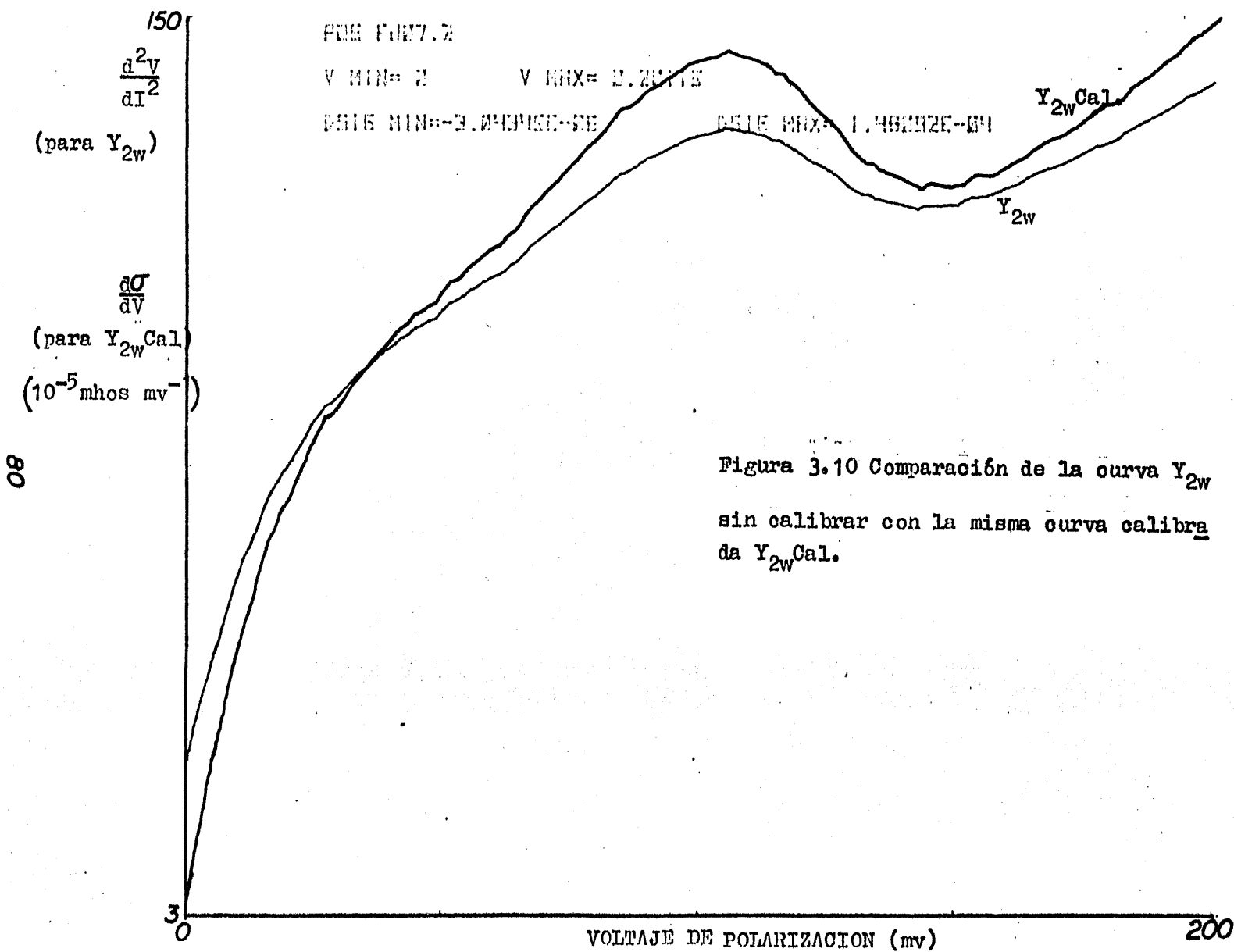


Figura 3.10 Comparación de la curva Y_{2w} sin calibrar con la misma curva calibrada $Y_{2w} \text{ Cal.}$

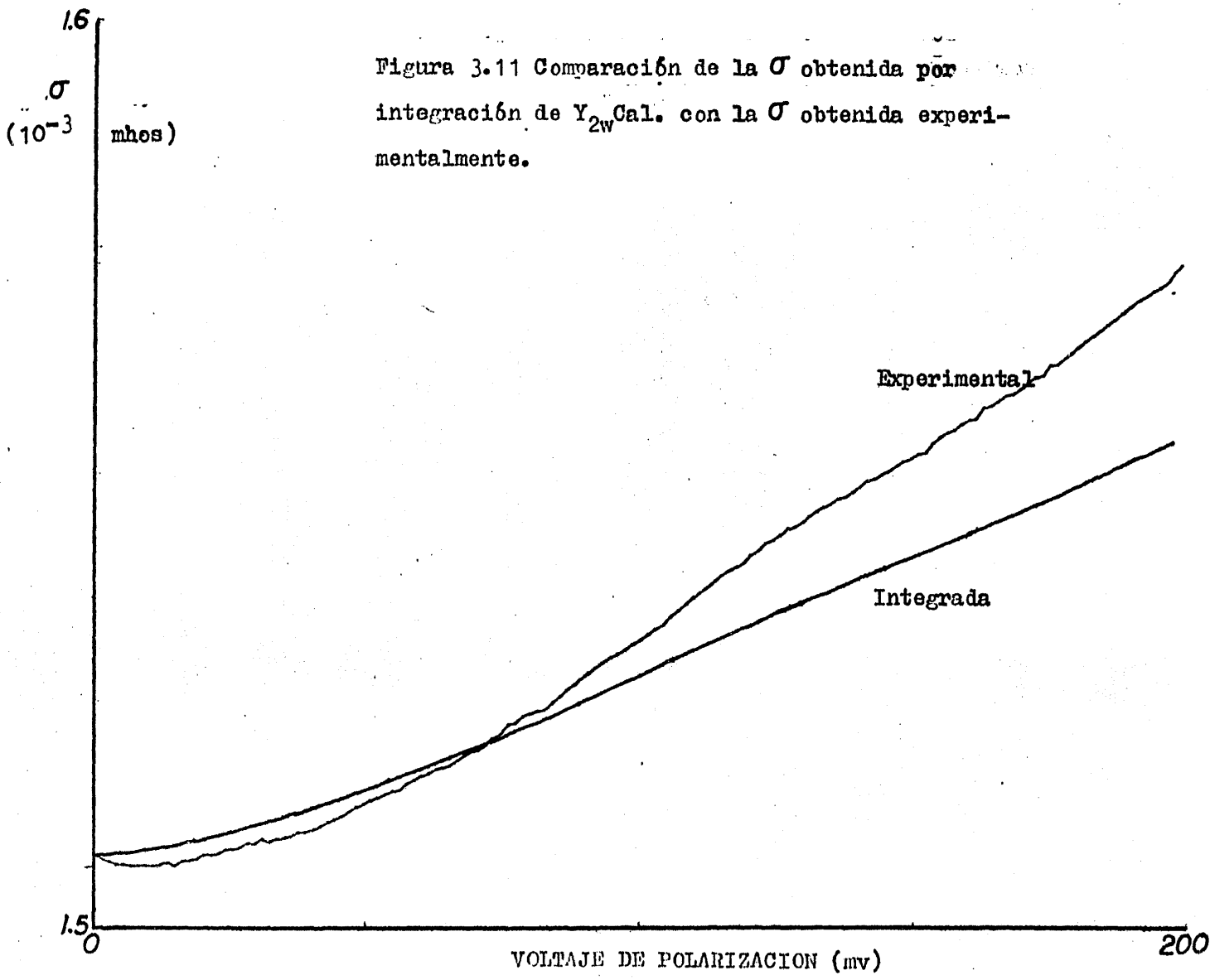


Figura 3.11 Comparación de la σ obtenida por integración de Y_{2w} Cal. con la σ obtenida experimentalmente.

