

UCH - FC
DOS - F
C 117
c. 1

TEORIA DE TRANSPORTE EN METALES FERROMAGNETICOS

GUILLERMO G. CABRERA,

Licenciado en Ciencias con mención en Física,

Universidad de Chile (1971).

Trabajo presentado a la Facultad de Ciencias de la Universidad de Chile
como requisito para optar al grado de Doctor en Ciencias con mención en Física.

Marzo de 1975.



FACULTAD DE CIENCIAS
DOCTORADO EN CIENCIAS
MENCION EN FISICA

INFORME SOBRE TESIS DOCTORAL DEL SR. GUILLERMO CABRERA OYARZUN

Los miembros de esta Comisión Examinadora en atención a :

1. Haber leído detenidamente la tesis doctoral del Candidato a Doctor en Física, Sr. Guillermo Cabrera O., sobre el tema : "Teoría de Transporte en Metales Ferromagnéticos".
2. Haber participado en el examen de defensa de la Tesis, el día 15 de Mayo de 1975.
3. Haber considerado los informes sobre la Tesis dados por los Profesores: Dr. Leo Falicov de la Universidad de California, Berkeley, y Dr. Miguel Kiwi, actualmente en la Universidad Simón Bolívar, Venezuela.

Consideran que la Tesis Doctoral del Sr. Cabrera, es un testimonio de su creatividad y un valioso aporte a la Teoría de Transporte en Metales Ferromagnéticos.

Calificamos por tanto, dicha Tesis con nota Siete (7 en la escala de 1 a 7).

DR. LIPO BIRSTEIN

DR. FRANCISCO CLARO

DR. PETER KURI

DR. J. ROBERTO MORALES

DR. RICARDO RAMIREZ

SEÑOR PRESIDENTE
COMISION DE DOCTORADO
FACULTAD DE CIENCIAS
DR. GABRIEL TRAVERSO R.
P R E S E N T E



Dedicado con todo afecto y agradecimiento
a mis padres, y también a Alejandro, mi mejor
amigo.

G.G.C.

AGRADECIMIENTOS

El trabajo de investigación original que contiene esta Tesis fue realizado en la Universidad de California, en el Campus de Berkeley, durante el transcurso de una beca otorgada por el Convenio Universidad de Chile - Universidad de California en los años 1973 - 1974.

Quiero agradecer aquí el permanente apoyo y estímulo prestado por el Prof. Leo M. Falicov durante mi estadía en Berkeley y su generosa ayuda económica para completar mi trabajo. En cierto modo esta Tesis representa un tributo a sus importantes contribuciones al campo de la Fermiología.

Mis más sinceros agradecimientos van dirigidos también al Dr. Miguel Kivi, a quien debo gran parte de los fundamentos de mi formación científica: Miguel fue un excelente profesor de mi licenciatura, director de mi Tesis de Licenciado y más tarde mi tutor al comienzo de mi programa de doctorado.

Debó agradecer también a mis amigos y compañeros de trabajo en Berkeley, su apoyo, las constructivas discusiones y los gratos momentos que pasé junto a ellos. No puedo dejar de mencionar a Delita Koeller, Nicolás García, Michel Avignon y Eric Hsu. Un agradecimiento general a todo el grupo de Física del Sólido Técnico de la Universidad de California en Berkeley, por la excelente acogida que me brindaron.

Mi vuelta a Chile hubiera sido más accidental de no haber contado con la desinteresada ayuda de Jaime Pilsafer, Víctor Moreno, J. Roberto Morales y Ricardo Ramírez. Para todos ellos, junto al resto del Departamento de Física de la Facultad de Ciencias, mis agradecimientos por el estímulo recibido y por el placer de las animadas charlas a la hora del café.

Quiero expresar también mi reconocimiento y gratitud a mis padres, a quienes va dedicada esta Tesis. Como es lógico, no siempre hemos estado de acuerdo en cuanto a escala de valores y actitud frente a la vida. Sin embargo quiero agradecerles el respeto que siempre han tenido por mis opiniones, lo cual ha creado una relación basada en lazos afectivos y racionales, desprovistos de una ciega autoridad paternal.

Por último quiero agradecer al Convenio Universidad de Chile - Universidad de California las facilidades prestadas durante mi estadía en Berkeley, y a la Fundación Ford por el financiamiento de mi beca.

Esta Tesis fue terminada a pesar de los esfuerzos que hizo Lucy, mi mujer, por lo contrario. Debo confesar, eso sí, que muchas de sus interrupciones fueron sumamente agradables y que finalmente me acostumbé a ellas.

GUILLEMO G. CABRERA

Santiago, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile.

CONTENIDO

DEDICATORIA	Pag.i
AGRADECIMIENTOS	Pag.ii
CONTENIDO	Pag.iv
NOTA	Pag.vii
@ 1. INTRODUCCION	Pag.1.1
@ 2. PROPIEDADES GALVANOMAGNETICAS DE LOS METALES : LA INTEGRAL DE CHAMBERS Y LA TEORIA DE LIFSHITZ	Pag.2.1
<u>2-1</u> Un breve estudio de la Superficie de Fermi	Pag.2.1
<u>2-2</u> Dinámica de los Electrones de Bloch	Pag.2.8
<u>2-3</u> Propiedades Semiclásicas de Transporte	Pag.2.13
<u>2-4</u> Propiedades Galvanomagnéticas para campos magnéticos muy grandes : La teoría de Lifshitz	Pag.2.25
@ 3. ESTRUCTURA DE BANDAS Y SUPERFICIE DE FERMI DE LOS METALES FERROMAGNETICOS : EL HIERRO, UN EJEMPLO ILUSTRATIVO	Pag.3.1
<u>3-1</u> Modelos para la estructura de bandas y la Superficie de Fermi del Fe	Pag.3.1
<u>3-2</u> Propiedades de Simetría en la Teoría de Bandas de los metales ferromagnéticos	Pag.3.16

@ 4. ESTRUCTURA DE DOMINIOS Y RESISTIVIDAD RESIDUAL DE LAS PAREDES DE BLOCH : MAGNETORESISTENCIA PARA CAMPOS MAGNETICOS PEQUEÑOS	Pag.4.1
<u>4-1</u> Introducción	Pag.4.1
<u>4-2</u> Método de Cálculo	Pag.4.8
<u>4-3</u> Cálculo del Efecto Túnel: el coeficiente de Reflexión	Pag.4.12
<u>4-4</u> Calculo de la Resistividad en la Pared de Bloch.	
Conclusiones.	
1. No inclusión de Efectos Diamagnéticos	Pag.4.15
2. Inclusión de Efectos Diamagnéticos para una pared de Bloch muy angosta	Pag.4.25
@ 5. INCLUSION DE RUPTURA MAGNETICA EN LAS PROPIEDADES DE TRANSPORTE	
TE	Pag.5.1
<u>5-1</u> Ruptura Magnética	Pag.5.1
<u>5-2</u> Ruptura Magnética y Propiedades de Transporte	Pag.5.8
@ 6. PROPIEDADES DE TRANSPORTE EN LOS METALES FERROMAGNETICOS EN PRESENCIA DE RUPTURA MAGNETICA Y DE UN MECANISMO DE SCATTERING DEPENDIENTE DEL SPIN	Pag.6.1
<u>6-1</u> Introducción	Pag.6.1
<u>6-2</u> Los Términos de Scattering y las Ecuaciones de Evolución	Pag.6.3
<u>6-3</u> La Ecuación de Boltzmann y la Ruptura Magnética	Pag.6.6
<u>6-4</u> Ejemplos, Modelos y Soluciones	Pag.6.13

6-5 Conclusiones y Discusión Pag.6-26

7. CONCLUSIONES FINALES Pag.7-1

APENDICE A
Dinámica de los Electrones de Bloch

APENDICE B
La Densidad de Probabilidad de Sobrevivencia $P(t, t_0)$

APENDICE C
Cálculo del coeficiente $\alpha_{xy}^{(1)}$ de la Conductividad, responsable del
Efecto Hall

APENDICE D

APENDICE E
La Superficie de Fermi y los Efectos de Muchos Cuerpos

APENDICE F
Algunos Resultados Exactos para los Modelos del Cap.6

REFERENCIAS

NOTA

Se han tomado algunas palabras directamente del inglés sin ningún intento por traducirlas. Muchos de estos vocablos carecen de un equivalente adecuado en el idioma español y se ha preferido el inglés para evitar confusiones. Otros necesitan de varias palabras para ser traducidos con cierta precisión.

Entre los términos tomados del inglés figuran :

- Scattering
- Gap
- Spin, spines, spin-flip
- Tight-binding,

que son familiares a todo físico del Sólido.

§ 1. INTRODUCCION

En 1907 Pierre Weiss ¹ dió un paso fundamental en la explicación del ferromagnetismo al postular la existencia de los llamados dominios ferromagnéticos. Esto dió respuesta a la pregunta de principios de siglo de porqué el hierro (Fe) no es espontáneamente ferromagnético y permitió elucidar algunos aspectos del ferromagnetismo que no son capaces de una explicación atómica directa, como el fenómeno de histéresis. Weiss propuso que un campo molecular sumamente intenso, llamado campo de Weiss, alinea los momentos magnéticos de los electrones, pero que este campo se orienta en diversas direcciones en los diferentes cristales elementales del sólido, siendo el estado de mínima energía aquél donde todos los circuitos magnéticos están cerrados. La hipótesis de Weiss tuvo una brillante confirmación en los años siguientes ².

El descubrimiento de la naturaleza correcta del ferromagnetismo aparece con el advenimiento de la Mecánica Cuántica. La explicación de la acción giroenergética $g \approx 2$ para la mayor parte de los materiales ferromagnéticos indicaría que sólo los spines participan de las propiedades gromagnéticas de los átomos.

En 1929, Heisenberg ³ demostró que el Principio de Exclusión de Pauli combinado con el espín de los electrones, modifica la repulsión coulombiana de tal manera que los electrones vecinos se comportan como si existiera un acoplamiento entre sus spines según el hamiltoniano

$$H = \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} + V_i \right) - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \cdot \sigma_j$$

(1.1)

donde $\vec{\sigma}_1$ y $\vec{\sigma}_2$ son los spines de los electrones y J es la llamada energía de intercambio, que depende de la distancia entre los electrones. Si las funciones de onda de los electrones no se traslapan, es decir si están muy separados, la función J se anula.

Heisenberg ⁴ fue el primero en notar que este efecto, si J es negativo, ofrece una explicación natural del ferromagnetismo. Si el acoplamiento local de los spines descrito por (1-1) se extiende por todo el cristal, los spines tenderán a alinearse produciendo una resultante ferromagnética. Desde entonces se ha reconocido que el origen del ferromagnetismo proviene de la interacción de intercambio, aunque debido principalmente a las dificultades matemáticas se ha temido que introducir una serie de teorías fenomenológicas. Básicamente son éstas las líneas seguidas desde entonces.

Para aclarantes, el Hamiltoniano de Heisenberg (1-1) resultó ser una buena descripción del problema. Bloch ⁵ y Slater ⁶ encontraron que las excitaciones elementales de este Hamiltoniano tienen la forma de ondas de spin.

También Bloch ⁷ en 1929 fue el primero en estudiar el problema del ferromagnetismo en un gas de electrones libres; la configuración ferromagnética tiene mayor energía que la no magnética para concentraciones muy bajas de un gas de electrones libres, en la aproximación de Hartree-Fock. Algunos años después, Wigner ⁸ demostró en un cálculo más refinado que la introducción de la energía de correlación (la tendencia manifestada por un número par de electrones con spines muy paralelos a evitarse debido a la repulsión de Coulomb) favorece fuertemente al estado no magnético. Sin embargo el trabajo pionero de Bloch abrió el campo del magnetismo itinerante, éste es del magnetismo

debido a los electrones de conducción en metales. En 1937 Slater ⁹ formuló una teoría del ferromagnetismo en metales basada en sus cálculos de banda para níquel (Ni) ¹⁰. A ésto siguió el tratamiento fenomenológico de Stoner ¹¹ para el ferromagnetismo de bandas.

Para Fe, Ni y cobalto (Co) el modelo itinerante parece ser el más apropiado ¹². Cálculos de la estructura de bandas ^{13 - 17} así como experimentos para determinar la Superficie de Fermi (SF) ^{18 - 19} han dado como resultado un cuadro bastante parecido al antiguo modelo de Stoner ¹¹.

Paralelamente, el estudio de los dominios de Weiss indicó que éstos no coinciden necesariamente con los cristales físicos. Sus tamaños están determinados por la superposición de varios efectos como magnetorestricción, energía de intercambio, energía de anisotropía y efectos de superficies. Contribuciones de Heisenberg ²⁰, Bloch ²¹ y de Landau y Lifshitz ²² sentaron las bases del llamado micromagnetismo. En un célebre trabajo en 1935, Landau y Lifshitz ²² determinaron la distribución de los momentos magnéticos en un cristal ferromagnético, el ancho de los dominios y la velocidad de propagación de las paredes entre dominios o paredes de Bloch en presencia de un campo magnético externo. Trabajos posteriores, principalmente de W.F. Brown y sus colaboradores, han dado los fundamentos matemáticos para la teoría de dominios.

Como ya se ha mencionado, el problema del ferromagnetismo es un problema cooperativo de muchos cuerpos que incluye aspectos como el intercambio y la correlación. La gran mayoría de los tratamientos del problema se han hecho en base a la aproximación de Hartree-Fock y otras aproximaciones autoconsistentes. Un tratamiento asintóticamente exacto del problema de muchos cuerpos puede for-

mularse en base a la teoría de Landau para el líquido de Fermi ^{12, 23}.

Las propiedades de simetría de los metales ferromagnéticos han sido estudiadas por Falicov y Ruvalds ²⁴. Los argumentos usuales de teoría de grupos no son válidos en este caso, pues la presencia de una magnetización neta destruye la simetría de inversión temporal, causando la separación de las bandas de diferente spin. La reducción de la simetría va más allá aún; el grupo resultante contiene solamente aquellas operaciones del grupo espacial paramagnético que dejan invariante el pseudovector \vec{B} de la inducción magnética. Cuando se considera el acoplamiento de spin-órbita, las bandas de spin hacia arriba (\uparrow) y spin hacia abajo (\downarrow) se hibridizan removiendo gran parte de la degeneración accidental. La SF resultante (ver, por ejemplo, Ref.25) presenta órbitas de spin hibridizado y gaps de energía (debidos a la interacción de spin-órbita) que pueden sufrir ruptura (transiciones entre bandas) al aplicar un campo magnético intenso.

La información experimental sobre la SF de los metales ferromagnéticos se ha obtenido en base al efecto de de Haas-van Alphen ^{18- 19} y en base al estudio de la magnetoresistencia ^{26 - 30}. Estas mediciones son de gran importancia pues muestran que la SF tiene hojas correspondientes a los electrones d, y por lo tanto invalidan cualquier modelo que trate a los electrones 3d como localizados.

Resumiendo, hagamos las siguientes consideraciones:

(a) La explicación de las propiedades galvanomagnéticas de metales ferromagnéticos para campos pequeños debe tomar en cuenta la estructura de dominios, pues ésta juega un papel importante cuando la muestra no está



saturada ²⁶ - ³⁰ .

(b) Las propiedades intrínsecas de dominios simples son de por sí bastante complicadas debido a la variedad de los mecanismos de scattering (electrón-electrón, electrón-fonón, electrón-magnón, spin-órbita, etc.). A esto hay que agregar la complejidad de la SF, pues los electrones de distinto spin (mayoría y minoría) se mueven en distintos potenciales autoconsistentes. La separación de energía debida al intercambio es bastante grande (~ 2 eV), dando como resultado superficies de Fermi bien distintas para cada spin.

(c) La magnetización neta reduce la simetría; entre otras la simetría de inversión temporal es eliminada. El acoplamiento de spin-órbita remueve gran parte de la degeneración accidental y produce órbitas de spin hibridizado. La ruptura magnética (en inglés "magnetic breakdown") puede producir toda una gama de nuevas órbitas susceptibles de ser observadas experimentalmente.

(d) La mayor parte de los problemas tratados hasta ahora de intercambio itinerante se refieren al gas de electrones libres. La inclusión de un potencial periódico fuerte, como es el caso de los metales de transición, complica tremendamente el cálculo, requiriendo un enorme trabajo de computación ¹² .

Como podemos apreciar, las propiedades básicas parecen entenderse bien, aún cuando todavía resta de explicar algunos efectos y de explorar algunos mecanismos teóricos.

En esta tesis abordaremos algunos de estos temas que incluyen:

(i) Diferencia en la resistividad residual de cristales ferromagnéticos al pasar de una estructura de multidominios (alta resistividad) a una estructura de dominio simple (baja resistividad). La diferencia se manifiesta como

una brusca disminución de la resistencia eléctrica (magnetoresistencia negativa) cuando el campo magnético aplicado varía entre 0 a 100 G ^{26 - 30}. Veremos que los resultados experimentales pueden explicarse en términos del efecto combinado del scattering de los electrones de conducción con las paredes de Bloch, y de la deflexión diamagnética de sus trayectorias al pasar de un dominio ferromagnético a otro ^{31 - 32}.

(ii) Para campos magnéticos muy grandes (hasta 200 kOe), la magnetoresistencia transversal del Fe muestra un comportamiento extraño. El exponente en la relación $\rho/\rho_0 = a B^n$ toma valores entre 1.8 - 1.9 para campos magnéticos de hasta 90 kOe para todas las direcciones del campo y de la corriente, revelando el comportamiento típico de un metal compensado; después n decrece a 1.3 - 1.5 para 150 kOe y puede llegar a valores menores que 1.0 para algunas direcciones ^{30 , 33}.

Estas observaciones sugieren que el fenómeno llamado ruptura magnética puede estar jugando algún papel significativo. Se verá que los resultados experimentales pueden explicarse como una transición entre dos regímenes de magnetoresistencia cuadrática con B ^{34 - 35}.

(iii) Un efecto no explorado teóricamente, y que estudiaremos en detalle en el Cap.6, es la influencia de la separación de energía debida al intercambio (exchange splitting) sobre las propiedades de transporte mediante los mecanismos de relajación.

La interacción de spin-órbita da lugar a un mecanismo de relajación que depende del spin. La mayor parte de las colisiones elásticas conservan el spin, ésto es, una partícula en la SF de un determinado spin sólo puede ser

llevada a otro punto de la SF del mismo spin mediante una de estas colisiones. Este mecanismo, que conserva el spin, está caracterizado por un tiempo de relajación τ "relativamente corto" y produce un estado de "cuasi-equilibrio" uniforme en las distribuciones de cada spin, pero sin equilibrio entre los diferentes spines.

La interacción de spin-órbita, aunque débil, da lugar a colisiones con cambio de spin. Este scattering está caracterizado por un segundo tiempo de relajación τ_s , "relativamente largo", y es el responsable del equilibrio final alcanzado por las distribuciones de los spines ³⁶.

Aunque el mecanismo extra de relajación no produce ningún efecto cualitativo nuevo en la magnetoresistencia, puede causar cambios de las propiedades ferromagnéticas ³⁶.

En el Cap.2 se comienza haciendo una revisión de las propiedades semi-clásicas de transporte. Bajo ciertas condiciones de carácter bien general, la ecuación de Boltzmann puede reducirse a una integración para la obtención del llamado camino efectivo de los electrones y usualmente referido como la integral de trayectoria de Chambers ³⁷. Este es un concepto útil y de fácil extensión cuando se incluyen la curvatura de las órbitas debidas a un campo magnético y efectos de ruptura magnética.

Después se analiza los diferentes comportamientos de la magnetoresistencia para campos magnéticos grandes, según la topología de la SF y los varios tipos de órbitas. Esto proporciona la teoría clásica de Lifshitz ³⁸.

El Cap.3 está dedicado a una revisión de la estructura de bandas y de la SF de los metales ferromagnéticos y en especial del Fe. Se analizan los

diferentes cálculos de bandas ^{13 - 17} , ²⁵ , así como la información experimental obtenida para la SF en base al efecto de de Haas-van Alphen ^{18 - 19} y en base a las propiedades galvanomagnéticas ^{26 - 30} , ³³ , ³⁵ .

El Cap.4 comprende el estudio de fenómenos galvanomagnéticos para campos pequeños cuando las propiedades de multidominios son importantes. Con la ayuda del concepto de camino efectivo puede calcularse la resistividad residual debida a las paredes de Bloch ^{31 - 32} .

Las modificaciones a la teoría de Lifshitz debidas a la inclusión de ruptura magnética, ésto es a las transiciones entre bandas, son analizadas en el Cap.5. La ruptura magnética puede cambiar radicalmente la topología de la SF y por consiguiente el comportamiento de los tensores galvanomagnéticos. Transiciones entre distintos regímenes orbitales son posibles y aparecen entonces nuevos tipos de dependencia de la magnetoresistencia con el campo magnético ³⁴ , ³⁵ .

Finalmente, el efecto combinado de un mecanismo de scattering dependiente del spin (al incluir el acoplamiento de spin-órbita por ejemplo) y de la ruptura magnética ³⁶ es analizado en el Cap.6.

El resumen de lo expuesto, junto con las conclusiones así como problemas aún por resolver, comprende el Cap.7.

§ 2. PROPIEDADES GALVANOMAGNETICAS DE LOS METALES : LA INTEGRAL DE CHAMBERS
Y LA TEORIA DE LIFSHITZ

2.1 Un breve estudio de la Superficie de Fermi.

No pretendemos realizar aquí un estudio extensivo de la SF y sus propiedades. La literatura ya existente es enorme y de carácter enciclopédico. Por lo tanto nos limitaremos a mencionar algunos conceptos que usaremos muy a menudo en las siguientes secciones y citaremos los libros y artículos más importantes en el tema.

Entre los libros y monografías más conocidos mencionaremos a Mercoureff⁴⁰, Falicov⁴¹, Cracknell⁴² y Harrison y Webb⁴³.

La SF contiene gran parte de la información de las propiedades electrónicas de los metales, especialmente en lo que concierne a transporte. Por ejemplo, como veremos más adelante, la topología de la SF es determinante en el comportamiento de las propiedades galvanomagnéticas.

La definición más simple de la SF recurre a la teoría de bandas, pero sabemos que la SF existe independientemente de dicha teoría⁴⁴. Sin embargo, para nuestros propósitos es suficiente suponer que los electrones en un metal son partículas independientes que se mueven en un potencial periódico $V(\vec{r})$. Cada electrón puede acomodarse en un estado cuántico que llamaremos (v, \vec{k}, σ) , donde v es el índice de banda, \vec{k} es el vector de onda restringido a la primera zona de Brillouin (1ª ZB) y σ es el índice de spin.

Si $\epsilon_v(\vec{k})$ es la energía de dicho estado (obtenida como autovalor de la Ec. de Schrödinger para una partícula), en equilibrio térmico la función de

(*) Ver Apéndice E.

distribución de los electrones es la función de Fermi-Dirac

$$f_{\nu\sigma}^{(o)}(\vec{k}) = \left(1 + \exp\left\{ \frac{(\epsilon_{\nu\sigma}(\vec{k}) - \mu_0)}{k_B T} \right\} \right)^{-1}, \quad (2-1)$$

donde μ es un parámetro que se determina escribiendo que la suma del número medio de electrones en todos los estados posibles es igual al número total N de electrones en el cristal:

$$\sum_{\vec{k}, \nu\sigma} f_{\nu\sigma}^{(o)}(\vec{k}) = N. \quad (2-2)$$

En principio μ es función de la temperatura, $\mu = \mu(T)$, y se denomina potencial químico (energía libre por electrón). Encontrar $\mu = \mu(T)$ requiere en principio el conocimiento de la densidad de estados $N(\epsilon)$. El cálculo clásico da ⁴⁵

$$\mu(T) \approx \mu_0 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \times \left(\frac{\partial}{\partial \epsilon} \ln N(\epsilon) \right)_{\epsilon = \mu_0} + \dots, \quad (2-3)$$

donde $\mu_0 = \lim_{T \rightarrow 0} \mu(T)$.

La constante μ_0 se llama el nivel de Fermi y la diferencia de energía entre el nivel de Fermi y el fondo de la banda de valencia se denomina la energía de Fermi ϵ_F .

$$\epsilon_F = \mu_0 - \epsilon_v \quad (2-4)$$

El conjunto de ecuaciones

$$\epsilon_{v\sigma}(\vec{k}) = \mu_0 \quad (2-5)$$

define una superficie de energía constante en el espacio recíproco (espacio \vec{k}); ésta se llama la Superficie de Fermi. A temperatura cero la SF separa los estados electrónicos ocupados de los estados desocupados.

En resumen, vemos que la naturaleza de la SF depende de dos factores: la estructura cristalina (que proporciona la estructura de bandas) y el número de electrones a distribuir en los diferentes estados de las bandas.

La energía de los electrones de Bloch es una función periódica en la red recíproca. Esto significa que las superficies de energía constante para cada banda se extienden periódicamente en todo el espacio recíproco y no están confinadas a una zona de Brillouin únicamente; cuando un electrón llega al borde de la zona, simplemente pasa a la zona siguiente en este esquema de zona repetida.

En este esquema de zona periódica, la intersección de la SF con un plano en el espacio \vec{k} produce una serie de líneas que se denominan órbitas. Las órbitas pueden ser abiertas o cerradas.

Varios casos deben ser considerados:

(i) Si la superficie de Fermi está enteramente contenida dentro de los límites de la zona, la SF es cerrada y todas sus órbitas son cerradas.

(ii) Si la SF consiste de varias partes pegadas a las caras de las zonas o partes alrededor de las esquinas, estas partes forman superficies cerradas en el esquema de zona periódica. En este caso todas las órbitas son también cerradas.

(iii) Las órbitas cerradas pueden ser de tipo electrón o de tipo hueco. Una órbita de tipo electrón encierra estados ocupados, es decir estados de más baja energía. Se define una órbita de tipo hueco como la que encierra estados desocupados o de más alta energía. En una órbita de electrón el vector velocidad de grupo $\vec{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \times \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k})$ apunta hacia afuera de la órbita, mientras que para una órbita de tipo hueco apunta hacia adentro.

(iv) Si la SF, en alguna de las zonas, se extiende desde una cara hasta otra, o desde un vértice hasta otro vértice, en el esquema de zona periódica ésto dará origen a una superficie múltiplemente conexa que se extenderá por todo el espacio recíproco.

Esta superficie abierta puede contener órbitas abiertas (que se extienden indefinidamente) para algunas direcciones y cerradas para otras.

La Fig.1 ilustra todos estos casos.

La clasificación de las órbitas que hemos dado es de suma importancia para el estudio de los fenómenos galvanomagnéticos. Para ello, necesitamos saber además, cómo se comportan los electrones de Bloch bajo la aplicación de campos externos. Esto se discute en la sección siguiente.

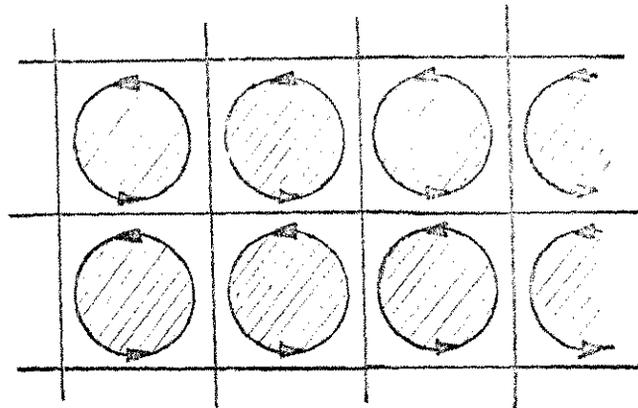
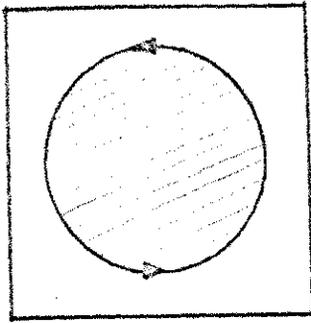


Fig.1(i) SF contenida enteramente en 1a Zona y las correspondientes órbitas cerradas de tipo electrón en el esquema de zona periódica.

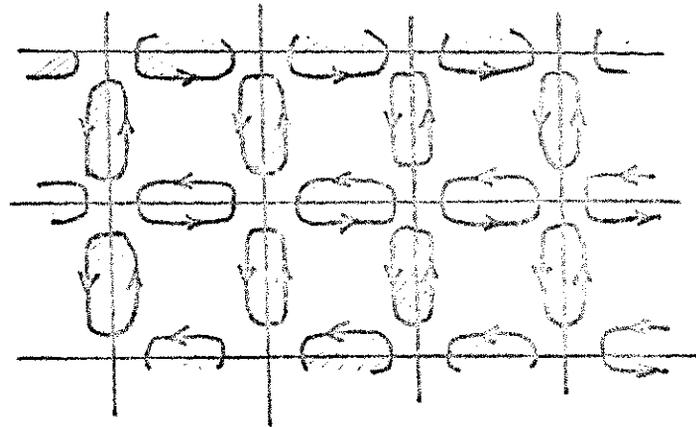
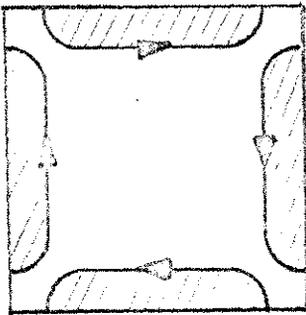


Fig.1(ii) Hojas de la SF pegadas a las caras de las zonas y sus órbitas cerradas de tipo electrón en el esquema de zona periódica.

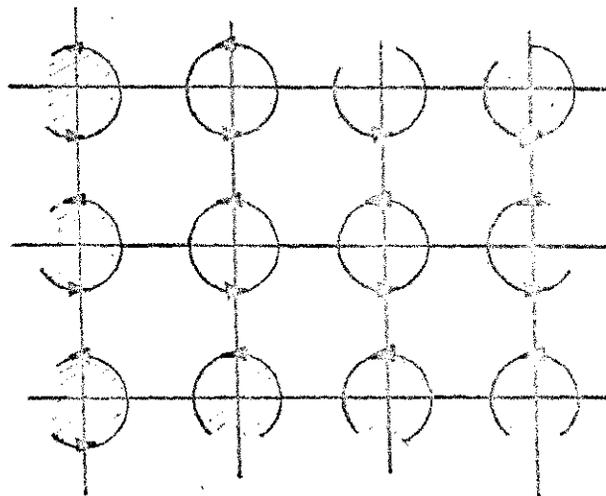
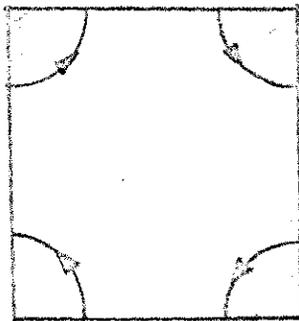


Fig.1(iii) Hojas de la SF alrededor de las esquinas. En el esquema de zona periódica obtenemos órbitas cerradas de tipo electrón.

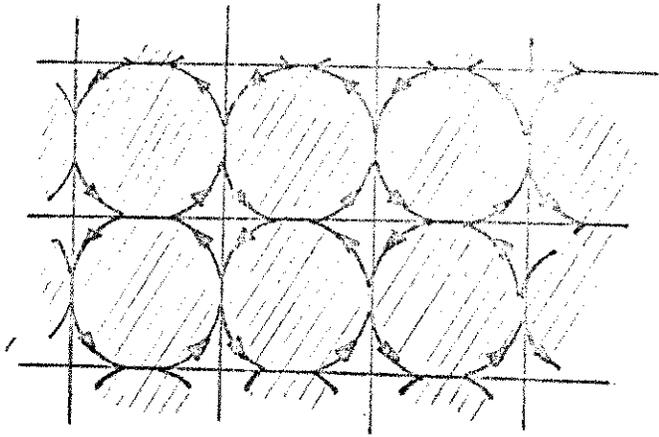
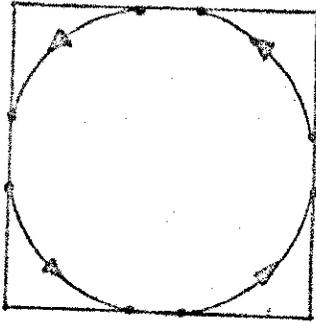


Fig.1(iv) Orbitas cerradas de tipo hueco.

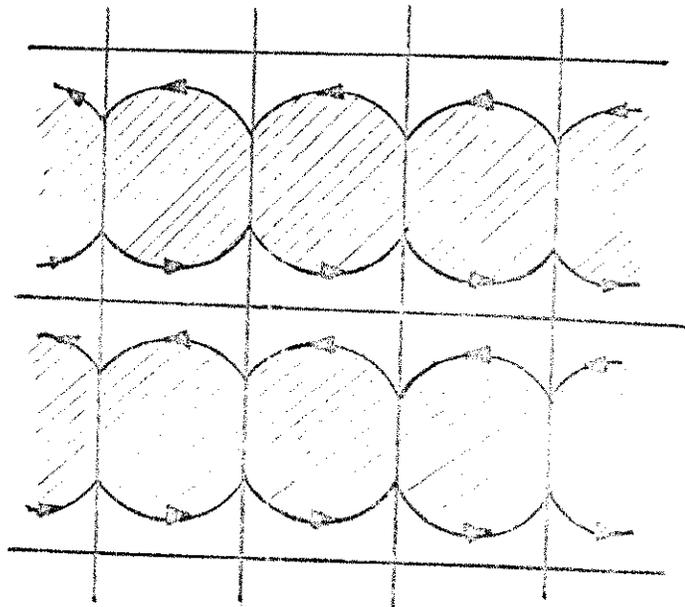
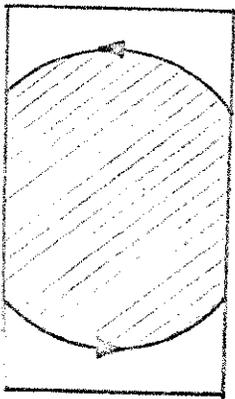


Fig.1(v) SF que se extiende desde una cara de la zona hasta otra. Hay órbitas abiertas.

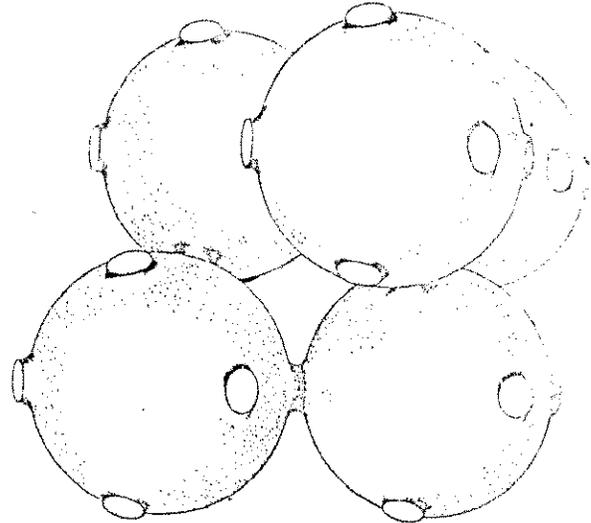
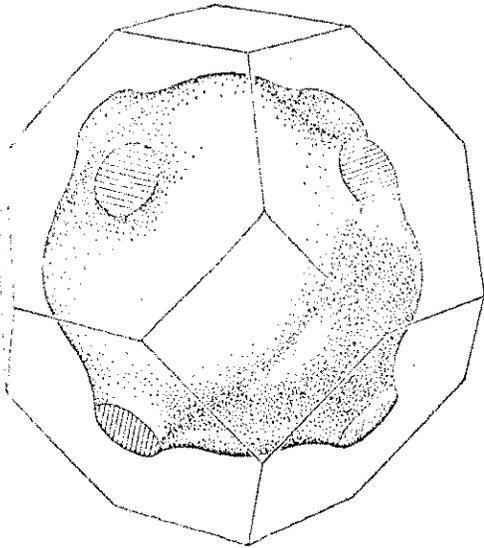


Fig.1(vi) SF del Cu. La estructura corresponde a fcc.

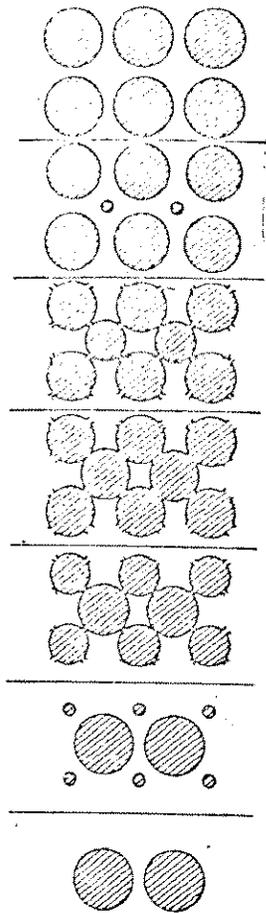


Fig.1(vii) Diversas secciones de la SF del Cu, mostrando diferentes tipos de órbitas.

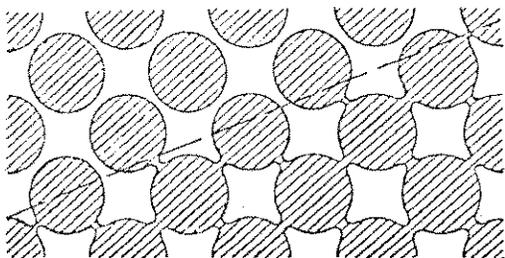
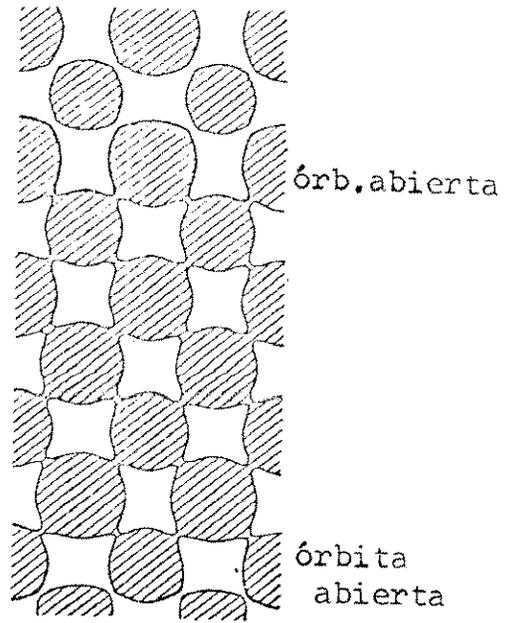


Fig. 1(viii) Órbita abierta aperiódica.

