

UCH-FC
MAG-F
H 519
C.1

**Magnetorresistencia transversal en películas delgadas de oro
evaporadas sobre mica**

Tesis
entregada a la
Universidad de Chile
en cumplimiento parcial de los requisitos
para optar al grado de
Magister en Ciencias con mención en Física
Facultad de Ciencias

por

Ricardo Andrés Henríquez Correa

Agosto, 2005

Director de Tesis: **Dr. Raul C. Muñoz**

FACULTAD DE CIENCIAS

UNIVERSIDAD DE CHILE

INFORME DE APROBACION

TESIS DE MAGISTER

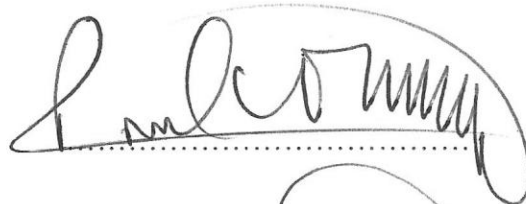
Se informa a la Escuela de Postgrado de la Facultad de Ciencias que la tesis de Magíster presentada por el candidato

RICARDO ANDRES HENRIQUEZ CORREA

Ha sido aprobada por la Comisión de Evaluación de la tesis como requisito para optar al grado de Magíster en Ciencias con mención en Física, en el examen de Defensa de Tesis rendido el día 14 de Julio de 2005.

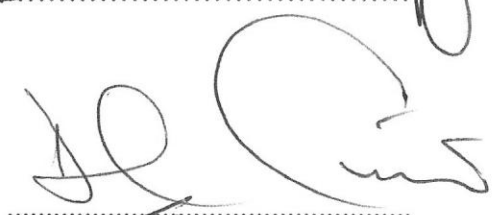
Director de Tesis:

Dr. Raúl Muñoz

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Raúl Muñoz', written over a horizontal dotted line.

Comisión de Evaluación de la Tesis:

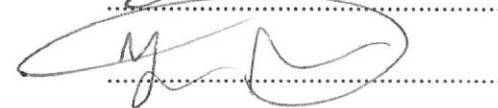
Dr. David Gottlieb

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'David Gottlieb', written over a horizontal dotted line.

Dr. Luís Moraga

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Luís Moraga', written over a horizontal dotted line.

Dr. Jaime Roessler

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Jaime Roessler', written over a horizontal dotted line.

Dedicado a mi señora, Bárbara, y mis hijos, Nicolás y Ricardo.

Agradecimientos:

Al grupo experimental dirigido por Raul Muñoz, dentro del cual realicé este trabajo. En particular por el apoyo, ayuda técnica, disponibilidad temporal, y enseñarme a apreciar esta disciplina a Germán Kremer y Juan Pablo García.

Al financiamiento de los proyectos Fondecyt 1010481 y 1040723.

INDICE DE MATERIAS

Portada.	i
Dedicatoria.	ii
Agradecimientos.	iii
Índice de Materias.	iv
Lista de Figuras.	vi
Resumen.	viii
Abstract.	ix
1.- INTRODUCCION.	1
2.- MATERIALES Y METODOS.	3
2.1.- PREPARACION DE LAS MUESTRAS.	3
2.2.- CARACTERIZACION DE LAS MUESTRAS.	7
3.- RESULTADOS.	10
4.- DISCUSION.	12
4.1.- MAGNETORRESISTENCIA DEBIDO A LA PRESENCIA DE DOS PORTADORES.	12
4.1.1.- CONSIDERACIONES TEORICAS	12
4.1.2.- CONFRONTACION EXPERIMENTAL	15
4.2.- MAGNETORRESISTENCIA DEBIDO A SCATTERING ELECTRON-SUPERFICIE RUGOSA.	17
4.2.1.- TEORIA DE FUCHS-SONDHEIMER-LUCAS.	20

4.2.1.1.- CONSIDERACIONES TEORICAS	20
4.2.1.2.- CONFRONTACION EXPERIMENTAL	26
4.2.2.- TEORIA DE CALECKI.	32
4.2.2.1.- CONSIDERACIONES TEORICAS	32
4.2.2.2.- CONFRONTACION EXPERIMENTAL	37
5.- CONCLUSIONES.	43
6.- BIBLIOGRAFIA.	45

LISTA DE FIGURAS

Fig. 1: Esquema del sistema de evaporación.	5
Fig. 2: Espectro RBS de una película delgada de oro sobre mica.	8
Fig. 3: Gráficos de magnetorresistencia en función del campo magnético, para cada temperatura.	10
Fig. 4: Gráficos de magnetorresistencia en función de la temperatura, para cada campo magnético.	11
Fig. 5: Superficie de Fermi del oro.	13
Fig. 6: Ajuste del modelo de dos portadores.	16
Fig. 7: Gráfico de resistividad en función de la temperatura, ajustando $\rho(4\text{ K})$ con la teoría de Sondheimer.	28
Fig. 8: Gráficos de magnetorresistencia en función del campo magnético para cada temperatura, ajustando $\rho(4\text{ K})$ con la teoría de Sondheimer	29
Fig. 9: Gráficos de magnetorresistencia en función del campo magnético para cada temperatura, ajustando $\Delta\rho/\rho(4\text{ K})$ con la teoría de Sondheimer	30
Fig. 10: Gráficos de resistividad en función de la temperatura para cada película, ajustando $\rho(4\text{ K})$ con la teoría de Calecki	38

Fig. 11: Gráficos de magnetorresistencia en función del campo magnético para cada temperatura, ajustando ρ (4 K) con la teoría de Calecki bajo la aproximación diagonal de la matriz de tiempos de colisión 39

Fig. 12: Gráficos de magnetorresistencia en función del campo magnético para cada temperatura en la película de 185 nm, ajustando $\Delta\rho/\rho$ (4 K) con la teoría de Calecki bajo la aproximación diagonal de la matriz de tiempos de colisión 41

RESUMEN

En este trabajo, informo las primeras medidas de magnetorresistencia donde la señal puede ser atribuida inequívocamente al scattering electrón-superficie, realizadas en 4 películas de oro evaporadas sobre un substrato de mica precalentada. La medida se efectuó a bajas temperaturas T ($4\text{K} \leq T \leq 50\text{K}$) bajo campo magnético intenso B ($1,5 \text{ T} \leq B \leq 9 \text{ T}$), con B orientado perpendicular a las películas. La magnetorresistencia a 4K y 9T es aproximadamente de 5% para la película más delgada (69 nm), y 14% para la película más gruesa (185 nm). La teoría de Sondheimer proporciona una descripción precisa de la dependencia de temperatura de la resistividad, pero predice una magnetorresistencia un orden de magnitud menor que la observada. La teoría de Calecki proporciona una descripción buena de la magnetorresistencia, pero predice una dependencia de temperatura de la resistividad un orden de magnitud más grande que la observada.

ABSTRACT

In this work, I report the first measurement of magnetoresistance where the signal can be unequivocally attributed to electron-surface scattering, performed on 4 gold films evaporated onto preheated mica substrate. The measurement was performed at low temperatures T ($4\text{K} \leq T \leq 50\text{K}$) under high magnetic field strengths B ($1.5\text{ T} \leq B \leq 9\text{ T}$), with B oriented perpendicular to the films. The magnetoresistance at 4 K and 9 T is about 5% for the thinner (69 nm) film, and 14% for the thicker (185 nm) film. Sondheimer's theory provide an accurate description of the temperature dependence of the resistivity, but predicts a magnetoresistance one order of magnitud smaller than observed. Calecki's theory provide a good description of the magnetoresistance, but predicts a temperature dependence of the resistivity one order of magnitud larger than observed.

1.- INTRODUCCION

Un problema fundamental relacionado con estructuras metálicas delgadas, es cómo la rugosidad de las superficies que limitan dicha estructura afecta a las propiedades de transporte eléctrico, cuando una o más de las dimensiones que caracterizan la estructura, son comparables o más pequeñas que el camino libre medio de los portadores de carga. Los fenómenos que resultan de las condiciones descritas se conocen como “efectos de tamaño”. En películas delgadas, donde sólo el espesor es comparable o menor al camino libre medio de los portadores de carga, la idea de que el scattering electrón-superficie conduce a un aumento de la resistividad es ampliamente aceptada. Esto se refleja en la publicación de cientos de trabajos, relacionados con los efectos de tamaño.

La presencia de un campo magnético en una película delgada, induce una curvatura en la trayectoria de los portadores de carga entre eventos de scattering. Luego, cabe esperar que la frecuencia con que la trayectoria de los portadores es intersectada por la superficie rugosa sea distinta en presencia de un campo magnético, que en ausencia de él. El cambio en la resistencia, $\Delta\rho$, debido a la presencia de un campo magnético, se conoce como magnetorresistencia, y a diferencia de lo que ocurre con la resistividad, su relación con los efectos de tamaño, ha sido tema de pocas publicaciones a la fecha.

La aparición de magnetorresistencia en una película delgada puede deberse a dos factores:

- a) La morfología de la superficie de Fermi. En un sólido cristalino dotado de una superficie de Fermi esférica, por razones de simetría, la magnetorresistencia es nula. Una superficie de Fermi no esférica puede conducir a una magnetorresistencia no nula.
- b) La geometría de la muestra. En un metal dotado de una superficie de Fermi esférica, la proximidad de las superficies rugosas superior e inferior intersectando la trayectoria de los portadores, puede dar origen a magnetorresistencia.

El primer cálculo sobre magnetorresistencia transversal en películas delgadas, con el campo magnético orientado perpendicular a la película, fue publicado en 1950 por Sondheimer¹. Posteriormente, este trabajo fue extendido por Calecki² en 1990.

Ambos autores predicen que la proximidad de las superficies rugosas superior e inferior que limitan una película de un metal caracterizado por una superficie de Fermi esférica, dan lugar a una magnetorresistencia no nula, cuando el espesor es comparable o inferior al camino libre medio de los electrones.

La búsqueda bibliográfica revela también que las predicciones de Sondheimer y de Calecki no han sido verificadas experimentalmente. Probablemente porque los experimentos requieren películas delgadas, en donde el scattering de electrones debido a impurezas, bordes de grano, dislocaciones, etc. no enmascaren el efecto del scattering electrón-superficie rugosa^{3,4}.

2.- MATERIALES Y METODOS

2.1.- PREPARACIÓN DE LAS MUESTRAS

Se prepararon películas de oro de diferentes espesores evaporadas sobre mica. La calidad de la mica asegura una superficie atómicamente plana excepto pasos de clivaje que se notan a simple vista y están separados por distancias varios órdenes de magnitud superiores al camino libre medio de los electrones en el cristal. De esta forma, el aumento de resistividad debido a la rugosidad de la cara inferior de la película (en contacto con el sustrato), es despreciable comparado con el aumento de resistividad debido a la cara superior de la muestra.

El método de preparación estuvo orientado a obtener películas que permitan observar el efecto del scattering electrón-superficie rugosa. Por esta razón, requerimos que la resistividad de la película a temperatura ambiente no exceda en más de un 30% la resistividad del cristal. Con esto aseguramos que al enfriar la película hasta 4K, la resistividad debido a impurezas, bordes de grano o fonones no enmascarará el efecto del scattering electrón-superficie rugosa.

