



**UNIVERSIDAD DE CHILE  
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

**RESISTIVIDAD, MAGNETORRESISTENCIA TRANSVERSAL Y VOLTAJE DE  
HALL INDUCIDO POR SCATTERING ELECTRÓN-SUPERFICIE, EN  
PELÍCULAS DELGADAS DE ORO DEPOSITADAS EN ALTO VACÍO SOBRE  
SUSTRATOS DE MICA**

**TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE MAGISTER EN  
CIENCIAS MENCIÓN FÍSICA**

**ADÁN ESTEBAN RAMÍREZ BUSTAMANTE**

**PROFESOR GUIA:  
RAÚL MUÑOZ ALVARADO**

**MIEMBROS DE LA COMISION:  
LUIS MORAGA JARAMILLO  
EDUARDO MENÉNDEZ TROUPIN  
RODRIGO SOTO BERTRÁN  
RODRIGO ARIAS FEDERICI**

**SANTIAGO DE CHILE  
AGOSTO 2008**

## **Agradecimientos**

A mis padres por dejarme escoger en libertad los caminos y luego apoyarme a concluirlos.

A mi profesor Germán Kremer, quién me mostró e introdujo en el mundo de lo “medible” y a como obtener de la naturaleza información de su comportamiento.

A mi estimado tutor Raúl Muñoz, por su infinita paciencia y su confianza depositada en mí. Quién me ha apoyado en los momentos más difíciles, proporcionándome una palabra sabia.

En especial a la mujer que me ha acompañado en este “largo” camino, aportándome fortaleza, constancia y amor, mi amada Ingrid.

Al proyecto FONDECYT 1040723.

***“Los sueños son gratis, pero la felicidad es real”***

## Resumen.

En esta tesis se estudia el fenómeno que es conocido en la literatura como “efectos de tamaño”. En específico se estudia de qué manera la superficie rugosa, que limita la estructura metálica, afecta a las propiedades de transporte de carga cuando una o más de las dimensiones que caracterizan la estructura metálica se tornan comparables o inferiores al camino libre medio  $l$  de los portadores de carga en el grueso.

Se analiza la teoría de transporte de Calecki, que proporciona una solución numérica para los coeficientes de transporte eléctrico como son la resistividad, la tangente de Hall y la magnetorresistencia transversal. La teoría de Calecki considera el efecto de scattering electrón-superficie rugosa desde primeros principios, usando el formalismo de la ecuación de transporte de Boltzmann.

Se generó un programa computacional desarrollado en FORTRAN para calcular la solución numérica de la teoría de transporte de Calecki y contrastar dicho cálculo con datos experimentales. Para efectuar la comparación entre teoría y experimento fue necesario realizar la medición de la rugosidad superficial de una familia de láminas delgadas de oro evaporadas sobre mica. En estas láminas se conocían los datos de resistividad, magnetorresistencia transversal y tangente de Hall, medidos bajo un campo magnético intenso  $\mathbf{B}$  ( $0 \leq \mathbf{B} \leq 9$  T) y a temperatura  $T$  ( $4 \leq T \leq 50$  K).

El resultado es que la teoría proporciona una descripción adecuada de la resistividad en función de la temperatura, una descripción aceptable de la tangente de Hall en función del campo magnético a 4 K, pero predice una magnetorresistencia transversal a 4 K que es *varios órdenes de magnitud menor que lo observado*.

## **Índice.**

1.- Introducción.	8
1.1.- Resistividad eléctrica.	8
1.2.- Magnetorresistencia transversal.	10
1.3.- Tangente de Hall.	12
1.4.- Características de una lámina delgada.	15
1.5.-Efectos de tamaño.	16
1.6.-Efectos de tamaño bajo la presencia de un campo magnético.	18
2.- Consideraciones experimentales.	26
2.1.- Mecanismos de scattering.	26
2.2.- Condiciones físicas de las láminas.	27
3.- Teoría semiclásica de transporte: Solución de la ecuación de Boltzmann mediante la aproximación de tiempo de relajación.	30
4.- Teoría de Calecki.	34
4.1.- Transporte de carga en una película metálica delgada, utilizando el formalismo de la ecuación de Boltzmann.	34

4.2.- Coeficientes de transporte.	41
4.3.- Rugosidad superficial.	44
4.4.- Impurezas y fonones.	50
4.5.- Método numérico.	52
5.- Determinación de los parámetros $\xi$ y $\delta$ propuestos por Calecki a partir de la medición de rugosidad superficial.	55
5.1.- Medición de la rugosidad superficial.	56
5.2.- Autocorrelación de alturas.	57
5.2.1. Método Cat. ( $N_x = N_y = 42$ ; $N_{0x} = N_{0y} = -42$ ).	58
5.3.- Promedio de la autocorrelación de 30 imágenes.	60
5.4.- Ajuste de un perfil gaussiano al promedio de las autocorrelaciones.	60
6.- Comparación experimento-teoría.	63
7.- Conclusiones.	69
8.- Bibliografía.	72
Anexo A: Programa computacional.	74
Anexo B: Publicación Phys. Rev. B <b>74</b> , 233402 (2006)	87

## Índice de figuras y tablas.

Figura 1: Esquema de un trozo metálico sometido a la acción de una corriente $I$ .	9
Figura 2: Esquema de un trozo metálico sometido a la acción de una corriente $I_0$ en la dirección $\hat{x}$ , y un campo magnético $\vec{B} = B\hat{z}$ perpendicular a la superficie $xy$ (magnetorresistencia transversal).	11
Figura 3: Esquema de un trozo metálico sometido a la acción de una corriente $I_0$ en la dirección $\hat{x}$ , y un campo magnético $\vec{B} = B\hat{z}$ perpendicular a la superficie $xy$ (tangente de Hall).	13
Figura 4: Esquema de los campos eléctrico $\vec{E} = (E_x, E_y, 0)$ y magnético $\vec{B} = (0, 0, B)$ aplicados sobre la lámina de espesor $t$ .	37
Figura 5: Medición de rugosidad superficial desplegada como imagen 3D.	57
Figura 6: Método para calcular la función de autocorrelación.	59
Figura 7: Autocorrelación de la imagen de rugosidad superficial m14_ori de la lámina M15 (espesor 180 [nm]).	62

Figura 8: Promedio de las Autocorrelaciones de las imágenes de rugosidad superficial de la lámina M15 (espesor 180 [nm]).	62
Figura 9: Resistividad en función de la temperatura, ajustando $\tau_{IMP}$ para describir $\rho(4K)$ .	64
Figura 10: Magnetorresistencia transversal en función del campo magnético a 4 K.	66
Figura 11: Tangente de Hall en función del campo magnético a 4 K.	67
Figura 12: Tiempo de colisión $\tau_{IMP}$ en función del espesor de las láminas.	68
Tabla 1: Medición del espesor, tamaño lateral de granos y camino libre medio a temperatura de 20 K de las láminas delgadas en las cuales se realizó la primera medición de resistividad, tangente de Hall y magnetorresistencia transversal.	22
Tabla 2: Amplitud cuadrática media $\delta$ y longitud de correlación lateral $\xi$ de la rugosidad superficial en función del espesor $t$ de la lámina.	29

## **1.-Introducción.**

A continuación se detallan ciertos conceptos que permitirán un entendimiento cabal del trabajo desarrollado en esta tesis.

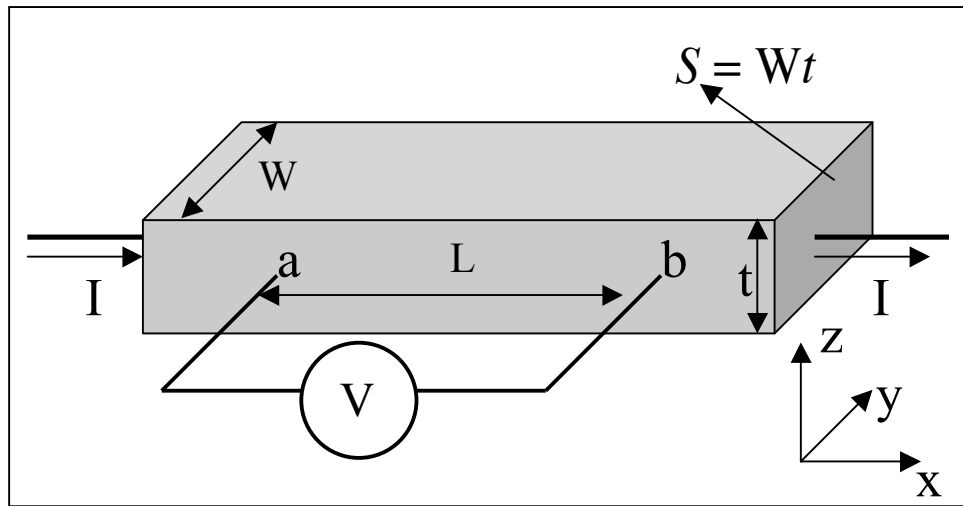
### **1.1.- Resistividad eléctrica.**

Se ha observado que al aplicar una corriente  $I$  a un trozo metálico que se encuentra a temperatura constante y homogénea (Fig. 1), se genera una diferencia de potencial  $V$  entre los puntos  $a$  y  $b$  que depende linealmente de la corriente  $I$ . La constante de proporcionalidad entre el voltaje y la corriente se denomina resistencia y se denota con la letra  $R$ . Esta relación es conocida como la ley de Ohm.

$$V = IR \quad (1)$$

En una muestra homogénea y uniforme, la resistencia depende linealmente de la distancia  $L$  que separa los terminales sobre los que se mide la caída de tensión  $V$ , y depende inversamente de la sección transversal  $S = Wt$  de la muestra que es perpendicular a la corriente aplicada.





**Figura 1.** Esquema de un trozo metálico sometido a la acción de una corriente  $I$ . La circulación de la corriente sobre el trozo metálico genera una diferencia de potencial  $V$  entre los puntos  $a$  y  $b$ .

Para relacionar la resistencia con los mecanismos microscópicos de scattering electrónico que inducen pérdida de energía de los portadores de carga, se define la resistividad  $\rho$  como la constante de proporcionalidad

entre la resistencia  $R$  y el cociente  $\frac{L}{S}$ :

$$R = \frac{L}{S} \rho \quad (2)$$

Esta definición de resistividad supone que  $\rho$  es independiente de las dimensiones de la muestra y corresponde a una propiedad intrínseca del

material. En el modelo simplificado de Drude, la resistividad se define como (Ref. 1, Cap. 7, ec. 48):

$$\rho = \frac{m^*}{nq^2\tau} \quad (3)$$

donde  $m^*$  es la masa efectiva del electrón,  $q$  es la carga del electrón,  $n$  es el número de electrones por unidad de volumen y  $\tau$  corresponde al tiempo que transcurre entre dos colisiones sucesivas del electrón con algún mecanismo de scattering.

Puesto que los electrones que participan en la conducción eléctrica se mueven con una velocidad igual a la velocidad de Fermi, la distancia recorrida por el electrón entre dos colisiones sucesivas es conocida como libre camino medio  $l$  y esta determinado por la expresión

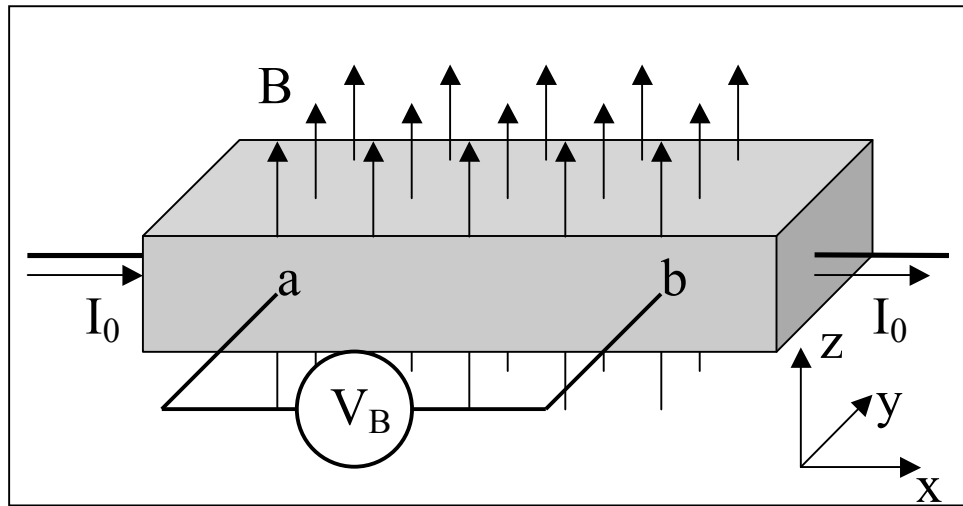
$$l = v_F \cdot \tau \quad (4)$$

donde  $v_F$  corresponde a la velocidad de Fermi.

## **1.2.- Magnetorresistencia transversal.**

Al aplicar a un trozo metálico una corriente  $I_0$  en la dirección  $\hat{x}$  (Fig.2), se genera una diferencia de potencial  $V_0$  entre los puntos a y b. Si en la muestra se mantienen la temperatura y la corriente aplicada, y además

se somete a la acción de un campo magnético  $\vec{B} = B\hat{z}$ , se observa un cambio en el voltaje medido entre los puntos a y b, el nuevo voltaje lo denominaremos  $V_B$ .