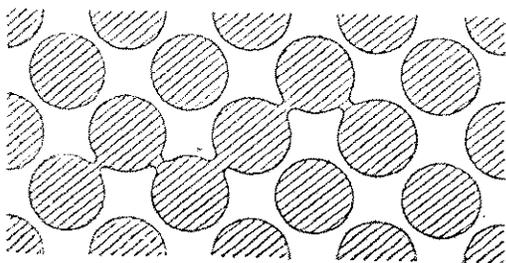


Fig.1(ix) Órbita extendida.

2.2 La Dinámica de los Electrones de Bloch.

Cuando los efectos del acoplamiento spin-órbita no son tomados en cuenta, ni tampoco se considera transiciones entre bandas - es decir los campos externos son suficientemente pequeños de modo que no causan ni ruptura de Zener ⁶² ni ruptura magnética - los índices de banda ν y de spin σ son constantes del movimiento. El paquete de ondas asociado a un electrón de Bloch en el cristal evoluciona en el tiempo de tal modo que el cambio del vector de onda \vec{k} dentro de una misma banda está dado por

$$\dot{\vec{k}}_{\nu\sigma} = -|e| \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v}(\vec{k}) \times \vec{H} \right) \quad (2-5)$$

donde $\vec{v}(\vec{k})$ es la velocidad de grupo para la banda $(\nu\sigma)$ y para el vector de onda \vec{k} y se expresa, en términos de la energía $\epsilon_{\nu\sigma}(\vec{k})$ de la banda, por

$$\vec{v}(\vec{k})_{\nu\sigma} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \epsilon_{\nu\sigma}(\vec{k}) \quad (2-6)$$

La validez de la relación (2-6) se discute en detalle en el Apéndice A, así como las condiciones para que no haya transiciones entre bandas.

El efecto puro de un campo eléctrico \vec{E} es mover el vector de onda \vec{k} en línea recta con velocidad uniforme en el esquema de zona repetida. El efecto causado por el campo magnético es un poco más complejo y puede verse de la relación (2-5). El cambio $\dot{\vec{k}}$ del vector de onda es siempre perpendicular tanto a la velocidad $\vec{v}(\vec{k})$ del electrón como al campo magnético \vec{H} . Pero la velocidad

es proporcional a $\nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k})$, de modo que la energía del electrón siempre permanece constante y el vector de onda \vec{k} se mueve entonces en una órbita en el espacio recíproco definida por las condiciones de

- a) energía constante, y
- b) componente de \vec{k} constante a lo largo de la dirección del campo magnético.

Si la energía del electrón que nos interesa es la energía de Fermi (y la mayor parte de las propiedades electrónicas de los metales se deben a estos electrones), entonces el vector \vec{k} se mueve en una órbita sobre la SF en un plano perpendicular al campo magnético como se muestra en la Fig.2. Esto conduce a estudiar en detalle la topología de la SF y los distintos tipos de órbitas que pueden aparecer en ella.

La trayectoria en el espacio real del centro del paquete de ondas está dada por

$$\vec{r}(t) = \vec{r}_0 + \int_0^t \vec{v}_{\vec{k}(t')} dt' \quad (2-7)$$

Quando se aplica solamente un campo eléctrico la Ec.(2-5) puede integrarse fácilmente. Para el caso de electrones casi libres y en ausencia de colisiones, la trayectoria real (2-7) es una parábola hasta que el vector \vec{k} llega al borde de la zona. Allí el electrón (para campos suficientemente pequeños) sufre una reflexión de Bragg y la velocidad cambia abruptamente (el vector de onda \vec{k} cambia en un vector de la red recíproca). A partir de aquí, la trayectoria real nuevamente es una parábola hasta que el electrón sufre una nueva reflexión de Bragg.

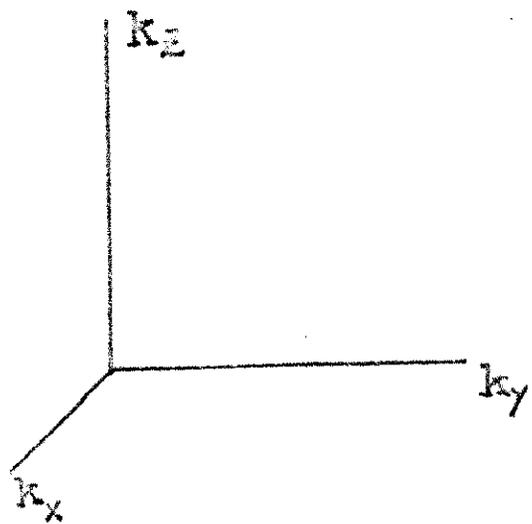
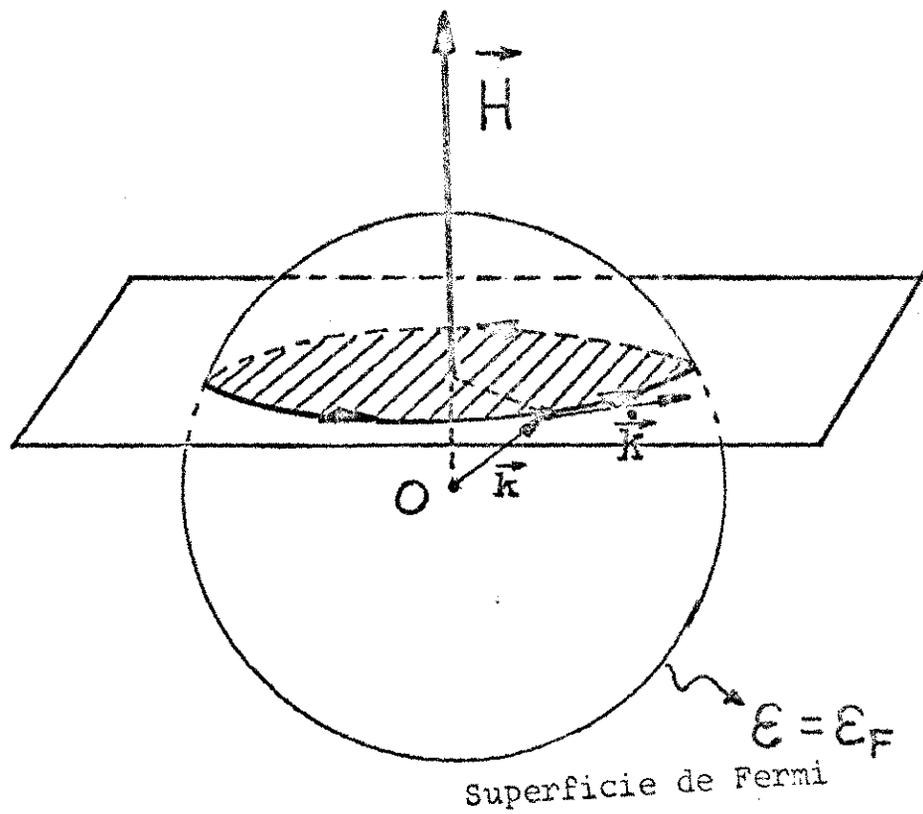


Fig.2 Orbita sobre la SF que describe un electrón en presencia de un campo magnético.

Analícemos ahora el caso cuando sólo se aplica un campo magnético. Si elegimos el sistema de coordenadas de modo que el eje Z apunte según el campo, la Ec.(2-5) da $k_z = 0$ y la integración proporciona

$$k_z = \text{cte.} ,$$

$$k_x = -|e|\hbar H / (c\hbar) \times (y - y_0) , \quad (2-8)$$

$$k_y = -|e|\hbar H / (c\hbar) \times (x - x_0) .$$

Las relaciones (2-8) muestran que la proyección de la trayectoria real en un plano perpendicular al campo magnético, puede obtenerse a partir de la órbita en el espacio recíproco mediante una rotación en $\pi/2$ en torno a la dirección del campo y la aplicación de una homotecia con un factor de escala $c\hbar / (|e|\hbar H)$. Esto es ilustrado en la Fig.3. Teniendo ésto en cuenta, vemos que órbitas abiertas en el espacio k dan lugar a trayectorias reales abiertas y órbitas cerradas en el espacio recíproco dan lugar a proyecciones cerradas de las trayectorias en un plano perpendicular al campo magnético.

Para el caso de electrones casi libres y en ausencia de colisiones, la proyección de la trayectoria real en dicho plano está compuesta de arcos de círculos y reflexiones repetidas de Bragg. En el caso de una órbita tipo hueco y bajo la acción del campo magnético, las reflexiones de Bragg producen una trayectoria de proyección cerrada en un plano perpendicular al campo magnético, descrita en sentido contrario al sentido de una órbita tipo electrón (ver Fig.14y). Es decir, un electrón en una órbita de hueco se comporta como una partícula con carga positiva.

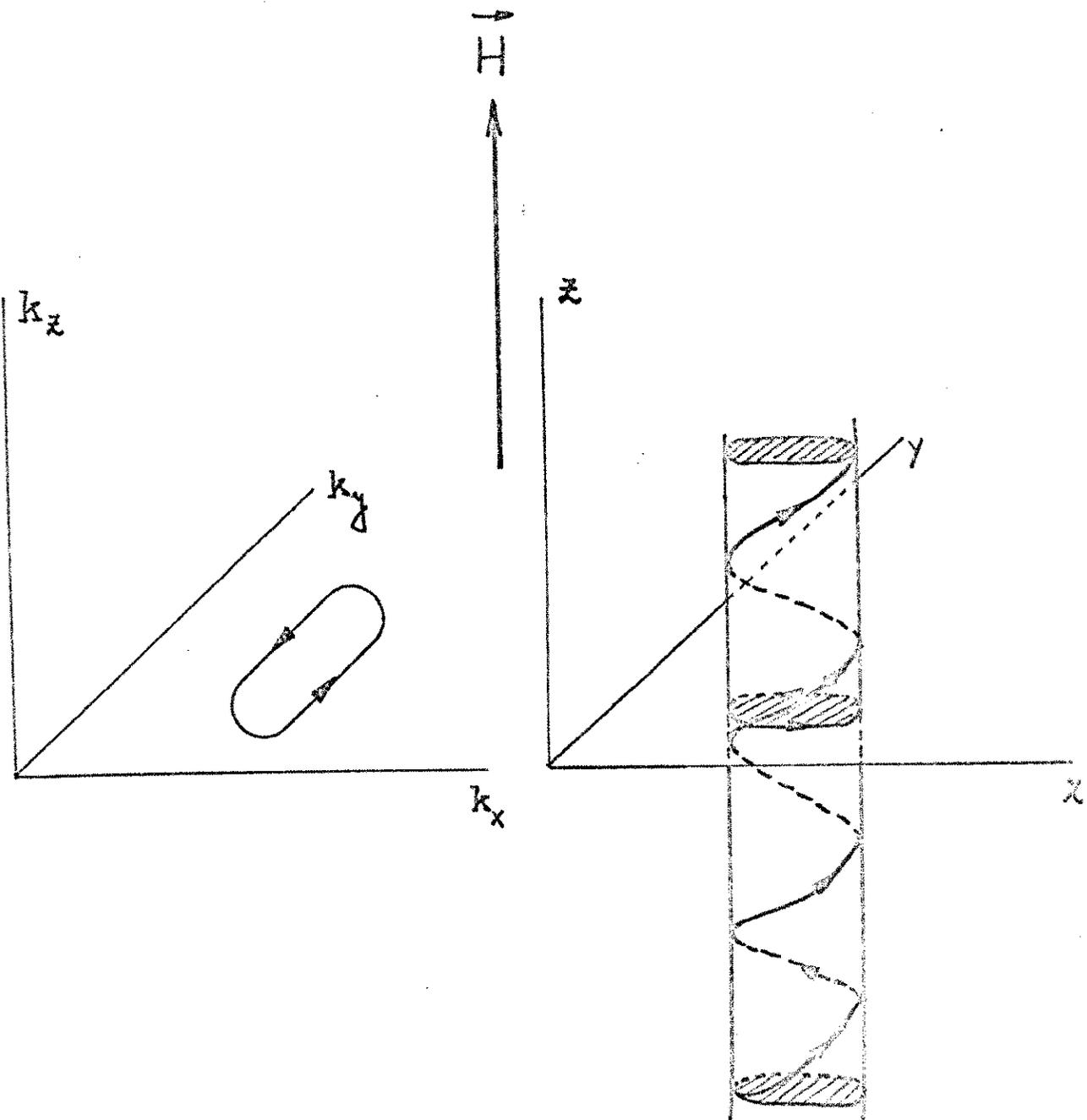


Fig.3 Correspondencia entre la trayectoria recíproca de un electrón y su trayectoria real cuando hay un campo magnético aplicado.

Las órbitas abiertas son particularmente importantes en fenómenos de transporte, pues la velocidad del electrón tiene un promedio distinto de cero, al promediar sobre el período de la órbita: la fuerza de Lorentz no es capaz de invertir el sentido de la velocidad.

2.3 Propiedades semiclásicas de Transporte.

Los electrones en un metal están sujetos a la acción de los campos y gradientes de temperatura. Simultáneamente sufren colisiones con impurezas, imperfecciones del cristal, fonones y otros tipos de excitaciones elementales.

El objetivo de la teoría de transporte es escribir y resolver una ecuación de continuidad para la función de distribución de los electrones - llamada Ecuación de Boltzmann-. Las diversas propiedades de transporte, como conductividad eléctrica y térmica, quedan determinadas una vez conocida la función de distribución.

Si junto a los gradientes de potencial se incluye gradientes de temperatura, la función de distribución de los electrones, además de depender del vector de onda \vec{k} , dependerá de la posición. Esto aparentemente trae problemas, pues los estados de Bloch no son localizados, y si conocemos el vector de onda en forma exacta no podemos especificar la posición de la partícula. De este modo hay que sacrificar cierta precisión en el número de onda para permitir que la función de distribución varíe con la posición, y para que la noción de trayectoria de la partícula tenga algún sentido.

En el tratamiento semiclásico, donde los efectos de coherencia de la fase de la función de onda no son tomados en cuenta, los electrones se comportan como partículas clásicas con trayectorias bien definidas descritas por las relaciones (2-5), (2-6) y (2-7). Los efectos cuánticos de ruptura (transiciones entre bandas) tampoco son considerados.

La ecuación de continuidad para la función de distribución $f(\vec{k}, \vec{r})$ de los electrones puede obtenerse a partir del Teorema de Liouville incluyendo el cambio debido a colisiones:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f(\vec{k}, \vec{r}) &= \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{k}, \vec{r}) + \vec{k} \cdot \nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}, \vec{r}) + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f(\vec{k}, \vec{r}) = \\ &= - \left(\frac{\partial f(\vec{k}, \vec{r})}{\partial t} \right)_{\text{col}} \end{aligned} \quad (2-9)$$

Las cantidades \vec{k} y \vec{v} se determinan según las relaciones (2-5) y (2-6).

En el caso estacionario $\partial f(\vec{k}, \vec{r})/\partial t$ se anula y la Ec.(2-9) puede escribirse

$$\begin{aligned} |e| \left\{ E + \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} \right\} f(\vec{k}, \vec{r}) - \vec{v}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{k}} f(\vec{k}, \vec{r}) = \\ = - \left(\frac{\partial f(\vec{k}, \vec{r})}{\partial t} \right)_{\text{col}} \end{aligned} \quad (2-10)$$

(o)
La función de distribución en equilibrio $f(\vec{k}, \vec{r})$ es la función de Fermi-Dirac (2-1).

Para nuestros efectos supondremos que las siguientes condiciones se cumplen:

(i) La función de distribución no depende de la posición, es decir no hay variación espacial de las magnitudes físicas ni hay efectos de superficie. Entonces

$$\nabla_{\vec{r}} f_{\vec{v}k} = 0 \quad (2-11)$$

(ii) La integral de colisión puede tratarse en la aproximación del tiempo de relajación. En este caso:

$$\left(\frac{\partial f_{\vec{v}k}}{\partial t} \right)_{col} = - \{ f_{\vec{v}k} - f_{\vec{v}k}^{(0)} \} / \tau(k) \quad (2-12)$$

donde $\tau(k)$ es el tiempo de relajación, en principio dependiente de k .

Bajo estas condiciones, y cuando se estudia efectos lineales en el campo eléctrico (ley de Ohm), la solución para la Ec. de Boltzmann (2-12) puede reducirse a una integración. Seguiremos aquí el tratamiento clásico de Chambers ³⁷.

Sea

$$g \equiv f - f^{(0)} \quad (2-13)$$

la desviación de la función de distribución medida desde el estado de equilibrio. Para mayor claridad omitiremos los índices ($v\sigma$) de banda y de spin. Sea τ el tiempo entre colisiones y supongamos que la función de distribución de los electrones satisface $g = 0$ inmediatamente después de una colisión (es decir la colisión hace que el electrón pierda "su memoria de los campos").

Observemos ahora, en el punto \vec{r} del espacio y en el tiempo t , cuántos electrones pasan con velocidad \vec{v} y energía ϵ . El valor $f(\vec{r}, \vec{v}, \epsilon, t)$ se encuentra entonces, integrando el número de electrones que han "nacido" de colisi-

siones en puntos previos de la trayectoria con energía $\epsilon - \Delta\epsilon$ (donde $\Delta\epsilon$ es la energía proporcionada por los campos desde el lugar de nacimiento hasta el punto \vec{r}), ponderado por la probabilidad de que el electrón llegue al punto \vec{r} . Es decir

$$f(\vec{r}_o, \vec{v}_o, t_o) = \int_{-\infty}^t dt f^{(o)}(\epsilon - \Delta\epsilon) P(t, t_o), \quad (2-14)$$

donde $P(t, t_o) dt$ es la probabilidad de que el electrón sufra una colisión en el intervalo de tiempo $(t, t+dt)$ y después se mueva un tiempo $t - t_o$ sin sufrir una colisión. El cálculo clásico de probabilidades (discutido en el Apéndice B) da

$$P(t, t_o) dt = dt/\tau \cdot \exp\{-(t-t_o)/\tau\}. \quad (2-15)$$

Si τ es una función del tiempo a través de k tendremos

$$P(t, t_o) dt = dt/\tau(t) \cdot \exp\left\{-\int_{t_o}^t ds/\tau(s)\right\}. \quad (2-16)$$

La densidad de probabilidad $P(t, t_o)$ satisface las siguientes propiedades:

(i) Normalización

$$\int_{-\infty}^t P(t, t_o) dt = 1. \quad (2-17)$$

(ii) $P(-\infty, t_o) = 0$, (2-18)

ya que la probabilidad de que un electrón haya colisionado en $t=-\infty$ y después

se mueva indefinidamente sin sufrir otra colisión es nula.

(iii) $P(t, t_0)$ satisface la siguiente ecuación diferencial:

$$P(t, t_0) = -\frac{d}{dt} \{ \tau(t) P(t, t_0) \} \quad (2-19)$$

Para efectos lineales en el campo eléctrico se cumple

$$f^{(0)}(\epsilon - \Delta \epsilon) = f^{(0)}(\epsilon) - \Delta \epsilon \left(\frac{df^{(0)}}{d\epsilon} \right), \quad (2-20)$$

donde el incremento de energía está dado por

$$\Delta \epsilon = -|e| \int_{t_0}^t \vec{E}(\vec{r}, s) \cdot \vec{v}(s) \, ds \quad (2-21)$$

El campo magnético no tiene efecto directo sobre $\Delta \epsilon$, pero sí afecta a la velocidad. Esta se determina integrando

$$\dot{\vec{v}} = -|e|/c \cdot \vec{v}(t) \times \vec{H} \quad (2-22)$$

con la ayuda de (2-6) y la condición inicial $\vec{v}(t_0) = \vec{v}_0$. En la Ec.(2-22) hemos omitido el término correspondiente al campo eléctrico, pues éste no contribuye a los efectos lineales (ley de Ohm).

La integración de (2-14) junto con la condición de normalización (2-17) y la propiedad (2-19) conducen a

$$g(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t) =$$

$$\begin{aligned}
 &= f(\vec{r}_o, \vec{v}_o, t_o) - f^{(o)}(\epsilon) \\
 &= -\left(\frac{df^{(o)}}{d\epsilon}\right) \cdot \int_{-\infty}^t \Delta \epsilon \cdot P(t, t_o) dt \\
 &= -\left(\frac{df^{(o)}}{d\epsilon}\right) \cdot \int_{-\infty}^t \Delta \epsilon \cdot \frac{d}{dt} \{ \tau(t) P(t, t_o) \} dt \quad (2-23)
 \end{aligned}$$

La última expresión en (2-23) puede integrarse por partes. La propiedad (2-18) y $\Delta \epsilon = 0$ dan

$$g(\vec{r}_o, \vec{v}_o, t_o) = \left(\frac{df^{(o)}}{d\epsilon}\right) \cdot \int_{-\infty}^t \tau(t) P(t, t_o) \frac{d}{dt}(\Delta \epsilon) dt, \quad (2-24)$$

que junto con las relaciones (2-16) y (2-21) proporcionan

$$g(\vec{r}_o, \vec{v}_o, t_o) = \left(\frac{df^{(o)}}{d\epsilon}\right) |e| \int_{-\infty}^t dt \{ E(\vec{r}, t) \cdot \vec{v}(t) \} \cdot \exp\left\{-\int_t^t ds/\tau(s)\right\}. \quad (2-25)$$

La Ec.(2-25) es la solución clásica de Chambers para la ecuación de Boltzmann en la forma de una integral de línea, para campos estacionarios o variables, uniformes o no uniformes.

Si el campo eléctrico es uniforme y estacionario, (2-25) se reduce a

$$g(\vec{r}_o, \vec{v}_o, t_o) = |e| \left(\frac{df^{(o)}}{d\epsilon}\right) \{ E \cdot \vec{v} \}, \quad (2-26)$$

donde el vector $\vec{\Lambda}$ se denomina camino efectivo y se expresa por

$$\vec{\Lambda} = \int_{-\infty}^t dt \vec{v}(t) \exp\left[-\int_t^t ds/\tau(s)\right] . \quad (2-27)$$

La densidad de corriente se escribe como

$$\vec{J} = -|e| \sum_{\vec{\sigma}, \vec{k}} g_{\vec{\sigma}}(\vec{k}) \vec{v}_{\vec{\sigma}}(\vec{k}) , \quad (2-28)$$

donde hemos vuelto a poner los índices de banda y de spin. Reemplazando (2-26) en (2-28) obtenemos

$$\begin{aligned} \vec{J} &= e^2 \sum_{\vec{\sigma}, \vec{k}}^{(o)} \left(-df_{\vec{\sigma}}/d\varepsilon\right) \vec{v}_{\vec{\sigma}}(\vec{k}) \{ \vec{E} \cdot \vec{\Lambda}_{\vec{\sigma}, \vec{k}} \} \\ &= (e^2/8\pi^3) \sum_{\sigma} \int_{\text{Todo } \vec{k}}^{(o)} \left(-df_{\vec{\sigma}}/d\varepsilon\right) \vec{v}_{\vec{\sigma}}(\vec{k}) \{ \vec{E} \cdot \vec{\Lambda}_{\vec{\sigma}, \vec{k}} \} d^3k . \end{aligned} \quad (2-29)$$

A temperaturas cercanas a 0°K la derivada $(-df_{\vec{\sigma}}/d\varepsilon)^{(o)}$ puede aproximarse muy bien por una función delta de Dirac

$$\left(-df_{\vec{\sigma}}/d\varepsilon\right)^{(o)} \approx \delta(\varepsilon_{\vec{\sigma}}(\vec{k}) - \varepsilon_F) , \quad (2-30)$$

en cuyo caso la integración (2-29) se reduce a una integración sobre la SF

$$\sum_{\vec{k}} \int_{\text{Todo } \vec{\sigma}} d^3k \delta(\varepsilon_{\vec{\sigma}} - \varepsilon_F) \vec{v}_{\vec{\sigma}}(\vec{k}) = \int_{\text{SF}} \frac{dS}{F} \cdot \frac{1}{|\vec{v}_{\vec{\sigma}}(\vec{k})|} .$$

Todas las
hojas

El tensor conductividad queda entonces (el signo \otimes denota producto tensorial) :

$$\underline{\underline{\sigma}} = (e^2/8\pi^3\hbar) \cdot \int_{SF} ds \frac{\vec{v}(k)}{v\sigma} / \left| \frac{\vec{v}(k)}{v\sigma} \right| \otimes \frac{\vec{\Lambda}(k)}{v\sigma} \quad , \quad (2-31)$$

donde el camino efectivo $\frac{\vec{\Lambda}(k)}{v\sigma}$ se expresa por

$$\frac{\vec{\Lambda}(k)}{v\sigma} = \int_{-\infty}^{\vec{t}(k)} dt \frac{\vec{v}(t)}{v\sigma} \cdot \exp\left\{-\int_t^{\vec{t}(k)} ds/\tau(s)\right\} \quad , \quad (2-32)$$

con $\frac{\vec{v}(t)}{v\sigma}$ determinado por la ecuación de evolución:

$$\hbar \dot{\vec{\kappa}} = -|e|\hbar/c \cdot \frac{\vec{v}(t)}{v\sigma} \times \vec{H} \quad (2-33)$$

y por la relación

$$\frac{\vec{v}(k)}{v\sigma} = \frac{1}{\hbar} \times \nabla_{\vec{\kappa}} \epsilon(\vec{\kappa}) \quad (2-34)$$



junto con la condición inicial

$$\frac{\vec{\kappa}(t)}{0} = \vec{\kappa} \quad , \quad \frac{\vec{v}(t)}{v\sigma} = \frac{\vec{v}(k)}{v\sigma} \quad . \quad (2-35)$$

El camino efectivo $\frac{\vec{\Lambda}(k)}{v\sigma}$ corresponde al camino libre medio local modificado por la presencia del campo magnético y los fenómenos de scattering y difracción.

Como ejemplo veamos el caso más sencillo de electrones libres con SF esférica para campo magnético nulo. Tendremos el conjunto de relaciones

$$\begin{aligned} \epsilon_{\sigma k} \vec{k} &= (\hbar^2/2m) k^2 \vec{k}, & \hbar \vec{k} &= 0, & \vec{v}_{\sigma k} &= \hbar/m \cdot \vec{k}. \end{aligned} \quad (2-36)$$

Si suponemos que τ es independiente del tiempo, la integración del camino efectivo es trivial y da

$$\Lambda_{\sigma k} \vec{k} = (\hbar\tau/m) \cdot \vec{k} = \vec{v}_{\sigma k} \tau, \quad (2-37)$$

que es la expresión clásica del camino libre medio.

El tensor conductividad se reduce a

$$\underline{\underline{\sigma}} = (e^2\tau/m) \cdot \left(\frac{k^3}{4\pi^3} \right)_F \cdot \int_{SF} \frac{ds}{F} \left(\hat{k} \otimes \hat{k} \right), \quad (2-38)$$

donde k es el vector de onda de Fermi.

Para una SF esférica (de radio k) tenemos

$$n = \frac{k^3}{3\pi^2} \quad , \quad \hat{k} = \begin{pmatrix} \text{sen } \theta \cdot \cos \phi \\ \text{sen } \theta \cdot \text{sen } \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (2-39)$$

donde n es la densidad de electrones.

La integración sobre la SF da

$$\underline{\underline{\sigma}} = (e^2 \tau n / m) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2-40)$$

que es el conocido resultado de la conductividad para electrones libres.

Veamos cómo cambia este cuadro cuando se aplica un campo magnético uniforme. Elijamos el eje Z de nuestro sistema de coordenadas según la dirección del campo magnético. Se cumplen las siguientes relaciones

$$\vec{v}(t) = \hbar / m \cdot \vec{\kappa}(t), \quad \hbar \dot{\vec{\kappa}}(t) = -(|e| \hbar / cm) \cdot \vec{\kappa}(t) \times \vec{H}. \quad (2-41)$$

Esto da las relaciones

$$\dot{\kappa}_z = 0, \quad \dot{\kappa}_x + \omega^2 \kappa_x = \dot{\kappa}_y + \omega^2 \kappa_y = 0. \quad (2-42)$$

La integración de (2-42) con la condición inicial

$$\vec{\kappa}(t=0) = \vec{k}$$

y su reemplazo en (2-32) lleva a

$$\Lambda_x(k) = (\hbar \tau / m) \cdot \{k_x + \omega \tau k_y\} / \{1 + \omega^2 \tau^2\}$$

$$\Lambda_y(k) = (\hbar \tau / m) \cdot \{k_x - \omega \tau k_y\} / \{1 + \omega^2 \tau^2\} \quad (2-43)$$

$$\Lambda_z(k) = (\hbar \tau / m) \cdot k_z,$$

donde ω es la frecuencia de ciclotrón, que para electrones libres se expresa por

$$\omega = (|e|H)/mc \quad (2-44)$$

El posterior reemplazo de (2-43) en (2-31) y la integración sobre la SF dan

$$\underline{\rho} = (m/ne^2\tau) \cdot \begin{pmatrix} \frac{\{1 + \omega^2\tau^2\}^{-1}}{c} & \frac{-\omega\tau\{1 + \omega^2\tau^2\}^{-1}}{c} & 0 \\ \frac{\omega\tau\{1 + \omega^2\tau^2\}^{-1}}{c} & \frac{\{1 + \omega^2\tau^2\}^{-1}}{c} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2-45)$$

El tensor resistividad puede obtenerse por inversión del tensor conductividad. La inversión de (2-45) proporciona

$$\underline{\rho} = (m/e^2\tau n) \cdot \begin{pmatrix} 1 & \frac{\omega\tau}{c} & 0 \\ \frac{-\omega\tau}{c} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2-46)$$

De esta última relación puede verse que el modelo de electrones libres no produce magnetoresistencia. Este resultado negativo es característico de un modelo con portadores de masa efectiva constante y con tiempo de relajación único.

La componente ρ_{xy} se llama resistividad de Hall y es independiente del tiempo de relajación τ

$$\rho_{xy} = \frac{m\omega}{e^2 n c} = RH \quad , \quad (2-47)$$

donde la constante R se llama constante de Hall y se expresa por

$$R = (n|e|c)^{-1} \quad . \quad (2-48)$$

En un principio el campo magnético defleca las trayectorias de los portadores creando un exceso de carga en algunas zonas de la muestra. Esto crea a su vez una diferencia de potencial y por lo tanto un campo eléctrico (llamado campo de Hall) que compensa exactamente la fuerza debida al campo magnético. El resultado neto es la ausencia de magnetoresistencia.

Es interesante observar los límites del camino efectivo Λ^{\rightarrow} para campos magnéticos muy grandes. De las relaciones (2-43) obtenemos

$$\begin{aligned} \Lambda^{\rightarrow}(k) &\rightarrow 0 \\ x \quad \omega \tau &\rightarrow \infty \\ &c \\ \Lambda^{\rightarrow}(k) &\rightarrow 0 \\ y \quad \omega \tau &\rightarrow \infty \\ &c \\ \Lambda^{\rightarrow}(k) &\rightarrow (\hbar k \tau / m) = \text{constante}, \\ z \quad \omega \tau &\rightarrow \infty \\ &c; \end{aligned} \quad (2-49)$$

lo cual puede interpretarse físicamente en términos de la trayectoria real de las partículas. El modelo de electrones libres produce órbitas circulares cerradas en la SF. Como sabemos de la sección anterior esto engendra proyecciones cerradas y circulares de la trayectoria real en un plano perpendicular al campo magnético (en este caso el plano XY). Para campos magnéticos muy grandes el radio

de ciclotrón de la trayectoria real se hace muy pequeño. El campo magnético no afecta el movimiento en la dirección Z. De aquí entonces el resultado (2-49). Este tipo de consideraciones, de carácter bien general, serán de gran importancia para determinar el comportamiento de la magnetoresistencia para campos muy grandes y para superficies de Fermi arbitrarias.

Como se verá en la sección siguiente, el modelo de electrones libres es insuficiente para explicar los resultados experimentales encontrados para los tensores galvanomagnéticos, incluso cuando no existe ruptura magnética.

2.4 Propiedades Galvanomagnéticas para campos magnéticos muy grandes: La Teoría de Lifshitz.

Experimentalmente, el comportamiento de la magnetoresistencia transversal dista mucho del caso de electrones libres.

El límite de campo grande se describe por $\omega \tau \gg 1$ y significa que grandes tramos de las trayectorias electrónicas son recorridas antes de que el electrón sufra alguna colisión. Esto sugiere, que para este régimen, la forma de las órbitas es determinante en el comportamiento de la magnetoresistencia.

Experimentalmente, para campos grandes, pueden distinguirse varios casos (cuando no se consideran efectos de ruptura magnética):

(i) La magnetoresistencia transversal se satura para todas las direcciones de la corriente y del campo magnético. El valor de saturación puede depender de la dirección.

(ii) La magnetoresistencia transversal crece indefinidamente, cuadrática con respecto al campo, para todas las direcciones del campo y de la corriente (el coeficiente del comportamiento cuadrático puede depender de la dirección).

(iii) La magnetoresistencia transversal se satura para algunas direcciones, pero no para otras, en cuyo caso crece en forma cuadrática con el campo.

(iv) La magnetoresistencia transversal oscila en función del campo H , sin embargo su promedio sigue alguno de los comportamientos ya señalados.

En esta sección no consideraremos el último efecto, llamado de Shubnikov-de Haas, que tiene el mismo origen que el efecto de de Haas-van Alphen, éste es, la cuantización de las órbitas electrónicas. Sólo nos ocuparemos del valor medio de la resistividad.

En verdad, el comportamiento real de la magnetoresistencia transversal es más complicado que el descrito aquí. Combinaciones de estos casos pueden encontrarse en forma de transiciones de un comportamiento a otro. Esta es la situación característica que revela la presencia de ruptura magnética y cambios importantes en la topología de la SF. Dejaremos pendiente este problema hasta el Cap.5 donde lo analizaremos en detalle. Por el momento supondremos que no hay ruptura magnética ni cambios en las órbitas electrónicas.

La primera modificación al modelo de electrones libres que puede pensarse consiste en agregar un tipo distinto de portadores, es decir considerar una SF de dos hojas, ambas esféricas, una correspondiente a portadores de carga e_1 , masa m_1 y concentración n_1 y la otra correspondiente a portadores de carga e_2 , masa m_2 y concentración n_2 . En metales debe tenerse $|e_1| = |e_2|$, pero eventualmente puede haber un cambio de signo si una de las hojas de la SF es de tipo hueco. Los

electrones sobre esta hoja se comportarán como cargados positivamente ante la presencia de un campo magnético.

Definamos las correspondientes frecuencias de ciclotrón por

$$\omega_{c1} = \frac{e H}{c m_1} \quad , \quad \omega_{c2} = \frac{e H}{c m_2} \quad . \quad (2-50)$$

Si suponemos que ambos portadores tienen el mismo tiempo de relajación τ , la generalización inmediata de la relación (2-45) da para la conductividad

$$\underline{\underline{\sigma}} = \frac{e^2 \tau n}{m} \cdot \begin{array}{c|ccc} & \frac{\{1 + \omega^2 \tau^2\}^{-1}}{c_1} & \frac{\omega \tau \{1 + \omega^2 \tau^2\}^{-1}}{c_1} & 0 \\ \hline & -\frac{\omega \tau \{1 + \omega^2 \tau^2\}^{-1}}{c_1} & \frac{\{1 + \omega^2 \tau^2\}^{-1}}{c_1} & 0 \\ & 0 & 0 & 1 \end{array} + \begin{array}{c|ccc} & \frac{\{1 + \omega^2 \tau^2\}^{-1}}{c_2} & \frac{\omega \tau \{1 + \omega^2 \tau^2\}^{-1}}{c_2} & 0 \\ \hline & -\frac{\omega \tau \{1 + \omega^2 \tau^2\}^{-1}}{c_2} & \frac{\{1 + \omega^2 \tau^2\}^{-1}}{c_2} & 0 \\ & 0 & 0 & 1 \end{array} \quad (2-51)$$

Para simplificar supongamos que ambos portadores tienen la misma masa efectiva m . Es interesante analizar el caso cuando unos de los portadores sea de tipo hueco.

Escribamos entonces

$$e_1 = -|e| \quad , \quad e_2 = |e| \quad (2-52)$$

y

$$\omega \equiv |e|H/mc$$

El tensor conductividad (2-51) puede escribirse

$$\underline{\underline{\sigma}} = e^2 \tau / m \cdot \begin{vmatrix} (n_1 + n_2) / \{1 + \omega^2 \tau^2\} & -\omega \tau (n_1 - n_2) / \{1 + \omega^2 \tau^2\} & 0 \\ \omega \tau (n_1 - n_2) / \{1 + \omega^2 \tau^2\} & (n_1 + n_2) / \{1 + \omega^2 \tau^2\} & 0 \\ 0 & 0 & (n_1 - n_2) \end{vmatrix} \quad (2-53)$$

El tensor resistividad puede obtenerse por inversión del tensor conductividad dado por (2-53).

Si definimos

$$\rho_0 \equiv m / \{e^2 \tau (n_1 + n_2)\} \quad , \quad \chi \equiv \omega \tau \quad , \quad (2-54)$$

entonces el tensor resistividad puede escribirse como

$$\underline{\underline{\rho}} = \rho_0 \cdot \begin{vmatrix} A(n_1, n_2; \chi) & B(n_1, n_2; \chi) & 0 \\ -B(n_1, n_2; \chi) & A(n_1, n_2; \chi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad (2-55)$$

donde A y B se expresan por

$$A(n_1, n_2; \chi) = (n_1 + n_2)^2 (1 + \chi^2) / \{ (n_1 + n_2)^2 + \chi^2 (n_1 - n_2)^2 \} \quad (2-55a)$$

$$B(n_1, n_2; \chi) = \chi (n_1 - n_2) (n_1 + n_2) (1 + \chi^2) / \{ (n_1 + n_2)^2 + \chi^2 (n_1 - n_2)^2 \} \quad (2-55b)$$

Al analizar estos resultados notemos

(i) Se cumplen las relaciones de Onsager, tanto para el tensor conductividad como para el tensor resistividad:

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{ij}(H) &= \sigma_{ji}(-H) \end{aligned} \right\} \quad (2-56)$$

$$\rho_{ij}(H) = \rho_{ji}(-H).$$

(ii) Si el metal no es compensado, $n_1 \neq n_2$, la magnetoresistencia transversal se satura para campos grandes. Los valores de saturación están dados por

$$\left. \begin{aligned} \rho_{xx}, \rho_{yy} &\rightarrow \rho_0 \frac{(n_1 + n_2)^2}{(n_1 - n_2)^2} \end{aligned} \right\} \quad (2-57)$$

$\chi \rightarrow \infty$

En este límite la resistencia de Hall se expresa por

$$\left. \begin{aligned} \rho_{xy} = -\rho_{yx} &\rightarrow \rho_0 \chi \frac{(n_1 + n_2)}{(n_1 - n_2)} \end{aligned} \right\} \quad (2-58)$$

$\chi \rightarrow \infty$

y el coeficiente de Hall está dado por

$$R = \frac{|e|(n_1 - n_2)c}{1 - 2} \quad (2-59)$$

El coeficiente de Hall es entonces una medida de la diferencia de concentraciones de los diferentes portadores (puede ser negativo).