18

Finalmente en la figura 3.11 aparece la integral de la curva Y_{2w} cal. comparada con Y_{2w} experim. La curva obtenida por integración, sigue aproximadamente el mismo comportamiento de la experimental, aunque no son tan similares como las de la figura 3.8. Esto se debe probablemente a que en la figura 3.11 se esta tomando un intervalo de 0 a 200 mv mientras que en la figura 3.8 se toma de 30 a 500 mv. En la figura 3.11 a 200 mv las curvas parecen alejarse, sin embargo en la figura 3.8 a 200 mv (y a 500 mv) es al voltaje al que más se separan las curvas.

Con lo visto en esta sección, podemos afirmar que si bien la calibración es importante en estudios de ETEI, en la posición de los picos no influye de manera apreciable, al menos con la resolución del equipo con que se trabajó.

CAPITULO IV
DISCUSION DE RESULTADOS

CAPITULO IV

DISCUSION DE RESULTADOS

En este capítulo se hace una discusión sobre los resultados obtenidos y se sacan algunas conclusiones. En la primera sección, se trata de encontrar una explicación cualitativa a los efectos vistos en el capítulo anterior, para lo cual se presenta un modelo. En la segunda sección, se presenta la forma en que, en base al modelo propuesto se reproducen las curvas obtenidas experimentalmente.

IV.1 DISCUSION Y POSIBLE EXPLICACION (MODELO)

Como se vió en el capítulo anterior, la resistencia de la sobrecapa no tiene que ver con el corrimiento observado en los experimentos, al menos en corrimientos de la magnitud observada (10 mv ó más). Es posible que la resistencia de la sobrecapa provoque corrimientos apreciables (de 5 mv en adelante) y que para esto se necesite que la resistencia varíe alrededor de $1K\Omega$; en los experimentos realizados para esta tesis, la resistencia de la sobrecapa varió cuando mucho $50\ \Omega$ a una misma temperatura, por tanto los experimentos realizados en este estudio no permiten determinar si la resistencia de la sobrecapa modifica la posición del pico a 117 mv medida a una misma temperatura.

Sin embargo el corrimiento del pico en mediciones a 4K y a 77K es evidente. Para estar seguros de que la resistencia de la sobrecapa no es la causante de este corrimiento, se fabricaron las juntas FJ15-3 y FJ15-4 con resistencia muy baja, $9.2\ \Omega$ y $6.4\ \Omega$ respectivamente, así al hacer las mediciones a 4K con campo la resistencia baja a $2.2\ \Omega$ y $2.9\ \Omega$, y sin campo es superconductor ($R=0$); por tanto el cambio en resistencia es muy pequeño mientras que el cambio en temperatura es considerable y el corrimiento es de 4 mv para una polaridad y 8 mv para la otra, ambas hacia bajas

energías.

Ahora la cuestión es saber como la temperatura influye en la posición del pico.

Se sabe que al aumentar la temperatura los picos se hacen más anchos. Se sabe también que los picos son más intensos para una polaridad (Al(+)) que para la otra (Al(-)), según se vió en el Capítulo I. En particular esto es muy notorio para el pico a 117 mv medido a 4 K (ver figura 4.1). Por otro lado se ve que después del máximo (≈ 117 mv) hacia altas energías, el pico desciende bruscamente, mientras que hacia bajas energías presenta una "joroba" que en el caso del Al(-) aparentemente llega a ser en algunas juntas tan intensa como el mismo pico. Al hacer mediciones a 77K se nota que para polaridad negativa (que es la que tiene la joroba más intensa), el pico se desplaza más hacia bajas energías que para la polaridad positiva.

Todo esto nos puede sugerir que la joroba y el pico, es decir entre 70 mv y 120 mv aproximadamente, hay una estructura más fina de la cual sólo vemos su superposición.

En este trabajo las mediciones se hicieron a temperatura de helio líquido (4K) y a la de nitrógeno líquido (77K).

El ancho de los picos a mitad de la altura se ve aumentado en 1.9 mv por efecto de la temperatura a 4K y en 35.8 mv a 77K.