**Figura 2.** Esquema de un trozo metálico sometido a la acción de una corriente  $I_0$  en la dirección  $\hat{x}$ , y un campo magnético  $\vec{B} = B\hat{z}$  perpendicular a la superficie  $xy$  (magnetorresistencia transversal). La acción del campo eléctrico y del campo magnético sobre los portadores genera una diferencia de potencial  $V_b$  entre los puntos a y b.

La magnetorresistencia transversal  $\Delta\rho / \rho_0$  corresponde a la razón de cambio.

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \frac{V_B - V_0}{V_0} \quad (5)$$

reemplazando las ecuaciones (1) y (2) en (5), obtenemos:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \frac{\rho_B - \rho_0}{\rho_0} \quad (6)$$

Así la magnetorresistencia transversal representa la razón de cambio de la resistividad del material debida a la presencia de un campo magnético  $B$  en la dirección  $\hat{z}$ .

El cambio en la resistividad se debe a que el campo magnético, a través de la fuerza de Lorentz, induce una curvatura en las trayectorias de los electrones que se mueven en el grueso.

La magnetorresistencia transversal en el grueso es independiente de las dimensiones de la muestra, como se desprende de la ecuación (6).

### 1.3.- Tangente de Hall.

Al aplicar un campo magnético  $\vec{B} = B\hat{z}$  perpendicular a la superficie del grueso y una corriente  $I_0$  en la dirección  $\hat{x}$ , se observa una diferencia de potencial  $V_H$  (Voltaje de Hall) entre los puntos c y d (Fig. 3), cuando la densidad de corriente que circula en la dirección  $\hat{y}$  es nula.

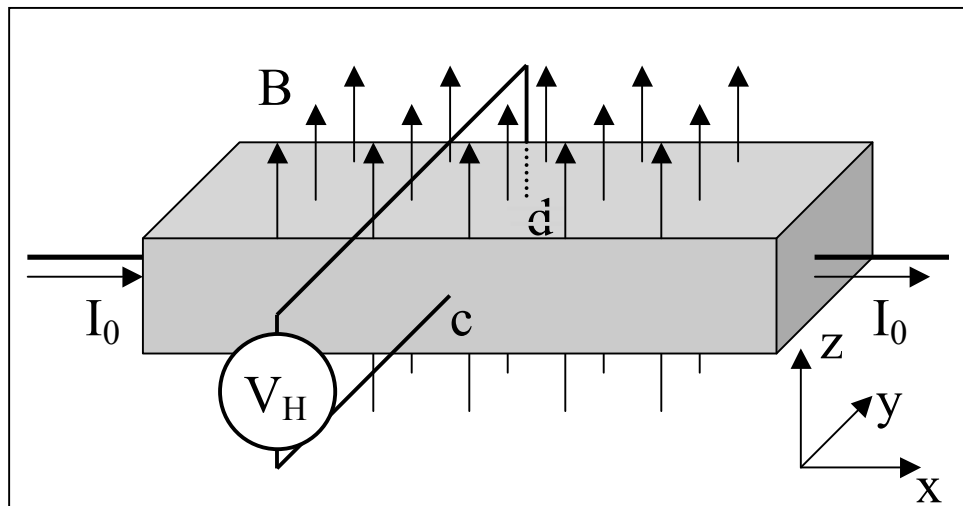
La diferencia de potencial se define como:

$$V_b - V_a = \int_a^b \vec{E} \cdot d\vec{s} \quad (7)$$

donde  $\vec{E}$  corresponde al campo eléctrico. De la ecuación (7) se deduce que:

$$\frac{V_H}{W} = E_y = E_H \quad (8)$$

$$\frac{V_B}{L} = E_x \quad (9)$$



**Figura 3.** Esquema de un trozo metálico sometido a la acción de una corriente  $I_0$  en la dirección  $\hat{x}$ , y un campo magnético  $\vec{B} = B\hat{z}$  perpendicular a la superficie del trozo (tangente de Hall). La acción del campo eléctrico y del campo magnético sobre los portadores genera una diferencia de potencial  $V_H$  (Voltaje de Hall) entre los puntos  $c$  y  $d$ , cuando la densidad de corriente en la dirección  $\hat{y}$  es cero ( $J_y = 0$ ). Las dimensiones del trozo corresponden a las de la Fig. 1.

La tangente de Hall se define como el cociente entre el campo transversal  $E_y = E_H$  y el campo longitudinal  $E_x$  cuando la densidad de corriente transversal es cero, es decir:

$$\tan(\theta) = \left( \frac{E_H}{E_x} \right)_{J_y=0} \quad (10)$$

al reemplazar las ecuaciones (8) y (9) en la ecuación (10) se deduce:

$$\tan(\theta) = \left( \frac{V_H}{V_B} \frac{L}{W} \right)_{J_y=0} \quad (11)$$

El voltaje de Hall se genera por una acumulación de carga de signos opuestos en los puntos c y d que aumenta la densidad de corriente a lo largo de la dirección  $\hat{y}$ . La acumulación de carga se produce por la deflexión de los electrones inducida por la fuerza de Lorentz que actúa sobre los portadores durante un tiempo de colisión  $\tau$ . Este tiempo de colisión es gobernado por los mecanismos microscópicos de scattering electrónico (modelo de Drude).

En la medida en que el tiempo de colisión  $\tau$  es gobernado por los mecanismos microscópicos de colisión electrónico, la tangente de Hall es independiente de las dimensiones macroscópicas  $L$ ,  $W$  y  $t$  que caracterizan la muestra.

#### 1.4.- Características de una lámina delgada.

Una lámina delgada está compuesta por una serie de granos que coalescen entre sí. A medida que los átomos se depositan sobre el sustrato, estos se van aglomerando (ya que difunden sobre la superficie) en estructuras denominadas granos.

- Dependiendo del sustrato y del material depositado, los granos pueden crecer con alguna orientación cristalina preferencial. En el caso del oro sobre un sustrato de mica, los granos crecen de forma que la dirección  $\langle 111 \rangle$  del oro es perpendicular a la superficie del sustrato, sin embargo este tipo de crecimiento no garantiza que los granos crezcan con la misma orientación respecto a la normal, es decir, pueden exhibir desorden azimutal. En otras palabras, pueden estar rotados (respecto a la dirección  $\langle 111 \rangle$ ) uno respecto a otro.
- Una lámina delgada pasa a ser conductora cuando los granos coalescen entre sí, de este modo la corriente puede fluir de un extremo a otro. Si los granos están rotados uno respecto a otro, se creará un defecto en la junta denominado *borde de grano*, además cada grano puede poseer todos los defectos que posee el grueso, tales como vacancias, dislocaciones etc. La concentración de impurezas en

un grano dependerá de la calidad de los materiales utilizados y del mecanismo de fabricación.

- Producto de los defectos e impurezas, además de los bordes de grano, en una lámina delgada están presente los mecanismos de scattering del grueso, estos son scattering electrón-fonón, scattering electrón-defectos puntuales, scattering electrón-impurezas, etc. Sin embargo, si una o más de las dimensiones que caracterizan la lámina es igual o inferior al camino libre medio  $l$  de los electrones en el grueso, entonces se manifiesta un nuevo mecanismo de scattering (scattering electrón-superficie rugosa), que es despreciable en el grueso y que es producto de la rugosidad superficial del conductor. Si las superficies fueran atómicamente planas, el scattering electrón-superficie sería perfectamente elástico.

### **1.5.- Efectos de tamaño.**

Si todas las dimensiones lineales de una muestra son de tamaño macroscópico, como ocurre en el grueso, su resistividad, tangente de Hall y magnetorresistencia transversal son independientes de su tamaño o forma. Sin embargo se ha observado que los coeficientes de transporte eléctrico



son dependientes de las dimensiones de la muestra, si éstas se reducen a escala nanoscópica. Esta reducción en las dimensiones de la muestra torna importante el efecto de la superficie en las propiedades de transporte eléctrico. Esto nos conduce a una de las interrogantes fundamentales de la física del sólido, que es cómo la dispersión de electrones por una superficie, rugosa o lisa, afecta a las propiedades de transporte eléctrico en una película metálica delgada.

Para comprender como este cambio en las dimensiones de la muestra afecta a los portadores de carga debemos referirnos al camino libre medio  $l$  de los electrones en el grueso, definido en la ecuación (4).

En el grueso los electrones pueden colisionar con impurezas, defectos puntuales de la red y fonones. Si el espesor de la muestra se hace comparable o menor que el camino libre medio, entonces los electrones colisionaran con la superficie una o más veces antes de colisionar con una impureza, un defecto puntual de la red o un fonón, con lo cual el transporte eléctrico se verá influenciado por las propiedades de la rugosidad de la muestra.

Interesa entender de qué manera la superficie rugosa, que limita la estructura metálica, afecta las propiedades de transporte de carga de la

estructura cuando una o más de las dimensiones que caracterizan la estructura metálica se tornan comparables o inferiores al camino libre medio  $l$  de los portadores de carga en el grueso. Este fenómeno es conocido en la literatura como “efectos de tamaño”.

El problema de los efectos de tamaño ha permanecido abierto tanto desde el punto de vista teórico como desde el punto de vista experimental y ha atraído la atención de numerosos investigadores durante los últimos 100 años [2].

### **1.6.- Efectos de tamaño bajo la presencia de un campo magnético.**

La disipación de energía asociada al scattering electrón-superficie rugosa se manifiesta también bajo la influencia de un campo magnético. El efecto del campo magnético es producir una curvatura en la trayectoria que siguen los electrones en el metal entre dos colisiones. En una película metálica delgada, dicha curvatura modifica la colisión de los electrones con la superficie rugosa. A pesar de la abundante literatura publicada referente a efectos de tamaño (fundamentalmente, trabajos relacionados con el aumento de resistividad inducido por superficies rugosas en películas

metálicas delgadas en ausencia de campo magnético), el estudio de los efectos de tamaño en presencia de campo magnético ha atraído una atención considerablemente menor. Hasta la fecha existen sólo dos teorías publicadas para describir efectos magnetomórficos en películas metálicas delgadas inmersas en un campo magnético ortogonal al plano de la película. La primera fue publicada por Sondheimer (S) [3, 4]. La otra teoría fue publicada por Calecki [5].

El trabajo teórico relativo a efectos de tamaño se focalizó durante varias décadas en la teoría (S). Esta teoría describe el movimiento de electrones en una película metálica delgada mediante una ecuación de transporte de Boltzmann (Boltzmann Transport Equation, BTE), donde el efecto de la superficie rugosa se incorpora en las condiciones de borde que debe satisfacer la función de distribución de electrones mediante un parámetro de especularidad  $R$ , que representa la fracción de electrones  $0 \leq R \leq 1$  que sufren reflexión especular al colisionar con la superficie rugosa, siendo  $R$  un parámetro de ajuste.

En 1990 Daniel Calecki formula una teoría más elaborada que la de Sondheimer, que describe las propiedades magnetomórficas en láminas metálicas delgadas [5]. La teoría utiliza la ecuación de transporte de

Boltzmann para describir el transporte eléctrico. El efecto del scattering electrón-superficie rugosa se estima calculando la perturbación  $H_1$  inducida por la presencia de dos superficies rugosas (que limitan por arriba y por abajo la película delgada) sobre el Hamiltoniano  $H_0$  que describe a un gas de electrones confinado entre dos superficies planas paralelas. El confinamiento del gas electrónico entre dos planos paralelos, induce la cuantización del vector de onda  $k_\nu = \nu\pi / t$  ( $t$  es el espesor de la muestra y  $\nu = 1, 2, 3\dots$ ) a lo largo de  $\hat{z}$  (dirección perpendicular a los planos paralelos). De esta forma, los estados electrónicos están caracterizados por los índices  $(\mathbf{k}, \nu)$ , donde  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  denota el índice del vector de onda (continuo) paralelo al plano de confinamiento y  $\nu$  denota el índice del vector de onda cuantizado a lo largo de la dirección  $\hat{z}$ . A los estados electrónicos  $\nu$  los denominaremos subbandas.

Calecki plantea y resuelve una BTE para  $f_\nu(\mathbf{k})$ , la función de distribución de los portadores de carga perturbada en la subbanda caracterizada por los índices  $(\mathbf{k}, \nu)$ , y demuestra que en presencia de un campo magnético transversal y un campo eléctrico paralelo, el scattering electrón-superficie rugosa produce transiciones entre las subbandas. Por

tanto, el operador de Boltzmann correspondiente a la colisión electrón-superficie rugosa no puede ser caracterizado por un tiempo de relajación  $\tau$ , a menos que exista sólo una subbanda ocupada.

El cálculo de Calecki procede de primeros principios y conduce a expresiones para la resistividad, la tangente de Hall y la magnetorresistencia transversal que dependen del espesor de la película y de las propiedades de la rugosidad superficial. Calecki utiliza en su formalismo los parámetros de amplitud cuadrática media  $\delta$  y la longitud de correlación lateral  $\xi$  para caracterizar la rugosidad de la muestra [5].