El trabajo de exploración se hizo en un sistema de alto vacío (presión del orden de 10^{-5} Pa) provisto de una bomba difusora Edwards con trampa de nitrógeno. A éste sistema se le hicieron las siguientes modificaciones:

- a) Para evaporar el oro se probó un bote y un canastillo de tungsteno, dando este último los mejores resultados.
- b) Sobre el evaporador se montaron dos pantallas. Una con un orificio al medio, que deja pasar sólo el oro evaporado y evita el aumento de temperatura del portamuestra por radiación desde el canastillo. La otra, funciona como obturador que permite comenzar o terminar la evaporación sobre el portamuestra.
- c) La distancia entre el bote y la muestra se fijó en 30 cm, para asegurar una homogeneidad de la evaporación de oro sobre la mica. Para esto se reemplazó la campana de evaporación, por un tubo de Pyrex de 46 cm de longitud.
- d) Se incorporó al montaje una microbalanza de cuarzo que permite controlar la cantidad de oro evaporado y su velocidad de evaporación. La ubicación es al lado del portamuestra, a la misma distancia del canastillo de evaporación, para asegurar una medida confiable de la velocidad de evaporación.
- e) El portamuestra se montó sobre un disco de cobre provisto de calefactores, y éste a su vez sobre una trampa de nitrógeno. Los calefactores se conectan a un control de temperatura, que en conjunto con la trampa de nitrógeno permiten variar la temperatura del substrato entre $-190\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $300\text{ }^{\circ}\text{C}$, con una variación de a lo más $2\text{ }^{\circ}\text{C}$ durante la evaporación y recocido.

- f) La trampa de nitrógeno descrita en el punto anterior permite alcanzar una presión menor que la de la bomba difusora por sí sola, manteniendo el ambiente más libre de impurezas durante la evaporación.
- g) Se construyó un sistema que permite preevaporar contactos, de manera de medir la resistividad in situ a medida que va creciendo la película.

Un esquema del sistema aparece en la figura 1.

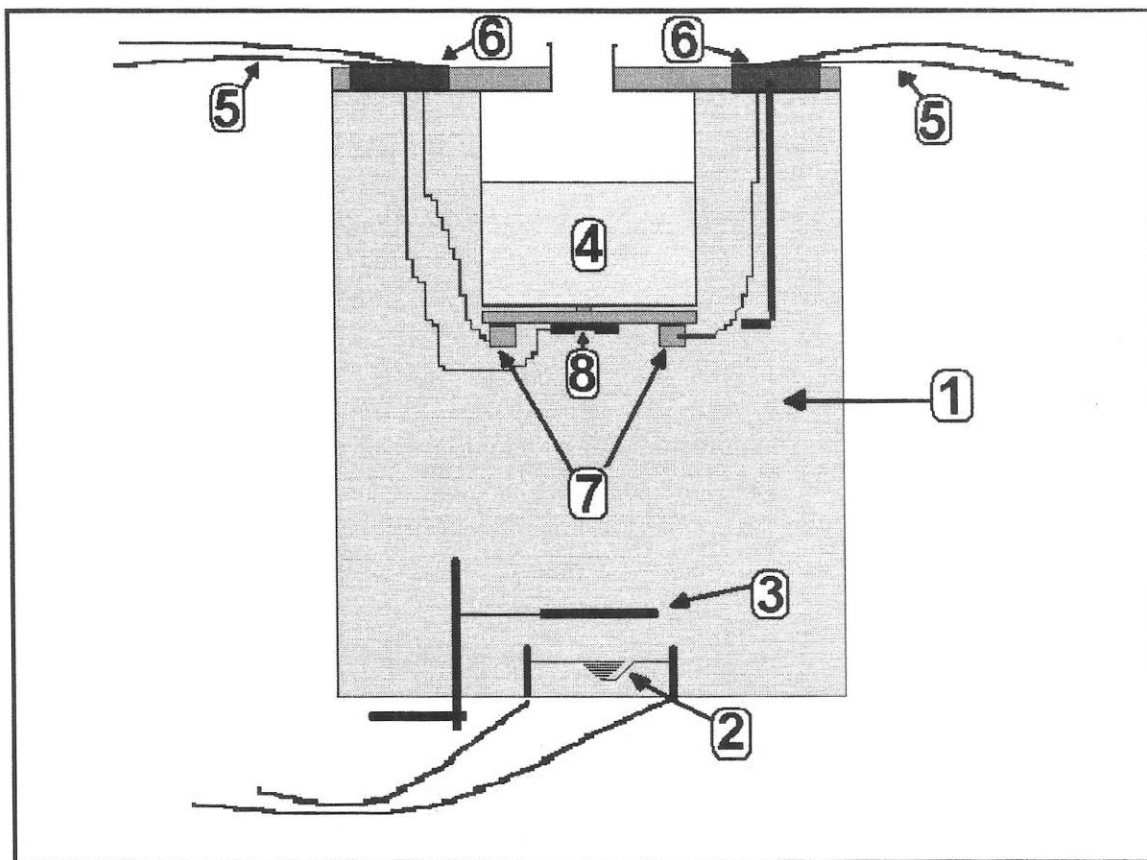


Figura 1: Esquema del sistema de evaporación. Los números señalan: 1.- Vacío. 2.-Evaporador. 3.-Pantalla móvil. 4.-Trampa de nitrógeno. 5.-Cables. 6.-Pasamuros. 7.-Calefactores. 8.-Portamuestra.

Con las modificaciones anteriores se fabricaron más de cincuenta películas barriendo la temperatura de sustrato y recocido, entre -190°C y 270°C . Esto nos permitió encontrar las condiciones deseadas que minimizan el exceso de resistividad de la película delgada a temperatura ambiente, por sobre la resistividad del cristal ($\rho(300\text{ K}) = 22,5\text{ n}\Omega\text{-m}$, determinada por scattering electrón-fonón) a la misma temperatura.

Posteriormente, se hizo un pequeño barrido en torno a las condiciones encontradas, cambiando el sistema de vacío, a uno de ultra alto vacío. Este sistema está provisto de una bomba iónica y una turbomolecular, y la evaporación se efectúa mediante un cañón de electrones. Con esto, la presión durante la evaporación es de 10^{-7} Pa (dos órdenes de magnitud menor que en el sistema de alto vacío), no existe contaminación por aceite de bomba difusora y la fuente de evaporación es más puntual (el área de la zona de evaporación que produce el haz de electrones, es menor que el área producida por evaporación con el canastillo de tungsteno). Sin embargo, la resistividad de las películas en este sistema resultó tres veces superior a las de un sistema de alto vacío, bajo iguales condiciones de temperatura de sustrato, temperatura de recocido, velocidad de evaporación y espesor.

Como resultado del proceso de exploración encontramos las siguientes condiciones óptimas:

- a) Temperatura de sustrato: entre 180°C y 270°C .
- b) Recocido: terminada la evaporación durante una hora a 270°C .
- c) Velocidad de evaporación: 3 nm/min .

d) Vacío: alto vacío con doble trampa de nitrógeno, con 10^{-5} Pa al comienzo de la evaporación.

De esta forma se fabricaron cuatro películas de 185, 150, 93 y 69 nm, cuyas resistividades a temperatura ambiente son entre 5 y 30 % más altas que las del cristal, respectivamente.

2.2.- CARACTERIZACION DE LAS MUESTRAS

Para caracterizar el espesor de las muestras se usaron dos métodos que concordaron bastante bien: Tolansky y Rutheford Back Scattering (RBS).

En el primer método, se evapora un escalón de oro sobre vidrio simultáneamente a la evaporación de la película. Posteriormente se evapora plata encima del escalón. Una lámpara de sodio hace incidir una haz de luz sobre un espejo semitransparente, y el haz que atraviesa se refleja en la plata del escalón. Así, se forman líneas de interferencia constructiva, las que pueden ser vistas nítidamente con un microscopio óptico. De esta forma se determina la altura del escalón.

En el segundo método, RBS, usando un acelerador Van der Graaf se hace incidir un haz de partículas α de 2 MeV sobre la película de oro, y se analizan la energía y el número de partículas que rebotan a 165° de la dirección incidente. Ajustando la curva de número de cuentas en función de los canales (energía), se puede determinar el espesor, con un error menor al 5%. La figura 2 muestra un espectro RBS.

Las muestras fueron sometidas a campos magnéticos entre 0 y 9 T orientado perpendicular a la película. Para esto se usó un imán superconductor construido por

Janis Research. El diseño del solenoide garantiza una uniformidad del campo magnético de $\pm 0,5\%$ en una esfera de 1 cm de radio localizada en el centro de éste. La temperatura de las muestras se varió entre 4 y 50 K con las muestras situadas en el centro del solenoide. El control de temperatura permite mantener la temperatura estable durante las mediciones con una precisión de $\pm 0,1$ K.

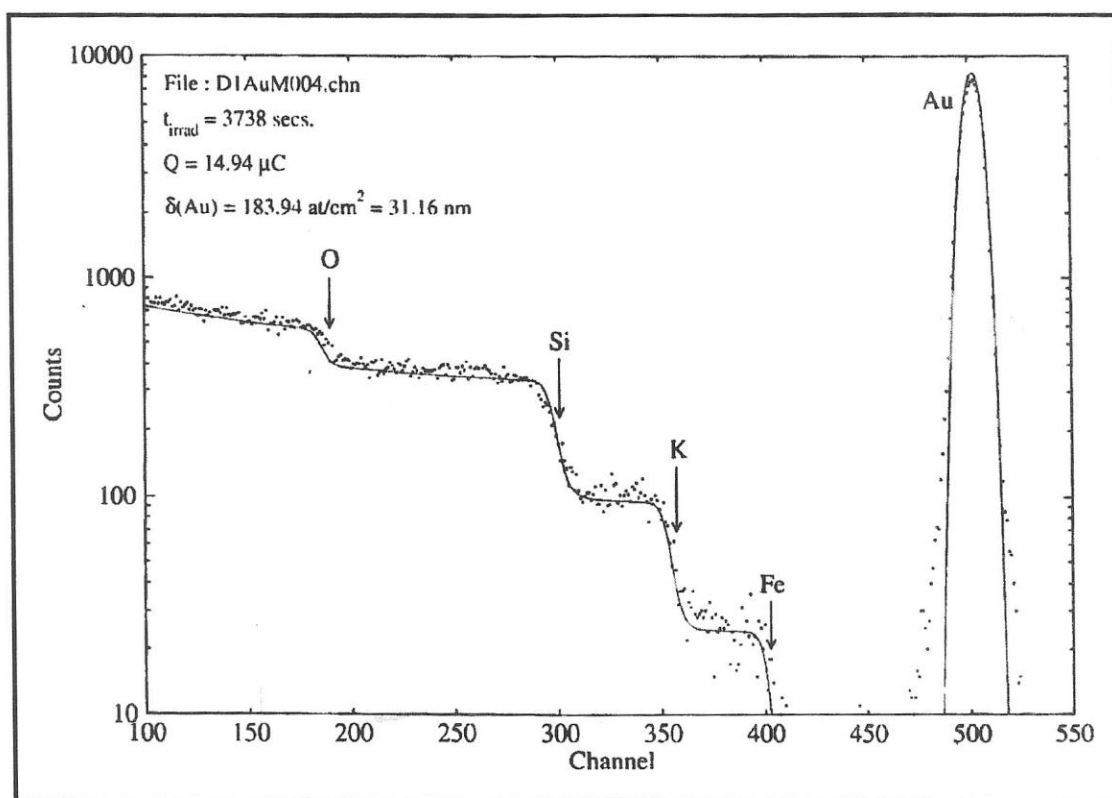


Figura 2: Espectro RBS de una película de oro evaporada sobre mica.

La resistencia de las películas se determinó a través del método de cuatro contactos con corriente alterna de 1,3 mA y 210 Hz. Los voltajes son medidos a través de amplificadores sintonizados SR 830 construidos por Stanford Research, y controlados por un computador. Para cada punto se promedia 100 lecturas; la desviación estándar resulta menor a uno en mil.