(iii) Si el metal es compensado, $n_1 = n_2$, la situación cambia drásticamente. En el régimen de campo grande la magnetoresistencia varía en forma cuadrática con el campo

$$\rho_{xx} = \rho_{yy} + \rho_0 \chi^2, \quad \chi \rightarrow \infty \quad (2-60)$$

y no hay resistencia de Hall ρ_{xy} .

Vemos entonces que un modelo tan sencillo como el de dos tipos de portadores proporciona dos de los comportamientos observados de la magnetoresistencia transversal, según si hay o no hay compensación: saturación para todas las direcciones (caso no compensado) y crecimiento cuadrático con el campo para todas las direcciones (caso compensado).

El comportamiento restante, de saturación para algunas direcciones pero no para otras, no puede provenir de un modelo con simetría esférica. La anisotropía sugiere asociarlo más bien con órbitas abiertas, donde existen direcciones bien distinguidas de otras. Esto es lo que discutiremos en detalle a continuación.

Tratemos de generalizar los resultados obtenidos para una SF cualquiera. En general, las órbitas que son diferentes entre sí tendrán distintas frecuencias de ciclotrón ω_c . Supondremos que para campo grande el tensor conductividad puede desarrollarse en una serie de la forma

$$\sigma_{ij} = \alpha_{ij}^{(0)} + \alpha_{ij}^{(1)} / \chi + \alpha_{ij}^{(2)} / \chi^2 + \dots \quad (2-61)$$

donde χ es un parámetro adimensional que puede escribirse como

$$\chi = \frac{\omega^* \tau}{c} \quad (2-62)$$

con τ siendo el tiempo medio de relajación y ω^* una frecuencia característica del movimiento de los electrones.

Si la órbita es cerrada ω^* puede obtenerse como una integral sobre la órbita⁴⁵

$$\frac{2\pi}{\omega^*} = \frac{c\hbar}{|e|H} \cdot \oint_{\text{órbita}} \frac{dk}{v(k)} \quad (2-63)$$

donde $v(k)$ es la componente de la velocidad en un plano normal a H en el punto k del espacio recíproco. En general ω^* resulta ser del mismo orden de magnitud que la frecuencia de ciclotrón $\omega_c = |e|H/mc$ de electrones libres.

Si la órbita es abierta y periódica puede elegirse $\omega^* = 2\pi/T$, donde T es el tiempo empleado en recorrer un período.

La elección es más complicada para órbitas abiertas aperiódicas. Muchas elecciones son posibles. Por ejemplo se puede tomar

$$\omega^* = \frac{2\pi}{\Delta T} \quad (2-64)$$

donde ΔT es el tiempo necesario para que la velocidad media a partir de un punto cualquiera de la trayectoria no difiera de la velocidad media sobre toda la trayectoria más que en una fracción arbitraria⁴⁷.

Las componentes del tensor conductividad deben satisfacer las relaciones de Onsager

$$\sigma_{ij}(\chi) = \sigma_{ji}(-\chi) \quad (2-65)$$

Esto junto con la expansión (2-61) proporcionan las relaciones

$$\alpha_{jj}^{(2n+1)} = 0, \quad \alpha_{ij}^{(2n)} = \alpha_{ji}^{(2n)}, \quad \alpha_{ij}^{(2n+1)} = -\alpha_{ji}^{(2n+1)}, \quad (2-66)$$

donde n es un número entero n=0,1,2,3,... De aquí resulta que los términos diagonales sólo tienen términos pares en χ^{-1} en la expansión (2-61); los términos no diagonales simétricos tienen los coeficientes pares iguales y los coeficientes impares con signo opuesto.

Veamos ahora los distintos casos posibles:

(i) Todas las órbitas son cerradas. Entonces, para campo magnético muy grande, $\chi \rightarrow \infty$, el camino efectivo (2-32) tiene los límites

$$\begin{aligned} \Lambda_x^{\rightarrow}(k), \Lambda_y^{\rightarrow}(k) &\rightarrow 0 \\ \chi &\rightarrow \infty \\ \Lambda_z^{\rightarrow}(k) &\rightarrow \text{cte.}, \\ \chi &\rightarrow \infty \end{aligned} \quad (2-67)$$

donde el eje Z de coordenadas se ha elegido según el campo magnético.

Tomando en cuenta las relaciones (2-31), (2-66) y (2-67) obtenemos la siguiente expansión para el tensor conductividad

$$\underline{\underline{\rho}} = \begin{vmatrix} \alpha_{xx}^{(2)}/\chi^2 & \alpha_{xy}^{(1)}/\chi & -\alpha_{zx}^{(1)}/\chi \\ -\alpha_{xy}^{(1)}/\chi & \alpha_{yy}^{(2)}/\chi^2 & -\alpha_{zy}^{(1)}/\chi \\ \alpha_{zx}^{(1)}/\chi & \alpha_{zy}^{(1)}/\chi & \alpha_{zz}^{(0)} \end{vmatrix}, \quad (2-68)$$

donde solamente hemos escrito los términos dominantes. El término $\alpha_{xy}^{(1)}$ es el responsable del efecto Hall y por lo tanto es importante precisarlo más. El cálculo realizado en el Apéndice C da el resultado

$$\alpha_{xy}^{(1)} = e^2 \tau / m^* \cdot (n_e - n_h) \quad (1), \quad (2-69)$$

donde m^* es la masa ciclotrónica efectiva de la órbita, n_e es la densidad de portadores tipo electrón y n_h la densidad de portadores tipo hueco.

Es necesario entonces distinguir dos casos:

(i) No hay compensación, es decir $n_e \neq n_h$. En este caso $\alpha_{xy}^{(1)} \neq 0$ y la

magnetoresistencia transversal se satura para todas las direcciones

$$\rho_{xx} \approx \left(\left\{ \alpha_{zz}^{(0)} \alpha_{yy}^{(2)} + (\alpha_{zy}^{(1)})^2 \right\} / \chi^2 + \dots \right) / \left((\alpha_{xy}^{(1)})^2 \alpha_{zz}^{(0)} / \chi^2 + \dots \right) \rightarrow \chi \rightarrow \infty$$

$$\rightarrow \left\{ \alpha_{zz}^{(0)} \alpha_{yy}^{(2)} + (\alpha_{zy}^{(1)})^2 \right\} / \left\{ \alpha_{zz}^{(0)} (\alpha_{xy}^{(1)})^2 \right\}$$

(2-70)

$$\rho_{yy} \approx \left(\left\{ \alpha_{zz}^{(0)} \alpha_{xx}^{(2)} + (\alpha_{zx}^{(1)})^2 \right\} / \chi^2 + \dots \right) / \left((\alpha_{xy}^{(1)})^2 \alpha_{zz}^{(0)} / \chi^2 + \dots \right) \rightarrow \chi \rightarrow \infty$$

$$\chi \rightarrow \infty \rightarrow \left\{ \begin{matrix} (2) & (0) & (1) \\ \alpha_{xx} & \alpha_{zz} & (\alpha_{zx})^2 \end{matrix} \right\} / \left\{ \begin{matrix} (1) & (0) \\ (\alpha_{xy})^2 & \alpha_{zz} \end{matrix} \right\}$$

La resistencia de Hall para campo grande resulta ser

$$\rho_{xy} = \left\{ \begin{matrix} (1) & (0) \\ \alpha_{xy} & \alpha_{zz} \end{matrix} / \chi \right\} / \left\{ \begin{matrix} (1) & (0) \\ (\alpha_{xy})^2 & \alpha_{zz} \end{matrix} / \chi^2 \right\} \rightarrow \begin{matrix} (1) \\ (\alpha_{xy})^{-1} \end{matrix} \chi =$$

$$= m^2 / \left\{ e^2 \tau (n_e - n_h) \right\} \cdot \chi, \quad (2-71)$$

luego el coeficiente de Hall se expresa por

$$R = \left\{ (n_e - n_h) / e c \right\}^{-1} \quad (2-72)$$

La magnetoresistencia longitudinal también se satura para campo grande

$$\rho_{zz} = \left\{ \begin{matrix} (1) \\ (\alpha_{xy})^2 / \chi^2 \end{matrix} \right\} / \left\{ \begin{matrix} (1) & (0) \\ (\alpha_{xy})^2 & \alpha_{zz} \end{matrix} / \chi^2 \right\} \rightarrow \begin{matrix} (0) \\ (\alpha_{zz})^{-1} \end{matrix} \quad (2-73)$$

De aquí resulta que, para campo grande, el campo eléctrico total E es perpendicular a la densidad de corriente J .

(i) Hay compensación, $n_e = n_h$. Entonces el coeficiente $\alpha_{xy}^{(1)}$ dado por (2-69) se anula. La expansión para el tensor conductividad queda entonces

$$\underline{\underline{\sigma}} \approx \begin{matrix} (2) & (2) & (1) \\ \alpha_{xx} / \chi^2 & \alpha_{xy} / \chi^2 & -\alpha_{zz} / \chi \\ (2) & (2) & (1) \\ \alpha_{xy} / \chi^2 & \alpha_{yy} / \chi^2 & -\alpha_{zy} / \chi \\ (1) & (1) & (0) \\ \alpha_{zx} / \chi & \alpha_{zy} / \chi & \alpha_{zz} \end{matrix} \quad (2-74)$$

El determinante de este tensor es

$$\det \underline{g} = \Delta(1/\chi)^4 + o(1/\chi)^4, \quad (2-75)$$

donde

$$\begin{aligned} \Delta = & \alpha_{xx}^{(2)} \alpha_{yy}^{(2)} \alpha_{zz}^{(0)} - 2\alpha_{xy}^{(2)} \alpha_{zy}^{(1)} \alpha_{zx}^{(1)} + \alpha_{zx}^{(1)} \alpha_{yy}^{(2)} \alpha_{zx}^{(1)} - (\alpha_{xy}^{(2)})^2 \alpha_{zz}^{(0)} + \\ & + \alpha_{xx}^{(2)} (\alpha_{zy}^{(1)})^2. \end{aligned} \quad (2-76)$$

Las componentes de la magnetoresistencia transversal resultan cuadráticas con

χ

$$\rho_{xx} \approx \left\{ \alpha_{yy}^{(2)} \alpha_{zz}^{(0)} + (\alpha_{xy}^{(1)})^2 \right\} \chi^2 / \Delta, \quad \rho_{yy} \approx \left\{ \alpha_{zz}^{(0)} \alpha_{xx}^{(2)} + (\alpha_{zx}^{(1)})^2 \right\} \chi^2 / \Delta. \quad (2-77)$$

Como en el caso anterior, la magnetoresistencia longitudinal se satura para campo grande

$$\rho_{zz} \rightarrow \left\{ \alpha_{xx}^{(2)} \alpha_{yy}^{(2)} - (\alpha_{xy}^{(2)})^2 \right\} / \Delta. \quad (2-78)$$

El término dominante de la componente responsable de la tensión transversal resulta cuadrático con χ

$$\rho_{xy} = - \left\{ \alpha_{xy}^{(2)} \alpha_{zz}^{(0)} + (\alpha_{zx}^{(1)})^2 \right\} \chi^2 / \Delta + C\chi + o(\chi). \quad (2-79)$$

Por razones de la geometría, ρ_{xy} se anula idénticamente para el caso de superficies de Fermi esféricas. En (2-79) la constante C es de expresión complicada también dependiente de la geometría y el término $o(\chi)$ es un término despreciable con respecto a χ cuando $\chi \rightarrow \infty$.

(ii) Hay órbitas abiertas . Para simplificar supongamos que hay un sólo tipo de órbitas abiertas y que éstas se extienden indefinidamente a lo largo del eje k en el espacio recíproco. Esto significa que la trayectoria en el espacio real y se extiende indefinidamente a lo largo del eje X .

En estas condiciones, el camino efectivo, para campo magnético grande, toma los límites

$$\begin{aligned} \Lambda(k) &\xrightarrow{x} \text{cte.} , \\ \Lambda(k) &\xrightarrow{y} 0 , \\ \Lambda(k) &\xrightarrow{z} \text{cte.} , \end{aligned} \quad (2-80)$$

y por lo tanto la expansión para el tensor conductividad queda

$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{vmatrix} (0) & (1) & (0) \\ \alpha & \alpha/\chi & \alpha \\ \text{xx} & \text{xy} & \text{xz} \\ (1) & (2) & (1) \\ -\alpha/\chi & \alpha/\chi^2 & \alpha/\chi \\ \text{xy} & \text{yy} & \text{yz} \\ (0) & (1) & (0) \\ \alpha & -\alpha/\chi & \alpha \\ \text{xz} & \text{yz} & \text{zz} \end{vmatrix} . \quad (2-81)$$

El determinante puede escribirse como

$$\det \underline{\underline{\sigma}} = \Delta \chi^{-2} + o(\chi^{-2}) , \quad (2-82)$$

donde la constante Δ se expresa por

$$\Delta = \alpha \begin{vmatrix} (0) & (2) & (0) \\ \alpha & \alpha & \alpha \\ \text{xx} & \text{yy} & \text{zz} \end{vmatrix} + 2\alpha \begin{vmatrix} (1) & (1) & (0) \\ \alpha & \alpha & \alpha \\ \text{xy} & \text{yz} & \text{xz} \end{vmatrix} - \alpha \begin{vmatrix} (2) & (0) \\ \alpha & \alpha \end{vmatrix}^2 +$$

$$+ \alpha_{zz}^{(0)} \alpha_{xy}^{(1)2} + \alpha_{xx}^{(0)} \alpha_{yz}^{(1)2} . \quad (2-83)$$

La inversión del tensor (2-81) da el resultado

$$\begin{aligned} \rho_{xx} &\rightarrow \left\{ \alpha_{yy}^{(2)} \alpha_{zz}^{(0)} + (\alpha_{yz}^{(1)})^2 \right\} / \Delta , \\ \chi \rightarrow \infty \\ \rho_{yy} &\rightarrow \left\{ \alpha_{xx}^{(0)} \alpha_{zz}^{(0)} - (\alpha_{xz}^{(0)})^2 \right\} \chi^2 / \Delta , \\ \chi \rightarrow \infty \\ \rho_{zz} &\rightarrow \left\{ \alpha_{xx}^{(0)} \alpha_{yy}^{(2)} + (\alpha_{xy}^{(1)})^2 \right\} / \Delta , \\ \chi \rightarrow \infty \\ \rho_{xy} &\rightarrow \left\{ \alpha_{xy}^{(1)} \alpha_{zz}^{(0)} + \alpha_{yz}^{(1)} \alpha_{xz}^{(0)} \right\} \chi / \Delta . \\ \chi \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (2-84)$$

La magnetoresistencia transversal crece en forma cuadrática con el campo en la dirección de abertura de la órbita en el espacio recíproco. Para la dirección perpendicular hay saturación.

Podemos extender este resultado para el caso más general, donde la dirección de abertura de la trayectoria forma un ángulo θ con el eje X en el espacio real.

Para campo grande obtenemos el siguiente resultado, para la magnetoresistencia transversal :

$$\begin{aligned} \rho_{xx} &\simeq A \cdot \cos^2 \theta + C \cdot \chi^2 \cdot \sin^2 \theta , \\ \chi \rightarrow \infty \\ \rho_{yy} &\simeq A \cdot \sin^2 \theta + C \cdot \chi^2 \cdot \cos^2 \theta . \\ \chi \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (2-85)$$

Para la componente de la tensión transversal obtenemos

$$\rho_{xy} \underset{\chi \rightarrow \infty}{\approx} (D + F \cdot \chi^2) \operatorname{sen}\theta \cdot \operatorname{cos}\theta + (G \cdot \operatorname{sen}^2\theta + K \cdot \operatorname{cos}^2\theta) \chi, \quad (2-86)$$

es decir aparece una componente par $(D + F \cdot \chi^2) \operatorname{sen}\theta \operatorname{cos}\theta$ que se agrega al efecto Hall.

(iii) Hay varios tipos de órbitas abiertas según diferentes direcciones; éstas contribuyen con términos constantes en todos los elementos de matriz en la conductividad $\underline{\underline{\sigma}}$. Por lo tanto la magnetoresistencia transversal y longitudinal se saturan. La componente responsable de la tensión transversal también se satura.

Todos estos resultados están resumidos en la Tabla 1.

Como podemos apreciar, la topología de la SF es determinante para el comportamiento de la magnetoresistencia. Si cambia la topología de la SF, por ejemplo cuando ocurre ruptura magnética, también cambia el comportamiento de la magnetoresistencia. Aparecen entonces transiciones entre los distintos regímenes ya vistos.

Concluyendo, podemos decir que la teoría semiclásica es capaz de explicar los resultados experimentales planteados al comienzo de esta sección.

TABLA 1

TIPO DE ORBITA	MAGNETORESISTENCIA TRANSVERSAL	CAMPO DE HALL	CAMPO PAR TRANSVERSAL
I. Todas las órbitas son cerradas; no hay compensación ($n \neq n'$). $e \quad h$	$\propto H^0$ (saturación).	$\propto H / \{ e (n - n') c \}$ $e \quad h$	$\propto H^0$
II. Todas las órbitas son cerradas; hay compensación ($n = n'$). $e \quad h$	$\propto H^2$ (cuadrático).	$\propto H$ En el caso de simetría esférica todos los coeficientes en el desarrollo de la tensión transversal ρ se anulan idénticamente. XV	$\propto H^2$
III. Órbita abierta según la dirección que forma un ángulo θ con el eje X en el espacio real.	$\rho_{xx} \approx A \cos^2 \theta + CH^2 \sin^2 \theta$ $\rho_{yy} \approx A \sin^2 \theta + CH^2 \cos^2 \theta$	$\propto H$	$\propto H^2 \cdot \sin \theta \cos \theta$
IV. Hay órbitas abiertas según varias direcciones.	$\propto H^0$ (saturación).	$\propto H^{-1}$	$\propto H^0$

§ 3. ESTRUCTURA DE BANDAS Y SUPERFICIE DE FERMI DE LOS METALES FERROMAGNETICOS:
EL HIERRO, UN EJEMPLO ILUSTRATIVO

3.1 Modelos para la estructura de Bandas y la Superficie de Fermi del Fe.

El trabajo experimental sobre la SF de los metales ferromagnéticos (Fe, Ni, Co) combinado con los cálculos de la estructura de bandas han dado como resultado un cuadro casi unívoco, muy similar al modelo clásico de Stoner ¹¹⁻¹². Según este modelo, las bandas degeneradas en el spin de la fase paramagnética son separadas por una interacción de intercambio de tipo ferromagnético, siendo la banda de spin mayoría desplazada por debajo de la banda de spin minoría. La separación de energía ΔE debida al intercambio es grande (~ 2 eV), y por lo tanto se espera que las hojas de la SF correspondientes a spines diferentes sean bastantes distintas.

Desde hace mucho tiempo ⁴⁸ se ha reconocido que en la primera serie de los metales de transición, los electrones 3d se encuentran en una banda muy angosta - que en un principio condujo a considerarlos como localizados - , mientras que los electrones 4s están en una banda muy ancha, y por lo tanto, pueden considerarse como electrones de conducción. Sin embargo, el orden relativo de las bandas tiene menor importancia que el hecho de que hay solapamiento entre ellas. Por lo tanto todo cálculo de la estructura de bandas debe tomar en cuenta esta hibridización: el número total de electrones de conducción estará dado por el número total de electrones 3d y 4s del átomo libre.

Los niveles de Fermi para los electrones de spin mayoría y minoría en uno de estos metales ferromagnéticos se determinan exigiendo que la suma de los números de ocupación, $n\uparrow + n\downarrow$, sea igual al número total de electrones fuera de la capa cerrada correspondiente al Ar, mientras que la diferencia ($n\uparrow - n\downarrow$) tiene que ser igual al número de magnetón observado experimentalmente (para el Fe, el número de magnetón encontrado es 2.21 ⁴⁹).

Uno de los primeros cálculos más o menos completo de las bandas fue el hecho por Wood ⁵⁰ para la fase paramagnética del Fe usando el método APW. Sin embargo no se hizo ningún intento por obtener la SF. Posteriormente Wakoh y Yamashita ¹³ calcularon la estructura de bandas de la fase ferromagnética usando el método de las funciones de Green de Kohn-Korringa-Rostoker (KKR). El potencial cristalino se determinó en forma autoconsistente, considerando que distintos potenciales se aplican a electrones de distinto spin. Su resultado es equivalente a introducir una separación de energía $\Delta\epsilon$ rígida debida al intercambio en las bandas de la fase paramagnética como calculadas por Wood, de manera de obtener el número de magnetón correcto.

En su cálculo Wakoh y Yamashita obtuvieron 2.9 electrones por átomo en la banda de spin hacia arriba (\uparrow) y 5.1 en la banda de spin hacia abajo (\downarrow). Este cálculo revela además que el Fe es compensado.

La SF obtenida es ilustrada en la Fig.4. Esta se puede describir brevemente como:

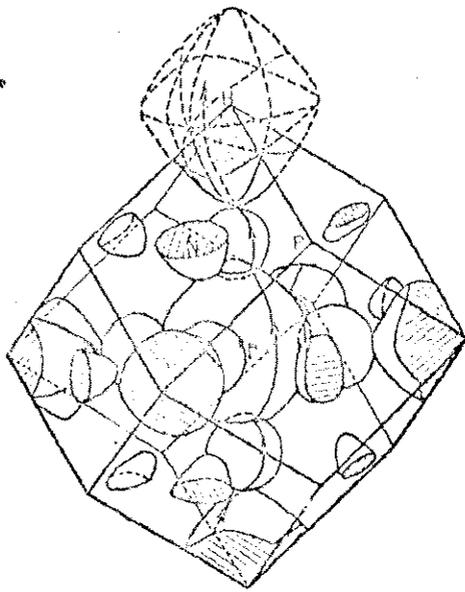
(i) la SF de spin minoría (ver Fig.4) es bastante parecida a la del cromo (Cr) no magnético; hay "bolsillos" correspondientes a huecos (hole pockets) en

torno a N, huecos octaédricos en torno a H, una porción central en torno a Γ correspondiente a electrones y bolsillos de electrones (electron pockets) a lo largo de la línea Γ -H, usualmente llamados lentes (lenses).

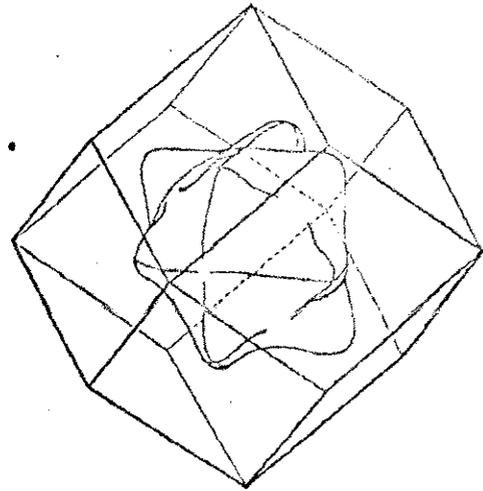
(ii) La SF para las bandas de spin mayoría consta de una superficie de tipo electrón de carácter s-d en torno a Γ (ver Fig.4b), dos bolsillos de tipo hueco alrededor del punto H (Fig.4d), y brazos de tipo hueco que conectan los puntos H en las direcciones $\langle 110 \rangle$ (ver Fig.4c).

Esta SF - como puede verse en la Fig.4 - proporciona órbitas abiertas en algunas direcciones, lo cual concuerda con los resultados experimentales de la magnetoresistencia ^{26, 51}. Reed y Fawcett ⁵¹ han observado órbitas abiertas a lo largo de las direcciones $\langle 110 \rangle$ y $\langle 001 \rangle$, aunque la falta de saturación completa ha hecho pensar que el número de órbitas abiertas es muy pequeño o que resultan de ruptura magnética. La SF de Wakoh y Yamashita explica la existencia de estas órbitas abiertas; la superficie de spin minoría contiene una órbita abierta en la dirección $\langle 001 \rangle$, indicada en la Fig.4a, la superficie de spin mayoría da origen a una órbita abierta en la dirección $\langle 110 \rangle$, a lo largo de los brazos que unen los puntos H, indicada en la Fig.4c.

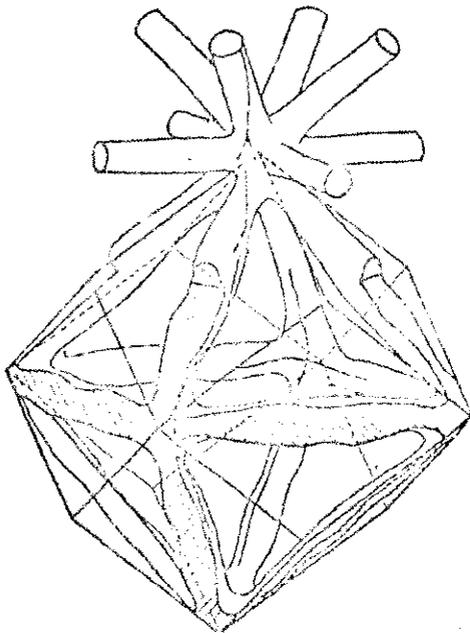
Sin embargo esta SF no está en completo acuerdo con las mediciones del efecto de de Haas-van Alphen ^{18 - 19}, ni con el modelo de SF propuesto por Gold et al ¹⁸ en base a estos experimentos. El cambio más notorio propuesto por Gold et al aparece en los brazos según la línea H-N de la SF de spin mayoría (ver Fig.4c). Desaparecen las órbitas abiertas y la superficie tiene el aspecto indicado en la Fig.5a. Sin embargo Gold et al ¹⁸ sugieren que existe un punto de



a) Spin minoría (electrones).
Hay una órbita abierta se-
gún la dirección 100 .

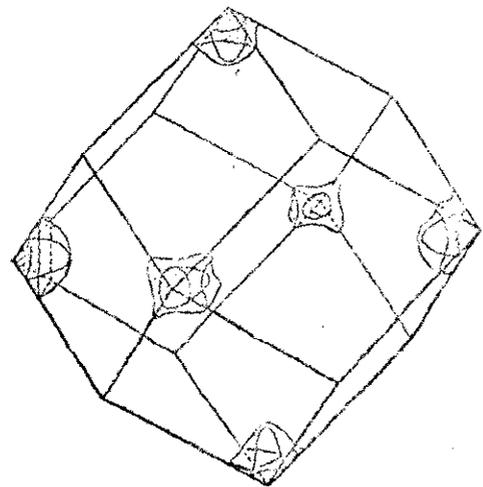


b) Spin mayoría (electrones).



c) Spin mayoría (huecos).

La órbita abierta está
indicada por una línea
continua.



d) Bolsillos tipo huecos para
spin mayoría.

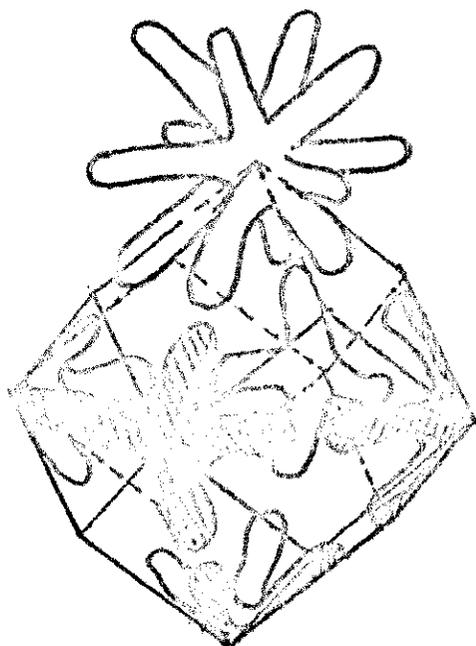
Fig.4 La SF del Fe , según Wakoh y Yamashita [13] .

contacto entre el brazo según la dirección $\langle 110 \rangle$ de la Fig.5a y la porción mayor de la SF de spin mayoría (centrada en I e indicada en la Fig.4b). Este punto de contacto, indicado en la Fig.6 por una flecha, puede generar órbitas abiertas en la dirección $\langle 100 \rangle$. Sin embargo, estos puntos de contacto, tanto para la SF de spin mayoría como de spin minoría, podrían desaparecer debido a pequeños gaps provenientes de la interacción de spin-órbita. La formación de órbitas abiertas requeriría entonces de ruptura magnética para campos magnéticos relativamente pequeños (gaps producidos por la interacción de spin-órbita). Este problema será tratado en detalle en los Cap. 5 y 6.

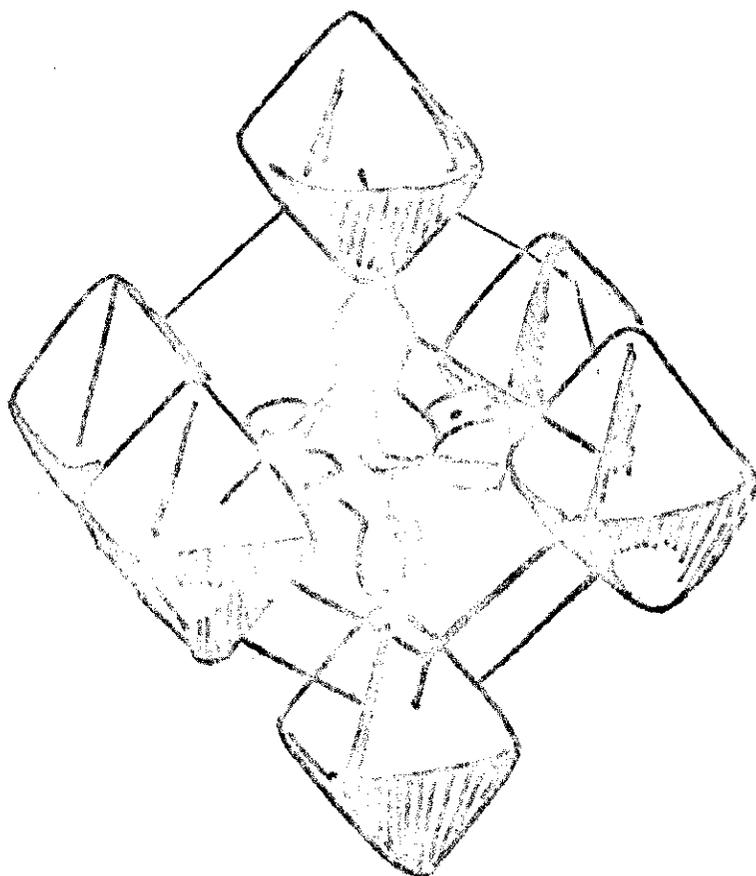
Recientemente, Tawil y Callaway¹⁴ han propuesto un cálculo de la estructura de bandas del Fe Ferromagnético basado en un método significativamente distinto de aquel usado por Wakoh y Yamashita. Este es un cálculo de "tipo-híbrido" autocconsistente y la SF que se obtiene se asemeja bastante a la de Wakoh y Yamashita. Secciones de esta SF se presentan en las Fig.7 y 8.

Nuevamente aparecen aquí los brazos según las líneas ΓN en la SF de spin mayoría. La principal modificación respecto a Wakoh y Yamashita se presenta en la SF de spin minoría. Tawil y Callaway obtienen una porción central en torno al punto Γ que no toca al resto de la SF, desapareciendo la posibilidad de una órbita abierta en la dirección $\langle 100 \rangle$ (ver Fig.7 y 8).

Al igual que en el caso de Wakoh y Yamashita¹³, se predice una estructura de la SF que las que son observadas¹⁸⁻¹⁹. Además no ha sido posible identificar algunas de las frecuencias de de Haas-van Alphen encontradas por Gold en el¹⁸⁻¹⁹. Es evidente que el problema está complicado por el acoplamiento de spin-órbita.



a) Hoja de la SF de spin mayoría que sufre cambios significativos comparada con la de Wakoh y Yamashita.



b) Spin minoría. Se aparecen algunas de las hojas encontradas por Wakoh y Yamashita.

Fig.5 La SF del Fe propuesta por Gold et al [18] .

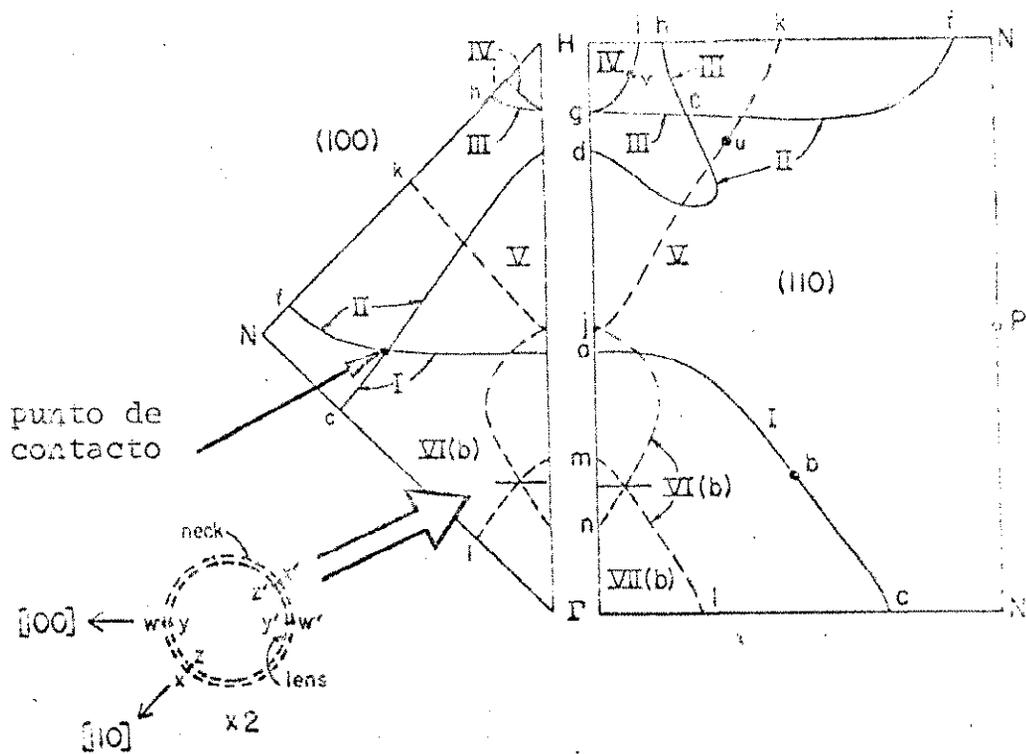


Fig.6 Sección de la SF del Fe propuesta por Gold et al. [10] mostrando algunos de los puntos de contacto entre las distintas hojas de la SF. La línea continua representa spin mayoría.