El formalismo de Calecki es la única teoría que describe los efectos magnetomórficos a partir del scattering electrón-superficie rugosa en láminas metálicas delgadas (inmersas en un campo magnético ortogonal a la película) que *no contiene parámetros ajustables*. Sin embargo, no existen publicaciones que den cuenta de la comparación entre teoría y experimento; ya que no existen trabajos experimentales en que se midan tanto de los coeficientes de transporte como de la rugosidad superficial en la escala de longitudes apropiada.

En 2006 se preparó una familia de 4 láminas delgadas de Au depositadas sobre mica. Las láminas poseen diferentes espesores y su

fabricación se realizó bajo condiciones similares de evaporación [6, 7]. En estas láminas se realizó, por primera vez, la medición simultánea de tres coeficientes de transporte eléctrico (resistividad, tangente de Hall y magnetorresistencia transversal). La medición deja de manifiesto el efecto de la superficie, puesto que existe una clara dependencia de los coeficientes de transporte con el espesor de las láminas (el espesor también fue medido).

En la tabla 1 se muestran el espesor, el tamaño lateral de los granos y el libre camino medio a temperatura de 20 K de las láminas utilizadas y del grueso.

Láminas delgadas			Grueso	
Espesor $t$ [nm]	Tamaño lateral de granos [nm]	Camino libre medio (T=20 K) $l$ [nm]	Temperatura [K]	Camino libre medio $l$ [nm]
69	$167 \pm 19$	118	300	37
93	$240 \pm 24$	172		
150	$255 \pm 28$	245	20	6700
185	$290 \pm 41$	366		

**Tabla 1.** Medición del espesor, tamaño lateral de granos y camino libre medio a temperatura de 20 K de las láminas delgadas en las cuales se realizó la primera medición de resistividad, tangente de Hall y magnetorresistencia transversal. En la tabla se ha incluido el libre camino medio en el grueso. El libre camino medio fue calculado a través de las ecuaciones 3 y 4, utilizando, para las láminas delgadas, la medición de resistividad a temperatura de 20 K y, para el grueso, la resistividad intrínseca del oro obtenida de la referencia [8] determinada por scattering electrón-fonón.

Sin embargo, para contrastar las medidas experimentales con la teoría de Calecki es necesario medir la rugosidad superficial de cada muestra en la escala de longitud correspondiente a la longitud de onda de Fermi (0.52 nm para el Au), determinar los parámetros  $\xi$  y  $\delta$  que Calecki utiliza para caracterizar la rugosidad superficial.

Es por tanto piedra angular y punto de partida del trabajo desarrollado en esta tesis, la medición de la rugosidad superficial y la determinación de los parámetros  $\xi$  y  $\delta$  utilizados por Calecki.

Al contrastar la teoría de Calecki con datos experimentales, queda de manifiesto la incapacidad de la teoría de describir satisfactoriamente los datos experimentales [6, 7].

Sin embargo, no queda claro si la discrepancia entre teoría y experimento es consecuencia de una limitación fundamental de la teoría o es consecuencia de una de las aproximaciones utilizadas en el trabajo de Calecki. En efecto, los coeficientes de transporte eléctrico fueron calculados considerando la aproximación de longitud de correlación pequeña  $\xi k_F \ll 1$  ( $k_F$  corresponde al vector de onda de Fermi); una aproximación propuesta por el propio Calecki.

El propósito de esta tesis es determinar si la discrepancia informada en las referencias [6, 7], entre los coeficientes de transporte calculados a partir de la teoría de Calecki y los medidos experimentalmente, se debe a una limitación fundamental de la teoría, o es, simplemente, consecuencia de la inaplicabilidad de la aproximación  $\xi k_F \ll 1$  a las muestras en las cuales se midió.

El programa de trabajo que fue ejecutado para lograr el objetivo planteado en esta tesis, es el siguiente:

a) Medir experimentalmente la rugosidad superficial de las láminas en las cuales se realizó la medición de resistividad, magnetorresistencia transversal y tangente de Hall. Determinar a partir de la rugosidad medida los parámetros de longitud de correlación lateral  $\xi$  y amplitud cuadrática media  $\delta$  propuestos por Calecki.

b) Construir un programa computacional que calcule los coeficientes de transporte eléctrico resolviendo numéricamente las ecuaciones de movimiento contenidas en el trabajo de Calecki, sin utilizar la aproximación  $\xi k_F \ll 1$ ; puesto que al abandonar dicha aproximación se disipa cualquier duda referente a la capacidad predictiva de la teoría.



c) Contrastar los coeficientes de transporte eléctrico calculados a partir de dicho programa con los informados en las referencias [6, 7], para dilucidar, por primera vez, si la teoría es capaz de describir los datos experimentales.

## 2.- Consideraciones experimentales.

Para determinar la influencia de la superficie en los coeficientes de transporte eléctrico se requiere un análisis cuidadoso y detallado de los mecanismos de scattering electrónico presentes en las películas en las que se efectuó la primera medición simultánea de resistividad, tangente de Hall y magnetorresistencia transversal.

### 2.1.- Mecanismos de scattering.

A continuación se enuncian los mecanismos de scattering presentes en las láminas:

- a) Scattering electrón-fonón. Puede ser caracterizado por un tiempo de relajación  $\tau_{PHON}$ , que depende de la temperatura de la muestra. La dependencia de  $\tau_{PHON}$  con la temperatura está dada por la teoría de Bloch-Grüneisen y su valor puede ser calculado a partir de la resistividad intrínseca para el Au, listada en la pagina 1209 de la referencia [8].
- b) Scattering electrón-impurezas. Puede ser caracterizado por un tiempo de relajación  $\tau_{IMP}$ , en el límite de baja concentración de

impurezas. Este tiempo de relajación es independiente de la temperatura.

- c) Scattering electrón-superficie rugosa.
- d) Scattering electrón-borde de grano.
- e) Scattering electrón-dislocaciones y otros defectos morfológicos de las muestras.

## **2.2.- Condiciones físicas de las láminas.**

Las láminas utilizadas [6, 7] fueron preparadas de manera tal que satisfacen las siguientes condiciones:

a) El tamaño de los granos es mayor que el espesor de la películas utilizadas, por lo que supondremos que en estas láminas el scattering electrón-borde de grano es pequeño en comparación con el scattering electrón-superficie.

b) La resistividad a 295 K es, a lo más, un 30% mayor que la resistividad calculada a partir de considerar la lámina un cristal perfecto, (sólo interacción electrón-fonón [8]). Por lo tanto, el efecto de las

dislocaciones, impurezas y otros defectos morfológicos sobre la resistividad de estas láminas ha sido minimizado.

c) El scattering electrón-superficie que ocurre en la superficie inferior de la película (en contacto con el sustrato, que es atómicamente plano salvo por pasos de clivaje) se puede considerar despreciable cuando se compara con el scattering que ocurre en la superficie superior (expuesta) de la película, debido a que la distancia entre pasos de clivaje es mucho mayor que el camino libre medio de los electrones en el grueso.

Por su parte, la superficie superior queda determinada por la amplitud cuadrática media  $\delta$  (valor r.m.s.) y la longitud de correlación lateral  $\xi$  de la autocorrelación de alturas de la rugosidad superficial. En la tabla 2 se muestran los parámetros calculados a partir de la medición de rugosidad realizada para cada lámina.

El método utilizado para determinar estos parámetros a partir de la medición de la rugosidad superficial, realizada con un microscopio de efecto túnel, será expuesto en la sección 5.

En resumen, en las láminas utilizadas, los mecanismos de scattering que supondremos dan origen a la resistividad observada son scattering

electrón-impureza, scattering electrón-fonón y scattering electrón-superficie (en la superficie expuesta de la película).

Espesor	Amplitud r.m.s. de la rugosidad superficial	Longitud de correlación lateral
$t$ [nm]	$\delta$ [nm]	$\xi$ [nm]
69	0,17	10,9
93	0,17	10,1
150	0,16	12,2
185	0,29	7,65

**Tabla 2.** Amplitud cuadrática media  $\delta$  y longitud de correlación lateral  $\xi$  de la rugosidad superficial en función del espesor  $t$  de la lámina.

### **3.- Teoría semiclásica de transporte:**

#### **Solución de la ecuación de Boltzmann mediante la aproximación de tiempo de relajación.**

En el año 1938 Fuchs elaboró un modelo en que el cambio inducido en el tensor de conductividad de una película metálica delgada, debido al scattering difuso de los portadores en las superficies rugosas, se describe con un formalismo basado en la ecuación de transporte de Boltzmann. Utilizando esta misma ecuación, Sondheimer en 1950 extendió la teoría de Fuchs y calculó el cambio en el tensor de conductividad en presencia de campo magnético cuando una o más dimensiones de la muestra son comparables al camino libre medio de los electrones en el cristal. En este formalismo, conocido como la teoría de Sondheimer (S), se supone que ambas superficies están caracterizadas por la misma rugosidad [3, 4]. Posteriormente, Lucas extendió el cálculo de Sondheimer e introdujo diferentes rugosidades para las superficies que limitan la película [9]. En 1990, Calecki generalizó la teoría de Sondheimer y caracterizó las superficies mediante parámetros medibles experimentalmente [5].

El formalismo (S) utiliza una descripción del transporte de carga en un metal que está basada en una ecuación clásica, la ecuación de transporte de Boltzmann (BTE):

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t}\right)_{CAMPOS} = \left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t}\right)_{COLISIONES} \quad (12)$$

donde  $f(\mathbf{k})$  es la función de distribución que caracteriza un gas de partículas puntuales.

Aquí el término de la derecha representa la tasa de cambio de la función de distribución debido a las colisiones que sufren los portadores, mientras que el término de la izquierda representa la tasa de cambio debido a la presencia de campos externos. La tasa de cambio debido a colisiones puede ser escrita en términos de la cantidad  $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ , que describe la probabilidad por unidad de tiempo que una partícula con momentum  $\hbar\mathbf{k}$  antes de la colisión, adquiera un momentum  $\hbar\mathbf{k}'$  después de la colisión. Así  $(\partial f(\mathbf{k}) / \partial t)_{COLISIONES}$  se puede expresar como:

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t}\right)_{COLISIONES} = \int \frac{d^3\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \{W(\mathbf{k}', \mathbf{k})f(\mathbf{k}')[1 - f(\mathbf{k})] - W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')f(\mathbf{k})[1 - f(\mathbf{k}')] \} \quad (13)$$

El termino  $[1 - f(\mathbf{k})]$  es la fracción de estado desocupados, y el producto de éste por  $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  reduce la tasa de transición de electrones a transiciones solo a estados disponibles, es decir, que da cuenta del principio de exclusión de Pauli, (Ref. [1], páginas 316-320).

La cantidad  $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  se calcula a partir del Hamiltoniano que describe la interacción de los electrones con el medio (fonones, impurezas, rugosidad superficial, etc); empleando la estadística de Fermi para describir la población de electrones y la estadística de Bose para describir la población de fonones. En algunos casos notables, como el scattering electrón-fonón acústico y electrón-impureza, el cálculo del operador de colisiones introducido por Boltzmann, puede ser representado mediante una aproximación conocida como “tiempo de relajación”. De acuerdo a esta aproximación, el efecto de las colisiones descrito por la ecuación (13), conduce a la expresión simple:

$$\left( \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right)_{COLISIONES} = - \frac{f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})} \quad (14)$$



donde  $\tau(\mathbf{k})$  es el tiempo que tarda la función de distribución perturbada por los campos,  $f(\mathbf{k})$ , en relajarse a la función de equilibrio (en ausencia de campos)  $f_0(\mathbf{k})$ .

Por su parte el término  $(\partial f(\mathbf{k}) / \partial t)_{CAMPOS}$  se calcula a partir de las ecuaciones semiclásicas de movimiento.

$$\left( \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right)_{CAMPOS} = -\frac{q}{\hbar} \left[ \mathbf{E} + \frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*} \times \mathbf{B} \right] \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \quad (15)$$

donde  $m^*$  es la masa efectiva de los portadores.

## **4.- Teoría de Calecki.**

En el año 1990, Calecki desarrolló un formalismo que permite calcular los cambios en las propiedades galvanomagnéticas de una película metálica delgada, debido a la proximidad de las superficies rugosas superior e inferior. A diferencia de Sondheimer, la teoría no incluye parámetros ajustables para describir la superficie rugosa, sino que procede de primeros principios; trabaja con un modelo gaussiano que describe la autocorrelación de alturas de la rugosidad superficial  $f(x, y) = \delta^2 \exp(-(x^2 + y^2) / \xi^2)$ , caracterizada por la amplitud r.m.s. de la rugosidad  $\delta$  y la longitud de correlación lateral  $\xi$ . Ambos valores  $(\delta, \xi)$  pueden ser obtenidos midiendo la rugosidad de la superficie de la película con un Microscopio de Efecto Túnel.