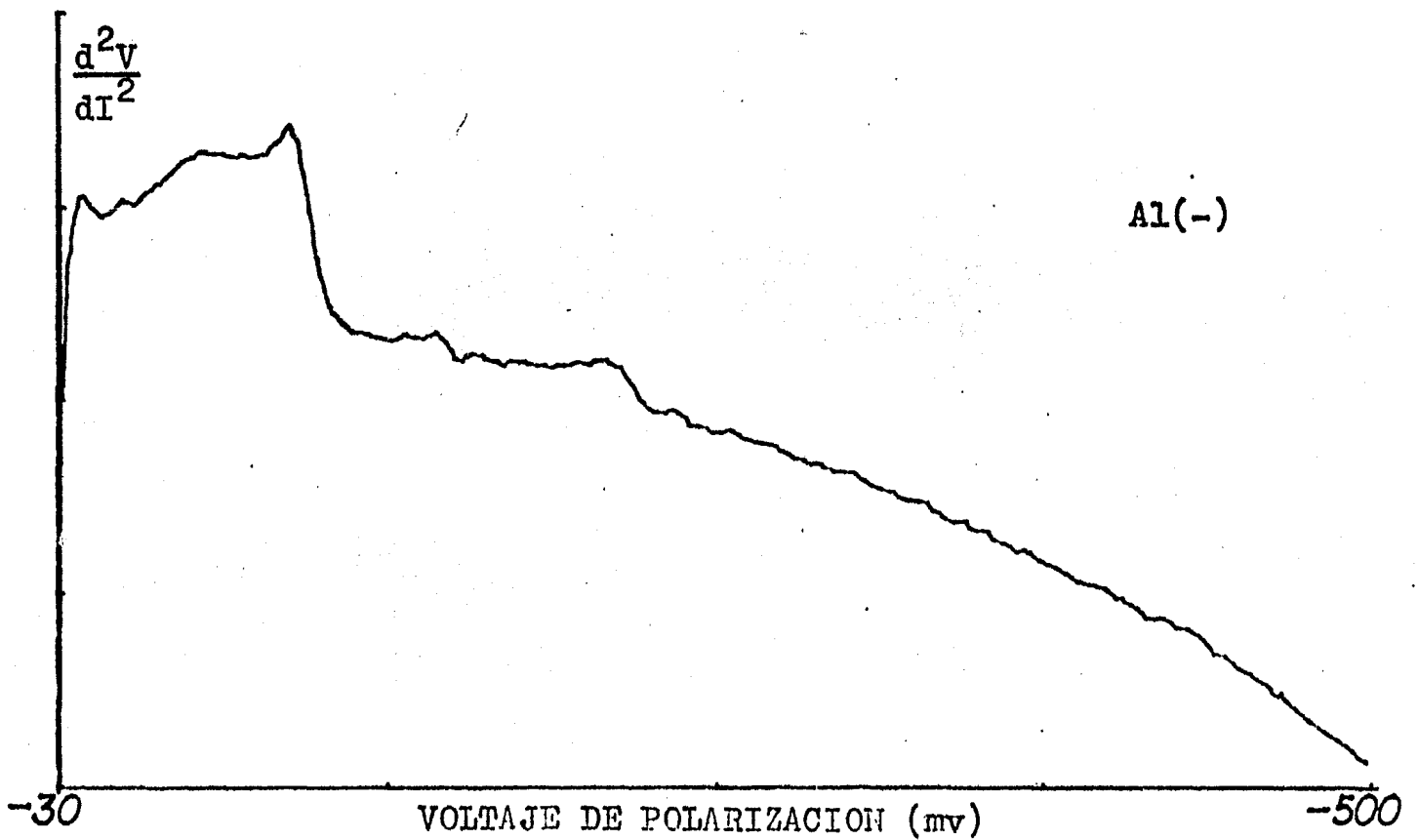
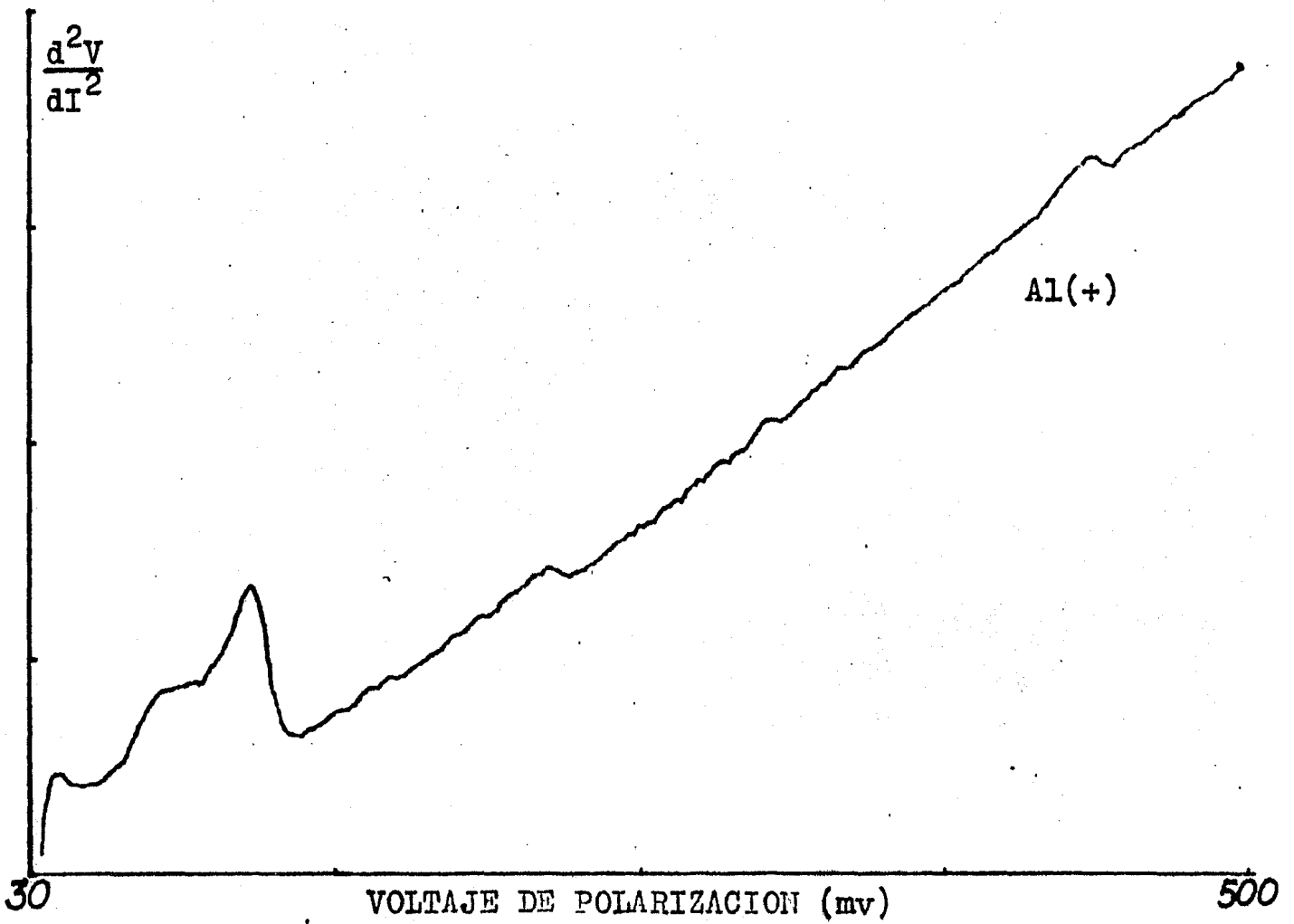


Figura 4.1 Espectro de la junta FJ 07-2 obtenido a 4K.

Por otro lado, los espectros se obtuvieron empleando una modulación de $\Delta V \approx 6$ mv, con lo que el ancho instrumental es de 10.2 mv, entonces a 4K el ancho debido a las dos contribuciones es de 12 mv y a 77K es de 46 mv.

Una estructura con características cualitativas similares puede obtenerse sumando cuatro picos con un ancho a mitad de la altura de 12 mv, de diferentes intensidades y a diferentes posiciones (siendo el más intenso uno a 117 mv aproximadamente). Si estos picos se ensanchan de tal manera que a mitad de la altura tengan 46 mv, como teóricamente deben tener en mediciones a 77K, en las mismas posiciones y con la misma altura relativa, la suma de estos picos tiene que dar como resultado una curva de forma diferente a la de 4K y con el máximo desplazado ligeramente hacia bajas energías.

Ahora, del origen de estos picos sólo se sabe del pico a 117 mv, como se expuso en la segunda sección del primer capítulo; de los demás a la fecha no se sabe a que modo vibracional se deban.

IV.2 SIMULACION DEL FENOMENO

Para reproducir las curvas experimentales y por tanto el corrimiento del pico a 117 mv hacia bajas energias por efecto únicamente de la temperatura, se utilizó la misma calculadora HP-9830 con la que se procesaron los datos.

Supongamos que los picos en ETEI tienen un ancho natural despreciable, como se hizo en el Capítulo I, su forma será el resultado de la suma de una curva gaussiana; que es el ensanchamiento térmico, y una curva (ecuación 1.2) que por su parecido a una parábola llamaremos curva parabólica y que es el ensanchamiento instrumental. Este último permanece constante mientras la temperatura aumenta o disminuye.