Se realizaron difractogramas de rayos X de cada muestra, con un difractómetro de Rayos X Siemens D-5000. Los difractogramas del modo θ - 2θ muestran el mayor pico en $2\theta = 38,314^\circ$, que corresponde a la reflexión $\langle 111 \rangle$ del oro. La intensidad de la señal de rayos X obtenida en el modo θ - 2θ es comparable a la obtenida en el modo Rocking-Curve. La evidencia anterior coincide con lo señalado en numerosos trabajos que se encuentran en la literatura, en donde se concluye que las películas están constituidas por granos que coalescen y crecen de manera tal que la dirección $\langle 111 \rangle$ es perpendicular a la superficie de la mica⁵.

3.- RESULTADOS

Los resultados se presentan en gráficos de magnetorresistencia en función del campo magnético para cada temperatura, y de magnetorresistencia en función de la temperatura para cada campo magnético. Los resultados aparecen en los gráficos de las figuras 3 y 4.

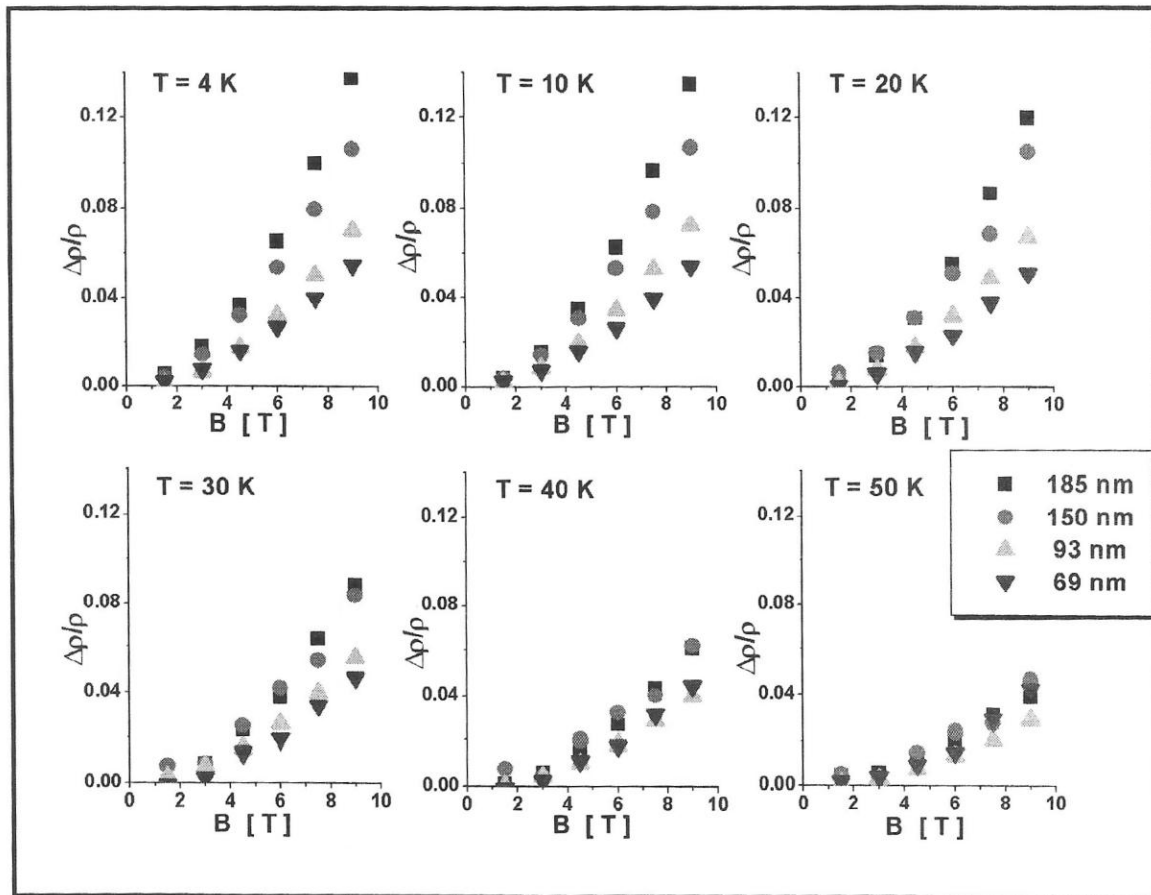


Figura 3: Gráficos de magnetorresistencia en función del campo magnético, para cada temperatura.

De los gráficos de magnetorresistencia en función del campo, podemos observar claramente la dependencia del espesor: para la película de 185 nm el efecto es superior que para la de 69 nm. Este efecto se hace más notorio al aumentar el campo magnético y bajar la temperatura.

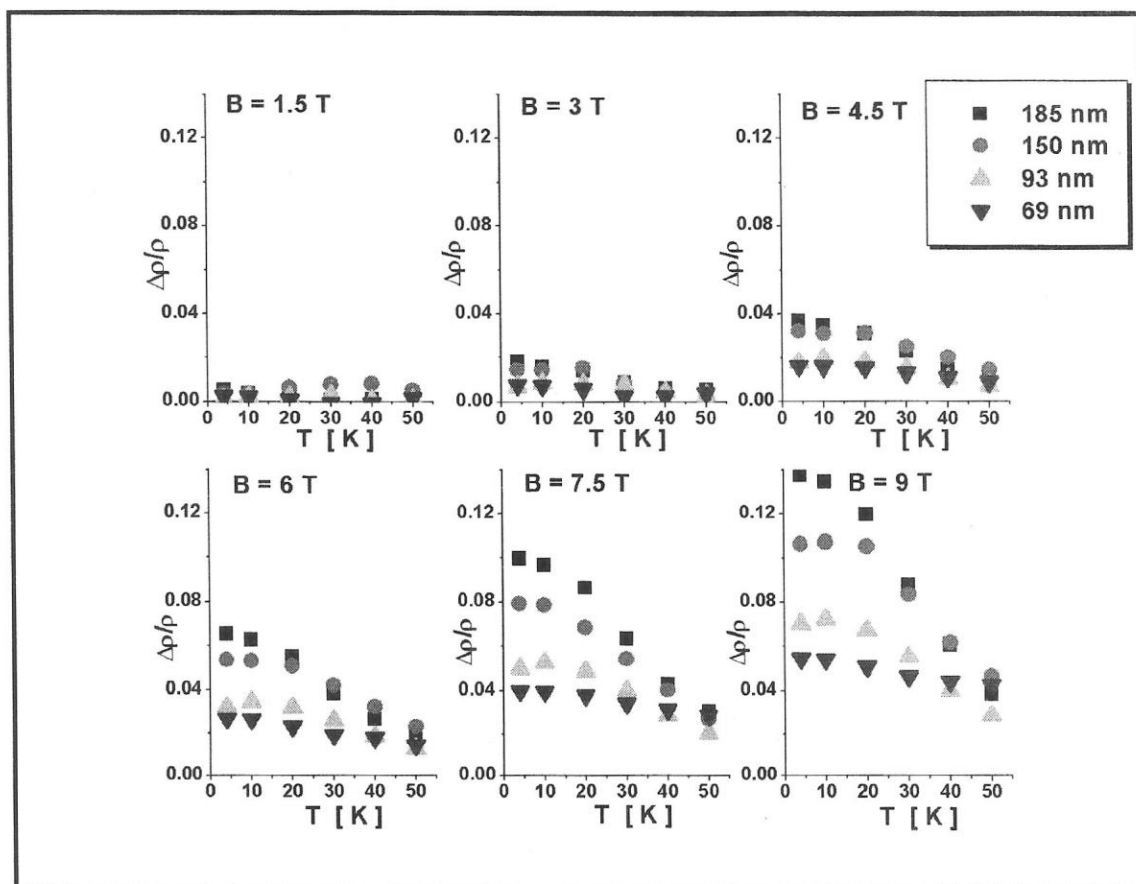


Figura 4: Gráficos de magnetorresistencia en función de la temperatura, para cada campo magnético.

De los gráficos de magnetorresistencia en función de la temperatura, podemos observar nuevamente la marcada dependencia del espesor. Resulta notable la magnitud del aumento de la magnetorresistencia al disminuir la temperatura en la película gruesa, comparada con la magnitud del aumento que se observa en la película delgada.

4.- DISCUSION

Es pertinente discutir los modelos que predicen la aparición de magnetorresistencia. En primer lugar, consideremos un primer modelo clásico que considera la existencia de dos portadores, y atribuye la magnetorresistencia a la morfología de la superficie de Fermi. Luego, consideraremos los modelos de Sondheimer¹ y de Calecki², que atribuyen la aparición de magnetorresistencia a la morfología de la muestra: la proximidad de las superficies rugosas superior e inferior de la película, en un metal cuya superficie de Fermi es esférica.

4.1.- MAGNETORRESISTENCIA DEBIDO A LA PRESENCIA DE DOS PORTADORES

4.1.1.- CONSIDERACIONES TEORICAS

Consideremos una película delgada en el plano X-Y, cuyo crecimiento se produjo en la dirección Z. Esta película está sometida a campos eléctricos y magnéticos, tales que:

$$\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0) \quad \mathbf{B} = (0, 0, B)$$

generándose una densidad de corriente:

$$\mathbf{J} = (J_x, J_y, 0)$$

El tensor de resistividad, está definido por la relación:

$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{J}$$

y la magnetorresistencia:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\rho_{xx}(B) - \rho_{xx}(0)}{\rho_{xx}(0)}$$

Cuando un electrón está inmerso en un campo eléctrico y un campo magnético como los descritos anteriormente, su trayectoria en el espacio- \vec{k} queda determinada por la intersección entre la superficie de Fermi y planos perpendiculares a la dirección del campo magnético⁶.

En la figura 5, se despliega la superficie de Fermi del oro: una esfera con ocho cuellos ubicados de forma simétrica. En las películas de oro evaporadas sobre mica, la

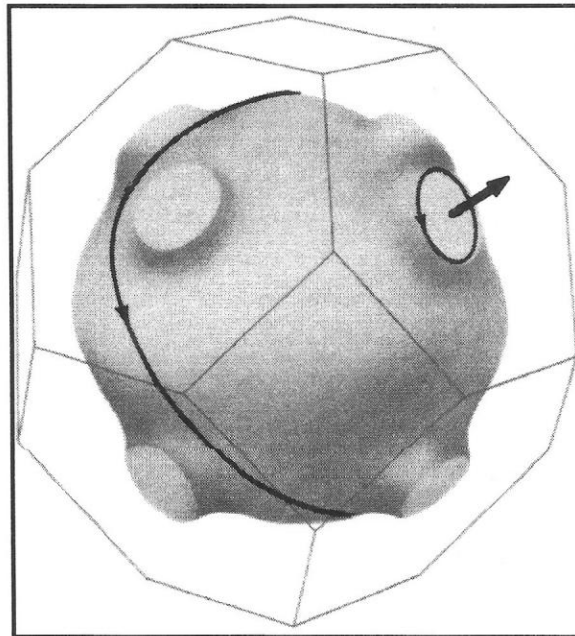


Figura 5: Superficie de Fermi del oro. Las líneas indican dos tipos de órbitas de los electrones en el espacio- \vec{k} . La flecha apunta en la dirección $\langle 111 \rangle$.

dirección $\langle 111 \rangle$ es perpendicular al plano de la mica, y coincide con la dirección del campo magnético \mathbf{B} . Bajo esta configuración, dos de los cuellos de la superficie de Fermi, tienen su eje de simetría orientado en la dirección $\langle 111 \rangle$.

El modelo clásico más simple que puede utilizarse para describir el movimiento de los electrones en las muestras de oro, incluye dos tipos de órbitas de los electrones en el espacio- \vec{k} dada la orientación cristalográfica y del campo magnético: las órbitas que intersectan la superficie de Fermi en la parte esférica (órbitas “belly”), y las que lo hacen en los dos cuellos ya señalados (órbitas “neck”). En la figura 5, ambas órbitas aparecen representadas como líneas negras sobre la superficie de Fermi.