### **4.1. Transporte de carga en una película metálica delgada, utilizando el formalismo de la ecuación de Boltzmann.**

La teoría considera una estructura cuasibidimensional. En este tipo de estructura el movimiento de los portadores de carga se separa en dos componentes independientes. La primera se asocia al movimiento paralelo a

las superficies de la película, a lo largo de las direcciones  $(x,y)$ . Este movimiento corresponde al de una partícula libre, es decir, la función de onda asociada es una onda plana normalizada  $S^{-1/2}e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\rho}}$  y corresponde a una energía cinética  $\hbar^2\mathbf{k}^2 / 2m^*$ ; donde  $\boldsymbol{\rho} = (x,y)$  es la proyección del vector posición  $\mathbf{r}$  en el plano de la superficie y  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  es el vector de onda bidimensional cuantizado por las condiciones periódicas usuales;  $S$  es la superficie del plano y  $m^*$  es la masa efectiva de los portadores, es decir partículas deslocalizadas sometidas a la presencia un potencial cristalino.

La segunda componente del movimiento es a lo largo del eje  $z$  (perpendicular a las superficies), y está determinada por un potencial unidimensional  $V(z)$ , que confina a los portadores entre las dos superficies paralelas. Las funciones de onda asociadas y las energías son, respectivamente, etiquetadas por  $\zeta_\nu(z)$  y  $\epsilon_\nu$  ( $\nu = 1, 2, \dots, \nu_{\max}$ ).

El hamiltoniano de los portadores de carga en esta estructura cuasibidimensional, queda expresado por:

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}_{\parallel}^2}{2m^*} + \frac{p_z^2}{2m^*} + V(z) \quad (16)$$

Para estados estacionarios se tiene que:

$$H_0 |v\mathbf{k}\rangle = \varepsilon_{v\mathbf{k}} |v\mathbf{k}\rangle \quad (17)$$

con

$$\langle r | v\mathbf{k}\rangle = \psi_{v\mathbf{k}}(r) = S^{-1/2} e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\rho}} \zeta_v(z) \quad (18)$$

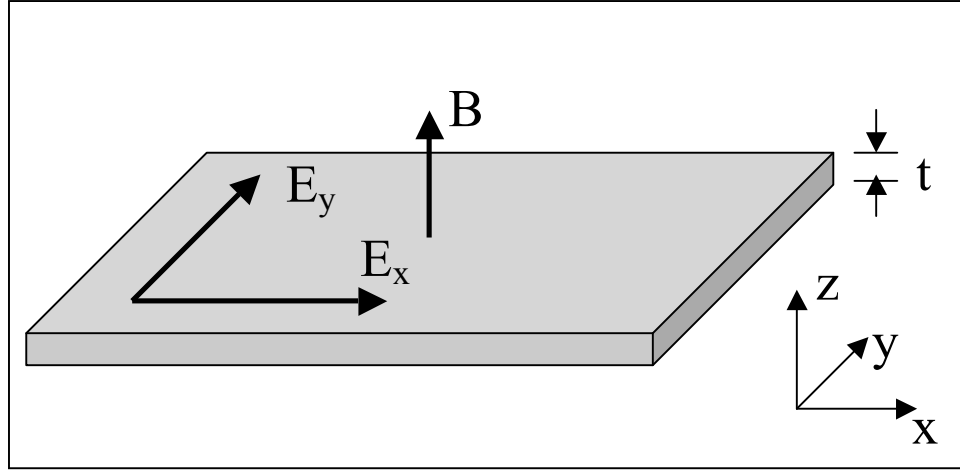
y

$$\varepsilon_{v\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} + \varepsilon_v \quad (19)$$

La ley de dispersión  $\varepsilon_{v\mathbf{k}}$  define la subbanda  $v$ .

Cuando los portadores se encuentran en equilibrio térmico a temperatura  $T$ , el número promedio de portadores en el estado  $|v\mathbf{k}\rangle$  viene dado por la función de distribución de Fermi-Dirac  $f_0(\varepsilon_{v\mathbf{k}}) = [1 + \exp(\varepsilon_{v\mathbf{k}} - \varepsilon_F) / k_B T]^{-1}$ , donde  $\varepsilon_F$  corresponde a la energía de Fermi.

Al someter la película a un campo eléctrico  $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$  y a un campo magnético  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ , como se muestra en la figura 4, la función de distribución de los portadores de carga  $f_v(\mathbf{k})$  en el estado  $|v\mathbf{k}\rangle$  difiere de  $f_0(\varepsilon_{v\mathbf{k}})$ .



**Figura 4.** Esquema de los campos eléctrico  $\vec{E} = (E_x, E_y, 0)$  y magnético  $\vec{B} = (0, 0, B)$  aplicados sobre la lámina de espesor  $t$ .

El aumento en energía que experimentan los portadores entre dos colisiones sucesivas debido a la presencia de estos campos, es pequeño comparado con la energía que inicialmente poseen ( $\varepsilon_F$ ). La nueva distribución  $f_v(\mathbf{k})$  en presencia de los campos externos, se logra cuando:

$$\left( \frac{\partial f_v(\mathbf{k})}{\partial t} \right)_{\text{CAMPOS}} = \left( \frac{\partial f_v(\mathbf{k})}{\partial t} \right)_{\text{COLISIONES}} \quad (20)$$

Al desarrollar esta última ecuación encontramos que  $f_v(\mathbf{k})$  obedece el siguiente sistema de ecuaciones acopladas semiclásicas de Boltzmann:

$$-\frac{q}{\hbar} \left[ \mathbf{E} + \frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*} \times \mathbf{B} \right] \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_v(\mathbf{k}) = \sum_{v'=1}^{v_{\max}} \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ W_{v',v}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{v'}(\mathbf{k}') [1 - f_v(\mathbf{k})] - W_{v,v'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_v(\mathbf{k}) [1 - f_{v'}(\mathbf{k}')] \right\} \quad (21)$$

Es importante mencionar que el lado derecho de la ecuación (21), correspondiente al término de colisiones, se calcula en forma explícita a partir de  $W_{v,v'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ , que corresponde a la probabilidad de transición por unidad de tiempo de que un portador desde un estado  $|v\mathbf{k}\rangle$  de la subbanda  $v$  con momentum  $\hbar\mathbf{k}$  pase al estado  $|v'\mathbf{k}'\rangle$  de la subbanda  $v'$  con momentum  $\hbar\mathbf{k}'$ . El término  $W_{v,v'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  se calcula utilizando la regla de oro de Fermi y consecuentemente depende del hamiltoniano de interacción entre los electrones y los diferentes mecanismos de scattering, ya sea scattering con impurezas, fonones o rugosidad superficial. En una interacción elástica se tiene:

$$W_{v,v'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle v\mathbf{k} | H_i | v'\mathbf{k}' \rangle \right|^2 \delta(\epsilon_{v\mathbf{k}} - \epsilon_{v'\mathbf{k}'}) \quad (22)$$

El scattering electrón-superficie rugosa mezcla los estados correspondientes a diferentes subbandas. En consecuencia, la ecuación de Boltzmann (ec. (21)) da origen a un conjunto de  $v_{MAX}$  ecuaciones acopladas. Como se observa en la ecuación (21), el efecto de las colisiones no resulta proporcional a  $f_v(\mathbf{k}) - f_0(\epsilon_{v\mathbf{k}})$ , por tanto la igualdad que define el tiempo de relajación (ec.(14)) no se satisface. En consecuencia, no existe un

tiempo de relajación asociado a la colisión electrón-superficie rugosa, a menos que  $v_{MAX} = 1$ .

Para resolver el sistema de  $v_{MAX}$  ecuaciones acopladas, es conveniente definir la matriz tiempo de relajación  $\underline{T}(\varepsilon)$ , cuyos elementos son  $T(\varepsilon)_{vv'}$ ; que posee unidades de tiempo, pero que no es un escalar. Esta matriz tiempo de relajación se define por:

$$\underline{T}(\varepsilon) = \underline{C}^{-1}(\varepsilon)\underline{F}(\varepsilon) \quad (23)$$

donde

$$C_{vv'}(\varepsilon) = \delta_{v,v'} \sum_{\mu=1}^{v_{max}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} k^2 W_{v,\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mu\mathbf{k}'}) - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' W_{v,v'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta(\varepsilon - \varepsilon_{v\mathbf{k}}) \quad (24)$$

y

$$F_{vv'}(\varepsilon) = \delta_{v,v'} \sum_{\mathbf{k}} k^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_{v\mathbf{k}}) \quad (25)$$

Se buscará una solución para la ecuación de Boltzmann (ec. (21)) en la forma

$$f_v(\mathbf{k}) = f_0(\varepsilon_{v\mathbf{k}}) + \phi_v(\mathbf{k}) \quad (26)$$

donde  $\phi_v(\mathbf{k})$  es una función lineal en el campo eléctrico  $E$ .

Conviene introducir un nuevo conjunto de funciones  $g_v(\mathbf{k})$  cuya relación con  $\phi_v(\mathbf{k})$  está dada por

$$\phi_v(\mathbf{k}) = \frac{q\hbar}{m^*} \frac{\partial f_0(\varepsilon_{v\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{v\mathbf{k}}} kE g_v(\mathbf{k}) \quad (27)$$

Al resolver el sistema de ecuaciones acopladas que describen el comportamiento del conjunto de funciones  $\phi_v(\mathbf{k})$ , se encuentra, a primer orden en  $E$ , que la función de distribución de los electrones perturbada por los campos  $f_v(\mathbf{k})$  en las diferentes subbandas  $v$  esta dada por [5]:

$$f_v(\mathbf{k}) = f_0(\varepsilon_{v\mathbf{k}}) + qE \frac{\hbar k}{2m^*} \frac{\partial f_0(\varepsilon_{v\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{v\mathbf{k}}} \sum_{v'} (e^{i\theta} \{ [1 + i\omega_c \underline{T}(\varepsilon_{v\mathbf{k}})]^{-1} \underline{T}(\varepsilon_{v\mathbf{k}}) \}_{vv'} + \text{c.c.}) \quad (28)$$

donde  $\theta$  es el ángulo entre  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{k}$ , mientras que  $\omega_c = qB/m^*$  es la frecuencia ciclotrónica.

Es importante recalcar que esta expresión final para  $f_v(\mathbf{k})$  es válida sólo si los campos eléctrico y magnético son lo suficientemente débiles (fenómenos lineales en  $E$  y en  $B$ ) y si las colisiones de los electrones son elásticas ( $\varepsilon_{v\mathbf{k}} = \varepsilon_{v\mathbf{k}'}$ ).



## 4.2. Coeficientes de transporte.

La expresión que describe la densidad de corriente paralela a las superficies de la estructura cuasibidimensional es:

$$\mathbf{j} = -\frac{2q}{St} \sum_{v=1}^{v_{\max}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*} (f_v(\mathbf{k}) - f_0(\epsilon_{v\mathbf{k}})) \quad (29)$$

El factor 2 es debido al spin del electrón.

Si se separa  $\mathbf{j}$  en sus dos componentes  $j_{\perp}$  y  $j_{\parallel}$ , respectivamente, perpendicular y paralela al campo eléctrico  $\mathbf{E}$ , y luego se reemplaza la expresión para  $f_v(\mathbf{k})$  contenida en la ecuación (28), se tiene

$$j_{\parallel} = E \sum_{\nu} \frac{n_{\nu} q^2}{m^*} \sum_{\nu'} \left\langle \{ [1 + \omega_c^2 T^2(\epsilon)]^{-1} T(\epsilon) \}_{\nu\nu'} \right\rangle_{\nu} \quad (30)$$

y

$$j_{\perp} = E \omega_c \sum_{\nu} \frac{n_{\nu} q^2}{m^*} \sum_{\nu'} \left\langle \{ [1 + \omega_c^2 T^2(\epsilon)]^{-1} T^2(\epsilon) \}_{\nu\nu'} \right\rangle_{\nu} \quad (31)$$

donde  $n_{\nu}$  es la densidad de electrones en la subbanda  $\nu$  y  $\langle \psi(\epsilon) \rangle_{\nu}$  denota el promedio de la función  $\psi(\epsilon)$  sobre todas las energías de la subbanda  $\nu$  y está definido por:

$$\langle \psi(\varepsilon) \rangle_v = \frac{\int_0^\infty \psi(\varepsilon) N_v(\varepsilon) (\varepsilon - \varepsilon_v) \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon}{\int_0^\infty N_v(\varepsilon) (\varepsilon - \varepsilon_v) \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon} \quad (32)$$

donde  $N_v(\varepsilon)$  es la densidad de estados en la subbanda  $v$  y esta definida por:

$$N_v(\varepsilon) = \frac{Sm^*}{\pi\hbar^2} Y(\varepsilon - \varepsilon_v) \quad (33)$$

donde  $Y(\varepsilon)$  es la función escalón.

La densidad de corriente se puede escribir como

$$\mathbf{j} = \sigma_0 \mathbf{E} + \sigma_1(B) \mathbf{u} \times \mathbf{E} + \sigma_2(B) \mathbf{u} \times (\mathbf{u} \times \mathbf{E}) \quad (34)$$

con  $\mathbf{u}$  vector unitario perpendicular a las superficies y donde  $\sigma_0$  es la conductividad habitual (en ausencia de campo magnético), mientras que  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  son respectivamente las partes de la conductividad impar y par respecto a una inversión de  $\mathbf{B}$ .