Con el fin de simplificar los programas y procedimientos, en lugar de utilizar en la reproducción de un pico dos curvas, se hizo con una sola curva gaussiana procurando que el ancho a mitad de la altura correspondiera al que debería de tener incluidas las dos contribuciones a una temperatura dada, es decir, la anchura que debería tener la resultante de la suma de la gaussiana y de la parabólica. Esta simplificación se puede hacer ya que, como se dijo antes,

la curva parabólica no se modifica con la temperatura, y su ancho a mitad de la altura es una constante.

La función con la que se logra esta reproducción es muy parecida a la que da el ensanchamiento térmico (en ella se basa), a la que se le ha hecho un cambio de variable y se han cambiado algunos parámetros (ecuación 4.1).

$$S = \frac{C}{T} e^y \frac{(y-2)e^y + (y+2)}{(e^y - 1)^3} \quad (4.1)$$

donde $y = xT/11.59$

En la ecuación 4.1, cuando sustituimos $T=5.6$ obtenemos al graficar una gaussiana con un ancho a mitad de la altura de 12 mv, (ver figura 4.2), correspondiente a picos a 4K; cuando $T=1.8$, entonces se tienen gaussianas con un ancho de 46 mv (figura 4.3) correspondiente a picos a 77K. La constante C se varia de tal manera que las alturas relativas de los picos sean las mismas.

En la figura 4.1 los espectros corresponden a la junta FJ07-2; para Al(+) el pico a 117 mv, tiene un corrimiento de 11 mv aproximadamente hacia bajas energías cuando se mide a 77K. La forma de este pico a 4K se puede simular con cuatro picos, tres de estos de poca altura situados a 86 mv el más

Figura 4.2 Pico con el ancho correspondiente a 4K, obtenido con la ecuación 4.1.
($T=5.6$)

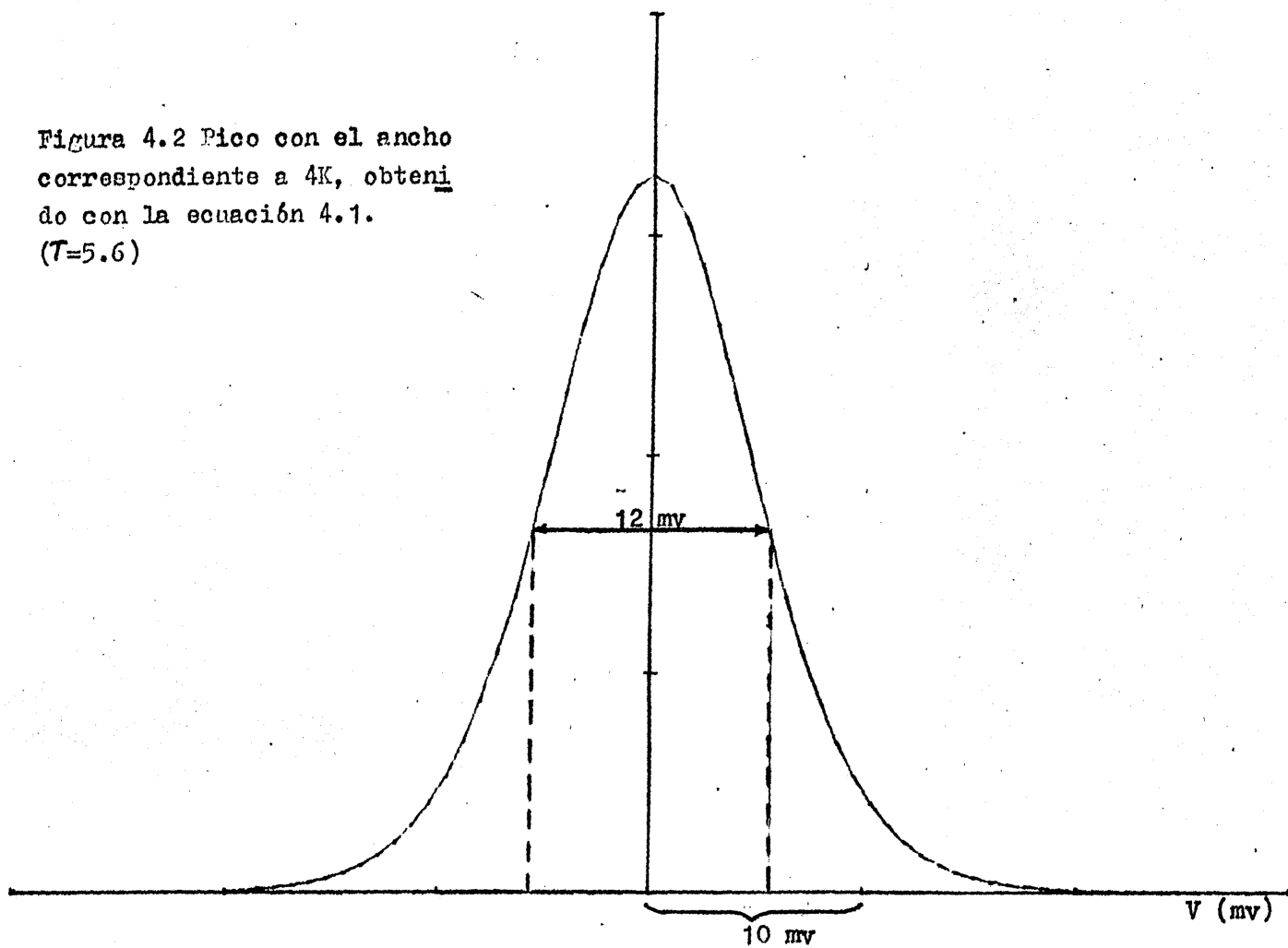
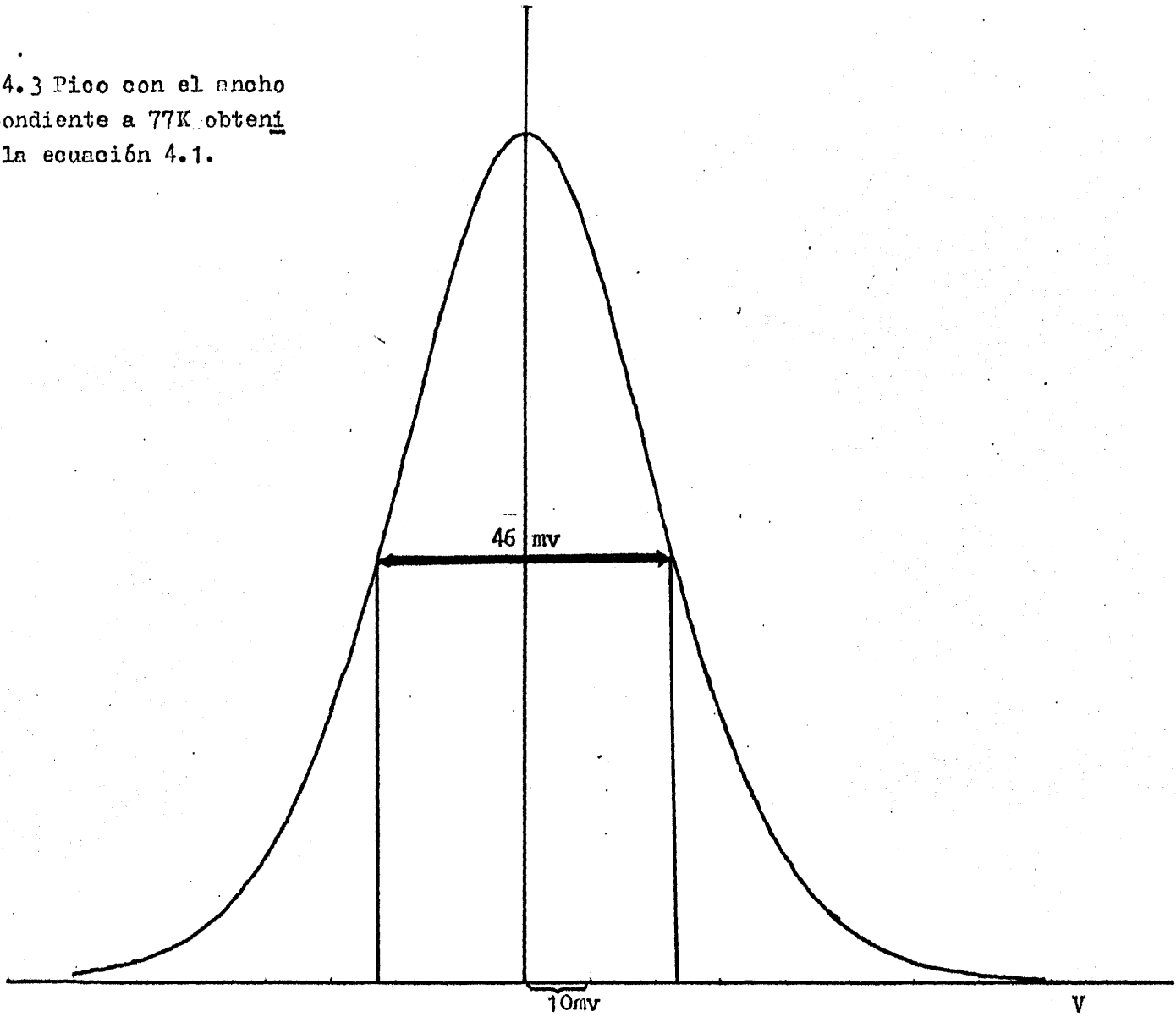