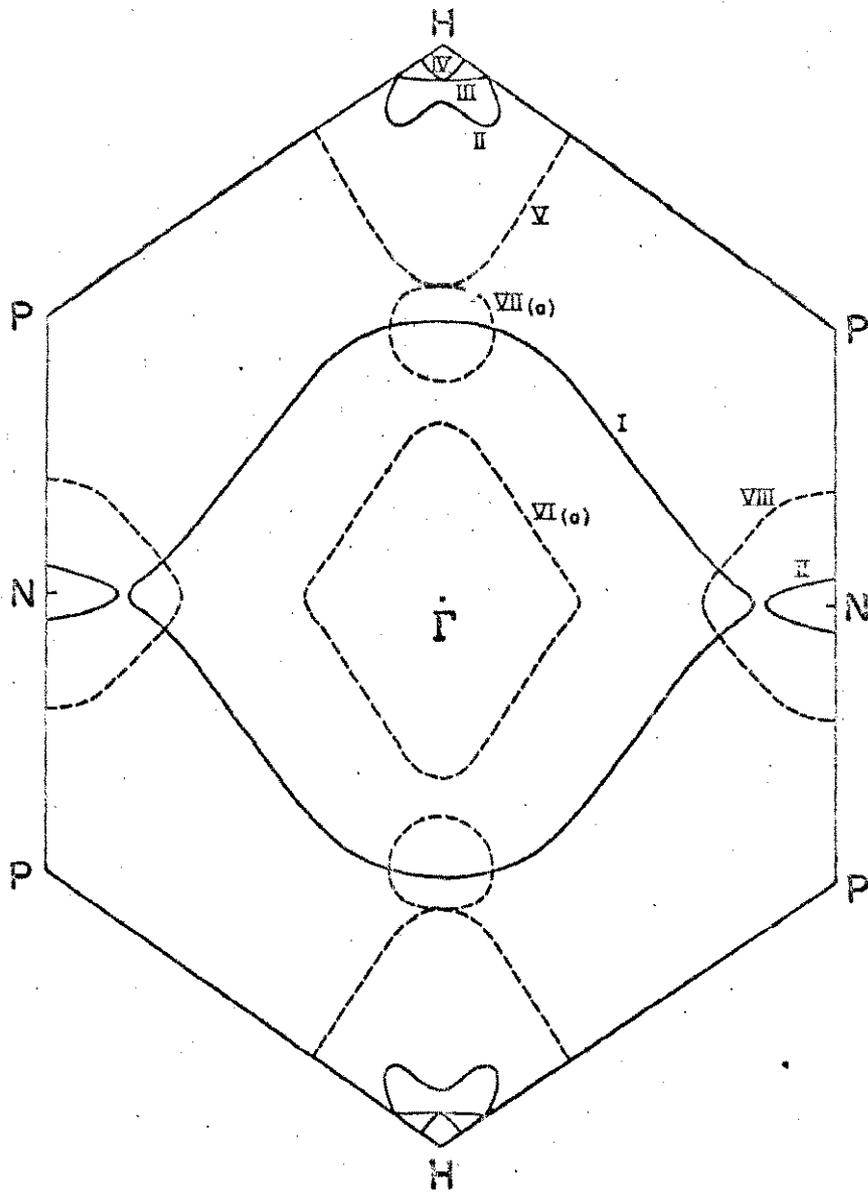
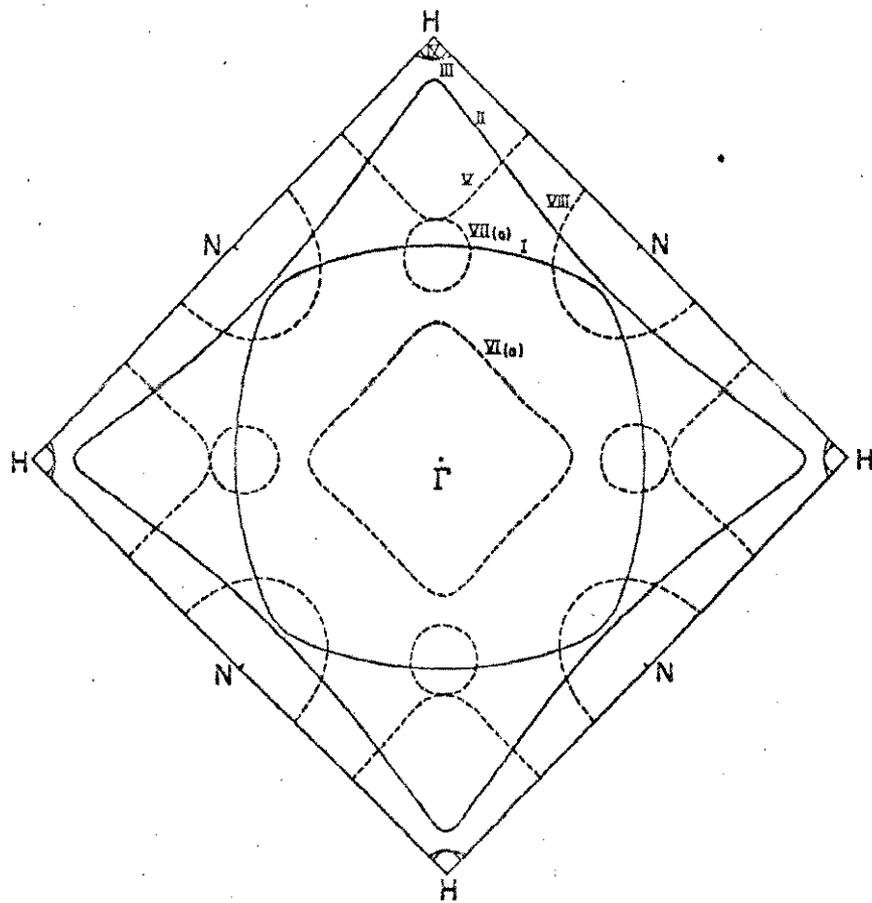
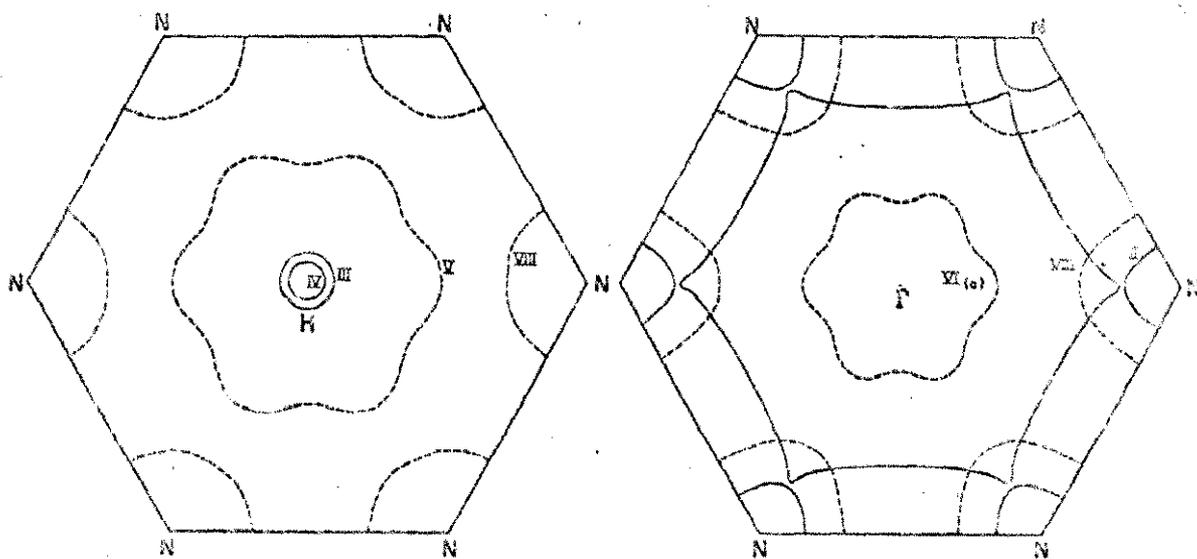


Fig.7 Sección de la SF del Fe, en el plano (110) que pasa por Γ calculada por Tawil y Callaway[14].



a) Sección en el plano (100) a través de Γ .



b) Sección en el plano (111) a través del punto H.

c) Sección en el plano (1-11) a través de Γ .

Fig.8 Secciones de la SF del Fe según Tawil y Callaway.

que puede romper la degeneración en muchos puntos y crear gaps susceptibles de ruptura magnética. En este caso podrían aparecer órbitas abiertas adicionales.

Además no hay una separación rígida de las bandas de diferente spin debido al intercambio. El cálculo de Tawil y Callaway ¹⁴ muestra que esta separación de energía $\Delta\epsilon$ (exchange splitting) no sólo varía sobre la banda d, sino que es substancialmente menor (alrededor de un factor 2) que el $\Delta\epsilon$ asociado a las bandas de simetría tipo p y s.

Posteriormente Callaway et al ²⁵ han presentado un cálculo de bandas considerando la interacción de spin-órbita. Los resultados, mostrados en las Fig.9,10 y 11, se parecen bastante a los del cálculo anterior con la salvedad que se rompe la degeneración en muchos puntos y aparecen pequeños gaps y órbitas de spin hibridizado ²⁵. La ruptura magnética puede producir varias clases de órbitas abiertas, algunas de ellas observadas experimentalmente mediante mediciones de magnetoresistencia ^{30, 52}. Sin embargo no hay un mecanismo obvio para la órbita abierta en la dirección <100> propuesta en el trabajo de Gold et al ¹⁶, a menos que se reduzca mucho la separación de energía debida al intercambio, con la consiguiente reducción del número de magnetón ²⁵.

Finalmente, nos referiremos ahora a mediciones de la magnetoresistencia para campos magnéticos muy intensos ^{30, 33, 35}. Los estudios experimentales para campos muy altos (hasta 215 kOe) de efectos galvanomagnéticos en el Fe han revelado un comportamiento extraño y de mucho interés. La magnetoresistencia transversal muestra una dependencia funcional del tipo $\Delta\rho/\rho = a \frac{n}{B^c}$ para todas las direcciones del campo magnético y de la corriente. En el rango intermedio, $50 < B < 100$ kG, el exponente n toma un valor muy cercano a 2 (dos) para todas las direcciones del campo y de la corriente, revelando el comportamiento tí-

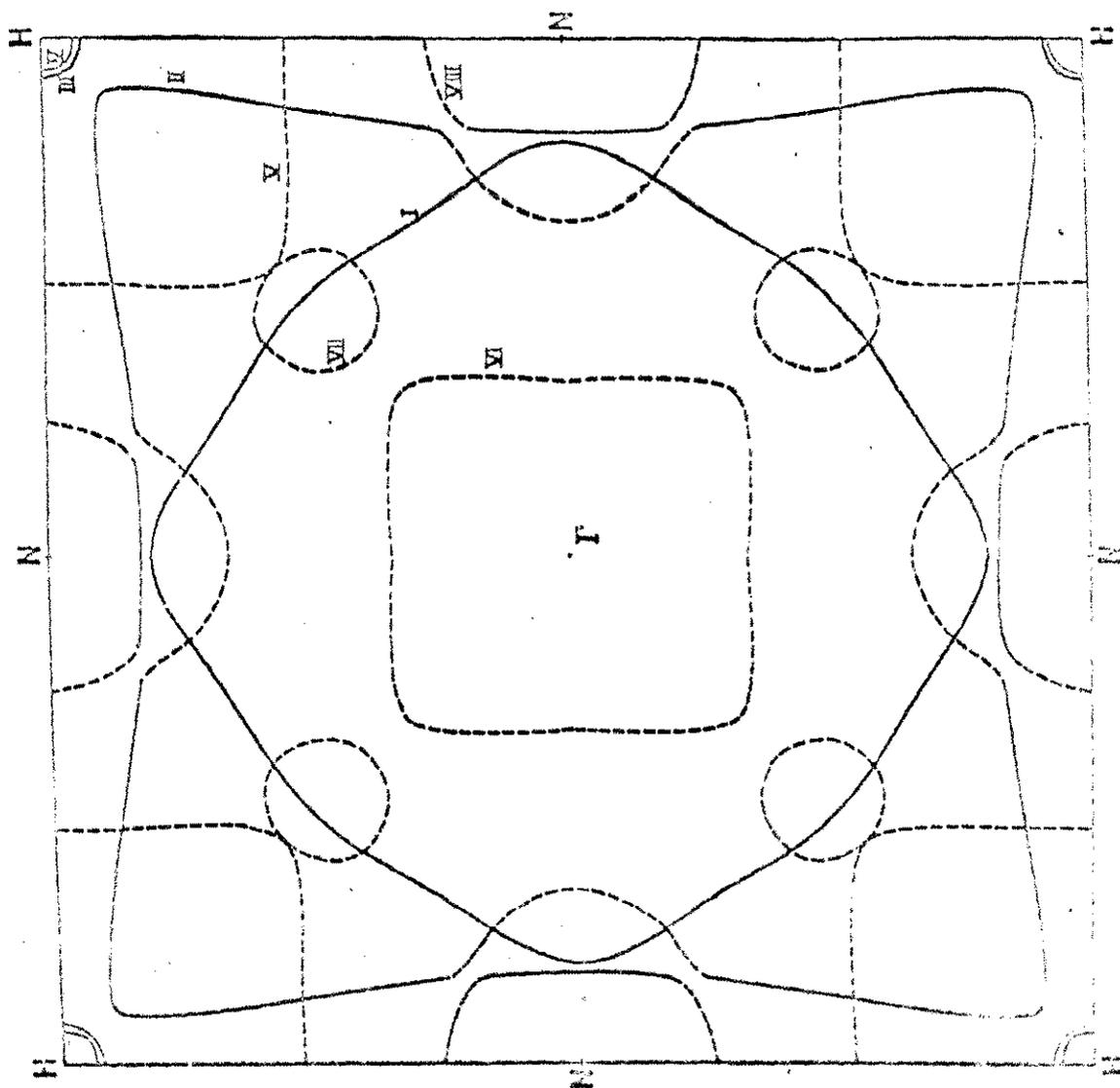


Fig.9 SF del Fe incluyendo la interacción de spin-órbita, según Callaway et al [25]. Sección en el plano (100) a través de Γ . La línea continua representa estados con spin predominantemente de tipo mayoría.

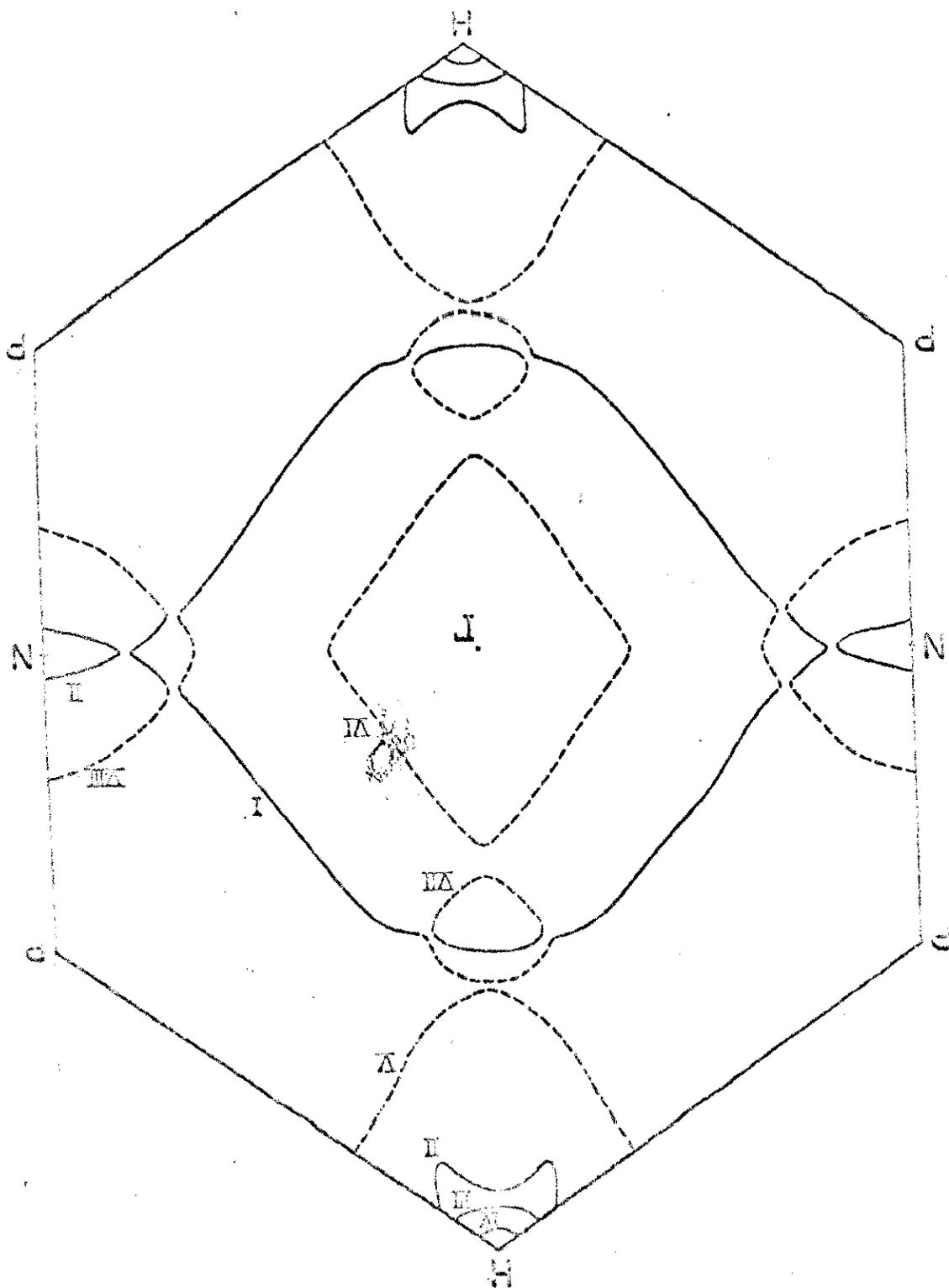


Fig.10 SF del Fe según Callaway et al [25].
 a) Sección en el plano (110) centrado en Γ .

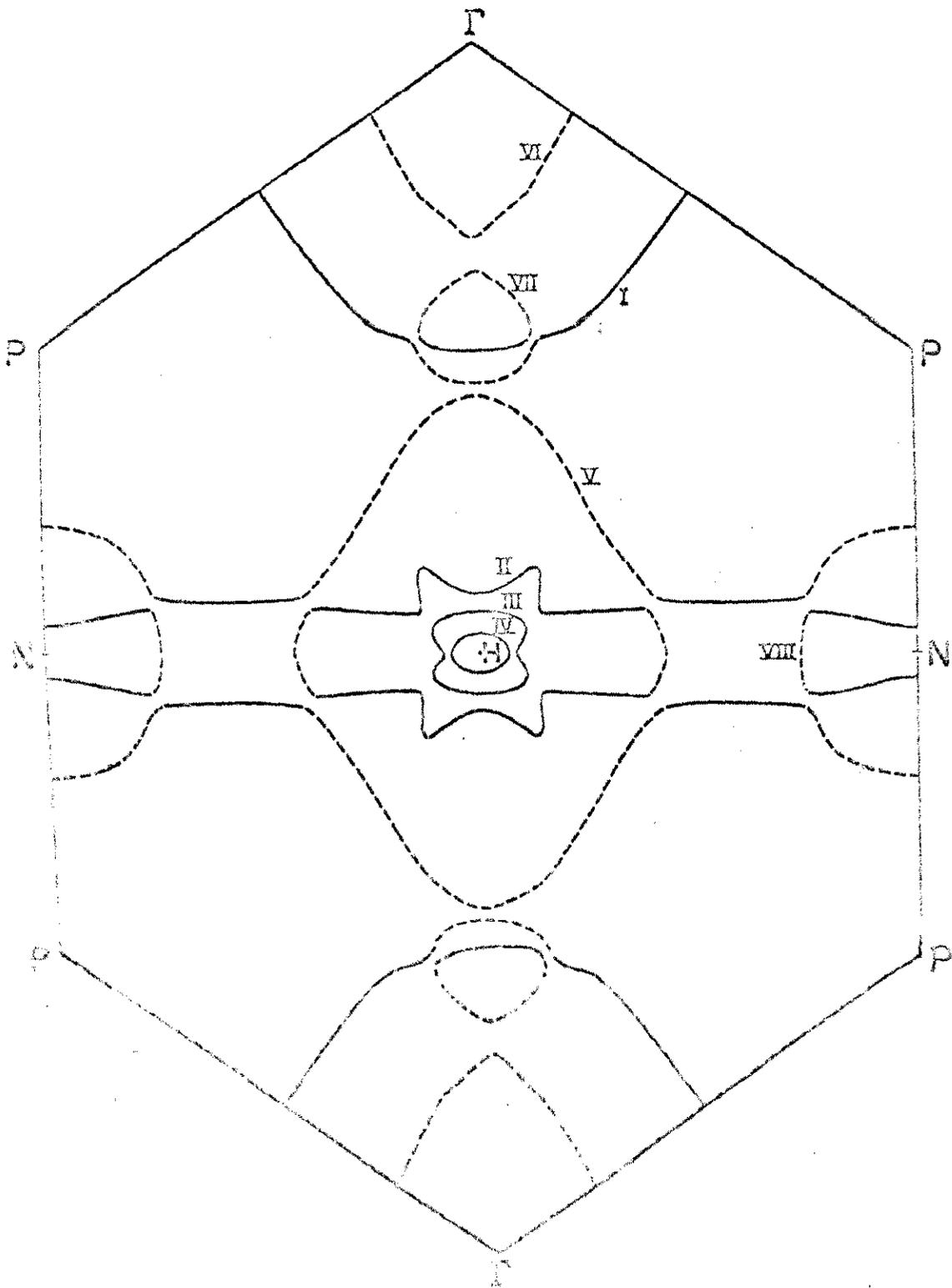


Fig. 10. The diagram shows the structure of the [100] plane in the plane (110) through the center.

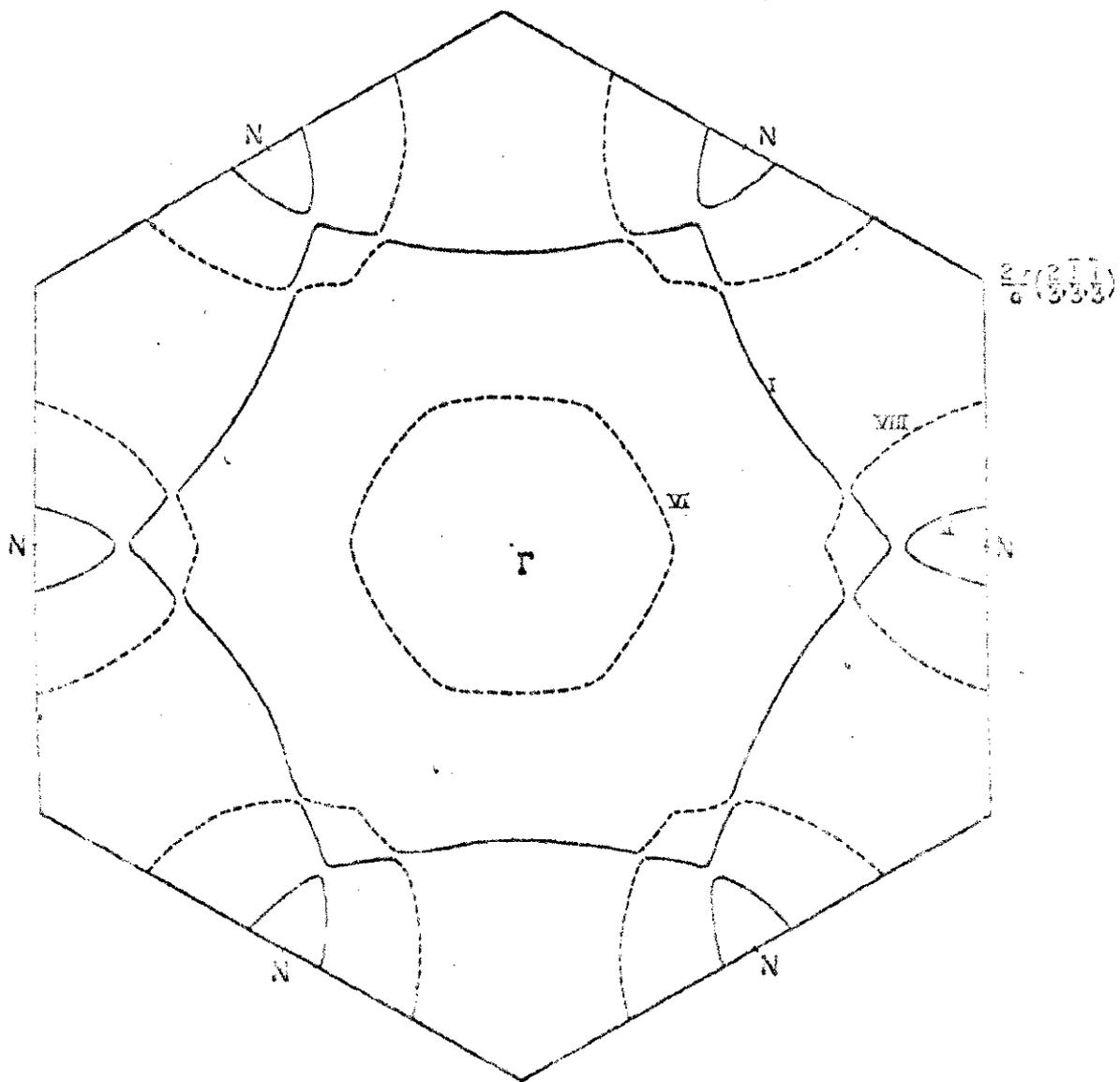


Fig.11 SF del Fe según Callaway et al [25].
 a) Sección en el plano (111) a través de Γ .

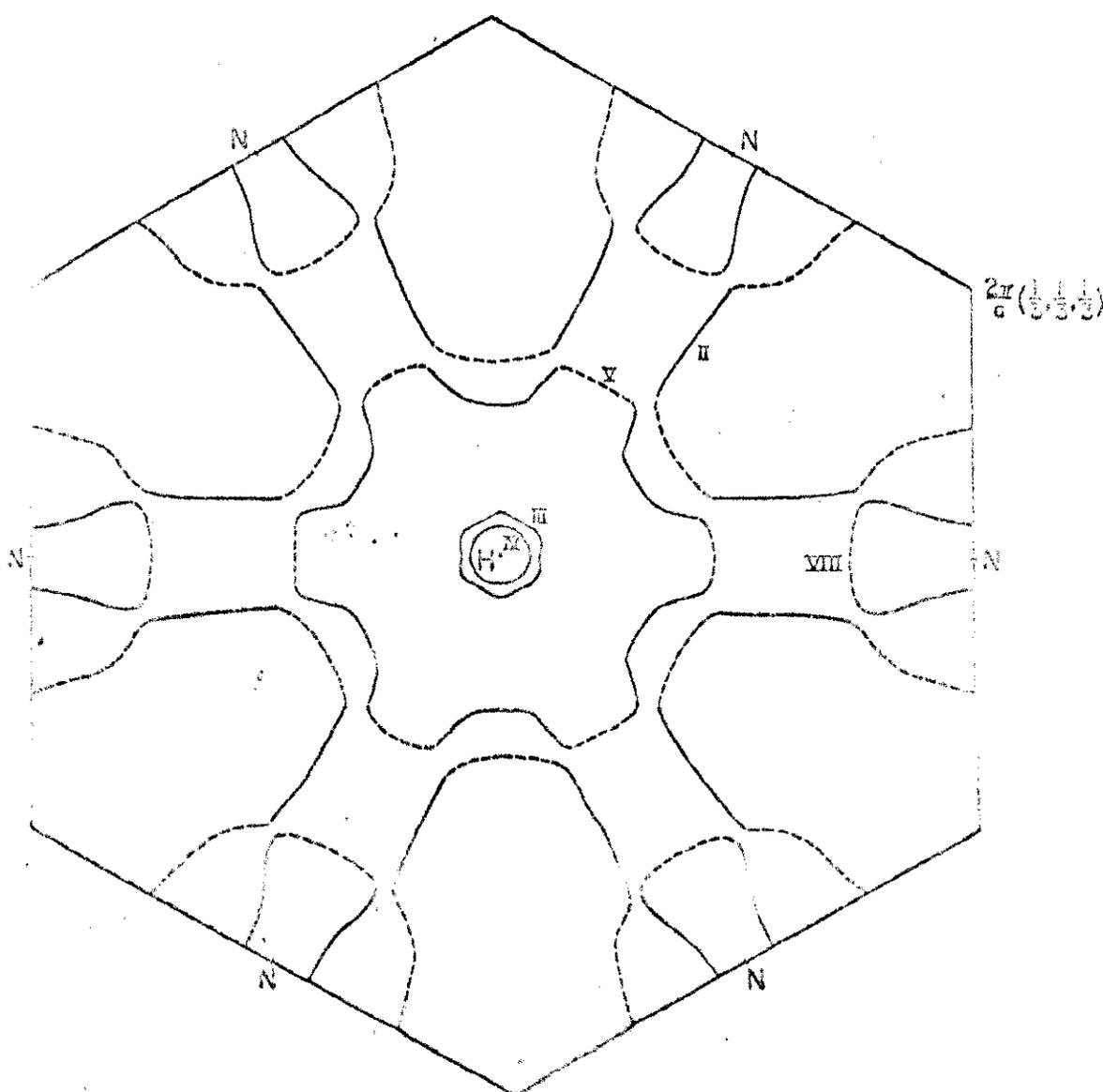


Fig. 1) a) Fe según Dattaway et al [15].
 b) sección en el plano (111) a través del punto H.



pico de un metal compensado . El exponente n decrece para campos magnéticos más altos, entre 1.3 y 1.5 para 150 kG; su valor relativo varía para las distintas direcciones del campo, pero se observa una reducción de él substancial en todas las direcciones para campos más altos. Ejemplos de este comportamiento se muestran en las Fig. 12, 13 y 14 en escala doble de logaritmo ($1/\rho$ vs. H)^{30,32}.

Las mediciones se continuaron haciendo hasta 215 kOe y el exponente n continuó decreciendo, alcanzando valores menores que 1.0 para varias direcciones^{33,34}, pero sin observarse saturación.

Cabrera y Falicov³⁴ han elaborado una teoría, basada en ruptura magnética entre dos regímenes cuadráticos con B , que parece explicar el comportamiento de la magnetoresistencia transversal y permite hacer algunas predicciones para campos más altos. Dejaremos este problema pendiente hasta el Cap.5 de esta tesis.

3.2 Propiedades de Simetría en la Teoría de Bandas de los Metales Ferromagnéticos.

Los argumentos de simetría que comunmente se usan en las aplicaciones de la teoría de grupos en el cálculo de bandas de sólidos deben modificarse bastante para tratar el caso de los metales ferromagnéticos²⁴.

La presencia de una magnetización neta destruye la simetría de inversión temporal con la consiguiente separación de las bandas de distinto spin. La reducción de la simetría es aún mayor y es el propósito de esta sección examinar este aspecto.

En adelante seguiremos el tratamiento de Falicov y Rivalds²⁴ para la deriva-

1.0-1.1
② <112>

Fe C-3 <111> || J

2nd half of third half of 1944

0 - 215 kOe

$R_{H2} = 2/3 R_H$

|| || <112>

35

20

25

20

15

10

5

Slope 1.40

100-215 kOe

Slope 1.57

0-150 kOe

②

Fig.12 Magneto-resistencia transversal del Fe segun Coleman [33]

30

35

40

45

50

55

ln B

LN

LN

TRANSVERSE MAGNETORESISTANCE
R_{H2} / R_H vs. ln B

Fe <100>

<100> min at $\theta = 90^\circ$

0 - 215 KOe

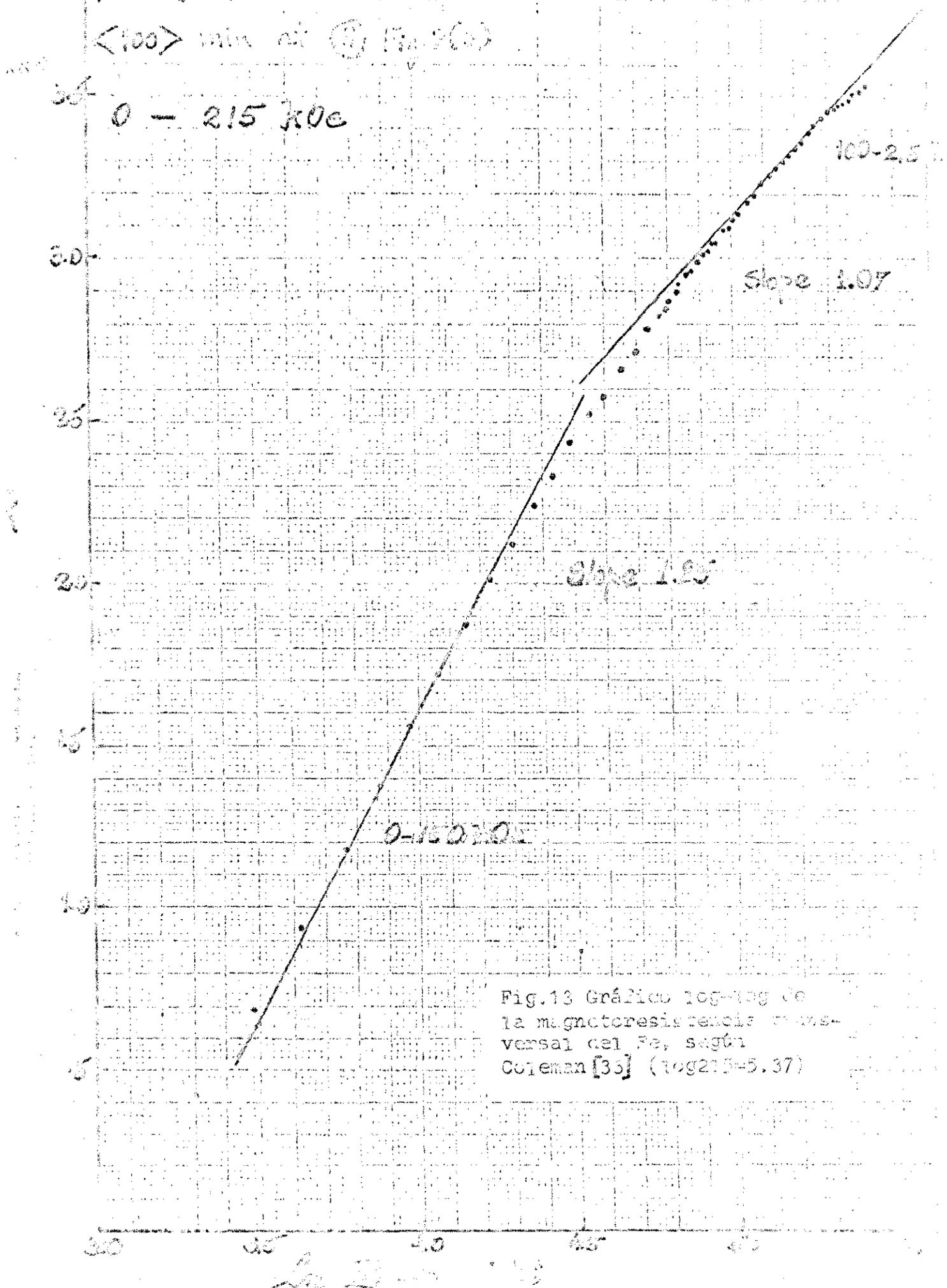
100-2.5

Slope 1.07

Slope 1.25

0-150 KOe

Fig.13 Gráfico log-log de la magnetoresistencia transversal del Fe, según Coleman [33] (log219-5.37)



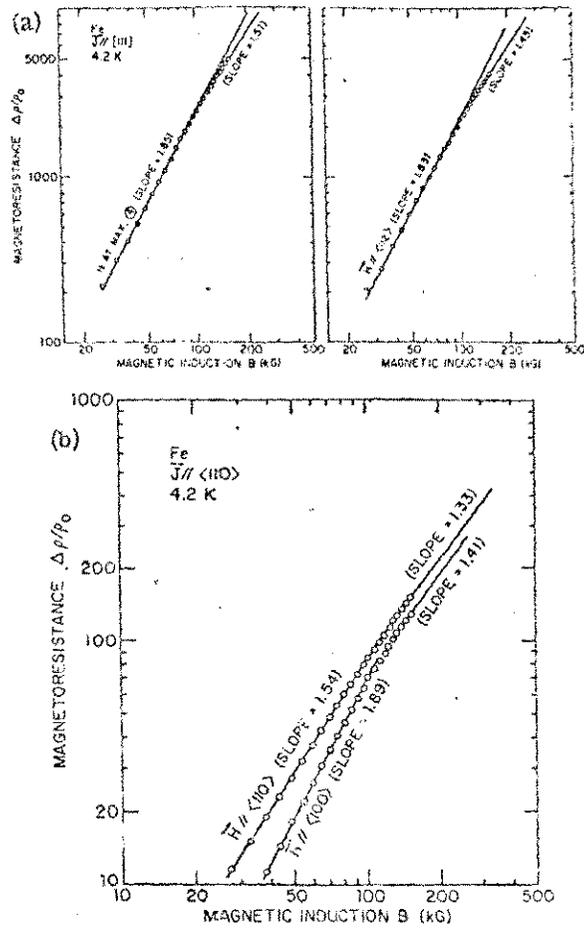


Fig. 14 Magnetoresistencia transversal del Fe según Coleman et al [30]. Nótese el "quiebre" de la pendiente en los gráficos log-log.

tría de las bandas de un metal ferromagnético.

En la aproximación de la teoría de las bandas, la función de onda de los electrones individuales satisface una ecuación de Schrödinger autoconsistente

$$H \Psi_{\nu\sigma k}^{\rightarrow} = \epsilon_{\nu\sigma}(k) \Psi_{\nu\sigma k}^{\rightarrow}, \quad (3-1)$$

donde ν es el índice de banda, σ un índice generalizado de spin (la dirección de cuantización por indicar) y k es el vector de onda.

En un metal ferromagnético el Hamiltoniano H se puede escribir como

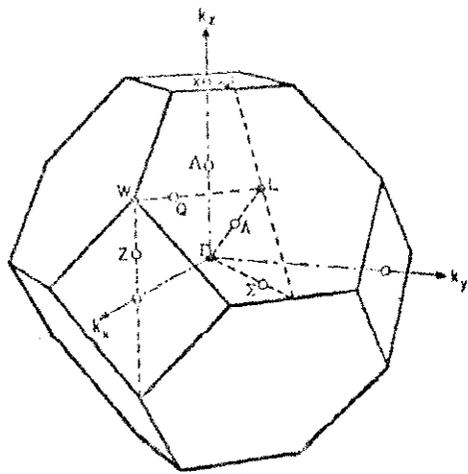
$$H = H_{EC} + H_{Hartree} + H_{S-O} + H_{intercambio} + H_B, \quad (3-2)$$

donde

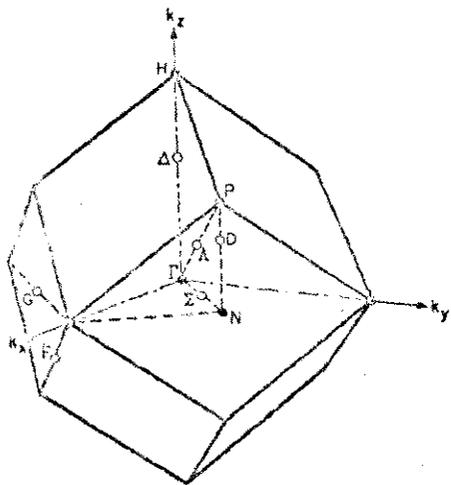
1) H_{EC} es la energía cinética y tiene completa simetría, tanto de traslación como de rotación;

2) $H_{Hartree}$ es el potencial de Hartree autoconsistente y es invariante bajo las operaciones del grupo espacial correspondiente.

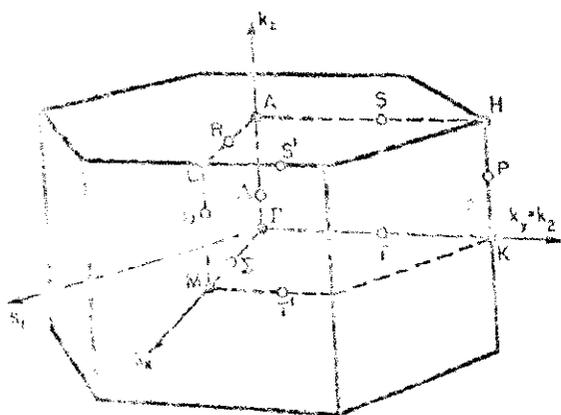
Los metales que nos interesan, Ni, Fe y Co, cristalizan en las estructuras fcc (cúbica de caras centradas), bcc (cúbica de cuerpo centrado) y hcp (hexagonal de empacamiento compacto) respectivamente. Los grupos espaciales de estas estructuras son O_h^f para fcc, O_h^c para bcc y D_{6h}^d para hcp. La Fig.15 muestra las correspondientes zonas de Brillouin que permiten visualizar la simetría asociada a los grupos puntuales. La notación de puntos y líneas de mayor simetría corresponde a las referencias 53 y 54.



a) Primera zona de Brillouin para la estructura fcc.



b) Primera zona de Brillouin para la estructura bcc.



c) Primera zona de Brillouin para la estructura hcp.