En consecuencia, el modelo más sencillo que puede utilizarse para describir la aparición de magnetorresistencia, considera la existencia de dos portadores en el metal, caracterizados por sus densidades “ n_i ”, masas efectivas “ m_i ”, tiempos promedio entre colisiones “ τ_i ”, cargas “ q_i ” y movilidades “ μ_i ”. Esta última cantidad se define como:

$$\mu_i = \frac{q_i \tau_i}{m_i}$$

y su relevancia se aprecia en la relación:

$$\mu_i B = \frac{q_i B}{m_i} \tau_i = \omega_C \tau_i$$

en donde “ ω_C ” es la frecuencia ciclotrónica (o sea, la frecuencia angular de revolución de los electrones libres en un campo magnético B), y el producto “ $\omega_C \tau$ ” representa la fracción de una revolución completa que alcanzan los electrones en su trayectoria, debido al efecto del campo magnético.

Aplicando este modelo con $i = 1$ para los portadores “neck” e $i = 2$ para los “belly”, $q_1 = q_2 = q$ (ambos portadores son electrones), se tiene:

$$\mathbf{J} = q(n_1\mu_1 + n_2\mu_2)\mathbf{E}$$

De donde podemos mediante un simple desarrollo matemático obtener la magnetorresistencia como:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\mu_1\mu_2(\mu_1 - \mu_2)^2 B^2 \alpha}{(\alpha\mu_2 + \mu_1)^2 + (\mu_1\mu_2 B)^2 (\alpha + 1)^2}$$

en donde:

$$\alpha = \frac{n_2}{n_1}$$

El valor de “ α ” se puede estimar a través del cociente entre las áreas de la esfera de Fermi y el área de los cuellos⁶:

$$\alpha \approx \frac{4\pi R^2}{2 \times \pi r^2} \approx 58$$

en donde, “ R ” es el radio de la esfera de Fermi y “ r ” el de los cuellos. La movilidad $\mu_2(T)$ se obtiene de las medidas de efecto Hall, y es consistente con las medidas de resistividad considerando el portador mayoritario. De esta forma las curvas tienen sólo un parámetro no medido experimentalmente “ μ_1 ”.

4.1.2.- CONFRONTACION EXPERIMENTAL

Para explorar si el modelo de dos portadores es capaz de reproducir los datos de magnetorresistencia, se realiza un ajuste de la curva teórica de magnetorresistencia en

función del campo magnético, a los valores experimentales, usando γ como parámetro de ajuste. El procedimiento se implementa con ayuda del programa Origin, a través del método de cuadrados mínimos. Los resultados se muestran en la figura 6.

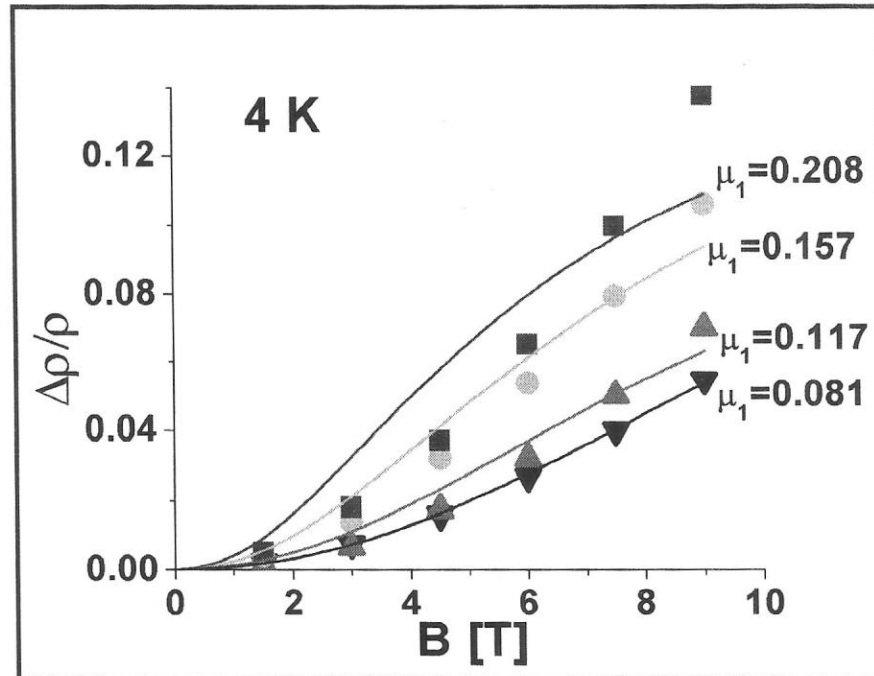


Figura 6: Ajuste del modelo de dos portadores. El gráfico muestra la magnetorresistencia en función del campo magnético a 4 K. Las líneas representan el ajuste a través del modelo de dos portadores clásicos. Los símbolos los valores experimentales, para cada espesor (Cuadrado: 185 nm, círculo: 150 nm, triángulo: 93 nm, triángulo invertido: 69 nm). Los números muestran los valores de la movilidad de los portadores "neck".

Los resultados de este análisis pueden resumirse como sigue:

- a) La teoría representa bien los datos experimentales en el caso de las películas de menor espesor.

- b) En las películas de mayor espesor el mejor ajuste es bastante pobre e incluso presenta una curvatura inversa a la que presentan los datos experimentales.
- c) Los valores de μ_1 dependen claramente del espesor de la película (factor 3 de diferencia entre la película más delgada y la más gruesa).

El análisis conduce a que la movilidad de los diferentes portadores depende del espesor de la muestra. La movilidad μ está determinada por los valores de q , m y τ . Para los portadores considerados q es la carga del electrón, por ende una constante. El valor de m queda determinado por la curvatura de la órbita en el espacio- k , por tanto directamente relacionado con la superficie de Fermi. Luego, la dependencia de espesor de la movilidad se asocia al tiempo de colisión τ .

Concluimos por tanto, que éste modelo, que basa la aparición de magnetorresistencia en la forma de la superficie de Fermi y en un tiempo de colisión que es característico del grueso, conduce a tiempos de colisión dependientes de espesor. Dicho de otro modo, no podemos ignorar el scattering electrón-superficie rugosa, en la aparición de magnetorresistencia.

4.2.- MAGNETORRESISTENCIA DEBIDO A SCATTERING ELECTRON-SUPERFICIE RUGOSA

En el año 1938, Fuchs elabora un modelo en que el aumento de resistividad 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. A partir de esta misma ecuación, en el año 1950, Sondheimer realiza el primer cálculo de efectos de tamaño, que predice la aparición de magnetorresistencia debido a la proximidad de las superficies rugosas superior e inferior de una película metálica delgada en un metal dotado de una superficie de Fermi esférica¹. Posteriormente, en 1965, Lucas extendió la teoría permitiendo rugosidades diferentes en cada una de las superficies de la película⁷. En 1990, Calecki generalizó la teoría de Sondheimer, e incluyó una caracterización de las superficies rugosas que puede ser medida experimentalmente.

La ecuación de transporte de Boltzmann es una ecuación clásica, que considera la función de distribución “ f ” de un gas de partículas puntuales, y queda expresada de la siguiente forma:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{CAMPOS}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{COLISIONES}}$$

El lado izquierdo representa la razón de cambio de la función de distribución debido a campos externos, y el lado derecho, debido a colisiones. Este último término puede ser escrito como:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{COLISIONES}} = \int d^3 \bar{v}' T(\bar{v}, \bar{v}') (f(\bar{v}') - f(\bar{v}))$$

donde “ $T(\bar{v}, \bar{v}')$ ” representa la probabilidad por unidad de tiempo de que una partícula con velocidad “ \bar{v} ”, después de la colisión adquiriera una velocidad “ \bar{v}' ”, y “ $f(\bar{v})$ ” es la función de distribución, proporcional a la densidad de partículas que viajan con velocidad “ \bar{v} ”.

Para aplicar esta ecuación al transporte de electrones se considera que su comportamiento ondulatorio no es dominante. Los electrones son tratados como partículas puntuales clásicas de masa efectiva “ m^* ” (por efecto de estar inmersos en el potencial periódico de la red cristalina), y dotados de spin $1/2$, lo que conduce a una distribución de Fermi-Dirac.

Para simplificar el cálculo del término de colisiones, se ha desarrollado un formalismo, cuyo punto de partida es la suposición de que el efecto de las colisiones es restaurar la función de distribución “ $f(\mathbf{v})$ ” hacia la distribución de equilibrio “ $f_0(\mathbf{v})$ ”, en un tiempo característico “ $\tau(\mathbf{v})$ ”, que se denomina tiempo de relajación. Así el término de colisiones se puede expresar por:

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{v})}{\partial t} \right)_{\text{COLISIONES}} = - \frac{f(\mathbf{v}) - f_0(\mathbf{v})}{\tau(\mathbf{v})}$$

donde “ $f(\mathbf{v})$ ” es la función de distribución en presencia de campos externos y “ $f_0(\mathbf{v})$ ”, la función de distribución en ausencia de ellos.

Recordemos que si dos mecanismos de scattering diferentes independientes son descriptibles por tiempos de relajación “ τ_1 ” y “ τ_2 ”, podemos obtener un tiempo de relajación total a partir de:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2}$$

Si dichos tiempos de relajación además no dependen del momentum de los electrones, obtenemos la conocida regla de Mathiessen:

$$\rho = \rho_1 + \rho_2$$

En el caso del movimiento de electrones en una muestra metálica cristalina, se ha encontrado que el scattering de electrones por impurezas (en el límite de concentraciones bajas) y por fonones, puede ser descrito por el formalismo de tiempo de relajación.

El scattering de electrones por la superficie rugosa no es descriptible mediante la aproximación de tiempo de relajación.

4.2.1.- TEORIA DE FUCHS-SONDHEIMER-LUCAS

4.2.1.1.-CONSIDERACIONES TEORICAS

Consideremos el aumento de resistividad debido a scattering electrón-superficie rugosa, en ausencia de campo magnético.

La teoría considera la película paralela al plano XY, con las superficies superior e inferior en $z = a$ y $z = 0$, respectivamente. El campo eléctrico orientado según:

$$\mathbf{E} = (E, 0, 0)$$

Los electrones se consideran libres, en el sentido que su energía viene dada por:

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

La función de distribución está constituida por dos partes: la parte del equilibrio, una función de Fermi-Dirac, y la parte fuera del equilibrio, que depende de la velocidad y de la posición según Z. De esta forma:

$$f = f_0 + f_1(\mathbf{v}, z); \quad f_0 = 1/(1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)})$$

donde $f_1 \ll f_0$.

Con estas consideraciones, Sondheimer resuelve la ecuación de transporte de Boltzmann bajo la aproximación de tiempo de relajación:

$$\left(\frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + (q\mathbf{E}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \right) f = - \left(\frac{f - f_0}{\tau} \right)$$

donde “ τ ” representa el efecto restaurador debido a las colisiones que ocurren en el grueso, esto es, debido a los mecanismos de scattering electrónico que serían observados en una película metálica delgada *en ausencia de superficies rugosas*.

Considerando términos hasta primer orden, la ecuación anterior se reduce a:

$$\frac{\partial f_1}{\partial z} + \frac{f_1}{\tau v_z} = \frac{qE}{mv_z} \frac{\partial f_0}{\partial v_x}$$

La solución más general de la ecuación anterior viene dada por la expresión:

$$f_1(\bar{v}, z) = \frac{q\tau E}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \left\{ 1 + F(\bar{v}) e^{-\frac{z}{\tau v_z}} \right\}$$

donde “ $F(\bar{v})$ ” es una función arbitraria de “ \bar{v} ”, y “ τ ” representa el tiempo de relajación asociado a los mecanismos de scattering electrónico presentes en el cristal (en el grueso).