Se deduce de las ecuaciones de  $j_{\parallel}$  y  $j_{\perp}$  que las conductividades quedan determinadas por las siguientes expresiones:

$$\sigma_0 = \sum_v \frac{n_v q^2}{m^*} \sum_{v'} \langle (T(\varepsilon))_{v,v'} \rangle_v \quad (35)$$

$$\sigma_1 = \omega_C \sum_{\nu} \frac{n_{\nu} q^2}{m^*} \sum_{\nu'} \left\langle \left( [1 + \omega_C^2 \underline{T}^2(\boldsymbol{\varepsilon})]^{-1} \underline{T}^2(\boldsymbol{\varepsilon}) \right)_{\nu, \nu'} \right\rangle_{\nu} \quad (36)$$

$$\sigma_2 = \omega_C^2 \sum_{\nu} \frac{n_{\nu} q^2}{m^*} \sum_{\nu'} \left\langle \left( [1 + \omega_C^2 \underline{T}^2(\boldsymbol{\varepsilon})]^{-1} \underline{T}^3(\boldsymbol{\varepsilon}) \right)_{\nu, \nu'} \right\rangle_{\nu} \quad (37)$$

A su vez la resistividad  $\rho_0$ , la tangente de Hall  $\tan(\theta)$  y la magnetorresistencia transversal  $\Delta\rho/\rho_0$ , quedan determinadas por las conductividades  $\sigma_0$ ,  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  a través de las siguientes expresiones (Ref. 5, ec. (37)):

$$\rho_0 = (\sigma_0)^{-1} \quad (38)$$

$$\tan(\theta) = \left( \frac{E_y}{E_x} \right)_{J_y=0} = \frac{\sigma_1}{\sigma_2 - \sigma_0} \quad (39)$$

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \frac{(\sigma_0 - \sigma_2)\sigma_0}{(\sigma_0 - \sigma_2)^2 + \sigma_1^2} - 1 \quad (40)$$

Para llevar a cabo la comparación entre teoría y experimento es necesario evaluar la matriz  $\underline{T}(\boldsymbol{\varepsilon})$  considerando cada mecanismo de scattering.

### 4.3. Rugosidad superficial.

Debido a que los coeficientes de transporte dependen explícitamente de la matriz  $\underline{T}(\varepsilon)$ , es necesario encontrar una expresión para ésta. Lo anterior se consigue al evaluar la probabilidad de transición por unidad de tiempo  $W_{v,v'}(\mathbf{k},\mathbf{k}')$  y, más precisamente, el elemento de matriz  $\left| \langle vk | H_i | v'k' \rangle \right|^2$ , donde  $H_i$  es el Hamiltoniano que describe la interacción de los electrones con cada uno de los mecanismos de scattering. En esta sección se busca un modelo para el hamiltoniano de interacción  $H_i$  que describa el scattering electrón- superficie rugosa, para calcularlo se utilizará el método desarrollado en la sección 4.5.

Si se considera que las superficies idealmente planas se encuentran separadas por una distancia  $t$  y perpendiculares a la dirección  $\hat{z}$ , las ecuaciones que describen dicha superficies serán  $z = \pm t/2$ . También se puede considerar que estas superficies crean dos barreras de potencial de altura  $V_{\pm}$ . El Hamiltoniano que describe la estructura cuadibidimensional está descrito por

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + V_+ Y\left(z - \frac{t}{2}\right) + V_- Y\left(-\left(z + \frac{t}{2}\right)\right) \quad (41)$$

donde  $Y(z)$  es la función escalón.

Sin embargo, las superficies no son planos, sino superficies rugosas, donde la altura de la superficie está descrita por

$$z = \pm \frac{t}{2} + f_{\pm}(\rho) \quad (42)$$

aquí, la función  $f_+(\rho)$  describe la rugosidad de la superficie superior y  $f_-(\rho)$ , la inferior. El hamiltoniano  $H$  que describe el gas electrónico en presencia de superficies rugosas es

$$H = V_+ Y\left(z - \frac{t}{2} - f_+(\rho)\right) + V_- Y\left(-\left(z + \frac{t}{2} - f_-(\rho)\right)\right) + \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} \quad (43)$$

Si se considera el efecto de la rugosidad superficial como una perturbación sobre el gas electrónico confinado entre estos dos planos paralelos, se tiene que  $H = H_0 + H_i$ , luego el hamiltoniano  $H_i$  correspondiente a esta perturbación, está descrito por

$$H_i = V_+ \left[ Y\left(z - \frac{t}{2} - f_+(\rho)\right) - Y\left(z - \frac{t}{2}\right) \right] + V_- \left[ Y\left(-\left(z + \frac{t}{2} - f_-(\rho)\right)\right) - Y\left(-\left(z + \frac{t}{2}\right)\right) \right] \quad (44)$$

Si se toma en cuenta que la rugosidad es mucho menor que el espesor de la película, es decir  $f_{\pm}(\rho) \ll t$ , (en la escala de longitud determinada por

la longitud de onda de Fermi) podemos expandir  $H_i$  a primer orden en  $f_{\pm}(\rho)/t$ , con lo cual

$$H_i \simeq -V_+ f_+(\rho) \delta\left(z - \frac{t}{2}\right) - V_- f_-(\rho) \delta\left(z + \frac{t}{2}\right) \quad (45)$$

En este modelo, la interacción electrón-superficie rugosa queda descrita como una perturbación fuertemente localizada en la superficie. Esto permite calcular el elemento de matriz que describe la interacción de un electrón con las superficies rugosas, obteniendo:

$$\begin{aligned} \left| \langle \mathbf{v}\mathbf{k} | H_i | \mathbf{v}'\mathbf{k}' \rangle \right|^2 &= \frac{1}{S} \times \\ \sum_{\eta=\pm} \sum_{\eta'=\pm} V_{\eta} V_{\eta'} \zeta_{\nu}^* \left[ \eta \frac{t}{2} \right] \zeta_{\nu'} \left[ \eta \frac{t}{2} \right] \zeta_{\nu} \left[ \eta' \frac{t}{2} \right] \zeta_{\nu'}^* \left[ \eta' \frac{t}{2} \right] &\frac{1}{S} \int d^2 \rho \int d^2 \rho' e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) \cdot (\rho-\rho')} f_{\eta}(\rho) f_{\eta'}(\rho') \end{aligned} \quad (46)$$

pero

$$\frac{1}{S} \int d^2 \rho \int d^2 \rho' e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) \cdot (\rho-\rho')} f_{\eta}(\rho) f_{\eta'}(\rho') = \int d^2 \rho e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) \cdot \rho} \langle f_{\eta} f_{\eta'} \rangle \quad (47)$$

donde  $\langle f_{\eta} f_{\eta'} \rangle$  es la función de correlación entre dos funciones cada una de las cuales describe la rugosidad superficial

$$\langle f_{\eta} f_{\eta'} \rangle = \frac{1}{S} \int_S f_{\eta}(\rho') f_{\eta'}(\rho + \rho') d^2 \rho' \quad (48)$$

y el símbolo  $\langle \rangle$  denota un promedio estadístico sobre las superficies.

Además es razonable asumir que las rugosidades de una y otra superficie no están correlacionadas, luego se tiene que

$$\langle f_\eta f_{\eta'} \rangle = \delta_{\eta, \eta'} \langle f_\eta f_\eta \rangle \quad (49)$$

en consecuencia el elemento de matriz queda determinado por

$$\left| \langle \mathbf{v}\mathbf{k} | H_i | \mathbf{v}'\mathbf{k}' \rangle \right|^2 = \frac{1}{S} \sum_{\eta=\pm} A_{\mathbf{v}\mathbf{v}', \eta}(t) F(\langle f_\eta f_\eta \rangle) \quad (50)$$

Se remarca que  $\lim_{S \rightarrow \infty} F(\langle f_\eta f_\eta \rangle)$  corresponde a la transformada de Fourier bidimensional de la función de autocorrelación de alturas que describe la rugosidad de la muestra, y en el límite  $V \rightarrow \infty$ ,  $A_{\mathbf{v}\mathbf{v}', \eta}(t)$  queda expresado por

$$A_{\mathbf{v}\mathbf{v}', \eta}(t) = \left( \frac{\hbar^2 \pi^2}{m^* t^3} \right)^2 v^2 v'^2 \quad (51)$$

Si se supone un perfil gaussiano para describir la función de autocorrelación

$$\langle f_\eta f_\eta \rangle = \delta_\eta^2 e^{-\frac{x^2 + y^2}{\xi_\eta^2}} \quad (52)$$

y en virtud de la regla de oro de Fermi, se encuentra una expresión algebraica para la probabilidad de transición  $W_{v,v'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ . Al reemplazar la probabilidad de transición en  $C(\varepsilon)_{vv'}$  (ec. (24)) y considerando  $\varepsilon = \varepsilon_F$ , la energía de Fermi (la energía de los electrones que participan en la conducción), se obtiene que

$$C(\varepsilon_F)_{vv'} = \frac{S\pi^2}{4\hbar t^6} \sum_{\eta=\pm} \delta_{\eta}^2 \xi_{\eta}^2 \left[ \delta_{v,v'} v^2 k_v^2 \sum_{\mu=1}^{v_F} \mu^2 I_{\eta,v\mu} - k_v k_{v'} v^2 v'^2 J_{\eta,vv'} \right] \quad (53)$$

donde  $k_v = \sqrt{(k_F^2 - (\pi v / t)^2)}$  y  $v_F$  es el número de subbandas ocupadas, el cual se calcula a partir de:

$$v_F = \text{Int}[\{\varepsilon_F / (\hbar^2 \pi^2 / 2m^* t^2)\}^{\frac{1}{2}}] \quad (54)$$

Además los símbolos  $I_{\eta,v\mu}$  y  $J_{\eta,vv'}$  son las integrales de la transformada de Fourier  $F(\mathbf{k})$  de la función de autocorrelación, que quedan determinados por:

$$I_{\eta,v\mu} = \int_0^{2\pi} F(\xi_{\eta} \sqrt{k_v^2 + k_{\mu}^2 - 2k_v k_{\mu} \cos \alpha}) d\alpha = 2\pi^2 e^{-\frac{1}{4}\xi_{\eta}^2 (k_v^2 + k_{\mu}^2)} I_0\left(\frac{1}{2}\xi_{\eta}^2 k_v k_{\mu}\right) \quad (55)$$

$$J_{\eta,v\mu} = \int_0^{2\pi} F(\xi_{\eta} \sqrt{k_v^2 + k_{\mu}^2 - 2k_v k_{\mu} \cos \alpha}) \cos \alpha d\alpha = 2\pi^2 e^{-\frac{1}{4}\xi_{\eta}^2 (k_v^2 + k_{\mu}^2)} I_1\left(\frac{1}{2}\xi_{\eta}^2 k_v k_{\mu}\right) \quad (56)$$



en las ecuaciones (55) y (56)  $I_0(x)$  e  $I_1(x)$  denotan dos de las funciones de Bessel modificadas, regulares en el origen [10].

La matriz  $\underline{C}(\varepsilon_F)$  no es diagonal y puesto que  $\underline{T}(\varepsilon) = \underline{C}^{-1}(\varepsilon)\underline{F}(\varepsilon)$ , es necesario encontrar su inversa, utilizando técnicas numéricas, para poder realizar el cálculo explícito de los coeficientes de transporte.

No obstante, existe un caso particular en el cual  $\underline{C}(\varepsilon_F)$  es diagonal. Si suponemos  $\xi_\eta k_F \ll 1$ ,  $J_{\eta,\nu\mu} \rightarrow 0$ , con lo cual se elimina el término no diagonal de  $\underline{C}(\varepsilon_F)$ . En este caso, de la inversión algebraica de la matriz, se obtiene que

$$T_{\nu\nu'}(\varepsilon_F) = \delta_{\nu,\nu'} \frac{m^*}{\pi^5 \hbar} \frac{6t^6}{v_F(v_F + 1)(2v_F + 1)} \frac{1}{\delta^2 \xi^2 v^2} = \tau_\nu(\varepsilon_F) \quad (57)$$

donde  $\delta^2 \xi^2 = \delta_+^2 \xi_+^2 + \delta_-^2 \xi_-^2$ .

Por lo tanto en el límite  $\xi_\eta k_F \ll 1$ , la matriz  $\underline{T}(\varepsilon_F)$  es diagonal. En este caso, el scattering electrón-superficie rugosa causa que la función de distribución  $f_\nu(\mathbf{k})$  relaje hacia la función de distribución de Fermi-Dirac  $f_0(\varepsilon_{\nu\mathbf{k}})$  con un “tiempo de relajación”  $\tau_\nu(\varepsilon_F)$  asociado a cada subbanda  $\nu$ .

En lo sucesivo se denominará CK1 al formalismo de Calecki que proporciona una matriz  $\underline{C}(\varepsilon_F)$  diagonal (aproximación  $\xi_\eta k_F \ll 1$ ) y CK2 al formalismo de Calecki que proporciona una matriz  $\underline{C}(\varepsilon_F)$  no diagonal.