Figura 4.3 Pico con el ancho correspondiente a 77K obtenido con la ecuación 4.1.
($T=1.8$)

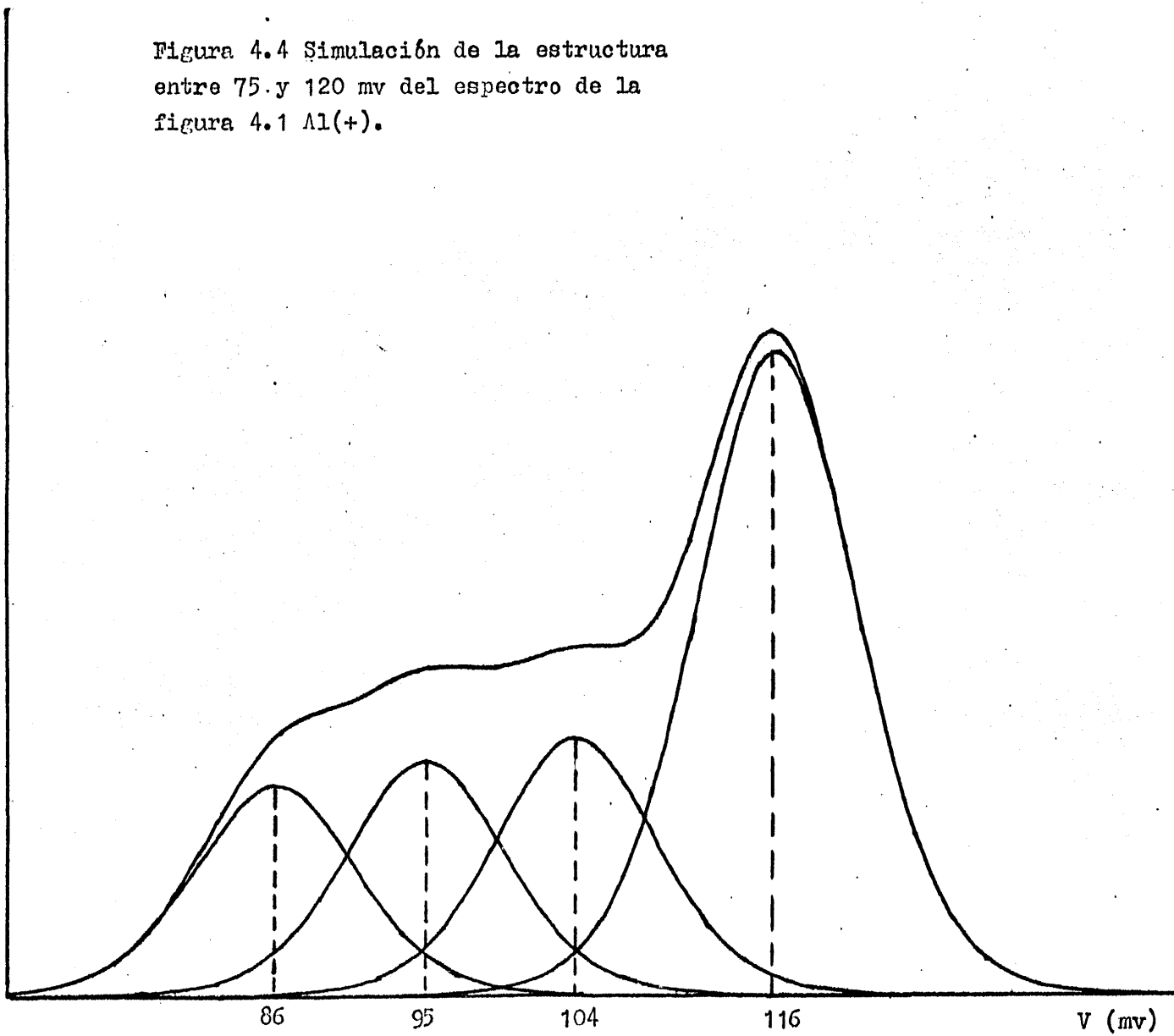


pequeño, a 95 mv y a 104 mv, (ver figura 4.4); el pico principal se encuentra a 116 mv, que sería el que se asocia con el modo de torsión del O-H del hidróxido de aluminio y es bastante más alto que los otros tres. Como ya se comentó, la altura de los picos se puede controlar a voluntad con el parámetro C de la ecuación 4.1, está en unidades arbitrarias ya que únicamente nos interesa la altura relativa entre el pico y la joroba de la curva experimental (figura 4.1), La intensidad real de los picos experimentales aquí no interesa ya que, como se vió en el capítulo anterior, la calibración no afecta la posición de los picos.