Para incluir el efecto del scattering electrón-superficie rugosa en esta solución de la ecuación de Boltzmann, Fuchs propuso imponer condiciones de borde sobre la función “ $F(\bar{v})$ ” en las superficies rugosas situadas en $z = 0$ y $z = a$. La forma más simple sería suponer que el scattering de los electrones con las superficies rugosas es absolutamente difuso. Expresado de otra forma, “ $F(\bar{v})$ ” debe ser tal que:

$$(\forall \bar{v} / v_z > 0)(f_1(\bar{v}, 0) = 0) \quad y \quad (\forall \bar{v} / v_z < 0)(f_1(\bar{v}, a) = 0)$$

De esta forma tendríamos dos funciones de distribución:

$$f_1^+(\bar{v}, z) = \frac{q\tau E}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \left\{ 1 - e^{-\frac{z}{\tau v_z}} \right\} \quad (v_z > 0)$$

$$f_1^-(\bar{v}, z) = \frac{q\tau E}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \left\{ 1 - e^{-\frac{a-z}{\tau v_z}} \right\} \quad (v_z < 0)$$

Sondheimer propuso utilizar una condición de borde un poco más general. Sondheimer supuso que el scattering de los electrones con la superficie rugosa, no es completamente difuso, sino que una fracción “ p ” de los electrones rebota especuláramente al colisionar con la superficie rugosa. El parámetro “ p ” no depende de la dirección de movimiento de los electrones antes del choque, sirviendo solamente para interpolar la teoría entre los casos extremos de reflexión completamente difusa y completamente especular.

De esta forma, la distribución de electrones que dejan la superficie $z = 0$ y $z = a$, está dada, respectivamente, por:

$$f_0 + f_1^+(v_z, 0) = p \{ f_0 + f_1^-(v_z, 0) \} + (1-p)f_0$$

$$f_0 + f_1^-(v_z, a) = p \{ f_0 + f_1^+(v_z, a) \} + (1-p)f_0$$

con lo cual se puede determinar “ $F(\bar{v})$ ”, lo que conduce a:

$$f_1^+(\bar{v}, z) = \frac{q\tau E}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \left\{ 1 - \left(\frac{1-p}{1-pe^{-\frac{a}{\tau v_z}}} \right) e^{-\frac{z}{\tau v_z}} \right\} \quad (v_z > 0)$$

$$f_1^-(\bar{v}, z) = \frac{q\tau E}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \left\{ 1 - \left(\frac{1-p}{1-pe^{-\frac{a-z}{\tau v_z}}} \right) e^{-\frac{a-z}{\tau v_z}} \right\} \quad (v_z < 0)$$

La función de distribución obtenida de esta forma se utiliza para calcular la densidad de corriente y la conductividad a partir de la ecuación:

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$$

y la resistividad como:

$$\rho = \frac{1}{\sigma}$$

el cálculo conduce a:

$$\rho = \frac{\phi_p(\kappa)}{\kappa \sigma_0}$$

en donde, $\kappa = a / l$, y donde “ l ” y “ σ_0 ” representan el camino libre medio y la conductividad “del grueso”, es decir, la película metálica *en ausencia de superficies rugosas*. La relación entre estas dos cantidades viene dada por:

$$\sigma_0 = \frac{nq^2 l}{m\bar{v}}$$

La función $\phi_p(\kappa)$, está dada por:

$$\frac{1}{\phi_p(\kappa)} = \frac{1}{\kappa} + \frac{3}{2\kappa^2} (1-p) \int_1^{\infty} \left(\frac{1}{t^3} - \frac{1}{t^5} \right) \frac{1 - e^{-\kappa t}}{1 - p e^{-\kappa t}} dt$$

Es importante destacar que el efecto del scattering por la superficie rugosa no se describe mediante un tiempo de relajación asociado, sino se describe a través del parámetro de especularidad “ p ”, que se introduce a partir de imponer ciertas condiciones de borde sobre la función de distribución fuera del equilibrio. O sea, este parámetro “ p ” contiene toda la información relativa a propiedades de la rugosidad superficial, y se convierte en un mero parámetro de ajuste.

Para obtener la magnetorresistencia, el formalismo es bastante similar. Los campos vienen dados por:

$$\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0) \quad ; \quad \mathbf{B} = (0, 0, B);$$

y la ecuación de Boltzmann que es necesario resolver es:

$$\left(\frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + (q\mathbf{E} + q\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \right) f = - \left(\frac{f - f_0}{\tau} \right)$$

la cual toma la forma:

$$\frac{\partial f_1}{\partial z} + \frac{f_1}{\tau v_z} - \frac{qB}{mv_z} \left(v_y \frac{\partial f_1}{\partial v_x} - v_x \frac{\partial f_1}{\partial v_y} \right) = \frac{q}{mv_z} \left(E_x \frac{\partial f_0}{\partial v_x} + E_y \frac{\partial f_0}{\partial v_y} \right)$$

para resolver esta ecuación consideramos:

$$f_1 = (v_x c_1 + v_y c_2) \frac{\partial f_0}{\partial v}$$

lo que nos lleva a dos ecuaciones simultáneas para “ c_1 ” y “ c_2 ”. Si introducimos las variables complejas:

$$g = c_1 - ic_2 \quad ; \quad \mathbf{E} = E_x - iE_y$$

podemos escribir las ecuaciones de forma compacta:

$$\frac{\partial g}{\partial z} + g \left(\frac{1}{\tau v_z} + \frac{iqB}{mv_z} \right) = \frac{qE}{mv v_z}$$

cuya resolución es similar a la obtenida para el caso de resistividad. Definiendo luego la densidad de corriente compleja:

$$\bar{\mathbf{J}} = J_x - iJ_y$$

llegamos a la ecuación:

$$\bar{\mathbf{J}} = \sigma_c \mathbf{E}$$

donde “ σ_c ” es la conductividad compleja. Con esto podemos determinar la resistividad y la magnetorresistencia, que vienen dadas por:

$$\rho = \frac{|\phi_p(s)|_{B=0}}{\kappa\sigma_0} \quad \frac{\Delta\rho}{\rho} = \left| \frac{1}{\phi_p(s)} \right|_{B=0} \left| \Re\left(\frac{1}{\phi_p(s)}\right) \right| / \left| \frac{1}{\phi_p(s)} \right|_{B \neq 0}$$

La función $\phi_p(s)$ tiene la misma forma anterior, pero en vez del argumento real “ κ ”, incorpora la variable compleja “ s ”, dada por:

$$s = \kappa + i\beta \quad \kappa = a/l \quad \beta = a/r$$

en donde “ a ” es el espesor de la película, “ l ” el camino libre medio del grueso (τv_F) y “ r ” el radio ciclotrónico (mv_F/qB).

Posteriormente, este trabajo fue extendido por Lucas⁷ a una película con superficies de rugosidad diferentes. Este formalismo es el adecuado para nuestras películas, debido a que la superficie inferior, en contacto con la mica, es atómicamente plana (excepto por pasos de clivaje), por lo que el scattering es completamente especular, $p = 1$, mientras que la superficie superior es rugosa, por tanto el parámetro de especularidad debiera ser $p \neq 1$.

El cálculo desarrollado por Lucas es similar al ya expuesto, excepto que al imponer condiciones de borde, se consideran dos parámetros diferentes para cada superficie: “ p ” y “ q ”. Las formas de la resistividad y la magnetorresistencia, siguen siendo las mismas, excepto por la función $\phi_p(s)$, que cambia por $\phi_{p,q}(s)$ y es:

$$\frac{1}{\phi_{p,q}(s)} = \frac{1}{s} - \frac{3}{4s^2} \int_1^\infty \left(\frac{1}{t^3} - \frac{1}{t^5} \right) \frac{(1 - e^{-st}) [2 - p - q + (p + q - 2pq)e^{-st}]}{1 - pqe^{-2st}} dt$$

4.2.1.2.- CONFRONTACION EXPERIMENTAL

Para confrontar la teoría con los datos experimentales, es necesario, previamente, considerar los mecanismos de scattering electrónico que generan resistividad en las muestras de oro. Estos mecanismos son:

- a) Scattering electrón-fonón. Puede ser caracterizado por un tiempo de relajación, " τ_f ", descrito por la teoría de Bloch-Grüneisen.
- b) Scattering electrón-impurezas. Puede ser caracterizado por un tiempo de relajación, " τ_i ", en el límite de baja concentración.
- c) Scattering electrón-superficie rugosa. No es caracterizable por un tiempo de relajación.
- d) Scattering electrónico por otros defectos de la película metálica tales como bordes de grano, dislocaciones, etc.

Los mecanismos (a) y (b) dan origen a la resistividad del "grueso", esto es, la resistividad del monocristal a una temperatura T.

Con respecto a los mecanismos (d), nuestras películas fueron preparadas bajo condiciones (descritas en la sección de "Materiales y Métodos"), que permiten minimizar su efecto sobre la resistividad total.

Para describir los datos de resistividad en función de temperatura, se dispone de dos parámetros ajustables, " κ " y " q " (pues $p = 1$).

El parámetro " q ", que representa la fracción de scattering especular en la superficie rugosa superior, puede asumir valores entre 0 y 1.

Para determinar el parámetro “ κ ”, se utilizó el hecho que a 4 K, los fonones están “congelados”, por lo tanto el camino libre medio “ l ” en el grueso a 4 K, está determinado por scattering electrón-impurezas. Esto implica que a 4 K:

$$\tau = \tau_i$$

es decir, el tiempo de relajación total está controlado por el tiempo de relajación debido a impurezas.

Habiendo ajustado “ τ_i ”, para describir los datos de resistividad a temperaturas mayores a 4 K, el camino libre medio se obtiene estimando el tiempo de relajación “ τ ”, en base al formalismo de Bloch-Grüneisen, a través de :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_f}$$

donde $\frac{1}{\tau_f}$ se obtiene de la tabla de resistividades del oro cristalino⁸.

El proceso de ajuste se realiza mediante un programa en Fortran. En la figura 7, se muestran los resultados.

Los resultados de esta etapa pueden resumirse como sigue:

- a) El ajuste arroja en las cuatro películas $q = 0$, o sea, scattering completamente difuso en la superficie superior.
- b) Los valores de “ τ_i ” no presentan correlación con el espesor. En el gráfico de la figura 7, aparece el valor de “ κ ” correspondiente a “ τ_i ”, para cada película.