Fig.15.

3) H_{S-O} es la interacción de spin-órbita que es invariante bajo las operaciones del grupo espacial cuando son aplicadas en forma simultánea en el espacio de coordenadas y en el espacio de spin. Hasta este punto la simetría se ha reducido al llamado grupo espacial doble. Todavía existe simetría bajo inversión temporal. Los términos restantes del Hamiltoniano reducen aún más la simetría.

4) H_{ex} es el término de Hartree-Fock debido al intercambio que separa las bandas de diferentes spines. Si bien distingue entre los spines, no determina la dirección de cuantización del spin, que sí es determinada por

5) H_B , el acoplamiento entre el spin y la inducción magnética \vec{B} mediante

$$H_B = - \mu_B \vec{B} \cdot \vec{\sigma} \quad , \quad (3-3)$$

donde μ_B es el magnetón de Bohr. Este término introduce una dirección privilegiada, ésta es la dirección de la inducción magnética \vec{B} . La interacción de spin-órbita también compete, pero muy poco, en la determinación de la dirección de cuantización.

Si la inducción magnética \vec{B} es uniforme, el término (3-3) tiene simetría traslacional, pero del grupo puntual quedan sólo aquellas operaciones que dejan la inducción magnética invariante.

La introducción del campo magnético rompe además la simetría de inversión temporal.

Concluyendo, el Hamiltoniano total dado por (3-2) contiene todas las operaciones del grupo espacial, pero sólo aquellas operaciones del grupo doble que dejan invariante el pseudovector \vec{B} de la inducción magnética.

De los 32 grupos puntuales sólo quedan como posibles aquellos que posean un eje preferencial:

$$C_n : C_1, C_2, C_3, C_4, C_6$$

$$C_{nh} : C_{1h}, C_{2h}, C_{3h}, C_{4h}, C_{6h}$$

$$S : S_2, S_4, S_6$$

En la Ref.24 se presentan las relaciones de compatibilidad al introducir la inducción magnética \vec{B} según ciertas direcciones de mayor simetría del cristal. Cuando \vec{B} está orientado según una dirección arbitraria no existe ninguna simetría, excepto la de traslación (suponiendo \vec{B} uniforme).

Algunas degeneraciones accidentales todavía están permitidas, pero sólo cuando el pseudovector \vec{B} apunta según un eje de simetría. En este caso las degeneraciones sólo aparecen en líneas de simetría paralelas a \vec{B} en planos de simetría perpendiculares a \vec{B} (ver, por ejemplo, Fig.7 y 8).

La presencia de la interacción de spin-órbita, por su parte, remueve muchas de las degeneraciones accidentales y produce bandas de spin híbrido (compara las Fig.7 y 8 con las Fig.9, 10 y 11).

En consecuencia, los cálculos de la estructura de bandas de metales ferromagnéticos deben ser compatibles con la presencia de muy pocas degeneraciones accidentales.

Haremos amplio uso de estas propiedades en el Cap.6.

§ 4 ESTRUCTURA DE DOMINIOS Y RESISTIVIDAD RESIDUAL DE LAS PAREDES DE BLOQUE :
MAGNETORESISTENCIA PARA CAMPOS MAGNETICOS PEQUEÑOS

4.1 Introducción.

Hasta ahora no había sido estudiado en detalle el problema de la diferencia en la resistividad residual observada entre cristales ferromagnéticos con estructura de dominios simples (baja resistividad) y cristales con estructura de multadominios (alta resistividad). La diferencia se manifiesta como una brusca caída - del orden de 80-90% - de la resistencia (magnetoresistencia remanente) - ver Fig.10 - cuando el campo magnético externo crece desde 0 hasta aproximadamente 100 G ^{26 - 36}. Aunque se sabía que la resistencia extra se debía a la presencia de una estructura de multadominios, el mecanismo responsable de ella todavía estaba en debate.

Se propuso ^{55 - 57} que la disminución en resistividad con la reorientación de los dominios podía explicarse en términos de la diferencia entre la magnetoresistencia longitudinal y transversal y el cambio en la dirección de la magnetización durante el proceso de reorientación. Sin embargo esta descripción no concuerda con los resultados experimentales ²⁷.

Debrene y Fildes ^{31 - 32} han presentado una teoría basada en el comportamiento de los cristales con las paredes que separan los dominios o paredes de Bloch. Esta teoría cuando incluye tanto los efectos paramagnéticos (interacción entre el momento de magnetización con el spin del electrón) como los efectos diamagnéticos (distorsión de las órbitas de los electrones debida al campo magnético interno), describe satisfactoriamente los datos experimentales dados a conocer en la literatura.

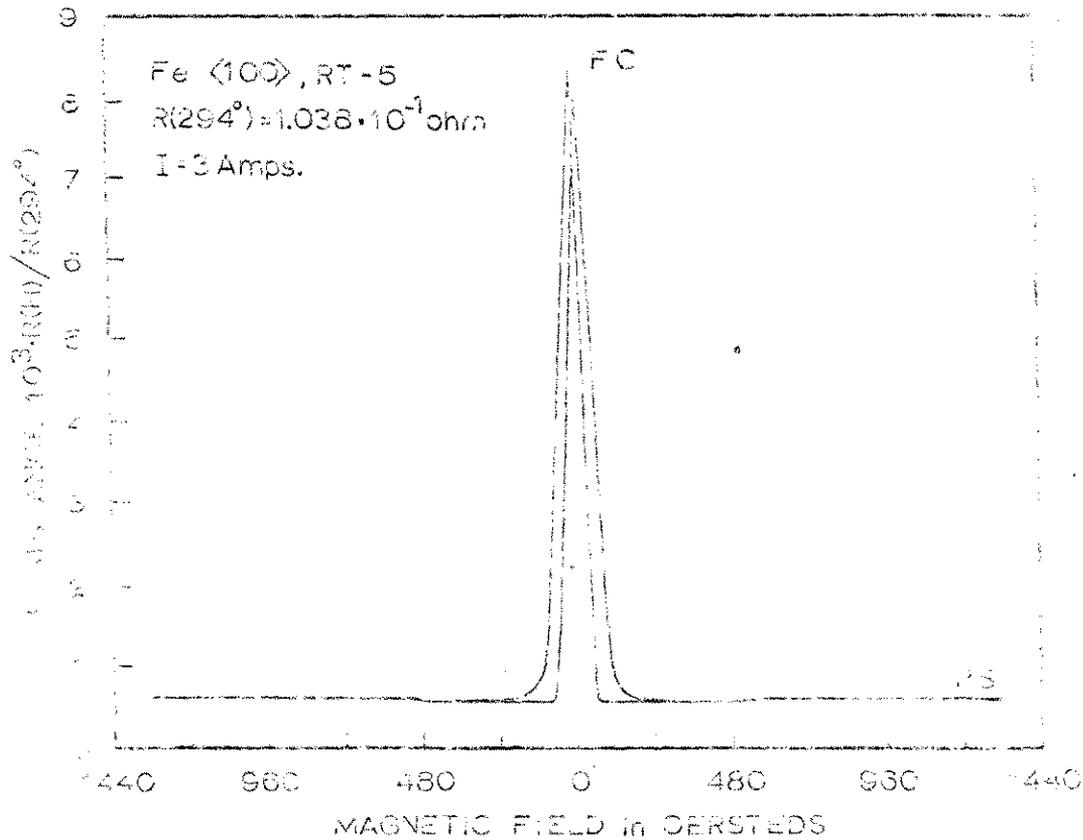
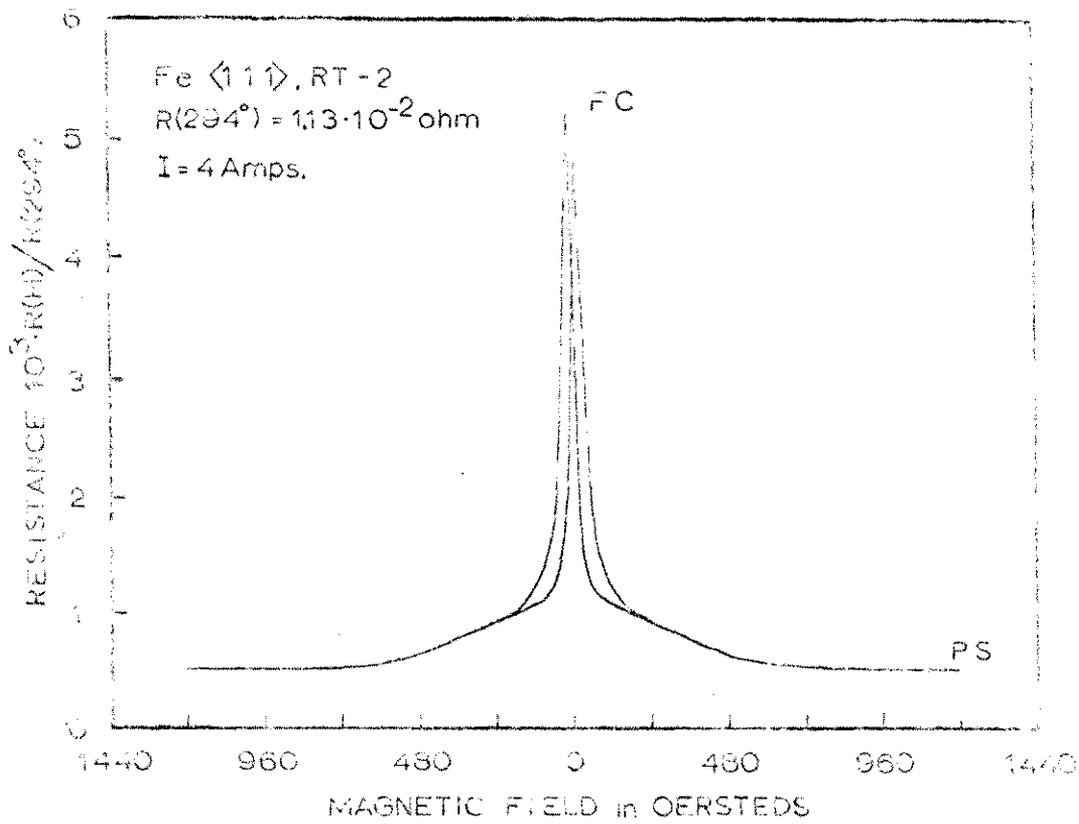


Fig. 16 Curvas de magnetoresistencia del Fe para magnitudes altas de campo según las direcciones $\langle 111 \rangle$ y $\langle 100 \rangle$. Puede verse en detalle el efecto de histéresis. La sigla PS se usa para designar el estado paramagnético saturado y FC para el estado de flujo cerrado (Nof. 1957).

tura. Aquí, en esta tesis, seguiremos esencialmente ese tratamiento.

La estructura de dominios en cristales de hierro ferromagnético ha sido estudiada con gran detalle ²⁷, ⁵⁸, aunque no se ha hecho ningún estudio sistemático siguiendo el movimiento de la pared y midiendo la resistividad simultáneamente.

Podemos tomar el espécimen según la dirección <100> de la Ref.27 como un ejemplo típico (ver Fig.17). Allí pueden encontrarse varias paredes de Bloch para las cuales la magnetización cambia en 90° y en 180°. En ausencia de campos aplicados, el vector inducción \vec{B} varía ²² como

$$\vec{B} = B_0 (\sin \alpha_y, 0, \cos \alpha_y) \quad (4-1)$$

para una pared de 180° ubicada en el plano $y=0$, y como

$$\vec{B} = \frac{\sqrt{2}}{2} B_0 (\sin \alpha_y, 1, \cos \alpha_y) \quad (4-2)$$

para una pared de 90°. En estas relaciones,

$$\cos \alpha_y = -\tanh \left(\frac{y}{\lambda} \right) \quad (4-3)$$

donde λ es un parámetro que describe el grosor de la pared. El ángulo α_y varía desde 0 para $y \rightarrow -\infty$, pasa por $\pi/2$ para $y=0$ y toma el valor π para $y \rightarrow \infty$. Esta variación espacial de B produce dos efectos diferentes que influyen en la resistividad de la muestra:

(i) una deflección diamagnética de las órbitas electrónicas en un campo magnético interno de valor entre 11 kG ³⁰ y 22 kG ⁵⁹, y

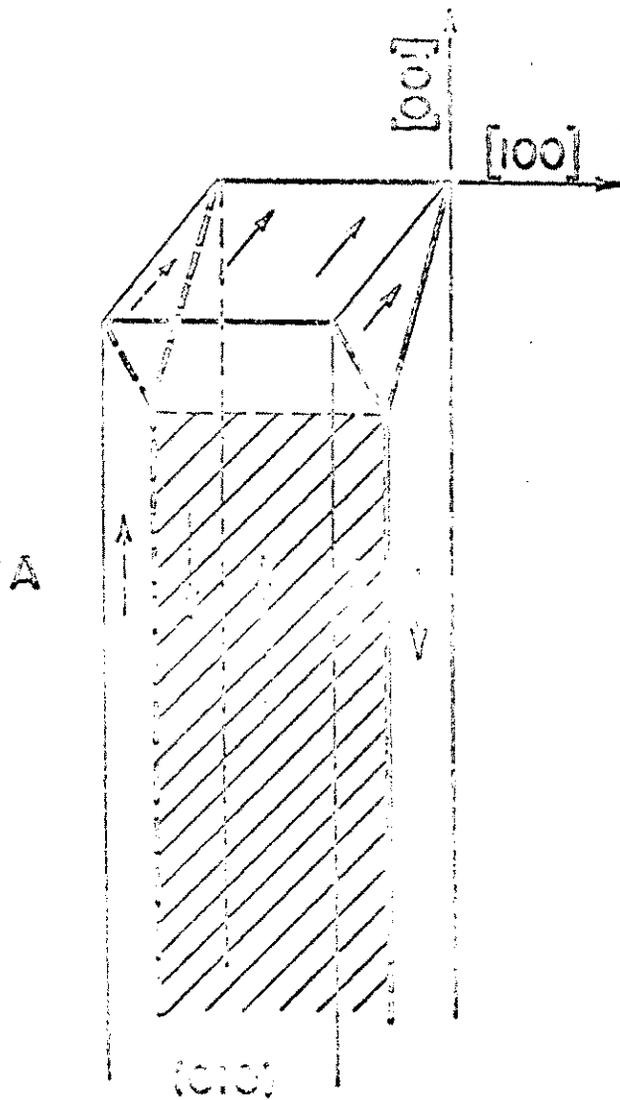


Fig. 17 Muestra de Fe según la dirección $\langle 100 \rangle$.
La estructura de dominios corresponde al estado de flujo cerrado
en ausencia de corriente.

(ii) un scattering paramagnético debido a la interacción directa del spin del electrón con la magnetización, proporcionando un coeficiente de reflexión para los electrones que inciden sobre la pared.

La primera etapa consiste entonces, en calcular los coeficientes de reflexión y transmisión para los electrones que inciden sobre la pared de Bloch bajo un ángulo arbitrario. Luego puede calcularse la resistividad, siguiendo el tratamiento clásico de Boltzmann, por medio de la integral de línea de Chambers ³⁷.

Para un metal ferromagnético con dos superficies de Fermi, una para spin mayoría otra para spin minoría, el tensor local de conductividad está dado por

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \frac{e^2}{8\pi^3 \hbar} \sum_{\sigma} \int_{SF} \frac{v_{\sigma i}(\vec{k}) \Lambda_{\sigma j}(\vec{k}, \vec{r})}{|\vec{v}_{\sigma}(\vec{k})|} dS_{\sigma k} \quad (4-4)$$

donde $\vec{v}(\vec{k})$ es el vector velocidad de Fermi para la SF de spin σ , y $\Lambda(\vec{k}, \vec{r})$ es el camino efectivo de la teoría de Chambers ³⁷

Lejos de las paredes de Bloch, en medio del volumen de la muestra, se tiene

$$\vec{\Lambda}_{\sigma}(\vec{k}) = \int_{-\infty}^{t_0(\vec{k})} \vec{v}_{\sigma}(t) \exp\left[\frac{t - t_0(\vec{k})}{\tau}\right] dt \quad , \quad (4-5)$$

donde

$$\vec{v}_{\sigma}(t) = (\hbar/m) \vec{k}(t) \quad (4-6)$$

y $\vec{\kappa}(t)$ satisface la ecuación de evolución

$$\hbar \dot{\vec{\kappa}} = - (|e| \hbar / mc) \vec{\kappa} \times \vec{B} \quad (4-7)$$

con la condición inicial

$$\vec{\kappa}(t_0) = \vec{k} \quad (4-8)$$

Para el modelo de electrones libres, esto proporciona el resultado clásico (2-46), suponiendo que $\vec{B} = B \hat{z}$.

En presencia de una pared de Bloch, el cálculo del camino efectivo debe ser modificado de dos maneras:

(i) el campo interno \vec{B} de (4-7) varía espacialmente de acuerdo con (4-1), (4-2) y (4-3);

(ii) al llegar a la pared, el paquete de ondas del electrón puede ser parcialmente reflejado, con probabilidad $R(\vec{k})$, y parcialmente transmitido, con probabilidad $\{1 - R(\vec{k})\} = T(\vec{k})$.

Bajo estas condiciones la trayectoria del electrón se transforma en una serie de trayectorias acopladas, similares al problema del camino aleatorio ⁸⁰, y las trayectorias individuales son caminos enroscados y no las órbitas ciclotrónicas helicoidales. La Fig. 18 presenta un ejemplo de esta red de trayectorias acopladas para una pared de Bloch de 180° y grosor muy pequeño comparado con el radio de ciclotrón.

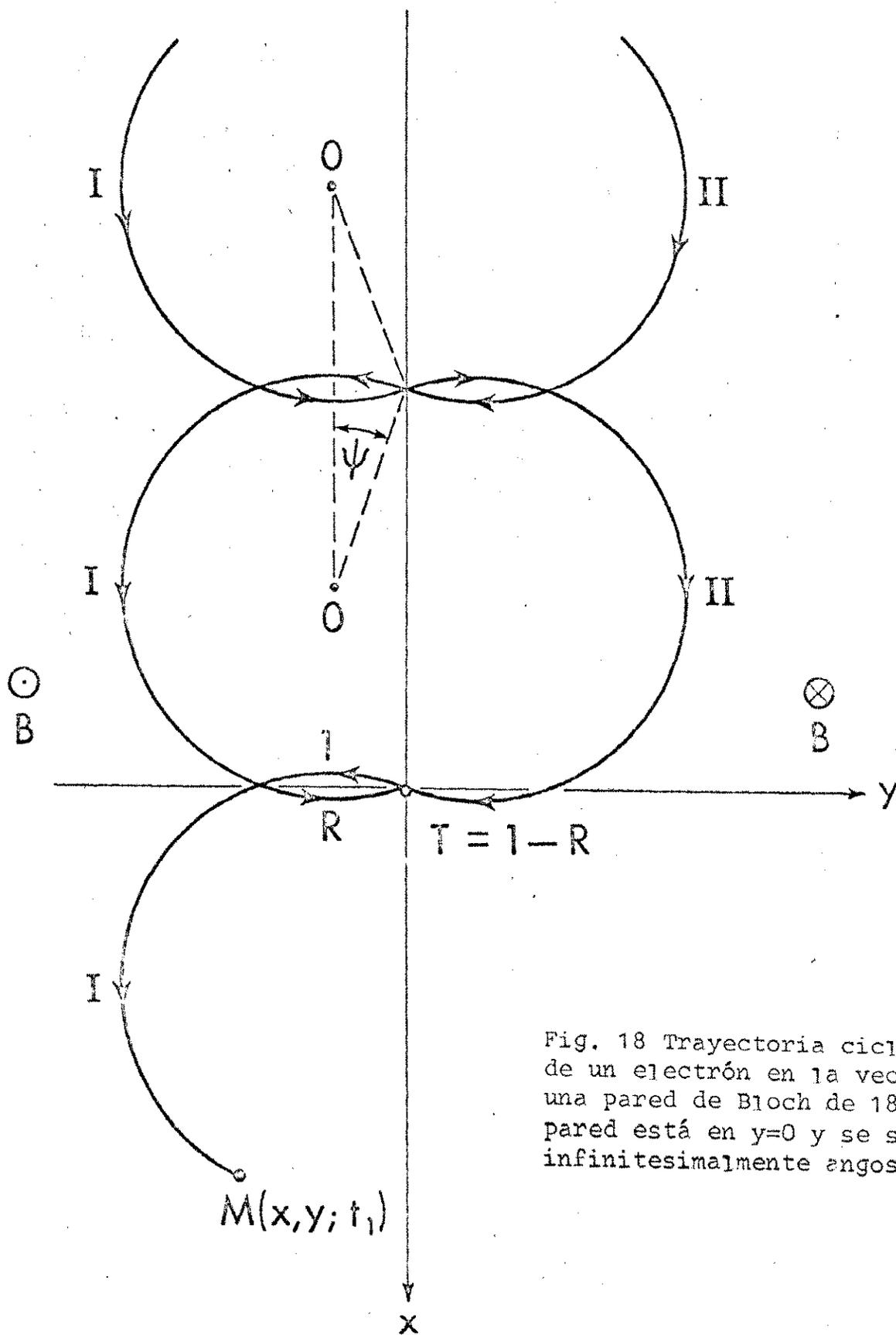


Fig. 18 Trayectoria ciclotrónica de un electrón en la vecindad de una pared de Bloch de 180° . La pared está en $y=0$ y se supone infinitesimalmente angosta.

4.2 Método del Cálculo.

El cálculo del camino efectivo fue hecho para los siguientes casos^{31 - 32}:

(i) Inclusión de los efectos diamagnéticos para una pared de Bloch de 180° de grosor infinitesimalmente pequeño. Entonces

$$\vec{B} = \begin{cases} B_0 \hat{z} & y < 0 . \\ -B_0 \hat{z} & y > 0 . \end{cases} \quad (4-9)$$

Esta aproximación corresponde a un grosor de la pared mucho más pequeño que el camino libre medio y que el radio de ciclotrón. Consideraciones de simetría implican que el tensor conductividad σ_{ij} depende solamente de la coordenada y , y que el camino efectivo $\Lambda(k, y)$ es función solamente de cuatro variables. Con la ayuda de la Fig.18, dados y y k así como B_0 , se determina

$$T = \left(\frac{2\pi}{\omega_c} \right) = \left(\frac{2\pi mc}{|e| B_0} \right) \quad , \quad (4-10)$$

el período de ciclotrón, $t(k, y)$, el tiempo transcurrido desde el último encuentro con la pared hasta que el paquete de ondas de vector k llega al punto de coordenada y , y $\theta(k, y)$, el tiempo transcurrido - para un paquete de ondas que pasa por y con vector de onda k - entre dos colisiones sucesivas con la pared.

Con estas definiciones se obtiene

$$\Lambda_{\sigma z}(\vec{k}) = \left(\frac{\hbar k_z \sigma \tau}{m} \right) \quad , \quad (4-12)$$

$$\Lambda_{\sigma x}(\vec{k}, y) = I_{\sigma x}(t_1) + \frac{I_{\sigma x}(\Theta) \exp(-t_1/\tau)}{1 - \exp(-\Theta/\tau)} \quad , \quad (4-12)$$

$$\Lambda_{\sigma y}(\vec{k}, y) = I_{\sigma y}(t_1) + \frac{(2R_{\vec{\sigma}ky} - 1) I_{\sigma y}(\Theta) \exp(-t_1/\tau)}{1 - [2R_{\vec{\sigma}ky} - 1] \exp(-\Theta/\tau)} \quad , \quad (4-13)$$

donde $R_{\vec{\sigma}ky}$ es el coeficiente de reflexión para el paquete de ondas con vector de onda k en el momento que llega a la pared, y

$$I_{\sigma j}(t) = \int_0^t v_{\sigma j}(t') \exp[(t' - t)/\tau] dt' \quad . \quad (4-14)$$

La velocidad v_{σ} está determinada por las relaciones (4-6) y (4-7) con la condición inicial

$$\vec{k}(t_1) = \vec{k} \quad . \quad (4-15)$$

(ii) Se consideran solamente los efectos paramagnéticos suponiendo que las trayectorias son líneas rectas (los electrones se mueven como si no hubiera campo interno). En este caso las fórmulas (4-11), (4-12) y (4-13) se reducen para una pared de 180° a

$$\vec{\Lambda}_{\sigma}(\vec{k}, y) = \vec{\Lambda}_{\sigma}(\vec{k}) \quad \text{para } |y| \geq -\Lambda_0 (\text{Sgn } y) (k_y/k_{F0}) \quad (4-16)$$

$$\vec{\Lambda}_\sigma(\vec{k}, y) = \vec{\Lambda}_\sigma(\vec{k}) - \hat{y} 2R_\sigma(\vec{k}) \left[y + \Lambda_\sigma(k_y/k_{F\sigma}) \right] \quad (4-17)$$

para $|y| \leq -\Lambda_\sigma(\text{Sgn } y)(k_y/k_{F\sigma})$,

donde

$$\vec{\Lambda}_\sigma(\vec{k}) = (\hbar/m)\tau \vec{k} \quad (4-18)$$

es el camino libre medio ordinario.

El cálculo detallado del camino efectivo depende crucialmente de los valores relativos del camino libre medio no perturbado Λ_σ y del grosor de la pared λ . Para que los efectos de la pared sean apreciables, es necesario tener muestras relativamente puras con $\Lambda_\sigma > \lambda$, y probablemente $\Lambda_\sigma \gg \lambda$. Se supone que éste es el caso.

El problema ahora se reduce a

1. Cálculo del coeficiente de reflexión $R \rightarrow \sigma k_y$.
2. Integración de (4-4) sobre la SF para la obtención del tensor conductividad.
3. Cálculo del tensor resistividad

$$\rho_{ij}(r) = \{\sigma(r)\}^{-1}_{ij}$$

mediante inversión matricial.

4. Cálculo de la relación voltaje-corriente para las condiciones geométricas específicas de un experimento dado.

Es importante hacer notar que para hacer más simple el cálculo, se ha hecho la aproximación drástica de esferas de Fermi de electrones libres. Se sabe (Cap.3) que éste está lejos de ser un modelo razonable para los metales ferromag-

néticos. Este supuesto plantea algunos problemas. En un modelo de electrones libres consistente, en general, la separación de energía debida al intercambio $2\mu_B$ es mucho más pequeña que la energía típica de Fermi,

$$2\mu_0 B_0 \ll \epsilon_F. \quad (4-19)$$

Esto conduce a dos esferas de Fermi que difieren muy poco en radio,

$$\frac{|k_{F\uparrow}^2 - k_{F\downarrow}^2|}{(k_{F\uparrow}^2 + k_{F\downarrow}^2)} = \mu_0 B_0 / \epsilon_F. \quad (4-20)$$

Aunque este modelo es apropiado para efectos magnéticos integrados, puede dar resultados muy malos en nuestro caso. Esto se debe a

(a) Las superficies de Fermi reales están formadas por hojas múltiplemente conexas de aspecto muy complicado y por una gran variedad de pequeños "bolsillos".

(b) La densidad de estados en el nivel de Fermi es muy diferente para los dos spines.

(c) El problema por resolver se reduce esencialmente a un efecto túnel donde el spin mayoría de la izquierda es el spin minoría de la derecha y viceversa.

(d) La disponibilidad de estados en el espacio de fase, casi idéntica para ambos spines en el modelo de electrones libres cuando se cumple (4-19), es de primordial importancia en este cálculo.

Por lo tanto, no queriendo abandonar el modelo de electrones libres, se le realizó el cálculo de $R \rightarrow$ bajo dos condiciones: la primera dada por (4-19)

Oky

y la segunda por

$$2 \mu_0 B_0 \sim \epsilon_F \quad (4-21)$$

En el primer caso, las propiedades magnéticas integradas están tomadas en cuenta correctamente; cuando es válido (4-21), se maneja la disponibilidad de estados en el espacio de fase de manera mucho más sensible.

4.3 Cálculo del Efecto Túnel: el Coeficiente de Reflexión $R \rightarrow \sigma_{ky}$

Cuando es válida la relación (4-19), para una pared de Bloch de 180° y grosor arbitrario λ , se cumplen las relaciones (4-1), (4-3) y

$$\zeta_F \equiv \frac{\mu_0 B_0}{\epsilon_F} \ll 1 \quad (4-22)$$

La ecuación de onda para el movimiento de un electrón a lo largo del eje Y está dada por

$$\frac{d^2}{dy^2} \phi_1 + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\epsilon + \mu_0 B_0 f_Z(y) \right] \phi_1 = \frac{2m}{\hbar^2} \mu_0 B_0 f_X(y) \phi_2 \quad (4-23)$$

$$\frac{d^2}{dy^2} \phi_2 + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\epsilon - \mu_0 B_0 f_Z(y) \right] \phi_2 = \frac{2m}{\hbar^2} \mu_0 B_0 f_X(y) \phi_1$$

donde (ϕ_1, ϕ_2) es un spinor de dos componentes (correspondiente a spin 1/2), con el spin cuantizado según el eje Z,

$$f_z(y) = \tanh\left(\frac{y}{\lambda}\right) \quad , \quad (4-24)$$

$$f_x(y) = \operatorname{sech}\left(\frac{y}{\lambda}\right) \quad , \quad (4-25)$$

y ϵ (con $\epsilon > -\mu B$) es la componente según el eje Y del autovalor energía E.

Tomando E igual a la energía de Fermi obtenemos

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} [k_x^2 + k_z^2] + \epsilon = \epsilon_F \quad . \quad (4-26)$$

El sistema de ecuaciones acopladas (4-23) puede resolverse por medio de la aproximación WKB en dos etapas:

primero se considera la contribución de $f_z(y)$ (despreciando $f_x(y)$) para un sistema de dos ecuaciones desacopladas; después se calcula la contribución de $f_x(y)$ que acopla las componentes del spinor (ϕ_1, ϕ_2) .

Para $\epsilon > 0$ definimos k por medio de

$$\epsilon \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad , \quad (4-27)$$

y

$$\zeta \equiv \frac{\mu_0 B_0}{\epsilon} \quad . \quad (4-28)$$

El parámetro ζ de (4-28) es en general un número pequeño.

Un cálculo largo pero directo da el siguiente resultado para el coeficiente de reflexión

$$R_\sigma(k, \lambda) = \frac{\zeta^2}{4} \pi^2 k^2 \lambda^2 \left\{ \frac{1}{\sinh^2 \pi k \lambda} + \frac{1}{\cosh^2 \pi k \lambda} \right\} \quad . \quad (4-29)$$

El primer término de (4-29) corresponde al proceso de reflexión con conservación

del spin, y el segundo término (que proviene de la contribución de $f(y)$)
 X
 corresponde a reflexión con cambio de spin.

La función $R \rightarrow (y, \lambda)$ tiene los valores límites correctos
 σ_k

$$R \rightarrow (y, \lambda) \left\{ \begin{array}{l} \rightarrow \zeta^2/4 \text{ para } k\lambda \rightarrow 0 \\ \rightarrow 0 \text{ para } \lambda \rightarrow \infty \end{array} \right. , \quad (4-30)$$

y alcanza su máximo valor $R_{\max} = 1.169 \cdot \zeta^2/4$ para $\pi k\lambda \approx .8$.

$R \rightarrow (y, \lambda)$ es en general muy pequeño, como se esperaba a partir de (4-22),
 σ_k
 y alcanza su máximo valor para $\lambda \approx (\pi k)^{-1}$, lo cual puede justificarse con argu-
 mentos generales.

Si dejamos de lado el supuesto (4-22) pero consideramos $k\lambda \ll 1$, el sis-
 tema de ecuaciones (4-23) puede simplificarse despreciando el lado derecho y
 reemplazando (4-24) por una función escalón. Bajo estas condiciones obtenemos

$$R \rightarrow (\lambda \rightarrow 0) = \left\{ \begin{array}{l} 1 \text{ para } |\zeta| \geq 1 \\ \left| \frac{(1+\zeta)^{1/2} - (1-\zeta)^{1/2}}{(1+\zeta)^{1/2} + (1-\zeta)^{1/2}} \right| \text{ para } 0 \leq \zeta \leq 1 \end{array} \right. , \quad (4-31)$$

donde ζ está definido por (4-28) y ϵ varía desde $-\mu B$ hasta $+\infty$.

4.4 Cálculo de la Resistividad en la Pared de Bloch. Conclusiones.

Podemos ahora aplicar los resultados de la última sección en el cálculo del tensor resistividad $\rho_{ij}(y)$.

1. No inclusión de efectos diamagnéticos.

Para $|y| \cong \Lambda$ tenemos el resultado

$$\rho_{ij} = \delta_{ij} \rho_o, \quad (4-32)$$

donde

$$\rho_o = \{(n\uparrow + n\downarrow) e^2 \tau / m\}^{-1}. \quad (4-33)$$

Despreciando los efectos diamagnéticos, solamente ρ_{yy} varía, aumentando su valor dentro de una distancia del orden de Λ de la pared. En lo que sigue calculamos $\rho_{yy}(y=0)$, es decir la resistividad en la pared según la dirección perpendicular a ella.

(i) Primer caso: Pequeña separación de energía debida al intercambio, pared de Bloch de 180° de grosor arbitrario.

Las relaciones (4-20) y (4-22) implican que

$$k_{F\uparrow} \cong k_{F\downarrow} \cong k_F, \quad n\uparrow \cong n\downarrow \cong (1/2) n. \quad (4-34)$$

Además, ya que $\lambda \cong 2 \times 10^{-6}$ cm y $k_F \cong 3 \times 10^8$ cm⁻¹ para casos de interés práctico tenemos

$$\pi k_F \lambda \cong 2 \times 10^3 \quad (4-35)$$

y por lo tanto podemos tomar la forma asintótica de (4-29)

$$R(k, \lambda) = 2 \zeta_F^2 \pi^2 k_F^2 \lambda^2 \exp[-2 \pi k \lambda] \quad (4-36)$$

como válida para la mayor parte del rango de variación de k . Escribiendo

$$k = k_F \cos \theta \equiv k_F \eta \quad (4-37)$$

y cortando la expresión (4-36) cuando alcanza el valor 1, obtenemos la siguiente expresión aproximada para el coeficiente de reflexión

$$R(\eta, \lambda) = \begin{cases} 1 & \text{para } \eta \leq \eta_c \\ 2 \left[\frac{\zeta_F \pi k_F \lambda}{\eta} \right]^2 \exp[-2 \pi k_F \eta \lambda] & \text{para } \eta > \eta_c \end{cases}, \quad (4-38)$$

donde ζ_F está definido por (4-22) y η_c satisface la ecuación trascendental

$$2 \pi k_F \lambda \eta_c = \ln 2 + 2 \ln(\pi k_F \lambda \zeta_F) - 2 \ln \eta_c \quad (4-39)$$

Usando el coeficiente de reflexión (4-38) obtenemos el resultado

$$\frac{\Delta \rho_{yy}}{\rho_0} = \frac{P}{1 - P}, \quad (4-40)$$

donde

$$P = 8 \eta_c^3 + 12 \left[\eta_c^2 / \pi \lambda k_F \right] \quad (4-41)$$

En la Tabla 2 se presenta una lista de valores de P para varios valores de ζ_F ($\zeta_F \ll 1$) y $\pi k_F \lambda$ ($\pi k_F \lambda \gg 1$). Como puede verse P es siempre un número peque-

TABLA 2

El factor P de la resistividad en la pared
para el caso de grosor arbitrario y $\zeta_F \ll 1$

	$\zeta_F = 10^{-4}$	$\zeta_F = 10^{-3}$	$\zeta_F = 10^{-2}$	$\zeta_F = 10^{-1}$
$\pi k_F \lambda = 10$	2×10^{-6}	2×10^{-4}	9×10^{-3}	1×10^{-1}
$\pi k_F \lambda = 10^2$	9×10^{-6}	1×10^{-4}	6×10^{-4}	2×10^{-3}
$\pi k_F \lambda = 10^3$	6×10^{-7}	1×10^{-6}	4×10^{-6}	8×10^{-6}
$\pi k_F \lambda = 10^4$	7×10^{-10}	8×10^{-9}	1×10^{-8}	2×10^{-8}

ño y

$$\rho_{yy}(0) = \rho_0 [1 - P]^{-1}$$

es del orden de P y no mayor que .1 para el valor más grande de ζ_F y para la pared más angosta. El valor observado para el Fe ($\Delta\rho_{yy}/\rho_{yy} \approx 4$) no puede ser explicado por este modelo.

(ii) Segundo caso : ζ_F grande, pared de 180° de grosor pequeño.

Para una separación arbitraria ζ_F de energía debida al intercambio, que tome en cuenta los argumentos de la Sec. 4.2 sobre el espacio de fase, y para una pared angosta, $\lambda k \ll 1$, el uso de (4-31) y (4-37) da

$$R_M(\eta, \lambda \rightarrow 0) = \begin{cases} 1 & \text{para } 0 \leq \eta \leq (2\xi \frac{M}{F})^{\frac{1}{2}} \\ \frac{\eta^2 - \xi \frac{M}{F} - \eta (\eta^2 - 2\xi \frac{M}{F})^{\frac{1}{2}}}{\eta^2 - \xi \frac{M}{F} + \eta (\eta^2 - 2\xi \frac{M}{F})^{\frac{1}{2}}} & \text{para } (2\xi \frac{M}{F})^{\frac{1}{2}} \leq \eta \leq 1 \end{cases} \quad (4-42)$$

$$y \quad R_m(\eta, \lambda \rightarrow 0) = \frac{\eta^2 + \xi \frac{m}{F} - \eta (\eta^2 + 2\xi \frac{m}{F})^{\frac{1}{2}}}{\eta^2 + \xi \frac{m}{F} + \eta (\eta^2 + 2\xi \frac{m}{F})^{\frac{1}{2}}} \quad (4-43)$$

para todo η , $0 \leq \eta \leq 1$,

donde \underline{M} y \underline{m} significan spin de mayoría y minoría respectivamente, y los parámetros

$\xi_{F}^{M,m}$ se definen por

$$\xi_{F}^{M} \equiv \frac{\mu_{0} B_{0}}{\epsilon_{F} + \mu_{0} B_{0}} = \frac{\zeta_{F}}{1 + \zeta_{F}} \quad (4-44)$$

y

$$\xi_{F}^{m} \equiv \frac{\mu_{0} B_{0}}{\epsilon_{F} - \mu_{0} B_{0}} = \frac{\zeta_{F}}{1 - \zeta_{F}} \quad (4-45)$$

En este momento es útil definir un nuevo parámetro, que será de importancia en los próximos cálculos, y que es la razón entre las densidades de estado en el nivel de Fermi

$$\nu \equiv \frac{D_{M}(\epsilon_{F})}{D_{m}(\epsilon_{F})} = \frac{k_{F}^{M}}{k_{F}^{m}} = \left(\frac{n_{M}}{n_{m}} \right)^{1/3} \quad (4-46)$$

Aquí n_{M} , n_{m} , k_{F}^{M} y k_{F}^{m} son las densidades de electrones y los vectores de onda de Fermi para los spines de mayoría y minoría respectivamente.