Si ahora sustituimos $T=1.8$ en la ecuación 4.1 y graficamos las gaussianas así obtenidas, en las mismas posiciones y con las mismas alturas relativas que en la figura 4.4, obtenemos gaussianas muy anchas que al sumarlas nos da una sola gaussiana con el máximo a 106.5 mv (ver figura 4.5), es decir, el máximo se corre 9.5 mv hacia bajas energías y además cambia la forma que tenía a 4K, desapareciendo la joroba. Este podría ser el mecanismo del corrimiento del pico a 117 mv en los datos experimentales. El corrimiento aquí obtenido con las gaussianas es del orden del corrimiento observado en el lado positivo de la junta FJ07-2, (figura 4.1), que es el espectro en que nos basamos para hacer esta simulación.

$\frac{d^2V}{dI^2}$

Figura 4.4 Simulación de la estructura entre 75 y 120 mv del espectro de la figura 4.1 Al(+).



$\frac{d^2v}{dt^2}$

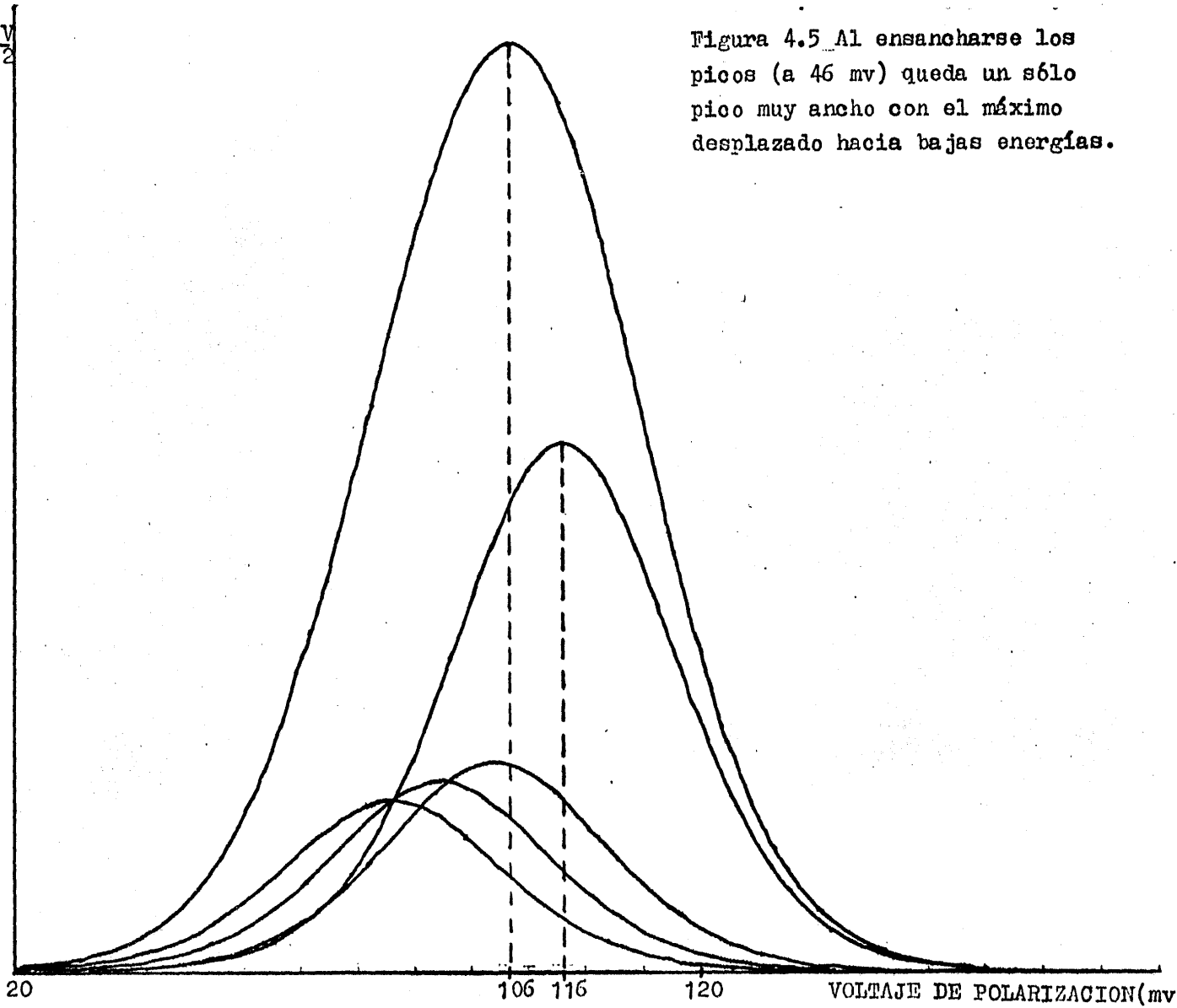


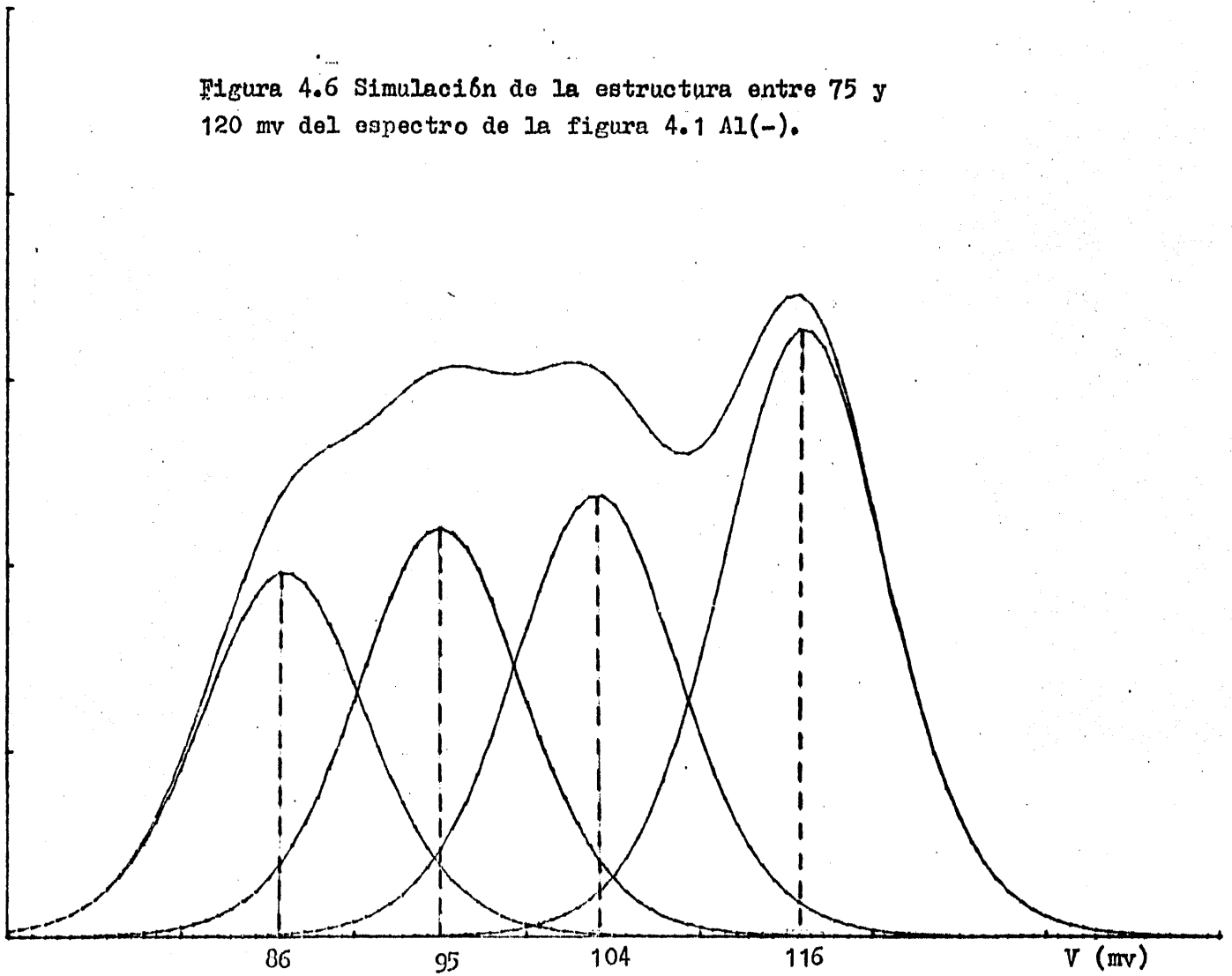
Figura 4.5 Al ensancharse los picos (a 46 mv) queda un sólo pico muy ancho con el máximo desplazado hacia bajas energías.