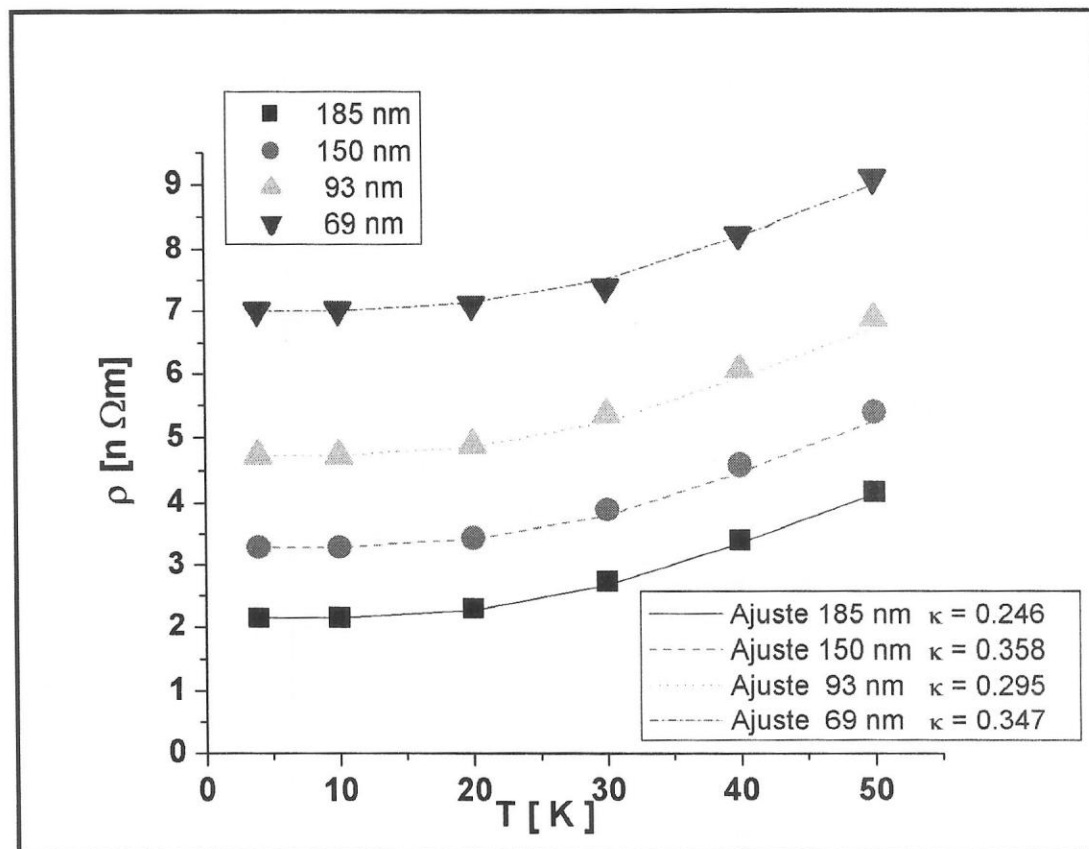


Figura 7: Gráfico de resistividad en función de la temperatura, ajustando $\rho(4 K)$ con la teoría de Sondheimer. Las líneas representan el ajuste de la teoría. Los símbolos los valores experimentales de resistividad.

- c) Es notable la concordancia entre las curvas teóricas y los valores experimentales, considerando que sólo se ajustaron los valores a 4K para cada película.

A partir de los valores de “ q ” y “ τ_i ” para cada película, generamos las curvas de magnetorresistencia como función del campo magnético, que se despliegan en la figura

8.

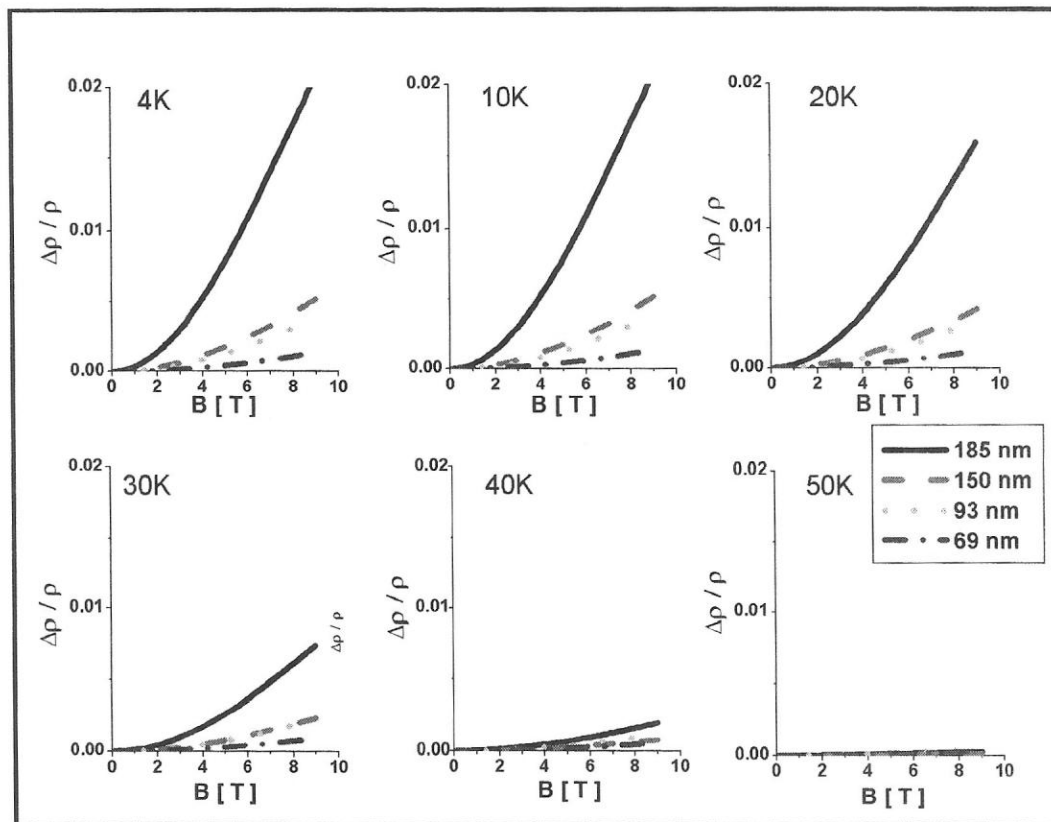


Figura 8: Gráficos de magnetorresistencia en función del campo magnético para cada temperatura, ajustando $\rho(4\text{ K})$ con la teoría de Sondheimer. Los distintos tipos de línea representan curvas para películas diferentes.

Los resultados de esta etapa pueden resumirse como sigue:

- a) El comportamiento de las curvas teóricas es similar a los valores experimentales. Las curvas se ordenan con respecto al espesor y aumentan con la temperatura.

- b) La teoría subestima la magnetorresistencia en aproximadamente un factor 6. Por ejemplo, el efecto máximo alcanzado (4 K y 9 T) teóricamente es de 2,5%, mientras que experimentalmente es de 14%.

Dada la discrepancia cuantitativa en la magnetorresistencia, intentamos ajustar κ y q para hacer coincidir la curva de magnetorresistencia en función del campo magnético a 4 K, con los datos experimentales. En la figura 9, se despliegan los resultados.

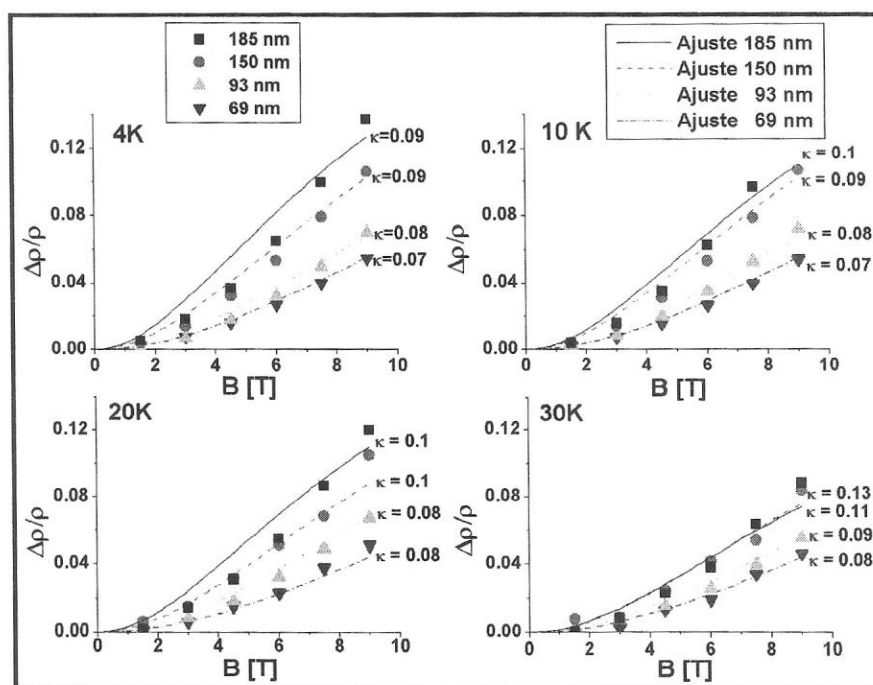


Figura 9: Gráficos de magnetorresistencia en función del campo magnético para cada temperatura, ajustando $\Delta\rho/\rho(4\text{ K})$ con la teoría de Sondheimer. Las líneas representan el ajuste de la teoría de Sondheimer. Los símbolos representan los valores experimentales.

Los resultados de esta etapa pueden resumirse como sigue:

- a) Los mejores ajustes se encuentran para $q = 0$, esto quiere decir que la superficie superior se presenta como completamente difusa.

- b) Al tratar de ajustar los datos que presentan mayor efecto (4 K), las curvas presentan una curvatura inversa a la que se observa en los datos experimentales. Esto se agudiza al ajustar la curva que alcanza el valor máximo (9T y 4K).
- c) Para las películas más delgadas las curvas representan bastante bien los datos experimentales.

A partir de los valores obtenidos, a pesar que no ajustan los valores de las películas más gruesas, se generaron las curvas de resistividad, las que no concordaron en absoluto con los valores experimentales.

Los resultados generales del proceso, se pueden resumir en dos puntos:

- a) Si τ_i es determinado ajustando la resistividad a 4 K, entonces la teoría Sondheimer–Lucas describe correctamente el comportamiento de la resistividad con la temperatura para cada muestra. No obstante, al usar el mismo valor de τ_i para generar las curvas de magnetorresistencia como función del campo magnético, obtenemos resultados casi un orden de magnitud menor que los esperados.
- b) Por el contrario, si determinamos τ_i ajustando la magnetorresistencia a 4 K, entonces la teoría no describe apropiadamente ni la magnetorresistencia como función del campo, ni la resistividad como función de la temperatura.

4.2.2.- TEORÍA DE CALECKI

4.2.2.1.- CONSIDERACIONES TEORICAS

En el año 1990, Calecki desarrolla un cálculo en el que muestra la aparición de magnetorresistencia debido a la proximidad de las superficies rugosas superior e inferior de una película metálica delgada². A diferencia de Sondheimer, la teoría no incluye parámetros ajustables para describir la superficie rugosa, sino que trabaja con un modelo gaussiano para describir la autocorrelación que describe la rugosidad superficial, caracterizada por la amplitud r.m.s. de la rugosidad “ δ ” (la desviación cuadrática media de la altura promedio de la superficie de la película), y la longitud de correlación lateral “ ξ ” (la mayor distancia a la que encuentro un determinado valor de la función de autocorrelación). Ambos valores no son parámetros ajustables, sino que pueden ser obtenidos al medir la rugosidad de la superficie de la película con un Microscopio de Efecto Túnel.

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, y es el movimiento de una partícula libre. Es decir, la función de onda asociada es una onda plana normalizada:

$$S^{-1/2} e^{-ik \cdot \rho}$$

donde “ ρ ” es la proyección del vector posición “ \mathbf{r} ” en el plano de la superficie, y “ \mathbf{k} ” es un vector de onda bidimensional. De esta forma la energía cinética debido a esta parte queda expresada por:

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$$

donde “ m ” es la masa efectiva de los portadores y “ \mathbf{k} ” representa el vector de onda bidimensional, definido por:

$$\mathbf{k} = (k_x, k_y)$$

La segunda parte del movimiento, es a lo largo del eje Z (perpendicular a las superficies), y está determinado por un pozo potencial “ $V(z)$ ”, que confina a los portadores entre las dos superficies rugosas. De esta forma, la función de onda localizada y energía debido a esta parte vienen dadas, respectivamente, por:

$$\zeta_\nu(z) \quad ; \quad \varepsilon_\nu \quad (\nu = 1, 2, \dots, \nu_{max})$$

El momentum de los portadores es entonces una variable continua en la direcciones x e y , pero cuantizada a valores discretos en la dirección Z. Esta cuantización está dada por:

$$k_\nu = \frac{\nu\pi}{a}$$

y es el resultado del confinamiento del gas electrónico entre los dos planos paralelos situados en $z = 0$ y $z = a$, que dan origen a las subbandas “ ν ”. El efecto de la rugosidad superficial se considera como una perturbación sobre el gas electrónico confinado entre estos planos.