Fácilmente se encuentra que

$$\xi_{F}^{M} = \frac{\nu^2 - 1}{2\nu^2} \quad , \quad \xi_{F}^{m} = \frac{\nu^2 - 1}{2} \quad , \quad (4-47)$$

para ν variando desde 1 hasta $+\infty$. Cuando ν está cerca del valor 1, se está tratando el caso de ζ_{F} pequeño (el caso paramagnético corresponde a $\nu = 1$). El otro límite, $\nu \rightarrow +\infty$, corresponde al estado completamente polarizado, donde se anula la densidad n_{m} de electrones con spin minoría.

Con estas definiciones, la resistividad queda

$$\rho_{yy}(0) = \rho_0 \cdot \frac{1 + \nu^3}{\nu^3 [1 - P_M(\nu)] + 1 - P_m(\nu)}, \quad (4-48)$$

donde $P_M(\nu)$ y $P_m(\nu)$ son los factores de aumento de la resistividad para los spines de mayoría y minoría respectivamente. Para una pared muy angosta de 180° éstos están dados por

$$\begin{aligned} P_M(\nu) = & [1 + (24/7)\nu^4(\nu^2-1)^{-2} + (48/35)\nu^{-3}(\nu^2-1)^{3/2} + (44/5)\nu^{-3}(\nu^2-1)^{-1} \\ & + 4\nu^{-3} + (32/7)\nu^{-3}(\nu^2-1)^{-2}] - [(24/5)\nu^2(\nu^2-1)^{-1} + 8\nu(\nu^2-1)^{-2}] \\ P_m(\nu) = & [1 + (8/35)(\nu^2-1)^{3/2} + (24/7)(\nu^2-1)^{-2} + (24/5)(\nu^2-1)^{-1} + \\ & (32/7)\nu^7(\nu^2-1)^{-2} + (24/15)\nu^3] - [(32/5)\nu^5(\nu^2-1)^{-1} + \\ & (12/5)\nu^3(\nu^2-1)^{-1} + 8\nu^3(\nu^2-1)^{-2}] \end{aligned} \quad (4-49)$$

Para el estado "completamente polarizado", ($\nu \rightarrow \infty$), encontramos los comportamientos asintóticos

$$\begin{aligned} P_M(\nu) & \approx 1 - 4/\nu^3 + \dots \\ P_m(\nu) & \approx 1 - (3/\nu) + (24/5)(1/\nu^2) - (13/2)(1/\nu^3) \dots \end{aligned} \quad (4-50)$$

que substituídos en (4-48) dan

$$\rho_{yy}(0) \approx \rho_0 (\nu^3/4) \left\{ 1 + (3/4)(1/\nu) \dots \right\} \quad (4-51)$$

para $\nu \rightarrow \infty$.

La relación (4-51) dice que, para valores grandes de ν , la resistividad crece proporcionalmente a la razón (n_M / n_m) . Este dramático efecto, para $\nu \rightarrow \infty$, es esencialmente resultado de la falta de espacio de fase disponible para los electrones que cruzan la barrera.

Para valores de ν cercanos a 1, obtenemos las expansiones

$$P_M(\nu) \approx 3.8790(\nu-1)^{3/2} - (3/4)(\nu-1)^2 + \dots \quad (4-52)$$

$$P_m(\nu) \approx 0.6465(\nu-1)^{3/2} - (1/2)(\nu-1)^2 + \dots$$

que reemplazadas en (4-48) dan

$$\rho_{yy}(0) = \rho_0 \left\{ 1 + (3/2)(\nu-1) + (8/5)\sqrt{2}(\nu-1)^{3/2} - (5/8)(\nu-1)^2 \dots \right\} \quad (4-53)$$

La relación (4-53) tiene el límite obvio

$$\lim_{\nu \rightarrow 1} \rho_{yy}(0) = \rho_0$$

En la Tabla 3 presentamos valores de los factores P_M y P_m y de la razón de resistividad $\rho_{yy}(0)/\rho_0$ para valores de ν entre 1 y 10. Como se señaló oportunamente en la Sec. 4.1, estamos interesados en valores de $\rho_{yy}(0)/\rho_0$ del orden de 5, que como puede verse de la Tabla 3, corresponden a valores de ν entre 2 y 3. Estos últimos se muestran en la Tabla 4.

Vemos entonces que una pared de Bloch, aún ignorando los efectos diamagnéticos, puede producir un cambio grande en la resistividad eléctrica de los metales ferromagnéticos. Este efecto es notorio solamente cuando las densidades de estados

TABLA 3

Los factores de aumento P y la resistividad ρ / ρ_0 en la pared para el caso de ζ arbitrario y de una pared muy angosta

ν	$P_M(\nu)$	$P_m(\nu)$	$\left[\frac{\rho_{yy}}{\rho_0} \right]$
1.0	0.0000	0.0000	1.000
2.0	0.7384	0.2067	3.118
3.0	0.9051	0.3648	8.757
4.0	0.9556	0.4731	19.30
5.0	0.9758	0.5506	36.27
6.0	0.9853	0.6085	60.84
7.0	0.9905	0.6534	95.42
8.0	0.9935	0.7041	141.6
9.0	0.9953	0.7181	196.9
10.0	0.9965	0.7422	266.4
$+\infty$	1.000	1.000	$+\infty$

TABLA 4

Los factores P y la razón de resistividad ρ_{yy} / ρ_o
en la pared, para el caso de una pared muy angosta,
para valores de ν entre 2 y 3

ν	$P_M(\nu)$	$P_m(\nu)$	$\left[\frac{\rho_{yy}}{\rho_o} \right]$
2.0	0.7384	0.2067	3.118
2.1	0.7674	0.2255	3.504
2.2	0.7924	0.2435	3.926
2.3	0.8139	0.2609	4.384
2.4	0.8326	0.2776	4.882
2.5	0.8489	0.2936	5.420
2.6	0.8631	0.3090	5.998
2.7	0.8757	0.3238	6.623
2.8	0.8867	0.3380	7.288
2.9	0.8965	0.3517	8.003
3.0	0.9051	0.3648	8.757



para spin mayoría y minoría son considerablemente diferentes. En este caso, un electrón con spin mayoría a la izquierda de la pared, casi no tiene estados disponibles al otro lado de la pared al cruzar la barrera, ya que su spin al lado derecho es de tipo minoría. Este electrón es por lo tanto reflejado en la mayoría de los casos, con el consiguiente aumento de la resistividad.

Concluyendo, hagamos notar:

a) En nuestro caso mayoría y minoría corresponden a densidades de estados alta y baja respectivamente, en el nivel de Fermi. Para los metales ferromagnéticos, v debería entenderse como la razón promedio de las densidades de estados, de modo que $v \geq 1$. Es posible que los electrones con spin de minoría sean más abundantes que los de mayoría en ϵ_F .

b) Para estructura de bandas reales, los cálculos del efecto túnel son mucho más complicados que en nuestro modelo, pero las direcciones generales indicadas aquí debieran ser las mismas.

c) Ignorando los efectos diamagnéticos, sólo la resistividad perpendicular a la pared es afectada, lo cual, en general no es necesariamente la resistividad medida en un experimento típico. Los factores geométricos involucrados pueden calcularse fácilmente.

d) Otras paredes de Bloch, distintas de 180° , pueden ser fácilmente estudiadas, multiplicando por los factores de escala apropiados, solamente si los efectos diamagnéticos son despreciados. En este caso, para una pared de 90° por ejemplo, los resultados de esta sección pueden aplicarse si B es reemplazado por $B/\sqrt{2}$.

e) Cuando $\lambda \sim (k_F)^{-1}$, el término de cambio del spin, dado por la compo-

nente $f(y)$ de la magnetización, abre un canal para un cambio adiabático del spin. En este caso, cuando $v \rightarrow \infty$, el aumento de la razón de resistividad ρ_x / ρ_{yy} no sería tan grande como el dado por (4-51) y la Tabla 3.

f) En consecuencia, aún cuando los efectos diamagnéticos no son considerados, el scattering de los electrones con la pared de Bloch puede ser responsable de la magnetoresistencia negativa inicial encontrada para los metales ferromagnéticos²⁶⁻³⁰, solamente si los spines de mayoría y minoría tienen densidades de estados substancialmente diferentes en el nivel de Fermi.

g) Como se verá a continuación, los efectos diamagnéticos aumentan aún más esta magnetoresistencia negativa y pueden explicar los resultados experimentales aún para valores de v muy cercanos a 1.

2. Inclusión de efectos diamagnéticos para una pared de Bloch muy angosta.

En el cálculo anterior se supuso que las trayectorias semiclásicas de los electrones eran líneas rectas en el espacio real, sólo sujetas a reflexiones en la pared de Bloch y a efectos de relajación por el scattering de volumen. Esta no es una aproximación muy sensible, ya que el campo interno generado en una buena muestra ferromagnética es del orden de 22 kG ^{30,59}, lo cual da para el parámetro $\chi = \omega \tau / c$ valores del orden de 3 y 10 ³⁰. Por lo tanto, ya que $\chi > 1$, las contribuciones diamagnéticas son importantes.

En estas condiciones, se realizaron cálculos sólo para casos específicos que incluyen

- (i) $y=0$ solamente, es decir la resistividad en la pared,
- (ii) el límite $\chi = \omega \tau / c \rightarrow 0$ y coeficiente de reflexión $R(v)$ arbitrario, dados por (4-52) y (4-43),
- (iii) el límite $\chi \rightarrow \infty$ con coeficiente de reflexión $R(v)$ arbitrario, y las

$$\rho_{ij}(x, \nu; y=0) = \rho_0 \begin{bmatrix} 2.215 & 2.215 \frac{T_{2m}(\nu) + \nu^3 T_{2M}(\nu)}{T_{1m}(\nu) + \nu^3 T_{1M}(\nu)} & 0 \\ 0 & \frac{(1+\nu^3)(x^2 + 0.8460)}{T_{1m}(\nu) + \nu^3 T_{1M}(\nu)} & 0 \\ 0 & \frac{T_{3m}(\nu) + \nu^3 T_{3M}(\nu)}{T_{1m}(\nu) + \nu^3 T_{1M}(\nu)} & 1 \end{bmatrix} \quad (4-56)$$

donde las seis funciones $T_{ks}(\nu)$ ($k=1,2,3$; $s=m,M$) están dadas en el Apéndice D.

En ausencia de reflexión paramagnética ($\nu = 1$, $R = 0$) obtenemos

$$\rho_{ij}(x, \nu=1; y=0) = \rho_0 \begin{bmatrix} 2.215 & 0 & 0 \\ 0 & (2/3)x^2 + 0.564 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4-57)$$

De las fórmulas anteriores se ve que:

a) Hay un fuerte efecto diamagnético, aún en ausencia de reflexión en la pared. Esto se debe al carácter de zig-zag de las órbitas electrónicas cuando éstos van de regiones donde la magnetización apunta en un sentido a regiones donde apunta en sentido contrario.

b) El efecto es muy fuerte (proporcional a χ^2) en la dirección perpendicular a la pared, pero también produce un aumento en un factor mayor que dos para la resistividad paralela a la pared y perpendicular al campo.

c) El efecto combinado de trayectorias diamagnéticas y reflexiones paramagnéticas produce un campo de Hall asimétrico y un efecto pequeño de mezcla longitudinal-transversal ρ_{zy} .

d) Un valor de $\chi \approx 3$ produciría, aún para $v = 1$, un aumento

$$\frac{\Delta \rho_{zy}}{\rho_{yy}^0} \approx 5$$

que parecería explicar las observaciones experimentales³⁰.

e) Bajo estas circunstancias, se concluye que los efectos diamagnéticos serían más importantes que los paramagnéticos, y que los efectos de la pared de Bloch pueden ciertamente explicar la resistividad adicional encontrada experimentalmente en la magnetoresistencia de los metales ferromagnéticos.

§ 5 INCLUSION DE LA RUPTURA MAGNETICA EN LAS PROPIEDADES DE TRANSPORTE

5.1 Ruptura Magnética.

Para muchos ejemplos en este capítulo usaremos el modelo de electrones casi libres, que es muy útil para una gran parte de los metales y además ofrece ventajas por su simplicidad.

Para tratar efectos semiclásicos es suficiente suponer que los números cuánticos (kV_0) de la estructura de bandas (sin campo aplicado) son buenos parámetros para definir el estado de un electrón en cualquier instante de tiempo. El vector de onda k variará con el tiempo si hay un campo aplicado. En la Sec.2.2 vimos que los campos eléctrico y magnético producen el desplazamiento del paquete de ondas de un electrón a lo largo de trayectorias bien definidas en el espacio k . Estas trayectorias, después de un cierto tiempo, pueden llegar a las proximidades de un plano de Bragg y sentir la influencia del potencial de la red cristalina, sufriendo allí difracción de Bragg. Pero si la interacción del electrón con la red es muy débil, las bandas de energía son casi degeneradas en las cercanías de un plano de Bragg y entonces es posible que, mediante efecto túnel, el paquete de ondas del electrón, bajo el impulso de los campos externos, sufra una transición entre bandas muy próximas. Este efecto, llamado de ruptura (en inglés "breakdown"), fue estudiado por Zener ⁶¹ en 1932 para el caso de los estados polares y homopolares de una molécula, y posteriormente aplicado en la discusión de ruptura eléctrica en cristales aislantes ⁶².

El fenómeno de ruptura magnética fue discutido por primera vez por Cohen y

Falicov ⁶³, quienes señalaron que el paquete de ondas de un electrón, al moverse en su órbita de ciclotrón y llegar al límite de la zona de Brillouin, bien podía no experimentar una reflexión de Bragg y por lo tanto pasar a otra hoja de la superficie de Fermi con una cierta probabilidad. Esto, por supuesto, produce el quiebre de la cuantización semiclassical de las órbitas electrónicas y un cambio en la topología de la SF.

Aquí nos interesa principalmente el caso de ruptura magnética. La expresión para la probabilidad de ruptura ha sido derivada de diferentes maneras por diversos autores ^{64 - 68}. Aquí seguiremos un análisis de Duke y Harrison ⁶⁸ válido para cualquier valor del campo magnético.

Del Cap.2 sabemos que el vector de onda \vec{k} asociado a un electrón en el cristal evoluciona como

$$\dot{\vec{k}} = -(|e|\hbar/c) \frac{\vec{v}}{k} \times \vec{H} \quad (5-1)$$

en la presencia de un campo magnético H , cuando no hay transiciones entre las bandas.

En el modelo de electrones casi libres, en las cercanías de la zona de Brillouin, el potencial periódico $V(\vec{r})$ de la red acopla los estados $|\vec{k}(\tau)\rangle$ y $|\vec{k}(\tau) + \vec{G}\rangle$ mediante la componente de Fourier $V_{\vec{G}} \equiv \langle \vec{k} + \vec{G} | V | \vec{k} \rangle$, donde \vec{G} es un vector de la red recíproca.

De la hermiticidad del potencial resulta

$$V_{-\vec{G}} = V_{\vec{G}}^* \quad (5-2)$$

integrales resultantes para $\nu \rightarrow 1$, $R = 0$.

El procedimiento descrito en la Sec.4.2 da los siguientes resultados, como función de $\chi = \omega \tau$ y el parámetro ν , la razón entre las densidades de estado para el spin mayoría y spin minoría

$$\rho_{ij}(\chi, \nu, y=0) = \rho_0 \begin{bmatrix} (1+\chi^2) & [\chi \Gamma(\nu) \{1+\chi^2\}] & 0 \\ 0 & \frac{(1+\nu^3)(1+\chi^2)}{1-P_m(\nu) + \nu^3 [1-P_M(\nu)]} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4-54)$$

para el límite de campo pequeño $\chi \ll 1$, donde las funciones $\Gamma(\nu)$, $P_m(\nu)$ y $P_M(\nu)$ están dadas en el Apéndice D. Cuando $\chi \rightarrow 0$, la relación (4-54) se reduce a la ecuación (4-48) que no considera los efectos diamagnéticos. Por otro lado, en ausencia de efectos paramagnéticos, $\nu = 1$, $R = 0$, obtenemos

$$\rho_{ij}(\chi, \nu=1, y=0) = \rho_0 \begin{bmatrix} (1+\chi^2) & 0 & 0 \\ 0 & (1+\chi^2) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4-55)$$

En el límite de campo alto, $\chi \gg 1$, despreciando términos del orden de χ^{-1} , se tiene

Al considerar el cruce aislado de un plano en el límite de la zona de Brillouin, basta tomar en cuenta tan sólo un vector de la red recíproca, que llamaremos \vec{G} , y una sola componente de Fourier $V_{\vec{G}}$ del potencial. Esta es una buena aproximación solamente si el elemento de matriz $V_{\vec{G}}$ es pequeño comparado con la energía de Fermi:

$$\frac{|V_{\vec{G}}|}{\epsilon_F} \ll 1 \quad . \quad (5-3)$$

Supondremos además que \vec{G} tiene una componente perpendicular a \vec{H} no nula. La energía del estado $|\vec{k}(t)\rangle$ permanece constante en el tiempo, cuando \vec{k} evoluciona de acuerdo con (5-1); la energía del estado $|\vec{k}(t) + \vec{G}\rangle$, en cambio, depende del tiempo.

Quando $\vec{k}(t)$ se acerca al plano en el límite de la zona definido por $\vec{k} \cdot \vec{G} = -G^2/2$, los estados $|\vec{k}(t)\rangle$ y $|\vec{k}(t) + \vec{G}\rangle$ se hacen degenerados y las transiciones entre ellos son posibles. Por lo tanto se representa la función de onda del electrón como una superposición de estos estados con coeficientes $\xi_1(t)$ y $\xi_2(t)$ dependientes del tiempo:

$$|\Psi\rangle = \xi_1(t)|\vec{k}(t)\rangle + \xi_2(t)|\vec{k}(t) + \vec{G}\rangle \quad . \quad (5-4)$$

Ahora hagamos notar lo siguiente

- (i) se mide la energía con respecto a la energía del estado $|\vec{k}(t)\rangle$ que no depende del tiempo;
- (ii) medimos el tiempo con respecto al momento del cruce, cuando el paquete de ondas llega al límite de la zona;
- (iii) la variación con respecto al tiempo de la energía del estado $|\vec{k}(t) + \vec{G}\rangle$

queda dada por

$$d\epsilon_{\vec{k}+\vec{G}} / dt = \hbar\omega_c \left| \vec{G} \cdot \vec{v}_{\vec{k}} \times \vec{H}/H \right| \quad , \quad (5-5)$$

lejos del límite de la zona, en la aproximación de electrones casi libres. Imponiendo la condición

$$\hbar\omega_c / E \ll 1 \quad , \quad (5-6)$$

que asegura la validez de la Ec.(5-1), supondremos que $d\epsilon_{\vec{k}+\vec{G}} / dt \equiv \epsilon$ es constante.

La ecuación de Schrödinger, dependiente del tiempo, para la función $|\Psi\rangle$ de (5-4) queda

$$i\hbar \begin{vmatrix} \dot{\xi}_1(t) \\ \xi_1(t) \\ \dot{\xi}_2(t) \\ \xi_2(t) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & V_{\vec{k}+\vec{G}} \\ V_{\vec{k}+\vec{G}} & \epsilon t \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \xi_1(t) \\ \xi_1(t) \\ \xi_2(t) \\ \xi_2(t) \end{vmatrix} \quad . \quad (5-7)$$

La condición inicial de nuestro problema es

$$|\xi_1| = 1 \quad , \quad \xi_2 = 0 \quad , \quad \text{para} \quad t \rightarrow -\infty \quad . \quad (5-8)$$

Para tiempos positivos muy grandes ($t \rightarrow +\infty$), la probabilidad T de que haya una transición a la otra banda estará dada por

$$T = \lim_{t \rightarrow \infty} |\xi_1(t)|^2 \quad , \quad (5-9)$$

y por lo tanto, la probabilidad de que la transición no ocurra será

$$S = \lim_{t \rightarrow \infty} |\xi_2(t)|^2 = 1 - T \quad . \quad (5-10)$$

La Ec.(5-7) representa la formulación exacta del problema de dos niveles, cuando éstos se cruzan en forma lineal con el tiempo, y por lo tanto proporciona una descripción aproximada de la ruptura magnética (sujeta a las aproximaciones (5-3) y (5-6)). Las dos ecuaciones acopladas de primer orden para las amplitudes $\xi_1(t)$ y $\xi_2(t)$, dadas por (5-7), pueden reducirse a una ecuación de segundo orden, ya sea para $\xi_1(t)$ ó $\xi_2(t)$. Para $\xi_1(t)$ obtenemos

$$\left\{ \frac{d^2}{dt^2} + i(\epsilon t/\hbar) \frac{d}{dt} + \frac{|V_{\rightarrow}|^2/\hbar^2}{G} \right\} \xi_1(t) = 0 \quad , \quad (5-11)$$

que mediante el cambio de variable

$$z \equiv (\epsilon/\hbar)^{1/2} t \quad , \quad (5-12)$$

se transforma en

$$\left\{ \frac{d^2}{dz^2} + iz \frac{d}{dz} + \frac{|V_{\rightarrow}|^2/\hbar\epsilon}{G} \right\} \xi_1(z) = 0 \quad , \quad (5-13)$$

sujeta a la condición inicial (5-8).

La Ec.(5-13) puede resolverse en forma exacta por medio del método de Laplace en la forma de una integral de contorno ⁶⁹.

La expansión de las soluciones que cumplen las condiciones iniciales para $z \rightarrow +\infty$ da

$$\left| \xi_2(z \rightarrow +\infty) \right|^2 = \frac{2\pi \exp(-\pi\lambda)}{\lambda \Gamma(i\lambda) \Gamma(-i\lambda)} + o(z^{-1}) \rightarrow 1 - \exp(-2\pi\lambda) \quad , \quad (5-14)$$

$z \rightarrow +\infty$

y

$$|\xi_1(z \rightarrow +\infty)|^2 = \exp(-2\pi\lambda) + O(1/z) \quad , \quad (5-14)$$

donde $\Gamma(x)$ es la función Gamma y λ se expresa por

$$\lambda \equiv \frac{|v \rightarrow|^2}{G \hbar c} \quad . \quad (5-15)$$

La probabilidad T de transición a la otra banda queda entonces

$$T = \exp(-2\pi\lambda) \quad . \quad (5-16)$$

En el llamado límite adiabático ($\lambda \rightarrow 0$ ó $H \rightarrow \infty$) la transición ocurre con certeza, es decir el gap de energía es roto totalmente por el campo H (break-down completo).

En el otro límite ($\lambda \rightarrow +\infty$ ó $H \rightarrow 0$) el electrón permanece con certeza en la banda original. Al llegar al límite de la zona de Brillouin experimenta una reflexión de Bragg con probabilidad 1.

Escribiremos ahora en una forma más conveniente la probabilidad T, en términos de parámetros con significado físico más directo.

Sea Δ el gap entre las bandas en el borde de la zona. Evidentemente se tiene

$$\Delta = 2 \frac{|v \rightarrow|}{G} \quad . \quad (5-17)$$

Definamos ahora los siguientes ángulos:

sea θ_1 el ángulo entre la velocidad $v \rightarrow$ y el campo magnético;
 k

θ_2 el ángulo entre el vector \vec{G} y el campo magnético;

y θ_{12} el ángulo entre el plano formado por los vectores (\vec{G}, \vec{H}) y el plano engendrado por los vectores (\vec{v}, \vec{H}) .

Simples consideraciones geométricas dan

$$\epsilon = \frac{\hbar\omega}{c} \frac{Gv}{k} \left| \sin\theta_1 \cdot \sin\theta_2 \cdot \sin\theta_{12} \right| . \quad (5-18)$$

Si la órbita considerada es una órbita sobre la SF, entonces

$$\frac{v}{k} = \frac{v}{F} , \quad G = \frac{2k}{F} , \quad (5-19)$$

para el modelo de electrones casi libres.

Las relaciones (5-17) a (5-19) junto con (5-15) resultan en

$$2\pi\lambda = \frac{\pi mc\Delta^2}{\{2\hbar|e| \epsilon \frac{H}{F} \sin\theta_1 \cdot \sin\theta_2 \cdot \sin\theta_{12} \}} \equiv \frac{H}{H_0} . \quad (5-20)$$

La relación (5-20) define un parámetro H_0 , llamado campo de ruptura, que se expresa por

$$H_0 = K \cdot \frac{mc\Delta^2}{(\hbar|e|\epsilon)} , \quad (5-21)$$

donde K es una constante (número) del orden de la unidad. La relación (5-21) es igual a la relación obtenida por Blount ⁶⁷ para el límite de campo alto y sugerida por primera vez por Cohen y Falicov ⁶³.

Si el gap Δ es tal que

$$K \cdot \frac{mc\Delta^2}{(\epsilon \hbar|e|H)} = K \frac{\Delta^2}{(c F)} \lesssim 1 , \quad (5-22)$$

los electrones tienen una probabilidad finita de efectuar una transición entre las bandas separadas por el gap Δ .

Si el gap tiene como origen la interacción de spin-órbita puede ser relativamente pequeño, del orden de $10^{-2} - 10^{-3}$ eV. Entonces la ruptura magnética puede ser un fenómeno fácilmente accesible para campos magnéticos del orden de $10^2 - 10^4$ G.

5.2 Ruptura Magnética y Propiedades de transporte.

La ruptura magnética puede alterar bastante la topología de la SF y por lo tanto cambiar las propiedades galvanomagnéticas de los metales, causando transiciones entre los distintos comportamientos de la magnetoresistencia transversal vistos en el Cap.2, al producir toda una red de órbitas acopladas.

En estas órbitas el punto de difracción de Bragg (donde aparece el gap) es reemplazado por una juntura magnética con probabilidades S y T asociadas. T es la probabilidad que haya transición a la otra banda y está dada por la fórmula (5-10). S es la probabilidad complementaria de que exista reflexión de Bragg, y obviamente se tiene

$$S + T = 1 \quad . \quad (5-10)$$

Las Fig.19 y 20 muestran algunos casos de órbitas acopladas. La Fig.19 ilustra un ejemplo llamado la cadena lineal que describe bastante bien el caso de

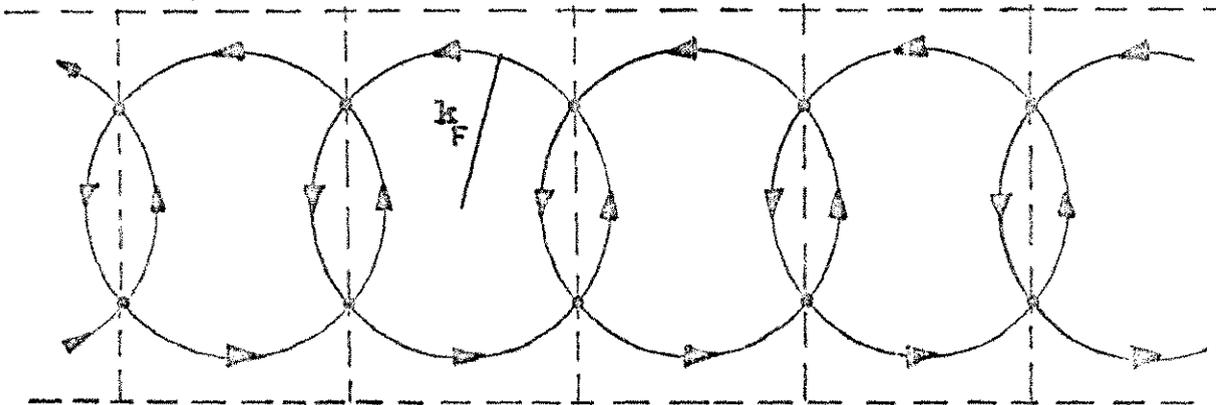


Fig. 19 Orbitas acopladas por ruptura magnética según una cadena lineal en el espacio recíproco. El caso se presenta en el Cd.

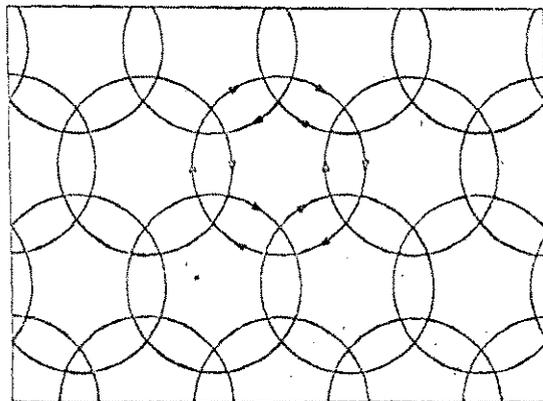


Fig. 20 Orbitas acopladas por ruptura magnética en la forma de una red hexagonal. El caso aparece en el Mg y en el Zn.

cadmio (Cd) cuando el campo magnético apunta según el eje hexagonal. El segundo caso, Fig.20, es posible en magnesio (Mg) y zinc (Zn).

El paquete de ondas de un electrón sigue una trayectoria al azar a través de la red de órbitas acopladas. Cada posible trayectoria está asociada a una cierta probabilidad. La probabilidad que el paquete de ondas vaya desde un determinado punto de la red de órbitas a otro punto de ella, estará dada por la suma de las probabilidades de todas las diferentes trayectorias que unen esos dos puntos.

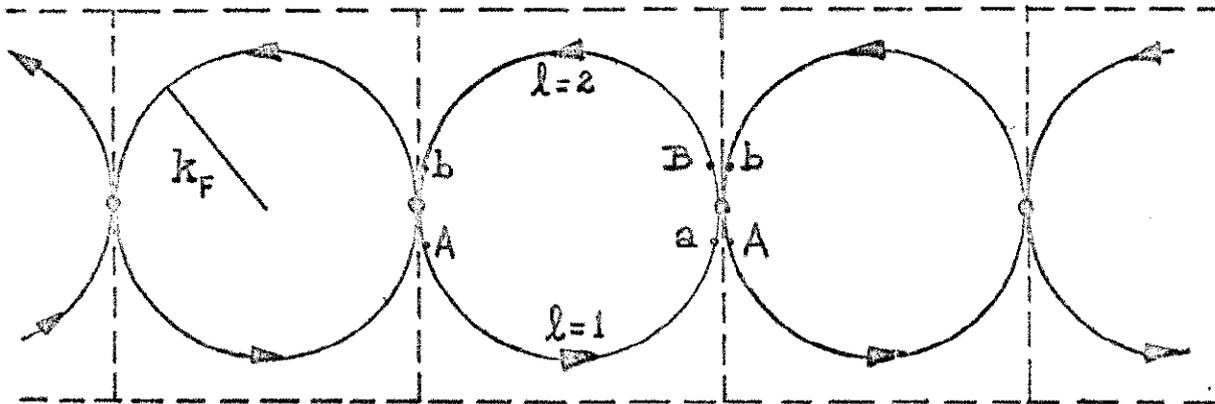
El caso más sencillo para tratar es el de la cadena lineal (como en la Fig.19), pero con una juntura simple. Este es el caso de una SF esférica que justo se extiende hasta los bordes de la zona de Brillouin (ver Fig.21a).

La juntura simple puede pensarse como el caso límite de una juntura doble cuando la distancia entre los centros de las esferas de Fermi se hace igual a su diámetro. Esto está ilustrado en la Fig.21b.

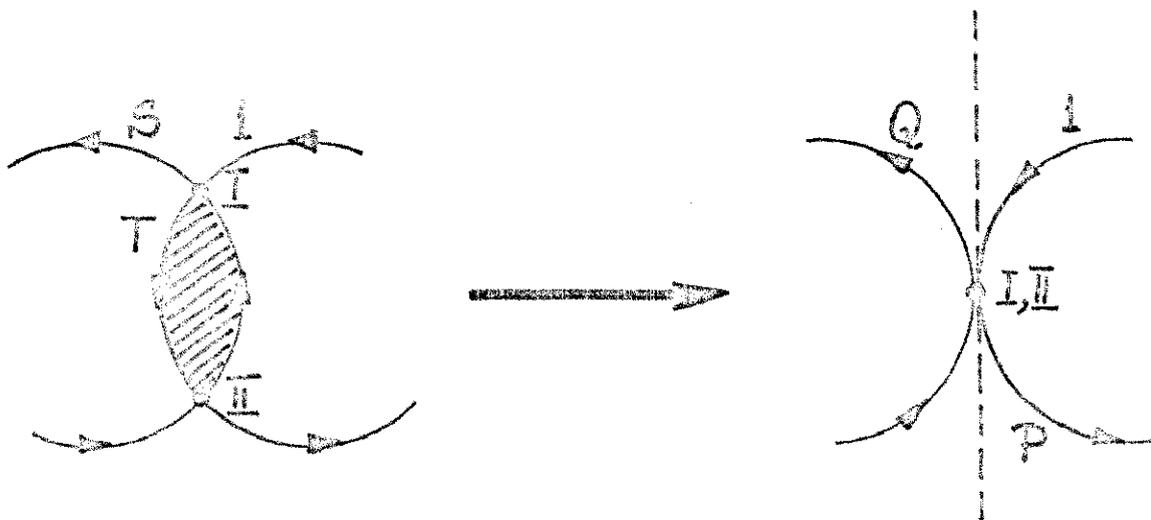
Si P es la probabilidad de continuar en la trayectoria de electrón libre (es decir encontrarse al otro lado de la juntura doble) y Q es la probabilidad complementaria (es decir de reflejarse en la juntura doble) se tendrá, mediante suma de probabilidades, las relaciones

$$P = T^2 + T^2S^2 + T^2S^4 + \dots = T/(1 + S) \quad , \quad (5-23)$$

lo cual puede interpretarse como una suma de "diagramas" para todas las posibles trayectorias que cruzan la juntura doble:

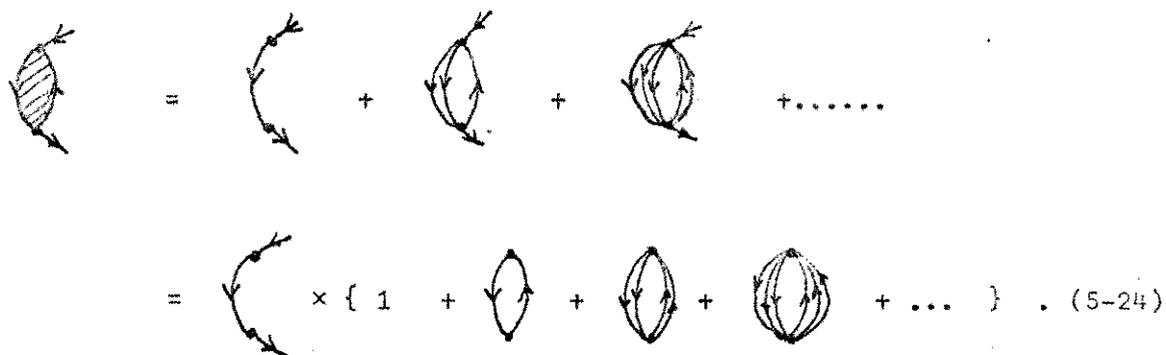


a) Cadena lineal en el caso límite de una junta simple.



b) Paso al límite de la junta doble a la junta simple.

Fig.21 .

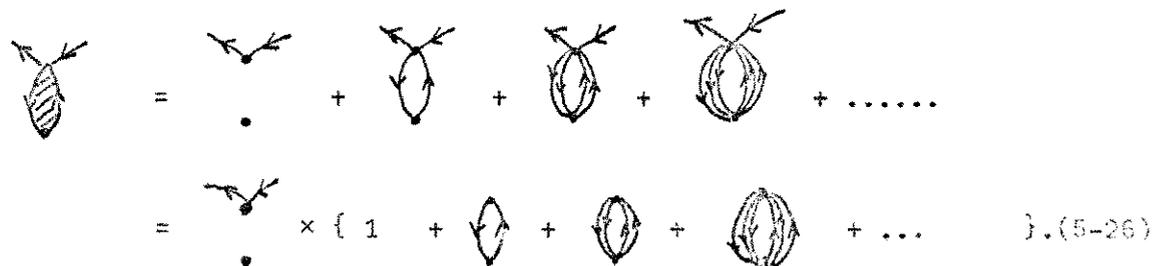


$$= \dots \times \{ 1 + \dots + \dots \} \quad (5-24)$$

Por otro lado para Q se obtiene

$$Q = S + ST^2 + T^2S^3 + T^2S^5 + \dots = 2S/(1 + S) \quad , \quad (5-25)$$

y diagramáticamente



$$= \dots \times \{ 1 + \dots + \dots \} \quad (5-26)$$

Hemos, por cierto, supuesto que ambas junturas - I y II de la Fig.21b - son equivalentes, es decir existe un plano de simetría (reflexión) que pasa por los centros de las esferas y contiene al campo magnético.

La conservación de la probabilidad conduce a

$$P + Q = 1 \quad . \quad (5-27)$$

Queremos calcular ahora la magnetoresistencia producida por una órbita del

tipo ilustrado en la Fig.21a.

Sean a y b puntos que entran a una juntura y están arbitrariamente próximos a ella. Los puntos A y B salen de la juntura y están muy cerca de ella (justo después).