#### 4.4. Impurezas y fonones.

Con el objeto de comparar teoría y experimento, es necesario incluir en el cálculo de los elemento de matriz  $C(\varepsilon_F)_{\nu\nu'}$ , el efecto de los otros mecanismos de scattering presentes en las láminas delgadas.

En el caso de scattering electrón-impurezas y electrón-fonón, los elementos de matriz  $T(\varepsilon)_{\nu,\nu'}$ , se pueden considerar cero a menos que  $\nu = \nu'$ . La razón es que el tiempo de relajación, asociado a mecanismos de scattering que caracterizan el cristal, se puede considerar en una primera aproximación, independiente del espesor de la muestra (por lo tanto, independiente de  $\nu$ ). En consecuencia, el valor de los elementos de matriz de  $T(\varepsilon)_{\nu,\nu}$  para cada subbanda es el mismo e independiente de  $\nu$  y  $\nu'$ . Esto permite encontrar un tiempo de relajación para el scattering electrón-impurezas y un tiempo de relajación para el scattering electrón-fonón independiente del número de banda  $\nu$ . Consecuentemente, la matriz  $\underline{T}(\varepsilon_F)$

asociada a cada uno de estos mecanismos de scattering, se puede considerar diagonal.

De esta manera, la matriz  $\underline{T}(\varepsilon_F)$  quedará definida por  $\tau_{IMP}I$  en el caso de impurezas y por  $\tau_{PHON}I$  en el caso de fonones, donde  $I$  es la matriz identidad.

En base a la regla de Mathiessen se define  $\tau_{BULK}$ , que representa los mecanismos de scattering en el “bulk” y satisface

$$\frac{1}{\tau_{BULK}} = \left( \frac{1}{\tau_{IMP}} + \frac{1}{\tau_{PHON}} \right) \quad (58)$$

Recordando que la matriz  $\underline{T}(\varepsilon)$  se definió por  $\underline{C}(\varepsilon) = \underline{T}^{-1}(\varepsilon)\underline{F}(\varepsilon)$ . La matriz  $\underline{F}(\varepsilon)$  es diagonal e independiente del mecanismo de scattering. Por tanto, al considerar dos mecanismos de scattering actuando simultánea e independientemente, se tiene

$$\underline{C}_{1+2}(\varepsilon) = \underline{C}_1(\varepsilon) + \underline{C}_2(\varepsilon) = (\underline{T}_1^{-1}(\varepsilon) + \underline{T}_2^{-1}(\varepsilon))\underline{F}(\varepsilon) \quad (59)$$

Si uno de los mecanismos de scattering describe la interacción de los electrones con el “bulk” y el otro, con la rugosidad superficial, tendremos que

$$\underline{C}_{TOT}(\varepsilon) = \underline{C}_{1+2}(\varepsilon) = \underline{F}(\varepsilon)\tau_{BULK}^{-1}(\varepsilon) + \underline{C}_{SURF}(\varepsilon) \quad (60)$$

donde el término  $\underline{C}_{SURF}(\epsilon)$  está determinado por la ecuación (53).

Esta última expresión proporciona las condiciones necesarias para realizar la comparación entre teoría y experimento en el caso en que  $\underline{T}(\epsilon)$  no es diagonal [11]. En el caso en que  $\underline{T}(\epsilon)$  es diagonal (aproximación  $\xi_{\eta} k_F \ll 1$ ) la expresión

$$(\tau_{TOT})_v = (1/\tau_{BULK} + 1/\tau_v(\epsilon_F))^{-1} \quad (61)$$

proporciona dichas condiciones, donde el término  $\tau_v(\epsilon_F)$  esta dado por la ecuación (57).

#### 4.5. Método numérico.

Los coeficientes de transporte según el formalismo de Calecki, quedan determinados por las expresiones (35)-(40). En particular, se tiene

$$\sigma_0 = \sum_v \frac{n_v q^2}{m} \sum_{v'} \left\langle \left( \underline{\underline{T}}_{\underline{X}_0}(\epsilon) \right)_{v,v'} \right\rangle_v \quad (62)$$

y

$$\sigma_1 = \omega_C \sum_v \frac{n_v q^2}{m} \sum_{v'} \left\langle \left( \underline{\underline{X}}_1 \left[ 1 + \omega_C^2 \underline{T}^2(\epsilon) \right]^{-1} \underline{T}^2(\epsilon) \right)_{v,v'} \right\rangle_v \quad (63)$$

donde  $\underline{T}(\varepsilon) = \underline{C}^{-1}(\varepsilon)\underline{F}(\varepsilon)$ , con  $\underline{C}(\varepsilon)$  no diagonal. Por lo tanto, es necesario invertir numéricamente  $\underline{C}(\varepsilon)$  y  $(1 + \omega_c^2 \underline{T}^2(\varepsilon))$ , ya que además  $v_{MAX} \sim 10^2$ .

Sin embargo es más rápido, y reduce considerablemente los errores numéricos, el descomponer la matriz (que se pretende invertir) en su forma LU y posteriormente resolver el sistema de ecuaciones lineales  $\underline{C}(\varepsilon)\underline{X}_0 = \underline{F}(\varepsilon)$  y  $(1 + \omega_c^2 \underline{T}^2(\varepsilon))\underline{X}_1 = \underline{T}^2(\varepsilon)$ , con lo cual se evita el cálculo explícito de la matriz inversa.

La descomposición LU consiste en escribir una cierta matriz  $A$  como

$$A = L \cdot U \quad (64)$$

donde  $L$  es una matriz triangular inferior (lower triangular) y  $U$  es una matriz triangular superior (upper triangular).

Así el sistema de ecuaciones lineales  $A \cdot x = b$  se puede resolver si se considera que

$$A \cdot x = (L \cdot U) \cdot x = L \cdot (U \cdot x) = b \quad (65)$$

luego encontrar el vector columna  $x'$  al resolver el sistema

$$L \cdot x' = b \quad (66)$$

y finalmente encontrar  $x$  al resolver el sistema

$$U \cdot x = x' \quad (67)$$

este proceso se debe realizar para cada vector columna  $b$  de la matrices  $\underline{F}(\epsilon)$  y  $\underline{T}^2(\epsilon)$ .

La ventaja de este método es que resulta trivial resolver un sistema de ecuaciones triangular, para más detalles sobre este método véase la referencia [12].

De igual forma se puede resolver el sistema de ecuaciones  $CC^{-1} = I$  y  $(1 + \omega_c^2 \underline{T}^2)(1 + \omega_c^2 \underline{T}^2)^{-1} = I$ , con lo que se obtienen las matrices inversas. Este proceso utiliza las mismas subrutinas del programa y sólo añade una matriz identidad.

Por lo tanto para verificar si la descomposición LU del programa y la resolución del sistema de ecuaciones lineales era correcto, se procedió a verificar que el producto de la matriz por su inversa conducía efectivamente a la matriz identidad para cada temperatura y para cada campo magnético, en las 4 muestras.

En general se obtuvo para cada supuesta matriz identidad que, 1 menos el promedio de los elementos de la diagonal era menor a  $10^{-15}$ , y que la suma de los valores absolutos de todos los elementos no diagonales era menor a  $10^{-19}$ , lo que verifica el correcto funcionamiento del programa.

## **5.- Determinación de los parámetros $\xi$ y $\delta$ propuestos por Calecki a partir de la medición de rugosidad superficial.**

Según lo observado en la sección 4.3, el elemento de matriz del hamiltoniano que describe la interacción de los electrones con la superficie depende del término

$$\langle f_\eta f_\eta \rangle = \frac{1}{S} \int_S f_\eta(\rho') f_\eta(\rho + \rho') d^2 \rho' \quad (68)$$

que corresponde a la autocorrelación de la función  $f$  que describe la rugosidad de la superficie. Calecki caracteriza la autocorrelación por un perfil gaussiano (ec. (52))

$$\langle f_\eta f_\eta \rangle = \delta_\eta^2 e^{-\frac{x^2 + y^2}{\xi_\eta^2}}$$

donde  $\delta$  corresponde a la amplitud cuadrática media de la gaussiana y  $\xi$  corresponde a la longitud de correlación lateral. El procedimiento generado para determinar los parámetros  $\xi$  y  $\delta$ , que caracterizan la rugosidad en la teoría de transporte de Calecki, es el siguiente.

## **5.1.- Medición de la rugosidad superficial.**

En primer lugar se debe medir la rugosidad de las láminas. La medición de la rugosidad superficial de cada una de las láminas es realizada mediante un microscopio de efecto túnel. El resultado de la medición es una matriz, donde cada elemento de la matriz corresponde a una medición de altura. Además, la dimensión de la matriz es equivalente al área de escaneo seleccionada.

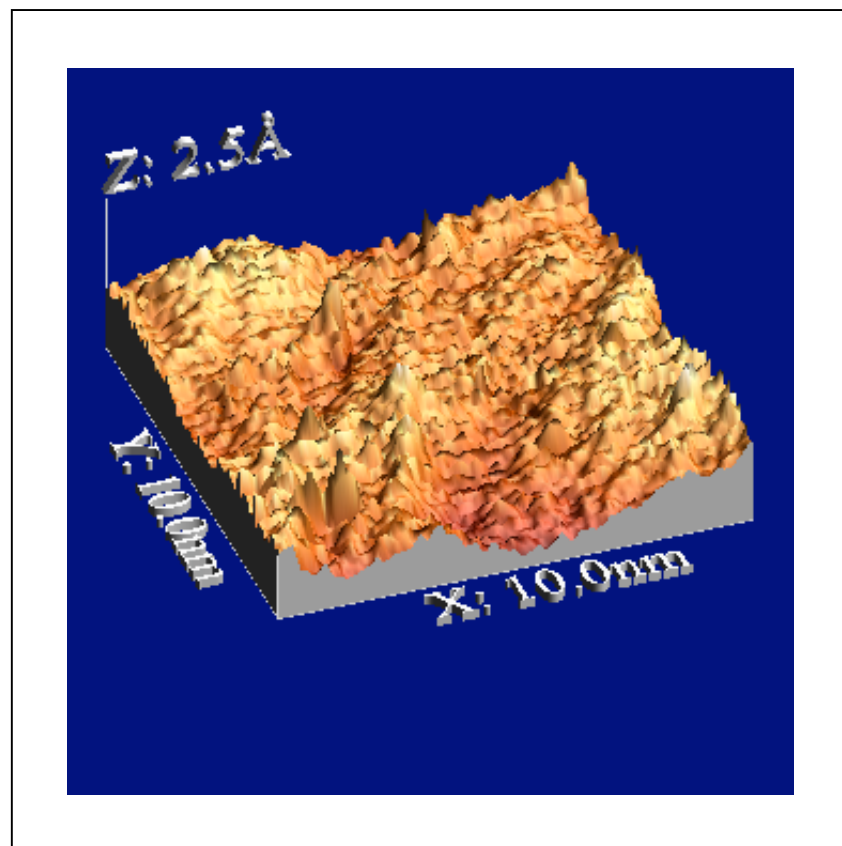
En específico se utilizó una matriz de dimensión de  $256 \times 256$ . Con respecto al área de escaneo utilizada, es necesario mencionar que la medición debe ser realizada en la escala determinada por la longitud de onda del electrón, ya que es posible suponer que éste parámetro proporciona el orden de magnitud de lo que “ve” el electrón cuando interactúa con la superficie.

Los electrones que participan en la conducción en el oro tienen una longitud de onda de  $0.52 \text{ [nm]}$  (longitud de onda de Fermi para el oro) por lo que se determinó que el área de escaneo para la medición de rugosidad es de  $10 \text{ [nm]} \times 10 \text{ [nm]}$



Nótese que las mediciones de rugosidad realizadas para cada lámina no incluyen la presencia de bordes de grano, ya que este tipo de defectos, en la red cristalina, no se contemplan en la teoría de Calecki.

Al asignar un código de colores a las alturas medidas, las matrices pueden ser desplegadas como imágenes (Fig. 5).



**Figura 5.** *Medición de rugosidad superficial desplegada como imagen 3D.* La imagen de rugosidad superficial desplegada se obtuvo en escala de  $10[\text{nm}] \times 10[\text{nm}]$ .

## 5.2.- Autocorrelación de alturas.

En segundo lugar se debe determinar la autocorrelación de las alturas. Como el resultado de la medición de rugosidad superficial es una matriz que contiene las alturas asociadas a cada píxel de la imagen, la autocorrelación de la rugosidad superficial se calculó utilizando la autocorrelación discreta (DAC), que está determinada por la siguiente expresión.