Si nos fijamos en el lado negativo de los espectros, en particular el de la junta FJ07-2 en la figura 4.1, notamos que la joroba es más intensa, si repetimos la simulación hecha para el lado positivo, ahora basándonos en la forma de la curva para el lado negativo, con las alturas adecuadas de los picos a sumar, obtenemos un corrimiento de 14 mv, mayor que el del lado positivo, como se observa experimentalmente (20 mv). Esto se muestra en las figuras 4.6 y 4.7 en las que las posiciones de los picos son las mismas que en la simulación para el lado positivo, mientras que las alturas en las figuras 4.6 y 4.7 son iguales entre si pero diferentes a las del lado positivo.

Por lo tanto la explicación para el corrimiento del pico, propuesta en este capítulo, es razonable.

$\frac{d^2V}{dI^2}$

Figura 4.6 Simulación de la estructura entre 75 y 120 mv del espectro de la figura 4.1 Al(-).



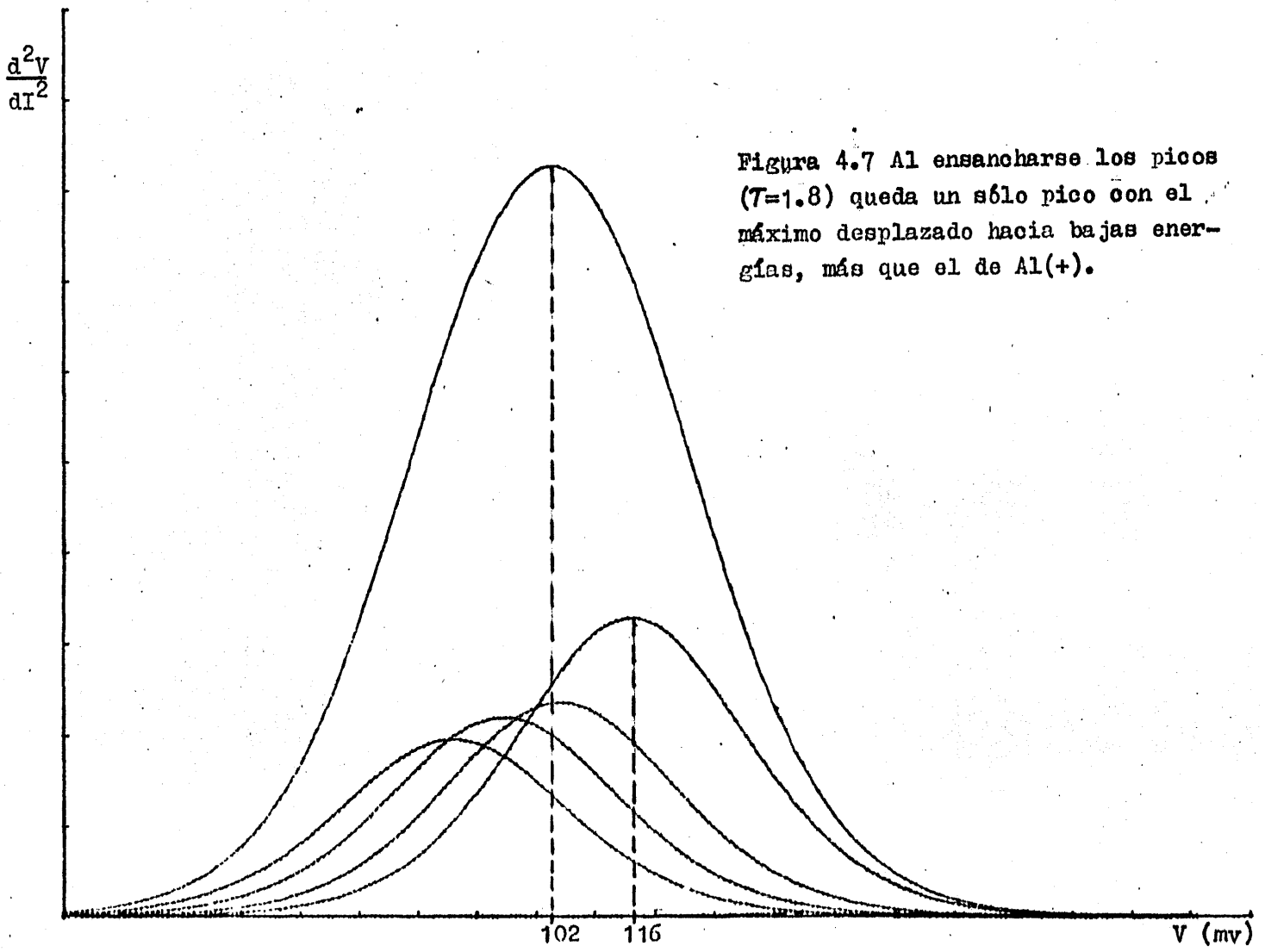


Figura 4.7 Al ensancharse los picos ($T=1.8$) queda un sólo pico con el máximo desplazado hacia bajas energías, más que el de $Al(+)$.

CAPITULO V
CONCLUSIONES

CAPITULO V

CONCLUSIONES

Los hechos observados a lo largo de esta tesis conducen a las siguientes conclusiones:

1) Se observa un corrimiento del pico que medido a 4K aparece en 117 mV, hacia bajas energías al medirlo a temperatura de 77K. Aquí cabe mencionar que la calibración del espectro de tunelaje no influye en la posición de los picos, es decir, la posición es la misma en los espectros calibrados y no calibrados.

2) El corrimiento es mayor para la polaridad en que aparece la "joroba" más intensa a 4K, en este caso para la polaridad negativa con respecto al metal base (Al(-)).

3) Los corrimientos de la magnitud observada en esta tesis, no se deben al cambio en la resistencia de la sobrecapa de la junta (al menos para $\Delta R \ll 50\Omega$) y por tanto se deben al cambio en temperatura.