Si

$$g_{\ell}(k) \equiv f_{\ell}(k) - f_{\ell}(k) = \phi_{\ell}(k) \delta(\epsilon - \epsilon_F) \quad (5-28)$$

es la desviación medida desde el equilibrio de la función de distribución en el ℓ -ésimo arco de la SF ($\ell=1,2$), donde θ_k es el ángulo que describe k en el plano de la órbita, para todo punto distinto de la juntura magnética tendremos ⁷⁰

$$\begin{aligned} \phi_{\ell}(k) = & \phi_{\ell}(\theta_{ol}) \cdot \exp\{-(\theta_k - \theta_{ol})/\omega \tau\} + \\ & + \int_{\theta_{ol}}^{\theta_k} d\theta_{k'} \exp(\theta_{k'} - \theta_k)/\omega \tau \cdot \left\{ -|e|/\hbar\omega \cdot (E \cdot k')/k \right\} . \end{aligned} \quad (5-29)$$

Explicamos a continuación el significado de (5-29). Esta relación no es más que la solución formal de la ecuación de Boltzmann cuando no hay ruptura magnética. Es completamente equivalente a las relaciones (2-26) y (2-27) del Cap.2 escritas en términos del camino efectivo Λ_k . Su significado físico es inmediato; relaciona el valor de la función de distribución en el punto θ_k de la órbita con su valor en un punto inicial θ_{ol} cuando no hay ruptura - esto es en un mismo arco de la órbita - . Todas las desviaciones en la órbita se superponen y contribuyen a la

desviación en el punto θ_k ; sus amplitudes decaen con un tiempo de relajación τ a la distribución de equilibrio mientras recorren la órbita bajo la acción del campo magnético.

Así pues, tendremos las relaciones

$$\begin{aligned} \phi_{\ell=1}(\theta_a) = & \phi_{\ell=1}(\theta_A) \cdot \exp(\theta_a - \theta_A)/\omega \tau + \\ & + \int_{\theta_A}^{\theta_a} d\theta \exp(\theta - \theta_c)/\omega \tau \cdot \{-|e|/\hbar\omega (E \cdot k)/k\}, \end{aligned} \quad (5-30)$$

y para el otro arco

$$\begin{aligned} \phi_{\ell=2}(\theta_b) = & \phi_{\ell=2}(\theta_B) \cdot \exp(\theta_b - \theta_B)/\omega \tau + \\ & + \int_{\theta_B}^{\theta_b} d\theta \exp(\theta - \theta_c)/\omega \tau \cdot \{-|e|/\hbar\omega (E \cdot k)/k\}. \end{aligned} \quad (5-31)$$

La ruptura magnética se expresa ahora por las relaciones probabilísticas

$$\phi_1(A) = P \cdot \phi_2(b) + Q \cdot \phi_1(a) \quad (5-32)$$

$$\phi_2(B) = Q \cdot \phi_2(b) + P \cdot \phi_1(a)$$

que tomando en cuenta las relaciones (5-30) y (5-31) para las funciones ϕ_{ℓ} se reduce a un sistema de dos ecuaciones lineales para las incógnitas $\phi_1(A)$ y $\phi_2(B)$.

Conocidos estos valores el problema está totalmente determinado, pues via relación (5-29) puede conocerse la función de distribución en cualquier punto de la órbita.

Transformaremos un poco las relaciones (5-30) y (5-31) para llevar (5-32) a una forma canónica de fácil extensión. Escribamos

$$\begin{aligned} \phi_1(a) &= \phi_1(A) \exp(\theta_A - \theta_a) / \omega \tau_c + \Lambda_1(A, a) \cdot E \\ \phi_2(b) &= \phi_2(B) \exp(\theta_B - \theta_b) / \omega \tau_c + \Lambda_2(B, b) \cdot E \end{aligned} \quad (5-32)$$

donde

$$\Lambda_{\ell}(\theta_i, \theta_f) \equiv \int_{\theta_i}^{\theta_f} d\theta \left\{ -|e| / \hbar \omega_c \cdot (k/k_F) \right\} \cdot \exp(\theta_i - \theta_f) / \omega \tau_c \quad (5-34)$$

Arco ℓ

Como era de esperar, $\Lambda_{\ell}(\theta_i, \theta_f)$ se asemeja bastante al camino efectivo definido en el Cap.2.

El reemplazo de (5-33) en (5-32) da :

$$\begin{aligned} (1 - Q \cdot \exp\{-\Delta s_1 / (\omega \tau_{k1})\}) \phi_1(A) - P \cdot \exp\{-\Delta s_2 / (\omega \tau_{k2})\} \phi_2(B) &= E \cdot \{Q \cdot \Lambda_1 + P \cdot \Lambda_2\}, \\ - P \cdot \exp\{-\Delta s_1 / (\omega \tau_{k1})\} \phi_1(A) + (1 - Q \cdot \exp\{-\Delta s_2 / (\omega \tau_{k2})\}) \phi_2(B) &= E \cdot \{P \cdot \Lambda_1 + Q \cdot \Lambda_2\}, \end{aligned} \quad (5-35)$$

donde Δs_{ℓ} ($\ell=1,2$) es la longitud del ℓ -ésimo arco de círculo. Si todos los arcos

tienen la misma longitud Δs , la relación (5-35) puede escribirse en forma más simplificada y canónica:

$$\left(\underline{1} - \exp\left\{-\frac{\Delta s}{c} \frac{\tau k}{F}\right\} \cdot \underline{M} \right) \Phi = \underline{M} \Phi_0, \quad (5-36)$$

donde Φ y Φ_0 son vectores en un espacio de dimensión igual al número de arcos de círculos en que hemos dividido nuestra SF. En nuestro caso sencillo tendremos

$$\Phi \equiv \begin{vmatrix} \phi_1(A) \\ \phi_2(B) \end{vmatrix}, \quad \Phi_0 \equiv \begin{vmatrix} \vec{E} \cdot \vec{\Lambda}_1(A, a) \\ \vec{E} \cdot \vec{\Lambda}_2(B, b) \end{vmatrix}. \quad (5-37)$$

La matriz \underline{M} es muy importante y se expresa por

$$\underline{M} \equiv \begin{vmatrix} Q & P \\ P & Q \end{vmatrix}. \quad (5-38)$$

Sus elementos m_{ij} dan la probabilidad que haya una transición desde el arco i -ésimo de la SF al arco j -ésimo.

La generalización al caso de N arcos de círculos iguales es inmediata.

Los elementos m_{ij} de \underline{M} tienen valores 0, 1, P ó Q y \underline{M} es una matriz de $N \times N$.

Nuestro caso sencillo queda

$$\left\{ \frac{1 - \exp(-\pi/\omega \tau)}{c} \begin{vmatrix} Q & P \\ P & Q \end{vmatrix} \right\} \begin{vmatrix} \phi_1(A) \\ \phi_2(B) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} Q & P \\ P & Q \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \vec{E} \cdot \vec{\Lambda}_1 \\ \vec{E} \cdot \vec{\Lambda}_2 \end{vmatrix}, \quad (5-39)$$

lo cual proporciona las siguientes soluciones para los valores iniciales $\phi_1(A)$ y $\phi_2(B)$:

$$\phi_1(A) = \left(\frac{\{ (1 - e^{-\gamma}) \cdot Q (Q\vec{\Lambda}_1 + P\vec{\Lambda}_2) + e^{-\gamma} P (P\vec{\Lambda}_1 + Q\vec{\Lambda}_2) \}}{\{ (1 - e^{-\gamma})^2 - e^{-2\gamma} \cdot P^2 \}} \right) \cdot \vec{E} \quad (5-40)$$

$$\phi_2(B) = \left(\frac{\{ (1 - e^{-\gamma}) \cdot Q (P\vec{\Lambda}_1 + Q\vec{\Lambda}_2) + e^{-\gamma} P (Q\vec{\Lambda}_1 + P\vec{\Lambda}_2) \}}{\{ (1 - e^{-\gamma})^2 - e^{-2\gamma} \cdot P^2 \}} \right) \cdot \vec{E} \quad (5-41)$$

con

$$\gamma \equiv \frac{\pi}{\omega \tau} \quad (5-42)$$

y $(\vec{\Lambda}_1, \vec{\Lambda}_2)$ están definidos por (5-34).

Mediante (5-29) podemos calcular la función de distribución $\phi(\theta \rightarrow)$ en ℓ, k cada uno de los arcos.

En seguida puede calcularse el tensor resistividad usando las expresiones (2-28), (2-31) e inversión de matrices.

En la Fig.22 mostramos el resultado obtenido para este modelo. La magneto-resistencia transversal del gráfico corresponde a la dirección paralela a la órbita abierta en el espacio recíproco. Cada curva corresponde a un valor diferente (mostrado en la figura) del campo de ruptura.

Falicov y Sievert ³⁹ han hecho un estudio teórico extensivo de las propie-

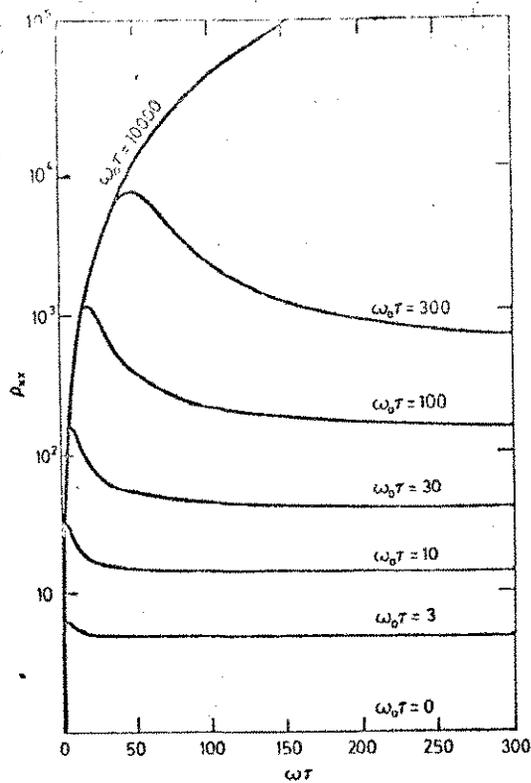


Fig. 22 Magnetoresistencia de la cadena lineal en la direcci3n de abertura de la 3rbita en el espacio rec3proco.

dades galvanomagnéticas incluyendo ruptura. Las Fig.23 y 24 están tomadas de ese artículo ³⁹.

La Fig.23 se refiere a la magnetoresistencia transversal cuando hay una transición desde una órbita cerrada compensada a dos órbitas abiertas que se interseccionan. La magnetoresistencia mostrada corresponde a la dirección perpendicular a la órbita abierta en el espacio recíproco. Al principio puede notarse el crecimiento cuadrático típico de una órbita compensada, después el comportamiento colapsa hacia la saturación.

La Fig.24 se refiere a una red hexagonal e ilustra muy bien los casos encontrados experimentalmente para Mg y Zn, cuando no se consideran las oscilaciones causadas por efectos de coherencia de la fase de la función de onda. La ruptura produce una transición desde una órbita cerrada compensada a) a una órbita cerrada b) de tipo electrón. En c) se muestra la magnetoresistencia para diversos campos de ruptura. La Fig.24d ilustra la magnetoresistencia transversal encontrada experimentalmente para el Mg cuando el campo magnético es paralelo al eje hexagonal. Puede apreciarse las oscilaciones debidas a efectos de coherencia de la fase ⁶⁰.

Algunas de las conclusiones generales de Falicov y Sievert ³⁹ son las siguientes:

i) Cuando hay transición de un comportamiento cuadrático a saturación, el valor de saturación en general es mucho mayor que el valor de la resistividad para campo nulo.

El detalle del cálculo muestra

$$\rho_{\text{sat}} \propto (1/\tau + C\omega) \quad , \quad (5-43)$$

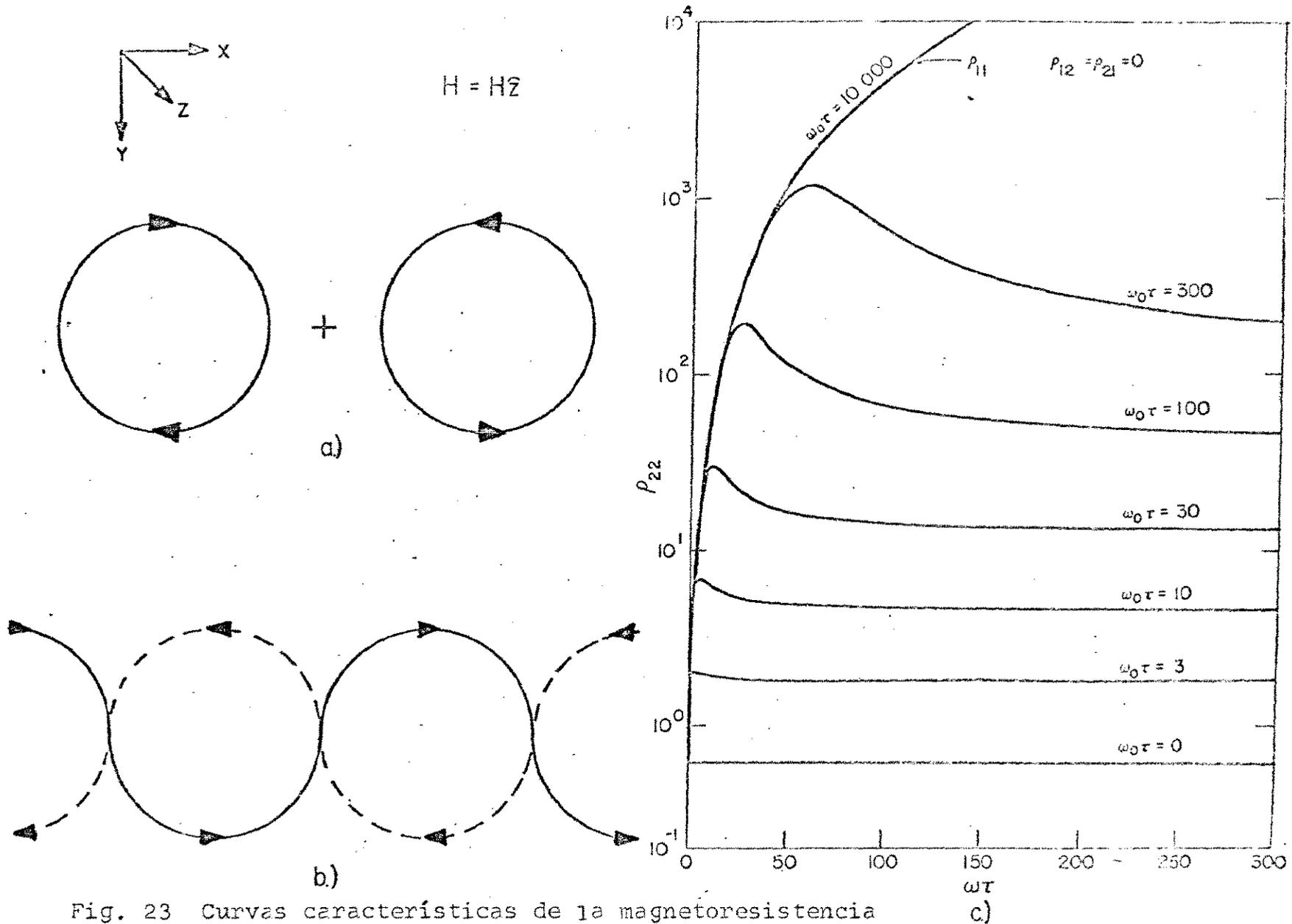


Fig. 23 Curvas características de la magnetoresistencia cuando hay ruptura magnética. La transición se efectúa desde dos órbitas compensadas a) a dos órbitas abiertas que se intersectan b). La magnetoresistencia se mide en la dirección perpendicular a las órbitas abiertas.

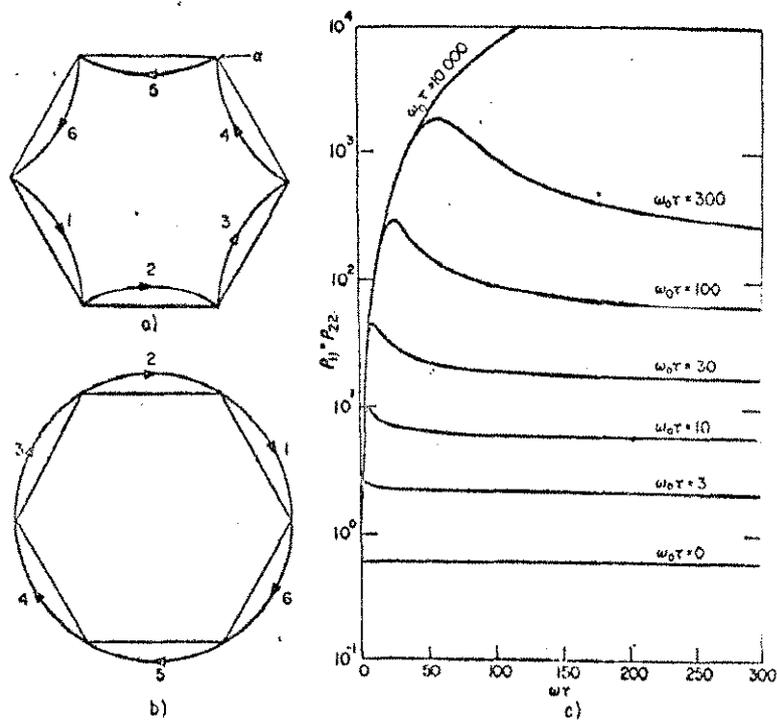
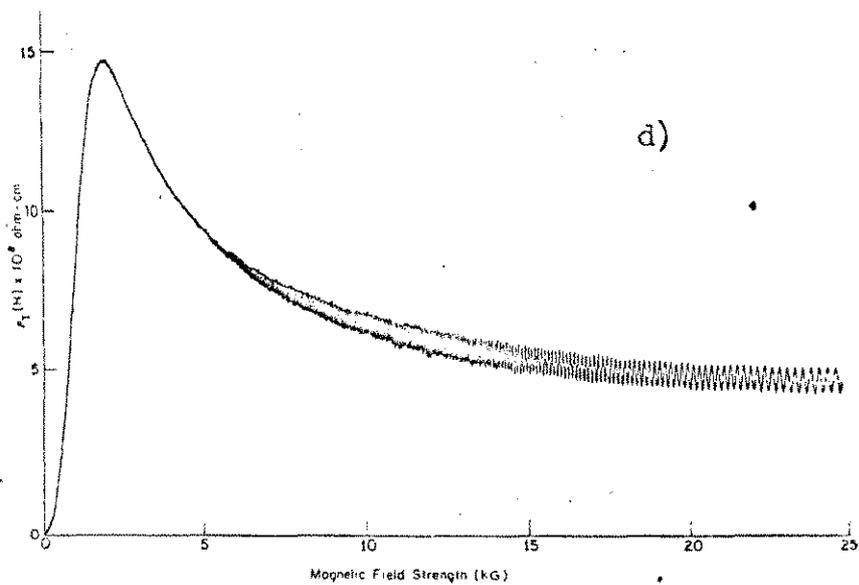


Fig. 24 Magnetoresistencia transversal para el caso cuando hay una transición desde órbitas compensadas a órbitas cercadas. a) Se muestra la órbita tipo hueco para $H \rightarrow 0$; b) la órbita tipo electrón para $H \rightarrow \infty$; c) la magnetoresistencia transversal.



d) Magnetoresistencia transversal del Mg cuando la densidad de dislocaciones es alta. Las oscilaciones se deben a efectos de coherencia de la fase en las órbitas acopladas.

donde τ es el tiempo de relajación, $\omega = |e|H/mc$ es la frecuencia de ciclotrón correspondiente al campo de ruptura y C es una constante del orden de la unidad.

Este resultado puede interpretarse en términos de un tiempo efectivo de relajación τ_{ef} para campos grandes dado por

$$1/\tau_{ef} \equiv 1/\tau + C\omega, \quad (5-44)$$

y causado por la ruptura magnética.

ii) La posición de los máximos ω_m satisface una relación del tipo

$$\omega_m \approx A\omega_m + B\omega_m^2\tau, \quad (5-45)$$

donde A y B son constantes numéricas positivas. A medida que τ aumenta ω_m toma valores menores. Resulta entonces una dependencia del aspecto de las curvas con τ , es decir con la pureza de las muestras. Este comportamiento ha sido observado experimentalmente para Mg^{71} y Zn^{72} .

Como puede verse de (5-45), ω_m no es una buena indicación del campo de ruptura ω .

También la ruptura magnética puede producir transiciones más sutiles en el comportamiento de la magnetoresistencia.

Cabrera y Falicov³⁴ han considerado el caso cuando la ruptura se produce entre dos regímenes orbitales, ambos de magnetoresistencia cuadrática con B pero con diferentes coeficientes.

Siguiendo las técnicas y procedimientos de Falicov y Sievert³⁹, descritas

en esta misma sección, Cabrera y Falicov hicieron una serie de cálculos para dos modelos diferentes que describiremos ahora:

i) un modelo en el cual dos órbitas compensadas, una de tipo electrón y la otra de tipo hueco, colapsan por ruptura a una órbita compensada que se autointersecta en la forma de un número ocho;

ii) un modelo no compensado en el cual dos órbitas abiertas y una órbita cerrada de tipo electrón colapsan por ruptura magnética a una órbita abierta ordinaria y a una órbita abierta que se autointersecta en forma de rizo.

Los resultados se muestran en la Fig.25. Fueron hechos cálculos para tres valores del parámetro $\omega \tau$, el producto de la frecuencia de ruptura por el tiempo de relajación.

Los gráficos están hechos en escala logarítmica doble; la abscisa corresponde al logaritmo del parámetro adimensional $\omega \tau$, donde ω es la frecuencia de ciclotrón, y la ordenada corresponde a la cantidad adimensional ρ/ρ_0 , donde ρ es la magnetoresistencia transversal pertinente (en el caso de la órbita abierta corresponde a la componente paralela a la dirección de abertura de la órbita en el espacio recíproco) y ρ_0 es el valor de la resistividad para campo nulo.

Puede verse que en todos los casos hay una transición desde un comportamiento cuadrático a otro comportamiento cuadrático, pasando por una región de pendiente menor, a veces negativa. El cambio de la pendiente es más marcado para valores mayores de $\omega \tau$. Las curvas para $\omega \tau$ pequeño se parecen mucho a las curvas encontradas experimentalmente para el Fe^{30,33,35}, descritas al final de la Sec.3.1 (ver Fig.13,14 y 15), para campos magnéticos muy altos (hasta 215 kOe).

En las curvas de la Fig.25 para $\omega \tau = 10^2$, la desviación del comportamiento

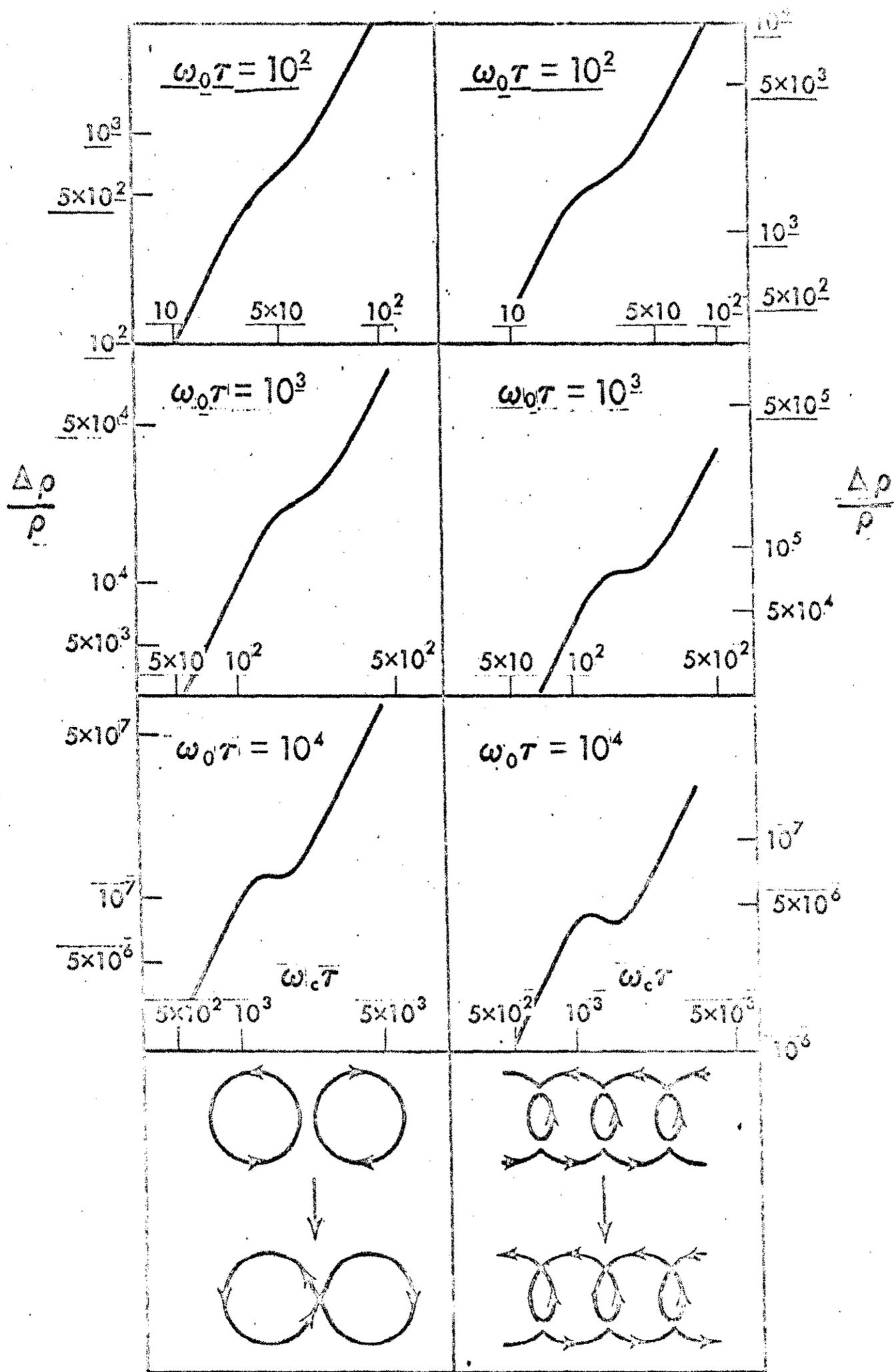


Fig. 25

cuadrático comienza aproximadamente en $\omega \tau \approx 20$ y el retorno al otro comportamiento cuadrático recién se completa para $\omega \tau \approx 60$.

Coleman et al ³⁰ estiman que en sus muestras $\omega \tau \approx 48$ para 100 kG. Si consideramos los resultados anteriores en forma literal, y si la teoría es correcta, la vuelta al comportamiento cuadrático recién tendrá lugar aproximadamente en 300 kG para las curvas encontradas experimentalmente ^{30,33,35} (ver Fig.12, 13 y 14).

Como vimos en el Cap.3 de esta tesis, la SF del Fe ferromagnético, que incluye el acoplamiento de spin-órbita, es lo suficientemente complicada - Fig.9,10 y 11 - como para permitir muchas órbitas del carácter mencionado antes.

Si la explicación dada es correcta, la teoría predice entonces que el cambio en la pendiente será más notorio y podrá alcanzar valores negativos cuando aumente la pureza de las muestras y por lo tanto aumente el valor de $\omega \tau$.

Un cambio de un orden de magnitud de $\omega \tau$ debería dar un efecto muy fuerte y un cambio visible en la curva de la magnetoresistencia transversal. Este efecto parece haberse observado positivamente en el Fe ³³.

El resultado definitivo queda abierto hacia el futuro, cuando se cuente con campos magnéticos más altos y con muestras de Fe de mayor pureza.

Finalmente nos referiremos brevemente a las oscilaciones de la magnetoresistencia que aparecen en la Fig.24d. Este tipo de oscilaciones, observadas experimentalmente en Mg ⁷¹ y Zn ⁷², ocurre en presencia de ruptura magnética y tiene un origen distinto al de los efectos de de Haas-van Alphen y de Shubnikov-de Haas, es decir no se debe a oscilaciones de la densidad de estados causada por la cuantización de las órbitas electrónicas.

Como sabemos, según lo visto en esta misma sección, cuando se toma en cuenta la ruptura magnética aparece una red de órbitas acopladas y una cierta cantidad de caminos diferentes que puede seguir el electrón al moverse desde un punto de la red hasta otro. En un tratamiento cuántico uno espera entonces que aparezcan efectos de interferencia siempre que no se destruya la coherencia de la función de onda del electrón a lo largo de los diferentes caminos.

Esta coherencia es una función de la densidad de dislocaciones presentes en el cristal ⁷³. Si esta densidad es alta se destruye la información de las fases y no se observa coherencia. Si el número de dislocaciones disminuye empiezan a aparecer oscilaciones en la magnetoresistencia. Las dislocaciones actúan entonces como centros de scattering, de manera análoga a las impurezas en los metales y al caso de las aleaciones.

El caso de Mg y Zn ha sido tratado exitosamente por Falicov, Pippard y Sievert ⁷⁴ y posteriormente Falicov y Gonçalves da Silva ⁷⁵ han presentado una teoría más general.

§ 6 PROPIEDADES DE TRANSPORTE EN LOS METALES FERROMAGNETICOS EN PRESENCIA DE RUPTURA MAGNETICA Y DE UN MECANISMO DE SCATTERING DEPENDIENTE DEL SPIN

6.1 Introducción.

La estructura de bandas y la SF del Fe han sido determinadas casi unívocamente mediante una estrecha colaboración entre la teoría (cálculos de bandas y propiedades de simetría) y los experimentos (efecto de de Haas-van Alphen, magnetoresistencia). Como vimos en el Cap.3, salvo pequeñas discrepancias, el acuerdo es bastante bueno. El resultado final es bastante parecido al modelo clásico de Stoner ¹¹, con una separación no rígida de energía debida al intercambio ¹⁴, y con hojas de la SF correspondiente a electrones 3d.

Si se toma en cuenta el acoplamiento de spin-órbita ²⁵, las bandas de spin mayoría y minoría se hibridizan y se remueve gran parte de las degeneraciones accidentales a causa de la reducción de simetría ²⁴. Esto produce un cambio grande en la topología de la SF, con la aparición de órbitas con spin hibridizado y de muchos gaps capaces de sufrir ruptura magnética bajo la aplicación de un campo magnético externo.

Esta estructura de bandas, que resulta del efecto combinado de la interacción de intercambio y del acoplamiento de spin-órbita, es muy sensible a la orientación de la magnetización, particularmente en algunos puntos de mayor simetría ²⁴.

El efecto que queremos estudiar en este capítulo es la influencia de la

separación de energía debida al intercambio sobre las propiedades de transporte, mediante nuevos mecanismos de relajación ³⁶.

La naturaleza de la mayoría de las colisiones elásticas es tal que un electrón conserva su spin; ésto significa que un electrón en la SF de un spin dado sólo puede sufrir una transición a otro punto de la SF del mismo spin mediante una de estas colisiones. Es decir, sólo una parte del espacio de fase - aquella que corresponde al mismo spin - está disponible para uno de estos eventos de scattering. Este mecanismo que conserva el spin está caracterizado por un tiempo de relajación τ "relativamente" corto. El estado de cuasi-equilibrio resultante es un estado con una distribución uniforme en la SF de cada spin, pero sin equilibrio entre los diferentes spines.

Sin embargo, la interacción de spin-órbita, aunque débil, está presente y da lugar a colisiones con cambio de spin. Este scattering dependiente del spin está caracterizado por un segundo tiempo de relajación τ_s , relativamente largo. Estas colisiones dependientes del spin son las responsables del equilibrio final alcanzado por los electrones de spin mayoría y minoría.

En ausencia de fuerzas externas, una perturbación creada en la distribución de equilibrio decaerá primero a una distribución uniforme en cada spin en un tiempo τ (ya que el scattering ordinario no puede cambiar el spin), y después alcanzará la distribución de equilibrio en un tiempo τ_s . El mecanismo de relajación se muestra gráficamente en la Fig.26 para un modelo sencillo de SF.

En la sección siguiente se analiza en detalle las nuevas ecuaciones de evolución. Estas son formuladas de manera autoconsistente, de modo que haya conservación de partículas en cada instante de tiempo. El planteamiento es completamente

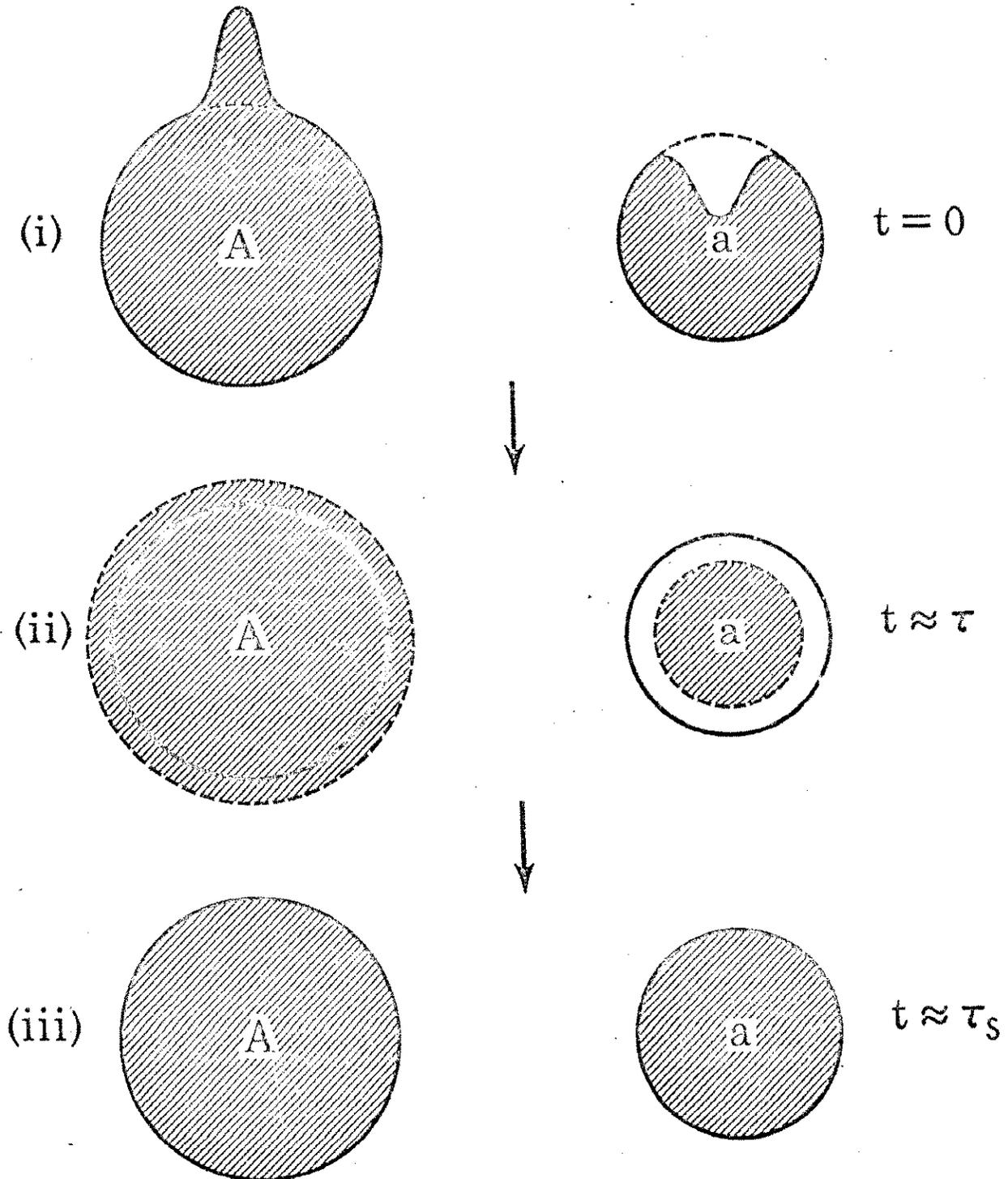


Fig.26

general y puede aplicarse a cualquier problema parecido donde dos mecanismos diferentes de scattering se combinan de tal manera, que la perturbación decae a la situación de equilibrio pasando a través de un estado intermedio de cuasi-equilibrio ($\tau / \tau_s \gg 1$).

El próximo paso es la inclusión de las fuerzas externas y la solución de la ecuación generalizada de Boltzmann. La ruptura magnética debe tomarse en cuenta, obteniendo una gran cantidad de órbitas electrónicas acopladas, con cambio de spin y sin cambio de spin, de topologías muy diferentes, como las mostradas en las Fig. 9, 10 y 11. La región de spin hibridizado puede reemplazarse, en muy buena aproximación, por una juntura magnética (ya que la interacción de spin-órbita proporciona pequeños gaps). Cada juntura está caracterizada por la probabilidad que un electrón continúe en la misma banda, cambiando su spin, y por la probabilidad complementaria que el electrón sufra una transición a la otra banda, conservando su spin.

El método del cálculo de los tensores galvanomagnéticos, de aquí en adelante, es el descrito en los Cap. 2 y 5. La solución de la ecuación de Boltzmann, incluyendo el efecto combinado de la ruptura magnética y de la interacción de spin-órbita, es analizada en la Sec. 6.3.

Por último, en la Sec. 6.4 se presenta las diversas curvas de la magnetoresistencia obtenidas para varios modelos de topologías de superficies de Fermi, para diferentes valores de τ / τ_s .

6.2 Los Términos de Scattering y las Ecuaciones de evolución.

Para formular la teoría de manera general, llamemos $g_A(\vec{k})\delta\{\epsilon_A(\vec{k})-\epsilon_F\}$ y $g_a(\vec{k})\delta\{\epsilon_a(\vec{k})-\epsilon_F\}$ las desviaciones de la función de distribución medidas desde el equilibrio. Estas desviaciones están localizadas en la SF en el espacio recíproco, y los índices \underline{A} y \underline{a} denominan dos conjuntos diferentes de estados (en nuestro caso spin de mayoría y minoría respectivamente).

Estos estados \underline{A} y \underline{a} están fuertemente acoplados por separado en cada una de sus propias hojas de la SF, pero están muy débilmente acoplados entre sí mediante un mecanismo extra de scattering caracterizado por un tiempo de relajación τ ; en nuestro caso τ es el tiempo típico del scattering que cambia el spin.