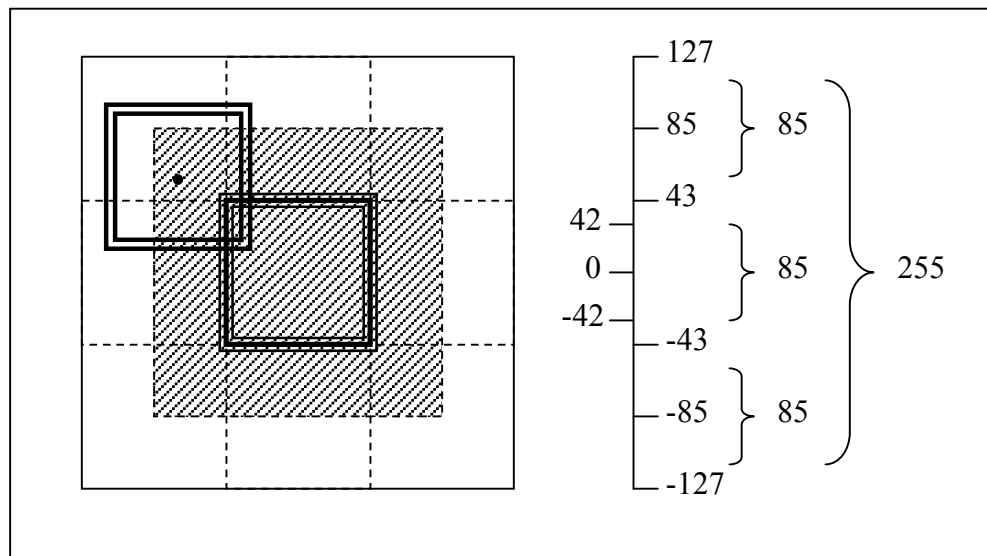
$$DAC_{i,j} = \frac{1}{N_x N_y} \left( \sum_{k=N_{0x}}^{N_x} \sum_{l=N_{0y}}^{N_y} f_{k,l} f_{i+k,j+l} \right) \quad (69)$$

Es importante definir los rangos para los índices (k,l) e (i,j). Por ejemplo, si los índices (k,l) e (i,j) variaran entre (-128, 128), se estaría suponiendo implícitamente condiciones de borde periódicas para la matriz que contiene la información de la rugosidad superficial, sin embargo no se observa esta periodicidad en la rugosidad de las láminas. El método generado para calcular la autocorrelación discreta se denominó Cat y es detallado en 5.2.1.

### 5.2.1. Método Cat ( $N_x = N_y = 42$ ; $N_{0x} = N_{0y} = -42$ ).

Bajo este método los índices (k,l) varían entre (-42,42), mientras que los índices (i,j) varían entre (-85,85). El método se

visualiza en la figura 6 y consiste en multiplicar punto a punto las alturas del cuadrado fijo (cuadrado con triple línea) por las alturas del cuadrado móvil (cuadrado con doble línea) y luego sumar todos los valores. Como resultado, se obtiene el valor de la función de autocorrelación en el centro del cuadrado con doble línea (salvo un factor de normalización). El cuadrado móvil recorre toda la superficie medida, resultando una matriz de autocorrelación de dimensión 171x171 (área achurada).



**Figura 6.** Método para calcular la función de autocorrelación.

La ventaja de este método es que no supone condiciones de borde periódicas para la matriz que contiene la información de la rugosidad superficial de la lámina.

### **5.3.- Promedio de la autocorrelación de 30 imágenes.**

En tercer lugar se debe promediar la autocorrelación de 30 imágenes.

La necesidad de calcular este promedio surge del hecho de que el electrón al desplazarse por la muestra interactúa repetidas veces con la rugosidad local. Por tanto, la teoría de Calecki incorpora el promedio de la autocorrelación de alturas de la superficie.

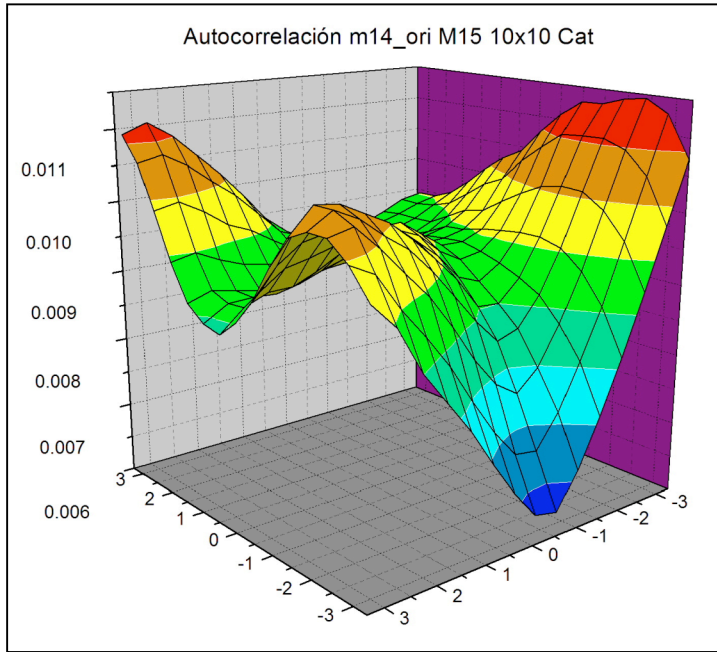
### **5.4.- Ajuste de un perfil gaussiano al promedio de las autocorrelaciones.**

Por último se debe ajustar un perfil gaussiano al promedio de las autocorrelaciones.

Calecki supone que la autocorrelación de la rugosidad superficial de la muestra se ajusta a un perfil gaussiano (ec. (52)), pero al observar la autocorrelación de una imagen de rugosidad superficial (Fig. 7) es claro que esta suposición es errónea. Sin embargo, al considerar el promedio de las autocorrelaciones (Fig. 8) la suposición cobra validez. Cabe señalar que ésta constituye la primera verificación experimental de la suposición de que el promedio de alturas exhibe, efectivamente, un perfil gaussiano, a pesar de

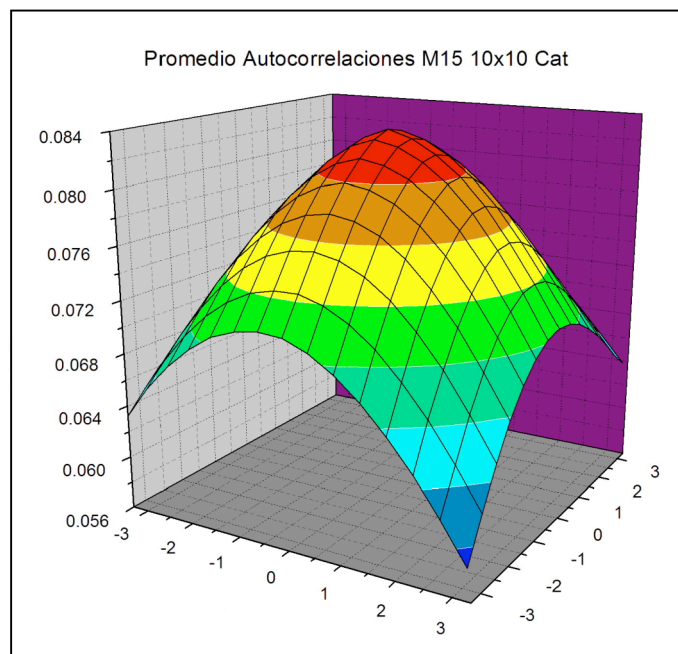
que las autocorrelaciones individuales (locales) de altura no satisfacen esta condición.

El ajuste del perfil gaussiano se realiza determinando los valores de longitud de correlación lateral  $\xi$  y amplitud cuadrática media  $\delta$ , definidos en la ecuación (52), que minimizan el error del ajuste. Los valores obtenidos para  $\xi$  y  $\delta$  en relación al espesor de la lámina se detallan en la tabla 2.



**Figura 7.** Autocorrelación de la imagen de rugosidad superficial *m14\_ori* de la lámina M15 (espesor 180 [nm]). La imagen de rugosidad superficial se obtuvo en escala de 10[nm]×10[nm]. La autocorrelación se calculó mediante el método Cat.

**Figura 8.** Promedio de las Autocorrelaciones de las imágenes de rugosidad superficial de la lámina M15 (espesor 180 [nm]). Las imágenes de rugosidad superficial se obtuvieron en escala de 10[nm]×10[nm]. Las autocorrelaciones se calcularon mediante el método Cat.



## 6.- Comparación experimento-teoría.

En las referencias [6, 7] se informan datos experimentales de resistividad, tangente de Hall y magnetorresistencia transversal observadas en 4 muestras, de espesores 69, 93,150 y 185 nm, medidos a temperaturas entre 4 K y 50 K, bajo la acción de un campo magnético que se varió entre 0 y 9 Tesla, donde los parámetros que caracterizan la rugosidad de las láminas fueron medidos experimentalmente.

Si imponemos que la masa efectiva sea igual a la masa del electrón, entonces para comparar las mediciones de los coeficientes de transporte eléctrico con la teoría de Calecki, sólo falta determinar  $\tau_{IMP}$ .

Para determinar el parámetro  $\tau_{IMP}$  se utilizó el hecho que a 4 K la población de fonones es cercana a cero, con lo cual, a esa temperatura, la resistividad de la lámina está determinada esencialmente por el scattering electrón-impurezas y el scattering electrón-superficie rugosa.

De esta manera, el método de comparación de los datos experimentales con la teoría de Calecki procede ajustando  $\tau_{IMP}$ , buscando que la teoría describa la resistividad medida a 4 K,  $\rho_0(4K)$ . Luego

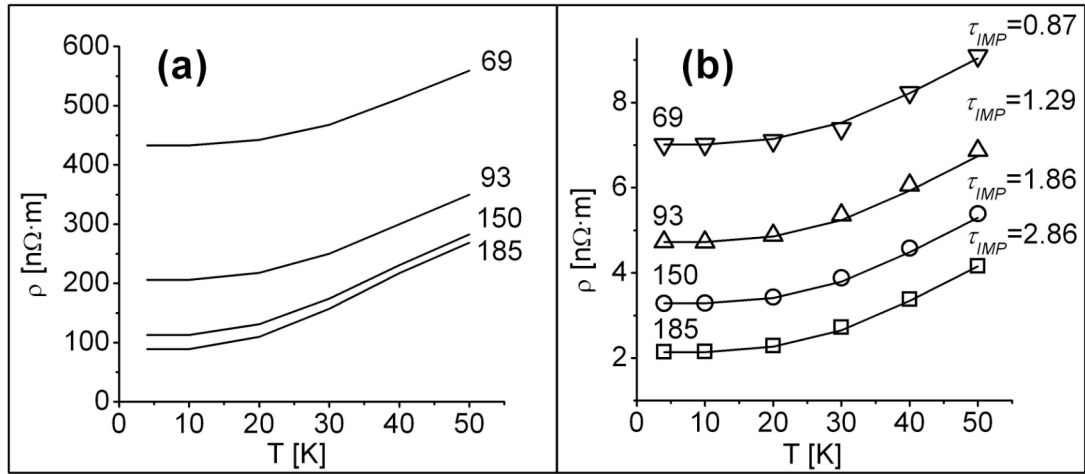
utilizamos este valor de  $\tau_{IMP}$  para calcular tanto  $\rho_0(T)$  (el efecto de la temperatura se incorpora a través del tiempo de colisión fonónico  $\tau_{PHON}$ ), como  $\tan\theta(B, 4K)$  y  $\Delta\rho/\rho_0(B, 4K)$ . La comparación de la tangente de Hall y la magnetorresistencia transversal se realizó a 4 K. A 4 K el efecto de la rugosidad es más notorio, ya que la red se encuentra congelada.

La resistividad en función de la temperatura predicha por la teoría de Calecki se muestra en la figura 9.

Como se muestra en la figura 9(a), la resistividad predicha por CK1 excede en dos órdenes de magnitud a la resistividad observada. No obstante, cuando las ecuaciones de transporte son resueltas numéricamente, sin otras aproximaciones (CK2), se encuentra un conjunto de tiempos de colisión  $\tau_{IMP}$  con los cuales se obtiene una descripción satisfactoria de la resistividad en función de la temperatura, como se observa en la figura 9(b).