4) La estructura observada entre 75 mV y 120 mV es el resultado de la superposición de una serie de cuando menos cuatro picos, siendo más intensos para una polaridad

(Al(-)) y de los cuales el pico observado a 117 mv es el más intenso.

5) La conclusión central de esta tesis es la siguiente: al ensancharse térmicamente la serie de picos entre 75 mv y 120 mv, dan origen a los corrimientos observados. Se propone un modelo para explicar el corrimiento por temperatura.

6) Acerca del origen de esta serie de picos, lo que podemos asegurar es que: las moléculas que lo producen deben estar más cercanas a la interface de plomo, debido ésto, a que los picos son más intensos para polaridad negativa con respecto al aluminio.

El trabajo realizado en esta tesis deja abierta la posibilidad de seguir investigando sobre este corrimiento. Puede decirse que es el inicio de una investigación, en la cuál se ha mostrado una posible explicación del fenómeno; y es importante seguir la investigación ya que de ser así, se obtendrá mayor información de los espectros de tunelaje al descubrir nuevos picos que a la fecha no han sido observados experimentalmente. Se tendrá que investigar el origen de estos picos, es decir, saber que modos vibracionales y por tanto que moléculas los producen, lo cual contribuirá a enriquecer esta espectroscopía.

Para continuar la investigación se tendrá que mejorar la

técnica de medición, así como el procesamiento de datos, para lo cual se sugiere lo siguiente:

La modulación empleada en este trabajo fue de cerca de 6 mv la mayoría de las veces, que provoca un ancho instrumental considerable (10 mv), por lo que sería muy recomendable disminuir la modulación y sería ideal que se redujera en un orden de magnitud, claro que de hacerlo así se tendrían serios problemas con el ruido. Para minimizar éste, habrá que revisar cuidadosamente el cableado y las tierras de cada aparato del sistema de medición; también se tendrán que revisar algunos elementos del puente que estén produciendo ruido, como por ejemplo, puede ser que el tipo de resistencias utilizadas no sean las mejores, tal vez sean necesario cambiarlas e inclusive modificar el puente ya que puede que no sea la configuración óptima para obtener los mejores resultados. También será necesario hacer las mediciones más lentamente, es decir, la velocidad de barrido de la polarización se tendrá que disminuir para poder aumentar la constante de tiempo del lock-in.

En la simulación del fenómeno hecha en calculadora en este trabajo, se han utilizado solamente curvas gaussianas, tanto para el ensanchamiento térmico como para el instrumental; tal vez mejoraría la simulación usando una curva "parabólica" para el ensanchamiento instrumental; o haciendo una simulación más detallada en computadora

utilizando las ecuaciones del Capitulo I.

También es conveniente mencionar que aunque las figuras 1.2 y 1.9 representan situaciones cuando la temperatura es cero, las explicaciones dadas en ellas son válidas a temperatura diferente de cero. En este caso ($T \neq 0$) la situación en dichas figuras cambia ligeramente debido a que hay excitaciones por arriba del nivel de Fermi. Cuando la diferencia de potencial aplicada es nula, las energías de Fermi de ambos metales se encuentran al mismo nivel; éste es el resultado de la condición de equilibrio termodinámico de que los potenciales químicos de los dos metales deben ser iguales (32, 33). En otras palabras la condición de equilibrio se traduce a que las energías de Fermi se nivelen en ambos lados de la barrera.

Finalmente no hay que olvidar, como ya se dijo, que la resistencia puede influir en la posición de los picos. Este trabajo no pretende descartar tal posibilidad; en el futuro para hacer investigaciones en este sentido, se requerirá hacerlas con juntas cuya sobrecapa tenga una resistencia mayor que la que se logra con plomo.

Espero que este trabajo sirva para entender de mejor manera, la técnica de medición y la teoría involucrada en ella; además espero que sirva para motivar más investigaciones en este campo.

BIBLIOGRAFIA

BIBLIOGRAFIA

1. J.Lambe y R.C.Jaklevic, Phys.Rev.165(1968)821.
2. P.K.Hansma, Phys.Lett.C.(Physics Reports)"Inelastic Electron Tunneling" 30,No.2(1977)145-206.
3. C.B.Duke,"Tunneling in Solids"p.207 Academic,NY(1969).
4. R.J.Jennings y J.R.Merrill, J.Phys.Chem.Solids 33(1972)1261.
5. J.Klein,A.Léger,M.Belin,D.Défourné y M.J.L.Sangster, Phys.Rev.B7(1973)2336.
- 6.
7. D.J.Scalapino y S.M.Marcus, Phys.Rev.Lett.18(1967)459.
8. J.Bardeen, Phys.Rev.Lett.6(1961)57.
9. J.Kirtley,D.J.Scalapino y P.K.Hansma, Phys.Rev.B14(1976)3177
10. R.Magno y J.G.Adler, Phys.Rev.B13,No.6(1976)2262.
11. B.F.Lewis,M.Mosesman y W.H.Weinberg, Surf.Sci.41(1974)142.
12. W.Vedder y A.Vermilyea, Trans.Faraday Soc. 65(1969)561.
13. T.Takamura,H.Kihara-Morishita y V.Moriyama, Thin Solid Films 6,R17(1970).
14. J.G.Adler, Phys.Lett.29A,675(1969).
15. J.L.Heiras, Tesis Doctoral (1980)Fc.Ciencias UNAM.
16. R.C.Jaklevic y M.R.Gaerttner, Appl.of Surf.Sci.1(1978)479.
17. A.F.Hebard y P.W.Shwmate, Rev.Sci.Instr.45(1973)529.
18. M.G.Simonsen,R.V.Coleman y P.K.Hansma, J.Chem.Phys.61(1974)378
19. J.S.Rogers,J.G.Adler y S.B.Woods, Rev.Sci.Instr.35(1963)208.
20. S.S.Linus y P.E.Oberg, Electronics, Mar(1963).
21. J.G.Adler,T.T.Chen y J.Straus, Rev.Sci.Instr.42(1971)362.
22. D.E.Thomas y J.M.Rowell, Rev.Sci.Instr.36(1965)1301.
23. T.A.Will y J.L.Heiras, Rev.Mex.Fís.23(1974)FA39.
24. J.G.Adler y J.Straus, Rev.Sci.Instr.46(1975)158.
25. H.B.Callen,"Thermodynamics", Wiley 1960.
26. G.G.Haselden,"Cryogenic Fundamentals", Academic Press(1971).
27. J.G.Adler,"Tunneling Espectroscopy", Cap.14, editado por K.P.Hansma, Plenum Publishing Co. (1982).
28. T.A.Will y R.Escudero, J.Appl.Phys.52(1981)1405.
29. J.W.Osmun, Phys.Rev.B21,No.7(1980)2829.

30. J.R.Kitley y P.K.Hansma, Phys.Rev.B12(1975)531.
31. J.G.Adler y J.E.Jackson, Rev.Sci.Instr.37(1966)1049.
32. F.Reif, Fundamental of Statistical and Thermal Physics, McGraw-Hill 1965, p.340.
33. J.Kestin y J.R.Dorfman, A Course in Statistical Thermodynamics, Academic Press 1971, p.362.