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

$$H_0 = \frac{(\hbar\mathbf{k})^2}{2m} + \frac{(\hbar k_v)^2}{2m} + V(z)$$

Para estados estacionarios se tiene que:

$$H_0 |v\mathbf{k}\rangle = \varepsilon_{v\mathbf{k}} |v\mathbf{k}\rangle$$

con:

$$\langle r | v\mathbf{k}\rangle = \psi_{v\mathbf{k}}(r) = S^{-1/2} e^{-ik_v r} \zeta_v(z)$$

y

$$\varepsilon_{v\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \varepsilon_v = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_v^2}{2m}$$

La función de distribución de portadores en un estado $|v\mathbf{k}\rangle$ está dada por:

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

con $f_0(\varepsilon_{v\mathbf{k}}) = 1 / \left(1 + e^{\beta(\varepsilon_{v\mathbf{k}} - \varepsilon_F)} \right)$

Calecki supone que la función distribución por subbandas obedece una ecuación de transporte de Boltzmann:

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

donde el lado derecho, correspondiente al término de colisiones, se calcula en forma explícita, a partir de la función de distribución y “ $W_{v,v'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ”, la probabilidad de transición desde un estado $|v\mathbf{k}\rangle$ de la subbanda v a otro $|v'\mathbf{k}'\rangle$ de la subbanda v' . Estos

cambios de estados $|\nu\mathbf{k}\rangle$ a $|\nu'\mathbf{k}'\rangle$ son producidos por el scattering con impurezas, fonones y superficies rugosas.

Para calcular el término de colisiones de la ecuación de Boltzmann, Calecki, define la matriz de tiempo de colisión $(\underline{T}(\varepsilon))_{\nu,\nu'}$, cuyo cálculo involucra el tipo de scattering a considerar.

En el caso de scattering electrón-impurezas y electrón-fonón, la matriz $(\underline{T}(\varepsilon))_{\nu,\nu'}$ es diagonal, dado que estos mecanismos al producir un cambio de estados de $|\nu\mathbf{k}\rangle$ a $|\nu'\mathbf{k}'\rangle$, ocurren de forma que $\nu = \nu'$. Los elementos de matriz $(\underline{T}(\varepsilon))_{\nu,\nu'}$, son cero a menos que $\nu = \nu'$. Además el valor de los elementos de matriz de $(\underline{T}(\varepsilon))_{\nu,\nu}$ para cada subbanda es idéntico (independiente de ν), lo que nos permite encontrar un único tiempo de relajación para el scattering electrón-impurezas y electrón-fonón.

En el caso de scattering electrón-superficie rugosa, la matriz $(\underline{T}(\varepsilon))_{\nu,\nu'}$ es no diagonal debido a que este mecanismo mezcla estados correspondientes a bandas ν y ν' .

Un cálculo exacto, con esta teoría, incluye la diagonalización de la matriz $(\underline{T}(\varepsilon))_{\nu,\nu'}$. Sin embargo, en el caso en que los términos no diagonales sean mucho menores que los términos diagonales, se utilizan los elementos diagonales del scattering electrón-superficie rugosa, para definir un tiempo de relajación por subbandas “ τ_ν ” como:

$$\tau_\nu(\varepsilon_F) = T_{\nu,\nu'}(\varepsilon_F) = \delta_{\nu,\nu'} \frac{m}{\pi^5 \hbar} \frac{6a^6}{\nu_F (\nu_F + 1)(2\nu_F + 1)} \frac{1}{\delta^2 \xi^2} \frac{1}{\nu^2}$$

en donde, “a” representa el espesor de la película, “ ξ ” la longitud de correlación lateral, “ δ ” la amplitud r.m.s. de la rugosidad superficial y “ ν_F ” el número de subbandas de energía ε_ν , cuyo mínimo de energía está bajo el nivel de energía de Fermi, ε_F .

Con este tiempo de relajación τ_ν , asociado a la subbanda, podemos definir un tiempo de relajación por subbanda, que incluye a todos los mecanismos de scattering, como:

$$\frac{1}{\tau} = \left(\frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_f} + \frac{1}{\tau_\nu} \right)$$

en donde τ_i y τ_f representan los tiempos de relajación asociados al scattering electrón-impurezas y electrón-fonón, respectivamente.

Resolviendo la ecuación de Boltzmann, podemos llegar a escribir la densidad de corriente como:

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

con “ \mathbf{u} ” vector unitario perpendicular a las superficies. En esta expresión, σ_0 es la conductividad habitual en ausencia de campo magnético:

$$\sigma_0 = \sum_\nu \frac{n_\nu e^2}{m} \sum_{\nu'} \langle \langle \underline{T}(\varepsilon) \rangle_{\nu, \nu'} \rangle_\nu$$

donde n_ν es la densidad de portadores en la subbanda ν , y $\langle \psi \rangle_\nu$ representa el promedio de ψ sobre las bandas con energía ε_ν . El término σ_1 es la parte de la conductividad impar con respecto a B:

$$\sigma_1 = \omega_c \sum_\nu \frac{n_\nu e^2}{m} \sum_{\nu'} \langle \langle [1 + \omega_c^2 \underline{T}^2(\varepsilon)]^{-1} \underline{T}^2(\varepsilon) \rangle_{\nu, \nu'} \rangle_\nu$$

donde ω_c es la frecuencia cilotrónica. El término σ_2 es la parte de la conductividad par con respecto a B:

$$\sigma_2 = \omega_c^2 \sum_v \frac{n_v e^2}{m} \sum_{v'} \left\langle \left([1 + \omega_c^2 T^2(\varepsilon)]^{-1} T^3(\varepsilon) \right)_{v,v'} \right\rangle_v$$

En función de los coeficientes definidos, se obtiene la resistividad y la magnetorresistencia como:

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

4.2.2.2.- CONFRONTACION EXPERIMENTAL

Para describir los datos de resistividad y magnetorresistencia, se dispone de un sólo parámetro de ajuste, τ_i . De manera similar al tratamiento de la teoría de Sondheimer-Lucas, se programa en Fortran un ajuste de la magnetorresistencia $\Delta\rho/\rho$ o la resistividad $\rho(4\text{ K})$ al valor experimental, para encontrar el valor del parámetro τ_i .

El valor del tiempo de relajación por scattering de electrón-superficie rugosa se calculó con los valores de rugosidad $\delta = 0,455\text{ nm}$ y longitud de correlación lateral $\xi = 0,480\text{ nm}$, valores medidos por Muñoz et al.⁵, con un STM, en películas fabricadas bajo condiciones similares a las ocupadas en este trabajo.

En la primera etapa, utilizando τ_i como parámetro de ajuste, se determina su valor para las cuatro películas a partir del valor de resistividad $\rho(4\text{ K})$, y de la expresión:

$$\frac{1}{\tau} = \left(\frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_v} \right)$$

dado que la parte fonónica está “congelada” a esta temperatura. Una vez obtenido este valor, generamos las curvas de resistividad ρ (T) como función de temperatura T agregando el tiempo de relajación correspondiente al scattering electrón-fonón a temperatura T. Los resultados se despliegan en el gráfico de la figura 10.

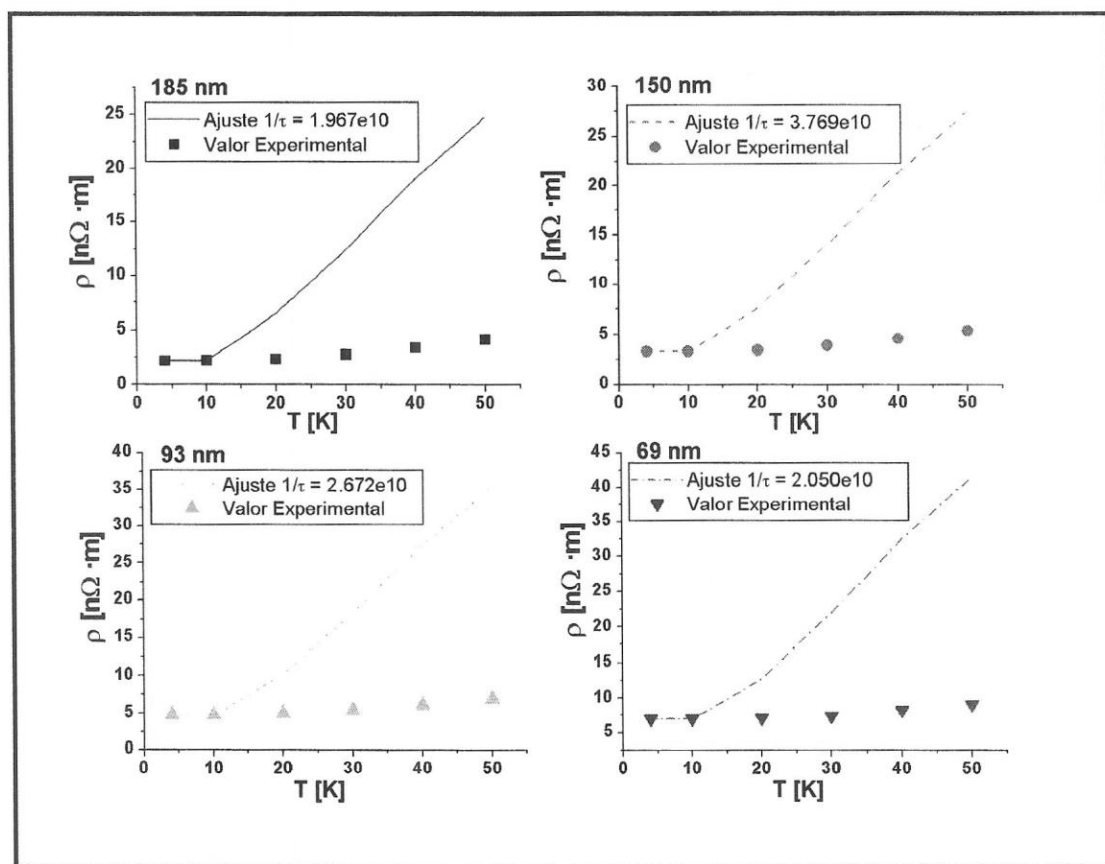


Figura 10: Gráficos de resistividad en función de la temperatura para cada película, ajustando ρ (4 K) con la teoría de Calecki. Las líneas representan el ajuste de la teoría de Calecki bajo la aproximación diagonal de la matriz de tiempos de colisión. Los símbolos representan los valores experimentales de resistividad. En los recuadros de cada gráfico, aparece el valor de $1/\tau_i$ [s⁻¹] que entrega el ajuste para cada película.

Los resultados se pueden resumir de la siguiente forma:

- Las curvas teóricas no reproducen los datos experimentales, aumentando la discrepancia a medida que aumenta la temperatura.
- A 50 K, los el ajuste superestima la resistividad en un orden de magnitud.

Con los valores encontrados para τ_i , se generan las curvas de magnetorresistencia en función del campo magnético, los que se despliegan en la figura 11.