La discrepancia de dos órdenes de magnitud entre la resistividad desplegada en la figura 9(a) y la resistividad observada en la figura 9(b), es consecuencia de la aproximación  $\xi k_F \ll 1$  utilizada para derivar la ecuación (57). La explicación es que en el oro  $k_F = 12.1 \text{ nm}^{-1}$ , y en las muestras utilizadas  $\xi$  tiene valores en el intervalo  $7.6 \text{ nm} \leq \xi \leq 12.2 \text{ nm}$ ,

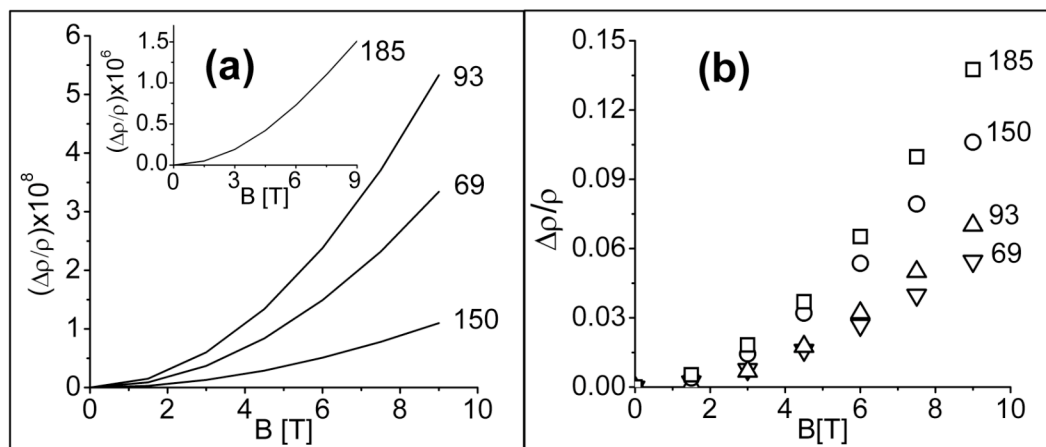




**Figura 9.** Resistividad en función de la temperatura, ajustando  $\tau_{IMP}$  para describir  $\rho(4\text{K})$ . (a) línea continua: Resistividad en función de la temperatura de 4 láminas de diferente espesor, predicha por CK1 [con un tiempo de relajación por subbanda dado por la ecuación (57)], donde el espesor de las láminas esta indicado en nanómetros. No fue posible ajustar un tiempo de colisión  $\tau_{IMP}$ . (b) Resistividad en función de la temperatura medida en diferentes láminas: Cuadrados: lámina de 185 nm; Círculos: lámina de 150 nm; Triángulos: lámina de 93 nm; Triángulos invertidos: lámina de 69 nm. La línea continua representa la resistividad predicha por solución numérica de CK2. El tiempo de colisión  $\tau_{IMP}$  (indicado en la figura en unidades de  $10^{-13}$  seg.) fue ajustado para describir  $\rho(4\text{K})$  observada en cada muestra.

con lo que  $90 < \xi k_F < 145$ . Así, al comparar la transformada de Fourier de la función de autocorrelación  $F(\langle f f \rangle)$  utilizando los valores medidos de  $\xi k_F$ , con la calculada en el límite  $\xi k_F \ll 1$ , se encuentra que esta última *sobrestima hasta en dos órdenes de magnitud* a la primera.

A partir de los valores de  $\tau_{IMP}$  desplegados en la figura 9(b) se calcula la dependencia de la magnetorresistencia transversal con el campo magnético a 4 K. El resultado del cálculo (CK2) se muestra en la figura 10(a).

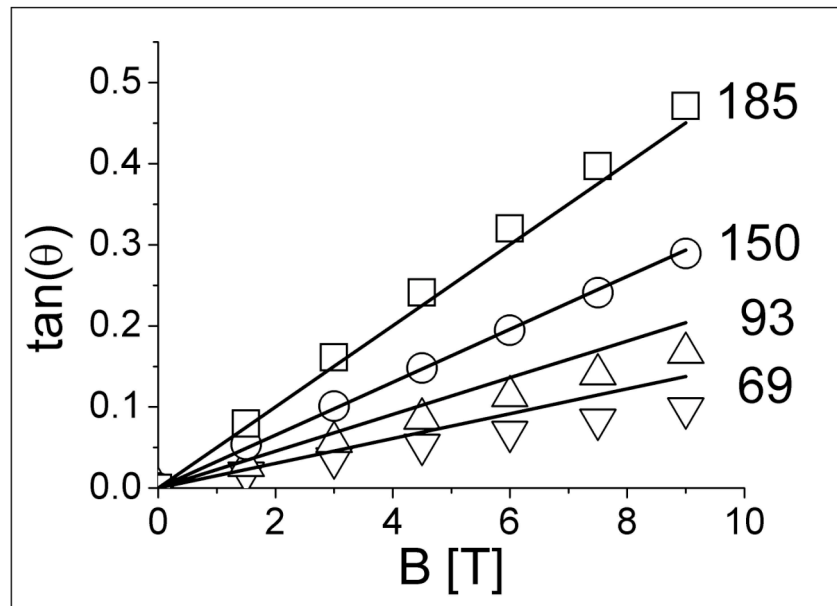


**Figura 10.** Magnetorresistencia transversal en función del campo magnético a 4 K. (a) Magnetorresistencia transversal en función del campo magnético a 4 K, para las láminas de espesores de 69 nm, 93 nm y 150 nm, utilizando CK2. Inserto: magnetorresistencia transversal predicha por la teoría a 4 K, para la lámina de 185 nm. (b) Magnetorresistencia transversal medida a 4 K en láminas de diferentes espesores, los símbolos tienen el mismo significado que en la figura 9(b).

En la figura 10 se observa que la magnetorresistencia transversal en función del campo a 4 K predicha por CK2, es varios órdenes de magnitud inferior a la observada. Además CK2 no conduce a un ordenamiento de

$\Delta\rho/\rho_0$  de acuerdo al espesor, como el observado en los datos experimentales.

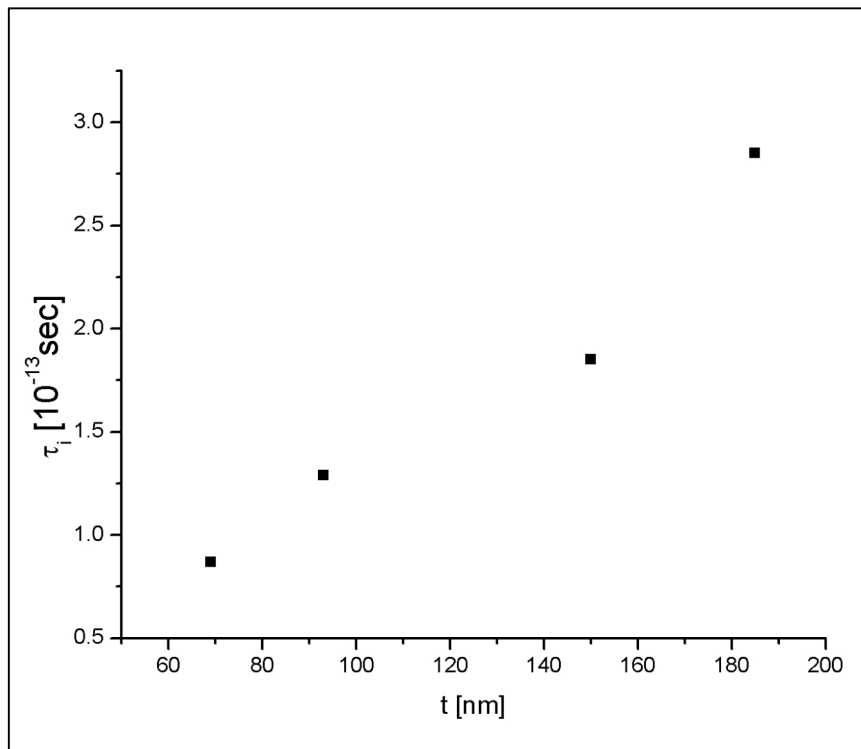
En la figura 11 se muestra la dependencia de la tangente de Hall con el campo a 4 K, calculada a partir de la solución numérica de la ecuación de transporte (CK2).



**Figura 11.** Tangente de Hall en función del campo magnético a 4 K. Los símbolos tienen el mismo significado que en la fig. 9(b) y la línea continua representa la tangente de Hall predicha utilizando la solución numérica de la ecuación de transporte (CK2).

En la figura 11 se observa que para las dos películas más gruesas, 185 y 150 nm, el ajuste proporcionado por CK2 coincide con los valores experimentales de tangente de Hall, mientras que para las dos más delgadas, 93 y 69 nm, la teoría sobrestima el efecto Hall observado.

En la figura 12 se muestra la dependencia del tiempo de colisión  $\tau_{IMP}$  con el espesor  $t$  de las películas



**Figura 12.** Tiempo de colisión  $\tau_{IMP}$  en función del espesor de las láminas. Los valores de tiempo de colisión son los utilizados para ajustar la resistividad a 4 K predicha por la teoría de Calecki (CK2) a los datos experimentales de las referencias [6, 7] (Fig. 9b).

En la figura 12 se observa una relación lineal entre el espesor de las muestras y los valores de tiempo de colisión  $\tau_{IMP}$  utilizados para realizar el ajuste de la resistividad predicha a 4 K por la teoría de Calecki (CK2) a los datos experimentales de las referencias [6, 7] (Fig. 9b).

## **7.- Conclusiones.**

Se ha realizado la primera comparación entre la solución numérica de la ecuación de transporte contenida en la teoría de Calecki (CK2) y los datos experimentales de resistividad, magnetorresistencia transversal y tangente de Hall medidas en una familia de láminas delgadas de oro evaporadas sobre sustratos de mica. La medición se efectuó a temperaturas entre 4 y 50 K y bajo la acción de un campo magnético que varió entre los 0 y 9 Tesla. El resultado es que la teoría (CK2) describe adecuadamente la dependencia de la resistividad con la temperatura, describe también de manera aproximada la tangente de Hall observada a 4 K, pero predice una magnetorresistencia transversal a 4 K que es varios órdenes de magnitud menor que la observada.

Estos resultados indican que la discrepancia entre la teoría de Calecki (CK1) y el experimento reportada en las referencias [6, 7], no se origina en la aproximación de longitud de correlación pequeña, sino que refleja limitaciones fundamentales de la teoría para describir adecuadamente la interacción electrón-superficie rugosa.

En la figura 12 se despliega una relación lineal entre el espesor de las muestras y los valores de tiempo de colisión  $\tau_{IMP}$  utilizados para realizar el ajuste de la resistividad a 4 K predicha por la teoría de Calecki (CK2), a los datos experimentales de las referencias [6, 7]. Este resultado se contradice con el supuesto de que los mecanismos de scattering que caracterizan al cristal son independientes del espesor de las láminas (Sección 4.4).

Esta contradicción aparente se disipa si se supone que el mecanismo (identificado como scattering electrón-impurezas en la teoría de Calecki) que limita la resistividad de las muestras a 4K, se origina, efectivamente, en el scattering electrón-superficie rugosa. Esta hipótesis es confirmada por el hecho de que la movilidad de Hall medida en las mismas muestras a 4 K, depende linealmente del espesor de las muestras. La conclusión resulta sorprendente: *“a 4 K el scattering electrón-superficie rugosa no puede ser considerado como una perturbación”*.

De lo anterior se desprende que la contradicción anteriormente enunciada se debe a la incapacidad de la teoría de Calecki para describir adecuadamente la interacción electrón superficie rugosa.

La concordancia de estos resultados con los obtenidos a partir de la teoría de Sondheimer [6, 7] –una buena descripción de resistividad y

tangente de Hall, y una magnetorresistencia transversal que resulta dos órdenes inferior a lo observado— permite concluir que *ninguna de las 2 únicas teorías disponibles en este momento es capaz de proporcionar una descripción coherente del conjunto de coeficientes de transporte eléctricos que se informan en las referencias [6, 7].*

La falla de los únicos modelos disponibles, de Sondheimer y de Calecki, puede ser considerada como la primera evidencia contundente de la necesidad de una nueva teoría que describa los efectos de tamaño originados por el scattering electrón-superficie rugosa en láminas metálicas delgadas en presencia de un campo magnético.

Los resultados obtenidos de esta tesis fueron publicados en la referencia [13].

## 9.- Bibliografía.

1.- N. Ashcroft and N. Mermin, 1976. Solid State Physics, Harcourt Brace College Publishers, Orlando.

2.- I. Stone, 1898. The electrical resistance of thin films, Phys. Rev. **6**, 1.

3.- E. H. Sondheimer, 1950. The Influence of a Transverse Magnetic Field on the Conductivity of Thin Metallic Films. Phys. Rev. **80**: 401-407.

4.- E. H. Sondheimer, 1952. The Mean Free Path of Electrons in Metals. Adv Phys. **1** 1.

5.- D. Calecki, 1990. Galvanomagnetic phenomena and surface roughness in thin metallic films. Phys. Rev. B **42**: 6906 – 6915.

6.- R. C. Munoz et al, 2006. Size effects under a strong magnetic field: transverse Magnetoresistance of thin gold films deposited on mica. J. Phys.: Condens. Matter **18**: 3401-3408.

7.- R. C. Munoz et al, 2006. Size effects under a strong magnetic field: Hall Effect Induced by Electron-Surface Scattering on Thin Gold



Films Deposited onto Mica Substrates under High Vacuum. Phys. Rev. Lett. **96**, 206803.

8.- R. A. Matula, 1979. Electrical resistivity of copper, gold, palladium, and silver. J. Phys. Chem. Ref. Data **8**: 1147-1298.

9.- M.S.P. Lucas, 1964. Electrical Conductivity of Thin Metallic Films with unlike Surfaces. J. Appl. Phys. **36**: 1632-1635.

10.- M. Abramowitz and I. A. Stegun 1965. Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications, New York, 374-379.

11.- Es necesario realizar la inversión de las matrices  $\underline{C}(\epsilon_F)$  y  $(1 + \omega_c^2 \underline{T}^2)$  en virtud de la ecuaciones 35-40, el detalle se encuentra en la sección 4.5.

12.- W. H. Press et al., 1992. Numerical recipes: The Art of Scientific Computing (FORTRAN version) 2nd Edition, Cambridge University Press, Cambridge, 34-40.

13.- R. C. Munoz, Adán Ramírez et all, 2006. Resistivity, transverse magnetoresistance, and Hall voltage induced by electron-surface scattering on thin gold films deposited on mica substrates under high vacuum. Phys. Rev. B **74**, 233402. Ésta publicación se encuentra en el anexo B.