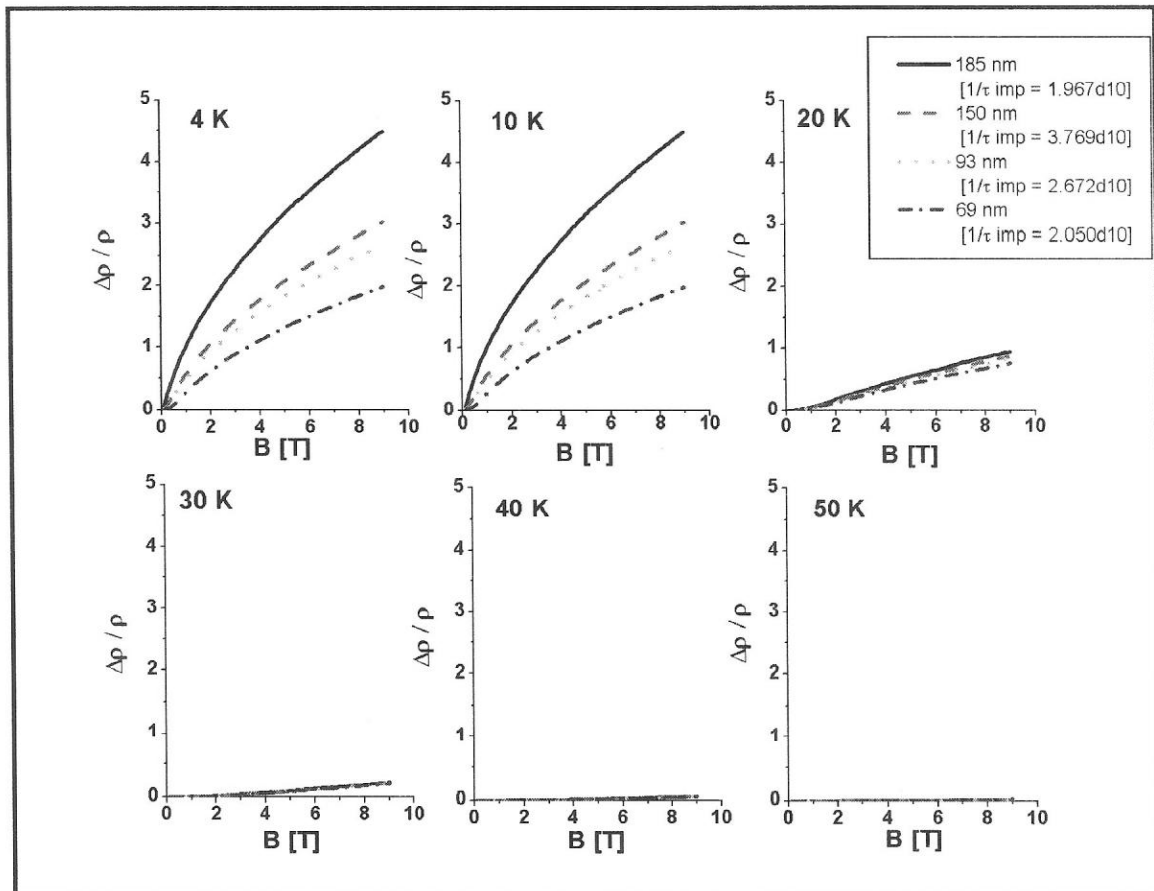


Figura 11: Gráficos de magnetorresistencia en función del campo magnético para cada temperatura, ajustando ρ (4 K) con la teoría de Calecki bajo la aproximación diagonal de la matriz de tiempos de colisión. Los distintos tipos de línea representan curvas para películas diferentes. En el recuadro, aparece el valor de $1/\tau_i$ [s^{-1}] que se ocupó para generar las curvas.

Los resultados se pueden resumir de la siguiente forma:

- a) Las curvas teóricas no representan los datos experimentales, y además una curvatura inversa a la que se observa experimentalmente.
- b) La teoría superestima la magnetorresistencia en más de un orden de magnitud.

En la segunda etapa, ajustamos la curva de magnetorresistencia $\Delta\rho/\rho(4\text{ K})$ en función del campo magnético a 4 K para cada película, con τ_i como parámetro de ajuste. Con este valor de τ_i se genera las curvas correspondientes a temperaturas mayores. El resultado para la película de 185 nm se muestra en el gráfico de la figura 12.

Los resultados pasan a enumerarse a continuación:

- a) La teoría reproduce el comportamiento de los datos experimentales para bajas temperaturas (0 a 20 K).
- b) A temperaturas superiores a 30 K, la teoría subestima el efecto.
- c) Al generar las curvas de resistividad en función de la temperatura con los valores de τ_i obtenidos, obtenemos curvas peores que las de la etapa anterior.

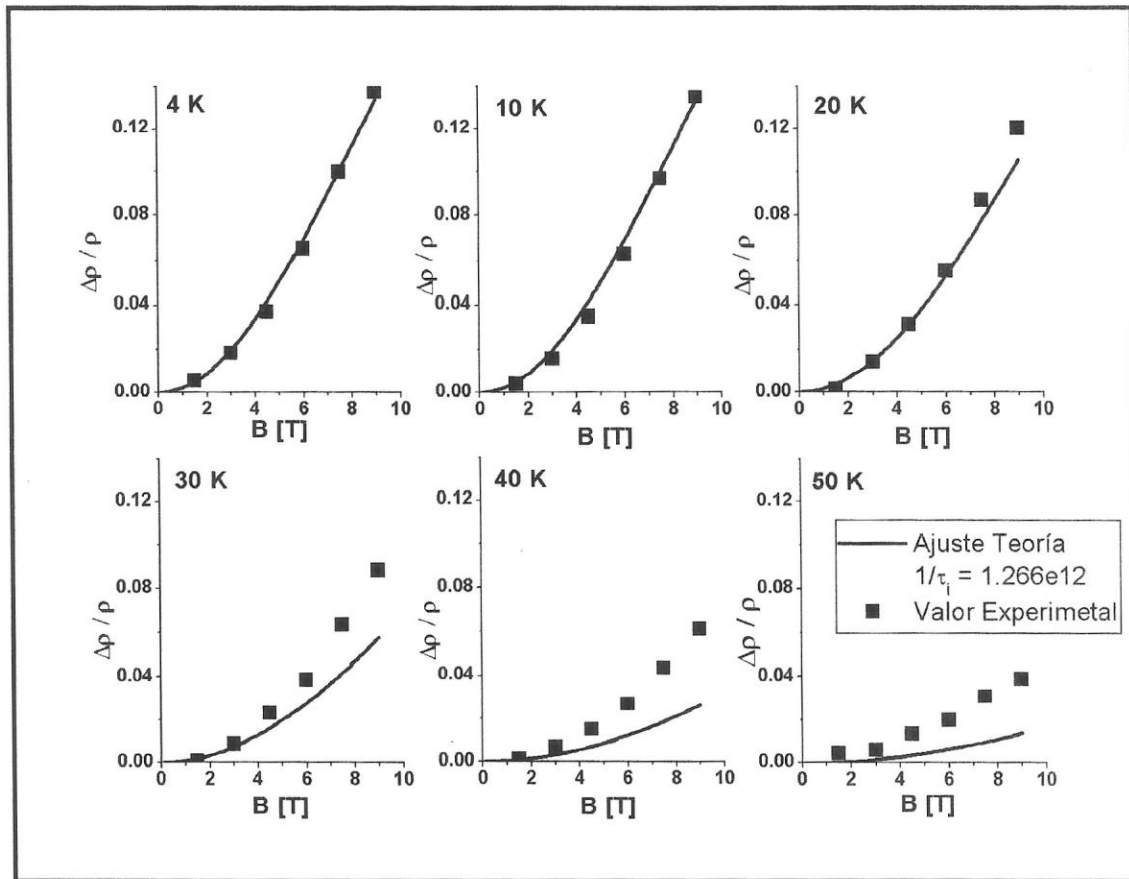


Figura 12: Gráficos de magnetorresistencia en función del campo magnético para cada temperatura en la película de 185 nm, ajustando $\Delta\rho/\rho$ (4 K) con la teoría de Calecki bajo la aproximación diagonal de la matriz de tiempos de colisión. La línea continua representa el ajuste. Los símbolos representan los valores experimentales de magnetorresistencia. En el recuadro, aparece el valor de $1/\tau_i$ [s^{-1}] que se obtuvo con el ajuste.

Los resultados generales del proceso, se pueden resumir en dos puntos:

- Si “ τ_i ” es determinado ajustando la resistividad a 4 K, entonces la teoría de Calecki, no describe ni los datos de resistividad en función de la temperatura, ni los de magnetorresistencia en función del campo.
- Por el contrario, si determinamos “ τ_i ” ajustando la magnetorresistencia a 4 K, entonces la teoría describe apropiadamente la magnetorresistencia como función del campo a temperaturas bajas, pero no a altas temperaturas. Sin

embargo las curvas de resistividad en función de la temperatura no describen los datos experimentales.

5.- CONCLUSIONES

1.- Por primera vez, se han fabricado películas delgadas de oro sobre mica donde el scattering electrón-superficie rugosa, domina el transporte de carga a bajas temperaturas.

2.- Por primera vez, se ha logrado medir la magnetorresistencia y el efecto Hall en una serie de películas, donde el scattering electrón-superficie rugosa domina ambos efectos. En esta tesis, se informa el resultado de las mediciones de magnetorresistencia transversal.

3.- Las mediciones de magnetorresistencia muestran una clara dependencia del espesor. Este comportamiento fue predicho por Sondheimer en 1950, y no había sido medido hasta la fecha.

4.- Al intentar explicar el comportamiento de los datos experimentales con una teoría clásica de dos portadores, que atribuye el efecto a la morfología de la superficie de Fermi, no se pueden describir bien los datos. El ajuste además conlleva a una dependencia de espesor, por tanto, no podemos explicar el fenómeno ignorando el scattering electrón-superficie rugosa.

5.- Al emplear las teorías que basan su explicación en la morfología de la muestra con una superficie de Fermi esférica, obtenemos mejores resultados. La teoría de Sondheimer describe el comportamiento de las curvas de resistividad de las cuatro películas, pero subestima el valor de la magnetorresistencia. La teoría de Calecki bajo la

aproximación de elementos diagonales en la matriz de tiempo de relajación, describe comportamiento de la magnetorresistencia, pero no el de la resistividad.

6.- Finalmente, cabe destacar la importancia de la fabricación y método de medición de las películas delgadas que abre nuevas interrogantes para continuar este trabajo. Algunas de ellas son:

- a) Completar el análisis de la teoría de Calecki diagonalizando la matriz numéricamente.
- b) Hacer una análisis similar a éste para el efecto Hall.
- c) Medir y analizar la magnetorresistencia longitudinal en sus dos formas (campos eléctricos y magnéticos paralelos contenidos en el plano de la película, y campos eléctricos y magnéticos perpendiculares contenidos en el plano de la película).
- d) Medir la rugosidad de las películas con un STM.
- e) Buscar correcciones a las teorías anteriormente descritas que permitan mejorar la descripción de los datos, etc.

6.- BIBLIOGRAFIA

1. E. H. Sondheimer, 1950. The Influence of a Transverse Magnetic Field on the Conductivity of Thin Metallic Films. *Phys. Rev.* **80** : 401- 407.
2. D. Calecki, 1990. Galvanomagnetic phenomena and surface roughness in thin metallic films. *Phys. Rev.* **B42**: 6906 – 6915.
3. A. B. Pippard, 1989. *Magnetoresistance in Metals*. Cambridge University Press. Capítulo VI.
4. P.M.Th.M. van Attekum et al, 1984. Influence of grain boundary and surface Debye temperature on the electrical resistance of thin gold films. *Phys. Rev.* **B29** 645.
5. R. C. Munoz et al, 2000. Surface roughness and surface-induced resistivity of gold films on mica: Application of quantitative scanning tunneling microscopy. *Phys. Rev.* **B62** 4686-4697.
6. N. W. Ashcroft y N. D. Mermin, 1976. *Solid State Physics*. Sunder College Publishing. Capítulos XII y XV.
7. M.S.P. Lucas, 1964. Electrical Conductivity of Thin Metallic Films with unlike Surface. *J. Appl. Phys.* **36**: 1632-1635.
8. R.A. Matula, 1979. Electrical Resistivity of Copper, Gold, Palladium and Silver. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **8** 1147.