La conservación del número de partículas requiere que

$$\int g_A(\vec{k})\delta\{\epsilon_A(\vec{k})-\epsilon_F\}d^3k + \int g_a(\vec{k})\delta\{\epsilon_a(\vec{k})-\epsilon_F\}d^3k = 0 \quad , \quad (6-1)$$

en forma independiente del tiempo. Definamos ahora distribuciones uniformes sobre las superficies de Fermi \underline{L} ($\underline{L} = \underline{A}$ ó \underline{a}) descritas por los parámetros n_L y Δ_L , de modo que

$$n_L \equiv \Delta_L \int \delta\{\epsilon_L(\vec{k})-\epsilon_F\}d^3k \equiv \int g_L(\vec{k})\delta\{\epsilon_L(\vec{k})-\epsilon_F\}d^3k \quad . \quad (6-2)$$

En ausencia de fuerzas externas, la evolución de esta distribución uniforme es descrita por

$$\frac{dn_L}{dt} = - \frac{n_L}{\tau} \quad . \quad (6-3)$$

Las ecuaciones (6-1) a (6-3) dan

$$n_A + n_a = d/dt (n_A + n_a) = 0 \quad (6-4)$$

El mecanismo descrito en la Sec.6.1 e ilustrado en la Fig.26, da para $g_L(k)$ la siguiente ecuación de evolución

$$\partial/\partial t g_L(k) = - \{ g_L(k) - \Delta_L \} / \tau + F_L(k) \quad (6-5)$$

donde el primer término del lado derecho describe una relajación "rápida" de $g_L(k)$ a una distribución uniforme Δ_L , y $F_L(k)$ debe determinarse en forma autoconsistente. La integración de (6-5) y el uso de (6-2) y (6-3) da

$$\begin{aligned} \partial/\partial t \int_L g_L(k) \delta\{\epsilon_L(k) - \epsilon_F\} d^3k &= dn_L/dt = -n_L/\tau \\ &= \int_L F_L(k) \delta\{\epsilon_L(k) - \epsilon_F\} d^3k \quad (6-6) \end{aligned}$$

Si se supone que $F_L(k)$ es uniforme sobre la SF, la Ec.(6-2) da

$$F_L = -(\Delta_L / \tau) \quad (6-7)$$

y entonces la relación (6-5) puede escribirse

$$\partial/\partial t g_L(k) = -g_L(k)/\tau + \Delta_L / \tau_{ef} \quad (6-8)$$

donde τ_{ef} es un tiempo de relajación efectivo definido por

$$(\tau_{ef})^{-1} = (\tau)^{-1} - (\tau_s)^{-1} \quad (6-9)$$

Vemos que el caso normal, es decir cuando no hay diferencia entre los conjuntos de estados \underline{A} y \underline{a} (no se distinguen los spines), corresponde al límite $\tau_s \rightarrow \tau$. Para este límite $\tau_{ef} \rightarrow \infty$ y solamente permanece el primer término al lado derecho de (6-8).

La ecuación (6-2)-(6-8), una ecuación integrodiferencial, puede resolverse fácilmente ahora, y da

$$g_L^{\rightarrow}(k,t) = \Delta_{LO} e^{-(t/\tau)} + C_L^{\rightarrow}(k) e^{-(t/\tau)} \quad (6-10)$$

donde las constantes Δ_{LO} satisfacen

$$\Delta_{AO} \int_A^{\rightarrow} \delta\{\epsilon(k) - \epsilon_F\} d^3k = -\Delta_{aO} \int_a^{\rightarrow} \delta\{\epsilon(k) - \epsilon_F\} d^3k \quad (6-11)$$

y las funciones $C_L^{\rightarrow}(k)$ son tales que

$$\int_L^{\rightarrow} C_L^{\rightarrow}(k) \delta\{\epsilon(k) - \epsilon_F\} d^3k = 0 \quad (6-12)$$

La solución (6-10) tiene las propiedades requeridas:

en $t=0$

$$g_L^{\rightarrow}(k,0) = \Delta_{LO} + C_L^{\rightarrow}(k) \quad ; \quad (6-13)$$

decae, para $(\tau/\tau_s) \ll 1$, a Δ_{LO} en un tiempo τ relativamente corto, y finalmente alcanza el equilibrio en un tiempo mucho más largo τ_s .

El nuevo término en la Ec.(6-8) debe ahora ser incluido en el término de colisión de la ecuación de Boltzmann. Este es el tema de la Sec.6.3.

6.3 La Ecuación de Boltzmann y la Ruptura Magnética.

Como los spines están hibridizados por el acoplamiento de spin-órbita, la función de distribución $\underline{f}(\vec{k})$ puede escribirse como una matriz de 2×2 en el espacio de spin. En términos de $\underline{f}(\vec{k})$, la densidad de corriente de partículas puede expresarse como:

$$\vec{J} = -|e| \sum_{\alpha \nu \vec{k}} \underline{f}_{\alpha\alpha}(\nu \vec{k}) \vec{v}_{\alpha \nu \vec{k}}, \quad (6-14)$$

y la densidad como

$$n = n_A + n_a = \text{Tr} \sum_{\nu \vec{k}} \underline{f}(\nu \vec{k}), \quad (6-15)$$

donde Tr significa traza en el espacio de spin, α es un índice de spin, ν es un índice de banda y $\vec{v}_{\alpha \nu \vec{k}}$ es la velocidad de grupo dada por

$$\vec{v}_{\alpha \nu \vec{k}} = (1/\hbar) \nabla_{\vec{k}} \epsilon_{\alpha \nu}(\vec{k}) \quad (6-16)$$

para la banda v de spin α y vector de onda k , y n_A y n_a son las densidades de partículas de spin mayoría y minoría respectivamente, dadas por los términos diagonales

$$n_A = \sum_{\vec{vk}} f_{11}(\vec{vk}), \quad n_a = \sum_{\vec{vk}} f_{22}(\vec{vk}). \quad (6-17)$$

Para mayor claridad, omitiremos de ahora en adelante el índice de banda v . La ecuación de transporte tiene la forma general

$$\frac{\partial}{\partial t} f_{\alpha\beta}(\vec{k}) + F_{\alpha\beta, \lambda\mu} \cdot \vec{V}_{k \lambda\mu} f_{\alpha\beta}(\vec{k}) = -(\frac{\partial}{\partial t} f_{\alpha\beta}(\vec{k}))_{\text{scatt}}, \quad (6-18)$$

donde $F_{\alpha\beta, \lambda\mu}$ es una fuerza externa generalizada que puede mezclar los estados de spin. En (6-18) se ha usado la convención de suma.

Como el acoplamiento de spin-órbita es una interacción débil (produce gaps del orden de $.1 \text{ eV}$)²⁵, podemos reemplazar la región hibridizada de la órbita electrónica en el espacio recíproco por una juntura de ruptura magnética. En este caso, en todos los puntos salvo en las juntas, sólo los elementos diagonales de $\underline{f}(\vec{k})$ son diferentes de cero, y la Ec.(6-18) se reduce a ecuaciones desacopladas para $f_{11}(\vec{k})$ y $f_{22}(\vec{k})$ a lo largo de los segmentos de órbitas donde los electrones no sufren ruptura magnética. Las juntas, por supuesto mezclan ambas funciones de distribución. Llamamos $f_A(\vec{k})$ y $f_a(\vec{k})$ a los elementos diagonales de $\underline{f}(\vec{k})$ de ahora en adelante.

Si $g_L(\vec{k}) \delta\{\epsilon_L(\vec{k}) - \epsilon_F\}$, como en la Sec.6.2, es la desviación medida desde el equilibrio,

$$g_L(\vec{k}) \delta\{\epsilon_L(\vec{k}) - \epsilon_F\} = f_L(\vec{k}) - f_o(\vec{k}), \quad (6-19)$$

para superficies de Fermi esféricas tenemos

$$g_L(\vec{k}) = g_L(\theta, \phi), \quad (6-20)$$

donde θ y ϕ son los ángulos polares de la esfera. Las distribuciones uniformes Δ_L definidas por (6-2) quedan ahora

$$\Delta_L = 1/4\pi \int_S g_L(\theta, \phi) \sin\theta \, d\theta \, d\phi. \quad (6-21)$$

Cuando aplicamos un campo magnético externo podemos describir el espacio recíproco por el siguiente conjunto de variables ⁷⁰ :

- i) energía ϵ , que sobre la SF permanece constante e igual a la energía de Fermi ϵ_F ;
- ii) componente k_H de \vec{k} a lo largo de la dirección del campo magnético, también constante; y
- iii) ángulo ϕ , que describe la órbita en el plano perpendicular al campo magnético.

Cuando no hay ruptura magnética presente, la ecuación para $g_L(\vec{k})$ en el

estado estacionario está dada por ⁷⁰

$$-|e|/\hbar \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f_{\vec{k}}^{(o)} = \delta\{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_F\} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial t} g_{\vec{k}} \right)_{L \text{ scatt}} - \omega_c \frac{\partial}{\partial \phi} g_{\vec{k}} \right\}, \quad (6-22)$$

donde ω_c es la frecuencia de ciclotrón. La Ec.(6-22) está linealizada en el campo eléctrico (ley de Ohm), pero considera los efectos del campo magnético (curvatura) en todo orden.

Si reemplazamos (6-8) en el término de scattering de la Ec.(6-22), y usamos (6-20) y (6-21) así como la relación

$$\left(\nabla_{\vec{k}} f_{\vec{k}}^{(o)} \right)_L = \frac{\partial}{\partial \epsilon} f_{\vec{k}}^{(o)} \nabla_{\vec{k}} \epsilon = - \delta\{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_F\} \nabla_{\vec{k}} \epsilon \quad (6-23)$$

obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial \phi} g_{\vec{k}}(\phi) + \frac{1}{\omega_c \tau} g_{\vec{k}}(\phi) = -|e|/\hbar \omega_c \left\{ \frac{(\vec{E} \cdot \vec{k})}{k} \right\}_{FL} + \frac{\Delta}{\omega_c \tau} \quad (6-24)$$

a lo largo de la órbita.

La integración inmediata de (6-24) da ⁷⁰

$$g_{\vec{k}}(\phi) = g_{\vec{k}}(\phi_0) \exp\{-(\phi - \phi_0)/\omega_c \tau\} + \int_{\phi_0}^{\phi} d\phi' \exp\{(\phi' - \phi)/\omega_c \tau\} \cdot \left\{ -|e|/\hbar \omega_c \frac{(\vec{E} \cdot \vec{k}')}{k'} + \frac{\Delta}{\omega_c \tau} \right\}, \quad (6-25)$$

que relaciona la función g_L en el punto ϕ de la órbita con su valor en el punto ϕ_0 , cuando no hay ruptura magnética. La Ec.(6-25) puede interpretarse como un principio de Huyghens generalizado :

la desviación g_L en un punto dado ϕ puede obtenerse como la suma de las desviaciones en otros puntos de la órbita; las amplitudes decaen con un tiempo de relajación τ a una distribución uniforme que conserva el spin. Esta distribución decae con un tiempo τ a la distribución de equilibrio; al mismo tiempo las desviaciones son impulsadas a lo largo de las órbitas por el campo magnético.

Para permitir efectos de ruptura magnética, suponemos que en ciertos puntos de las órbitas pueden ocurrir transiciones entre bandas con una probabilidad dada por

$$T = 1 - S = \exp(-H_0/H) \quad , \quad (6-26)$$

donde H_0 es el campo de ruptura, dado por la relación (5-21) del Cap.5.

El cálculo de los tensores galvanomagnéticos sigue el mismo tratamiento de Falicov y Sievert³⁹, descrito en el Cap. 5 de esta tesis. Si las junturas de ruptura magnética dividen las órbitas acopladas en n segmentos no equivalentes, el problema se reduce a un conjunto de n ecuaciones lineales para los valores iniciales $g_L^{(n)}(\phi_0)$ en las junturas (ver Sec.5.2). Una vez que se conocen estos valores, los parámetros Δ_L se determinan en forma autoconsistente, mediante las relaciones (6-2) y (6-4), para conservar partículas en cualquier instante.

6.4 Ejemplos, Modelos y Soluciones.

Los distintos modelos calculados se muestran en la Fig.27 junto con las órbitas para los casos sin ruptura magnética o ruptura completa. Los modelos incluyen órbitas de tipo electrón (a),(b) y (c), órbitas abiertas como (d) y (h), superposición de órbitas cerradas de tipo electrón y de tipo hueco como (e), y órbitas que se autointersectan como (f) y (g).

Las cantidades T y T' son las probabilidades que un electrón no cambie su spin en las junturas y coinciden con las probabilidades (6-26),

$$T = \exp(-\omega_0/\omega_c) \quad , \quad T' = \exp(-\omega_0'/\omega_c) \quad , \quad (6-27)$$

donde ω_0 y ω_0' son las frecuencias de ciclotrón correspondientes a los campos de ruptura. Como es de esperar, cuando $\omega \rightarrow \infty$, los procesos con cambio de spin causados por los efectos de spin-órbita tienen probabilidades muy pequeñas, que se anulan en el límite ($T, T' \rightarrow 1$ cuando $\omega \rightarrow \infty$).

Todos los modelos son bidimensionales (no se incluye dependencia de k_z) y deben entenderse como provenientes de pequeñas secciones cilíndricas de la SF.

Mirando las Fig.12,13 y 14, vemos que el número de órbitas diferentes es muy grande, debido a lo intrincado de la SF; sin embargo las topologías de los modelos calculados aquí son perfectamente posibles en un caso real. Cuando aparece la ruptura magnética, obtenemos transiciones entre las distintas órbitas de la Fig.27, y aparecen muchas posibilidades. Se muestra los resultados solamente para algunos casos, donde el efecto del nuevo mecanismo de relajación es más evidente.

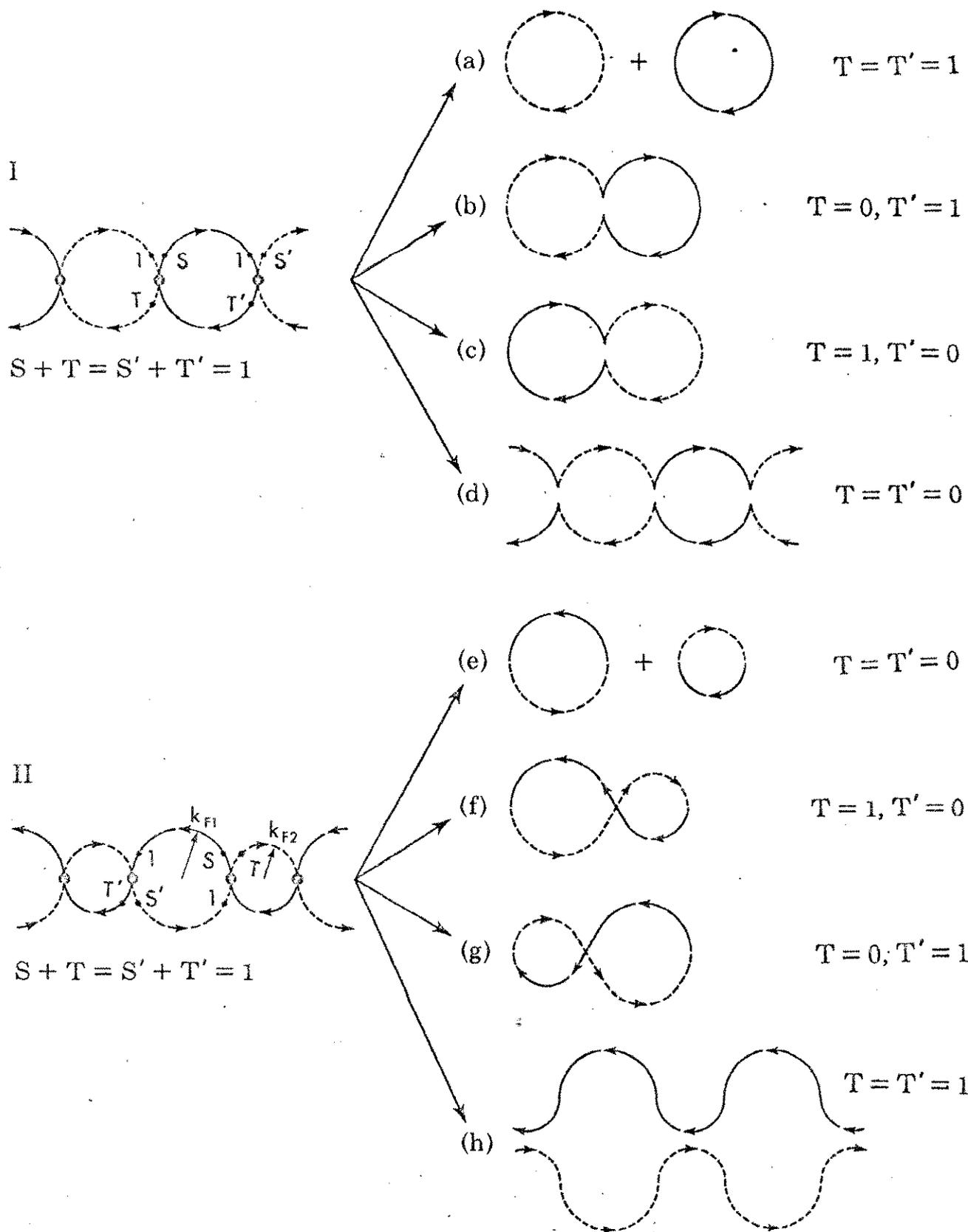


Fig.27

Las consideraciones de simetría también son importantes. Si $T = T'$ en el primer modelo (I) de la Fig.27, tendremos un resultado neto

$$\Delta_L (T=T') \equiv 0 \quad , \quad (6-28)$$

para el parámetro Δ_L definido en la Sec.6.2 . Esta simetría extra implica que cualquiera desviación que aparezca en una juntura es cancelada completamente por los efectos de la otra, y el resultado neto es nulo.

Por otro lado, el modelo mostrado en la parte II de la Fig.27 es altamente anisotrópico aún para el caso compensado. La anisotropía se manifiesta especialmente para campo magnético nulo, donde el modelo da, en el límite $\tau \rightarrow \infty$, una componente nula del tensor resistividad según la dirección perpendicular a la órbita abierta en el espacio recíproco, mientras que para la otra dirección da la resistividad normal para campo magnético nulo. Este resultado proviene de un modelo que no tiene simetría de inversión ni de reflexión con respecto a algún plano. Mientras que los electrones con spin mayoría tienen la velocidad del centro de masa apuntando hacia arriba, los electrones con spin de minoría tienen la velocidad de su centro de masa apuntando hacia abajo. En ausencia de scattering con cambio de spin, las desviaciones de distinto spin no pueden relajarse a la situación de equilibrio. En la mayor parte de los casos encontrados en la naturaleza, aunque por cierto anisotrópicos, cada hoja de la SF de cada spin tiene velocidad nula de su centro de masa, y el efecto anterior entonces no aparece. Este sería el caso si consideramos, por ejemplo, nuestro modelo junto con el caso complementario, en el cual los spines están intercambiados.

En las Fig.28,29 y 30, se muestra los resultados de la magnetoresistencia

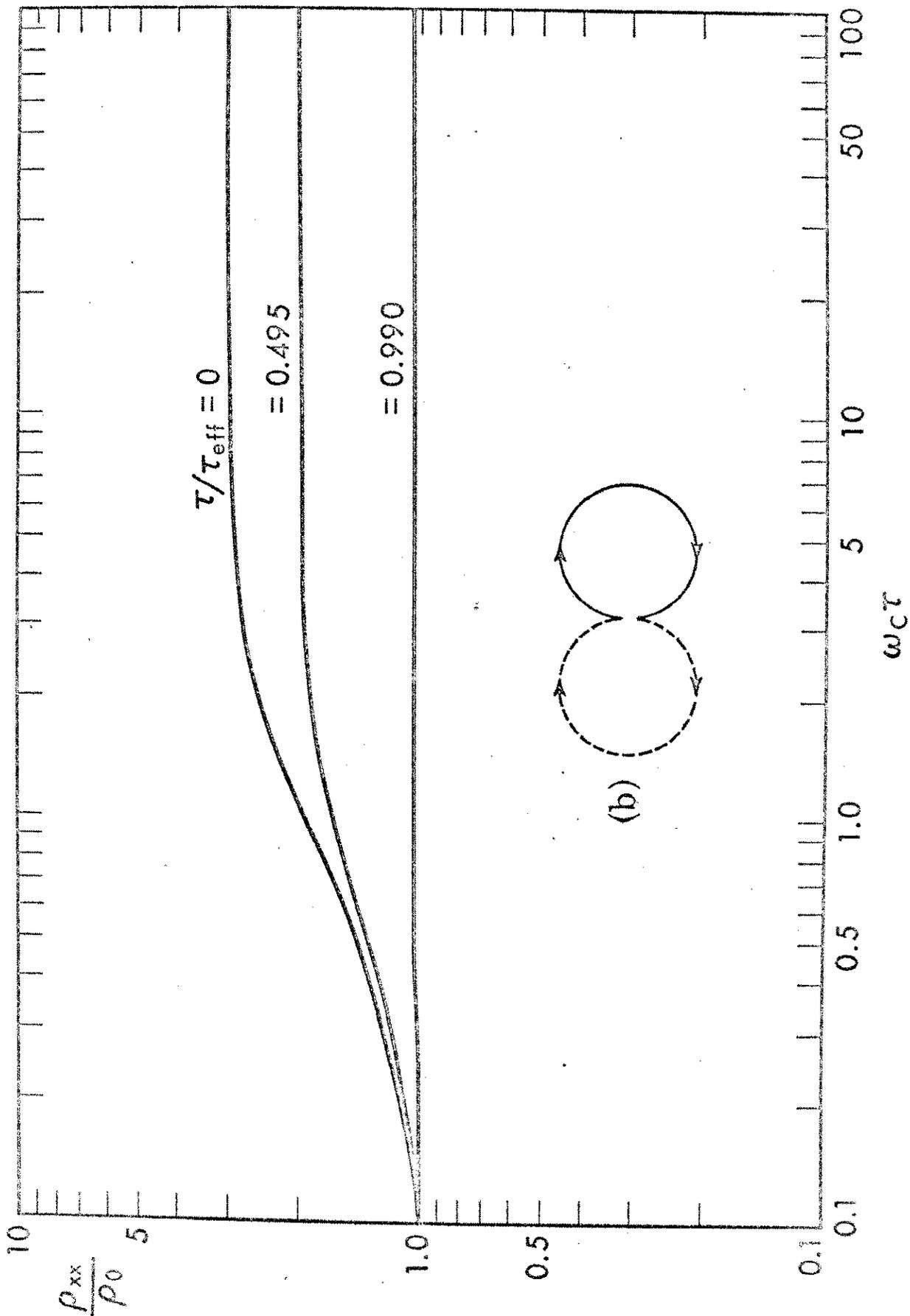


Fig. 28

FIG. 29

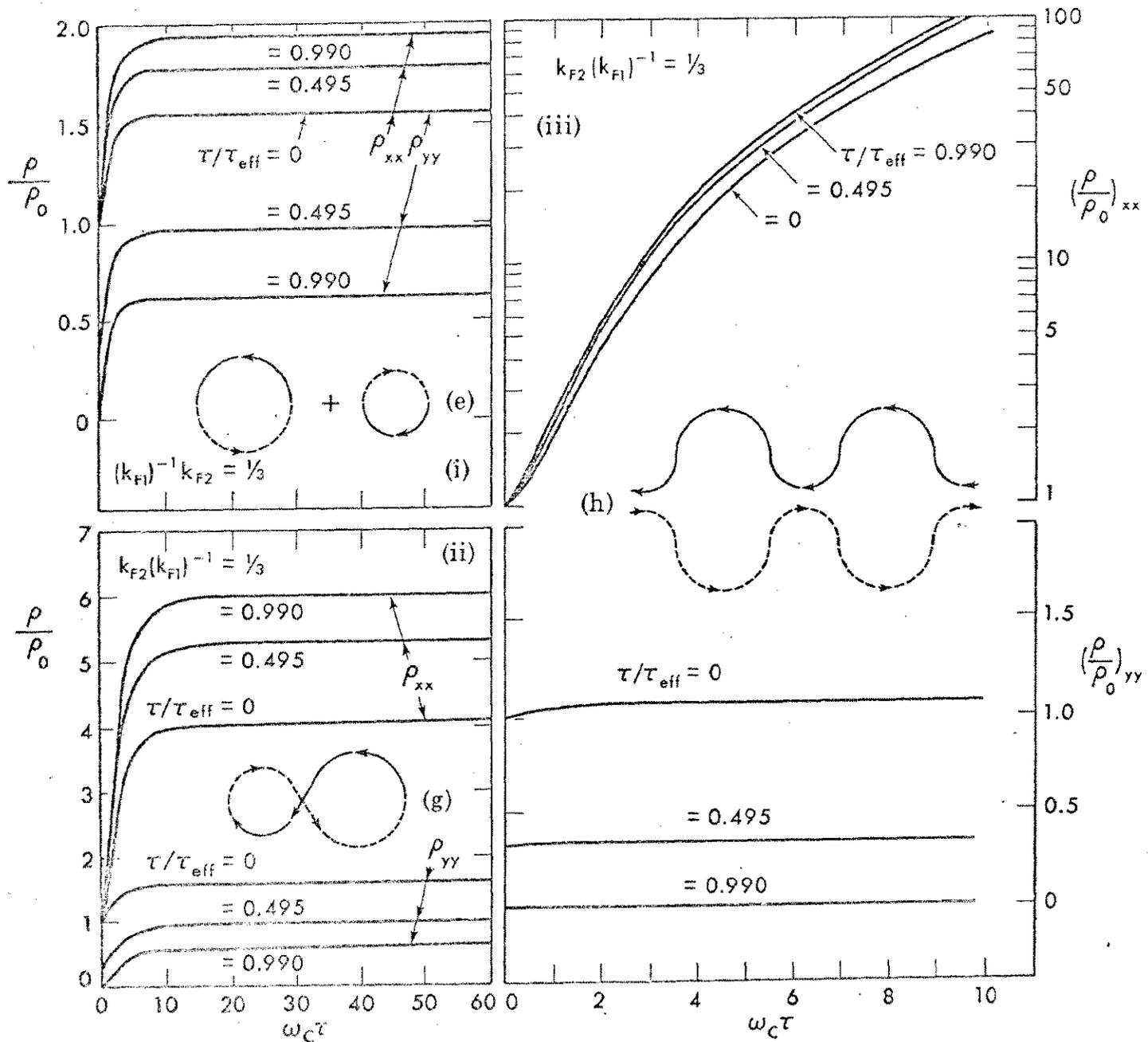
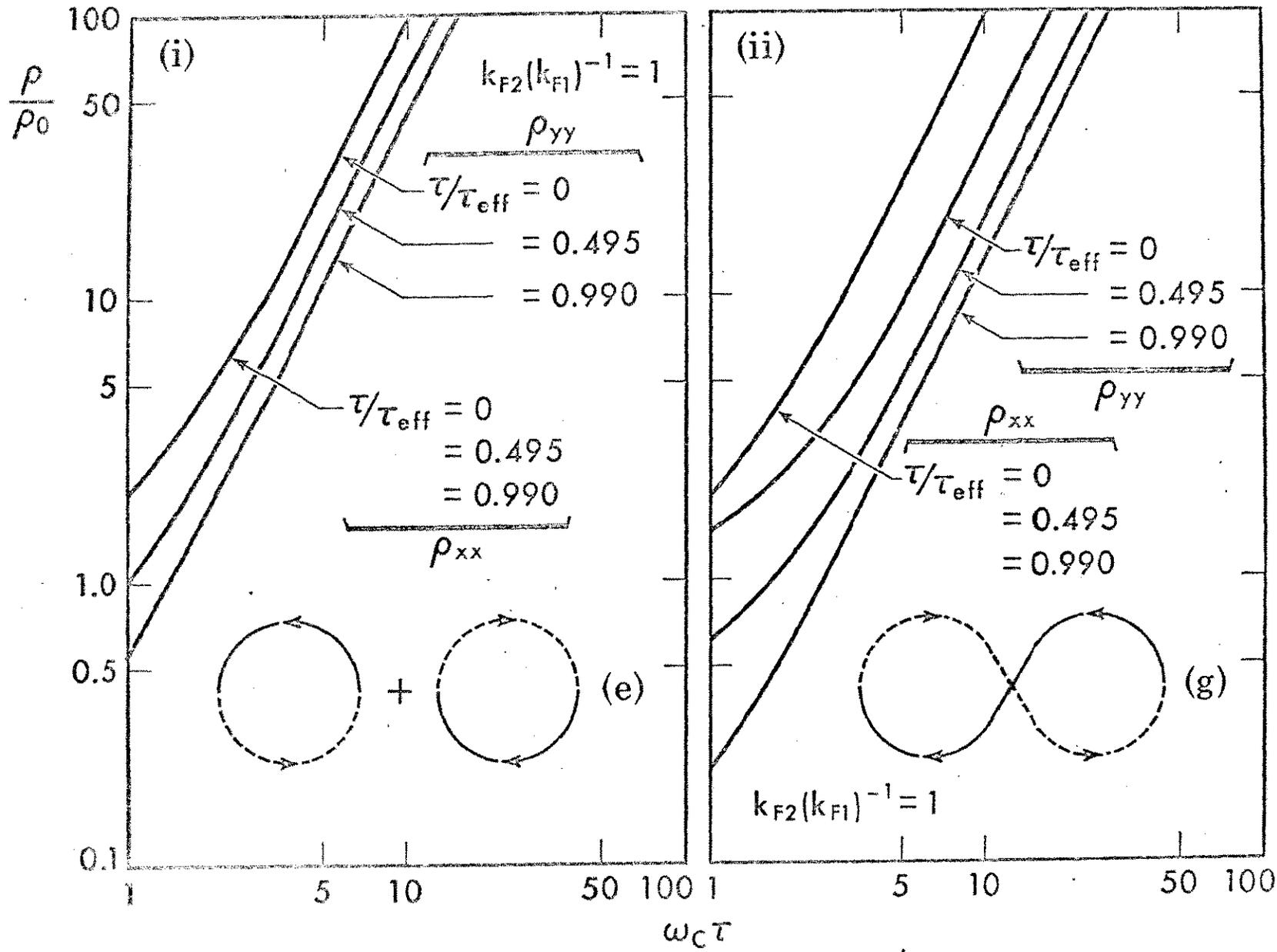


FIG. 30



para la mayor parte de los casos sin ruptura o con ruptura completa. Se han omitido los casos donde no hay efectos nuevos, como (a) y (d) de la Fig.27, y también los casos donde los resultados son similares a otros ya mostrados, como (c) y (f) de la Fig.27.

Todas las curvas, salvo la Fig.34 que necesita explicación extra, están graficadas como funciones del parámetro adimensional $\omega \tau_c$ y están normalizadas con respecto a la resistividad ρ_0 para campo nulo en el caso normal ($\tau_c = \tau_s$, es decir $\tau_c/\tau_s = 1$). Los cálculos se hicieron para tres valores del parámetro τ_c/τ_s , a indicar, (τ_c/τ_s) = 0, .495, .990, ya que $\tau_c > \tau_s$.

El tensor resistividad para el primer modelo (I), mostrado en la Fig.27, tiene la forma sencilla

$$\underline{\rho}/\rho_0 = \begin{vmatrix} (1 + \omega^2 \tau_c^2 W)/(1 - W) & -\omega \tau_c \\ \omega \tau_c & 1 \end{vmatrix}, \quad (6-29)$$

donde $W = W(T, T'; \omega \tau_c, \omega \tau_s)$ es una cierta función de $T, T', \omega \tau_c$ y $\omega \tau_s$. La relación (6-29) no muestra magnetoresistencia en la dirección Y.

En la Fig.28 se muestra la componente XX de la resistividad para el caso $T = 0, T' = 1$, para tres valores de (τ_c/τ_s) . Para campo magnético nulo tenemos

$$\rho/\rho_0 \rightarrow 1, \quad (6-30)$$

$$H \rightarrow 0$$

y para campo muy alto se satura a un valor dado por

$$\rho_{\text{sat}} / \rho_0 = 3 - 2(\tau/\tau_{\text{ef}}) \quad (6-31)$$

La relación (6-31) puede interpretarse en términos de un tiempo de relajación efectivo válido para campos altos, dado por

$$1/\tau_{\text{sat}} = 1/\tau \{3 - 2(\tau/\tau_{\text{ef}})\} \quad (6-32)$$

La Fig.29 corresponde a las curvas de la magnetoresistencia para los casos parcialmente compensados (e) y (g), y la órbita abierta (h) de la Fig.27, cuando $k_{F1} = 3k_{F2}$. Cuando hay compensación ($k_{F1} = k_{F2}$), la magnetoresistencia cambia drásticamente para los casos (e) y (g); se obtiene comportamientos cuadráticos tanto para ρ_{XX} como para ρ_{YY} para campos altos, sin dependencia de ρ_{XX} en (τ/τ_{ef}) (ver Fig.30).

Un aspecto común de todos estos casos - (e) al (h) - tanto parcialmente compensado como compensado así como órbitas abiertas, son los valores de la resistividad para campo magnético nulo. Obtenemos los resultados

$$\left(\frac{\rho_{XX}}{\rho_0}\right)_{H \rightarrow 0} \rightarrow 1, \quad (6-33)$$

y

$$\left(\frac{\rho_{YY}}{\rho_0}\right)_{H \rightarrow 0} \rightarrow \frac{\{1 - (\tau/\tau_{\text{ef}})\}}{\{1 + (\tau/\tau_{\text{ef}})\}}, \quad (6-34)$$

que muestran explícitamente la anisotropía del modelo, como se indicó anteriormente.

Mediante la relación (6-34), podemos definir un tiempo de relajación efectivo $\bar{\tau}$ para campo magnético nulo y para la dirección Y por

$$1/\bar{\tau} \equiv 1/\tau \cdot \{1 - (\tau/\tau_{ef})\} / \{1 + (\tau/\tau_{ef})\} \quad , \quad (6-35)$$

que puede interpretarse como una modificación en la relajación causada por el nuevo mecanismo.

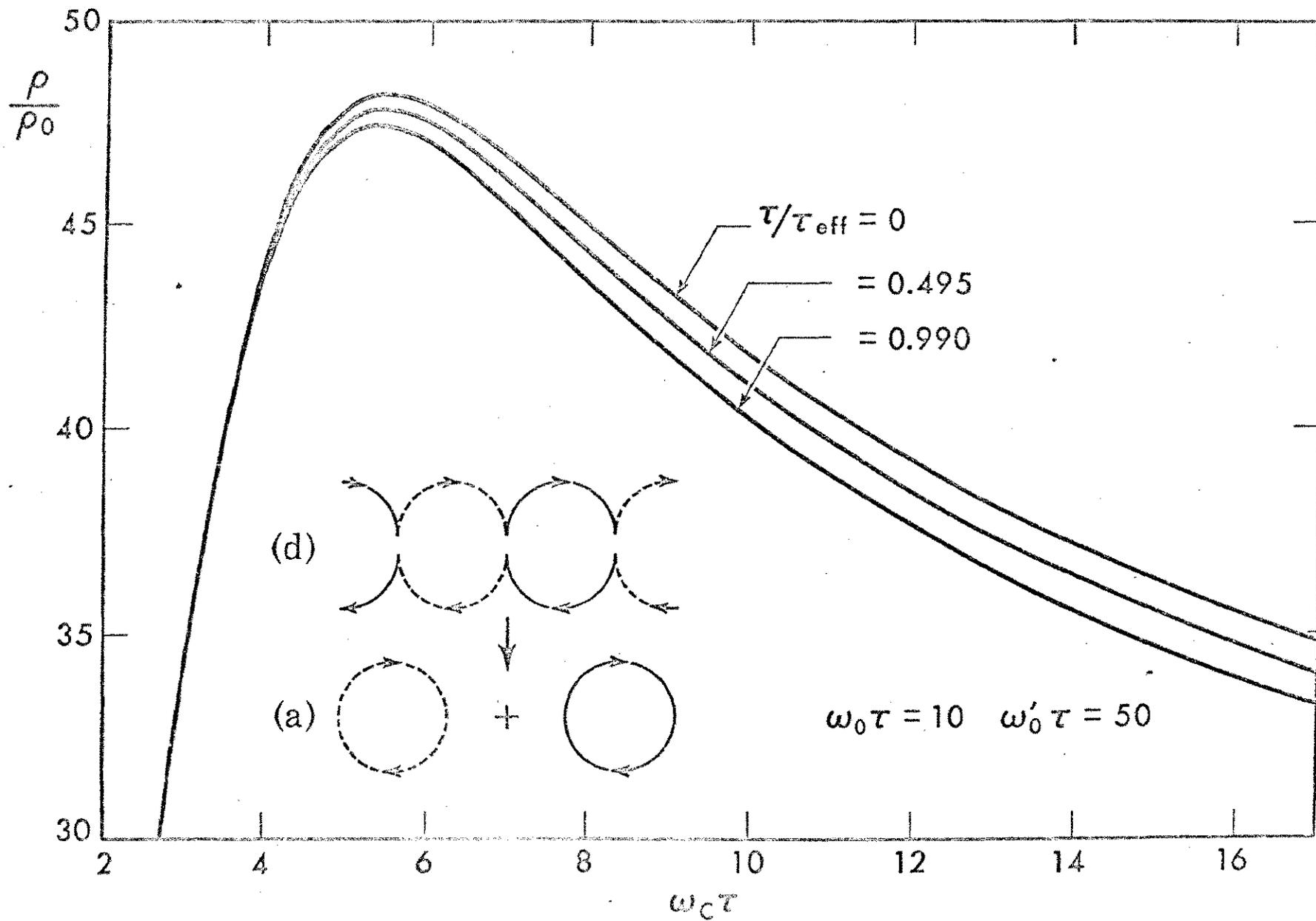
En las Fig.31,32 y 33 se muestra las curvas de la resistividad que incluyen ruptura magnética. Los campos de ruptura están indicados mediante los parámetros $\omega_0 \tau$ y $\omega'_0 \tau$ (los productos de las frecuencias de ruptura por el tiempo normal de relajación τ). La transición desde campo nulo a campo alto se muestra también en las figuras. Se ha usado una flecha, siempre apuntando hacia el límite de campo alto, para indicar las transiciones entre los distintos casos de la Fig.27 .

La Fig.34 necesita un comentario especial. Usando la relación (6-35), podemos redefinir la resistividad para campo magnético nulo según la dirección Y para el modelo II de la Fig.27, escribiendo

$$\bar{\rho}_0 \equiv \rho_0 \cdot (\tau/\bar{\tau}) \quad . \quad (6-36)$$

En la Fig.34, por lo tanto, se grafica la resistividad renormalizada $(\rho/\bar{\rho}_0)_{yy}$ versus el producto efectivo $\omega \bar{\tau}$, para dos casos simples, para mostrar que no hay un factor de escala entre las distintas curvas para diferentes (τ/τ_{ef}) . En principio, los diferentes casos pueden distinguirse experimentalmente.

FIG. 31



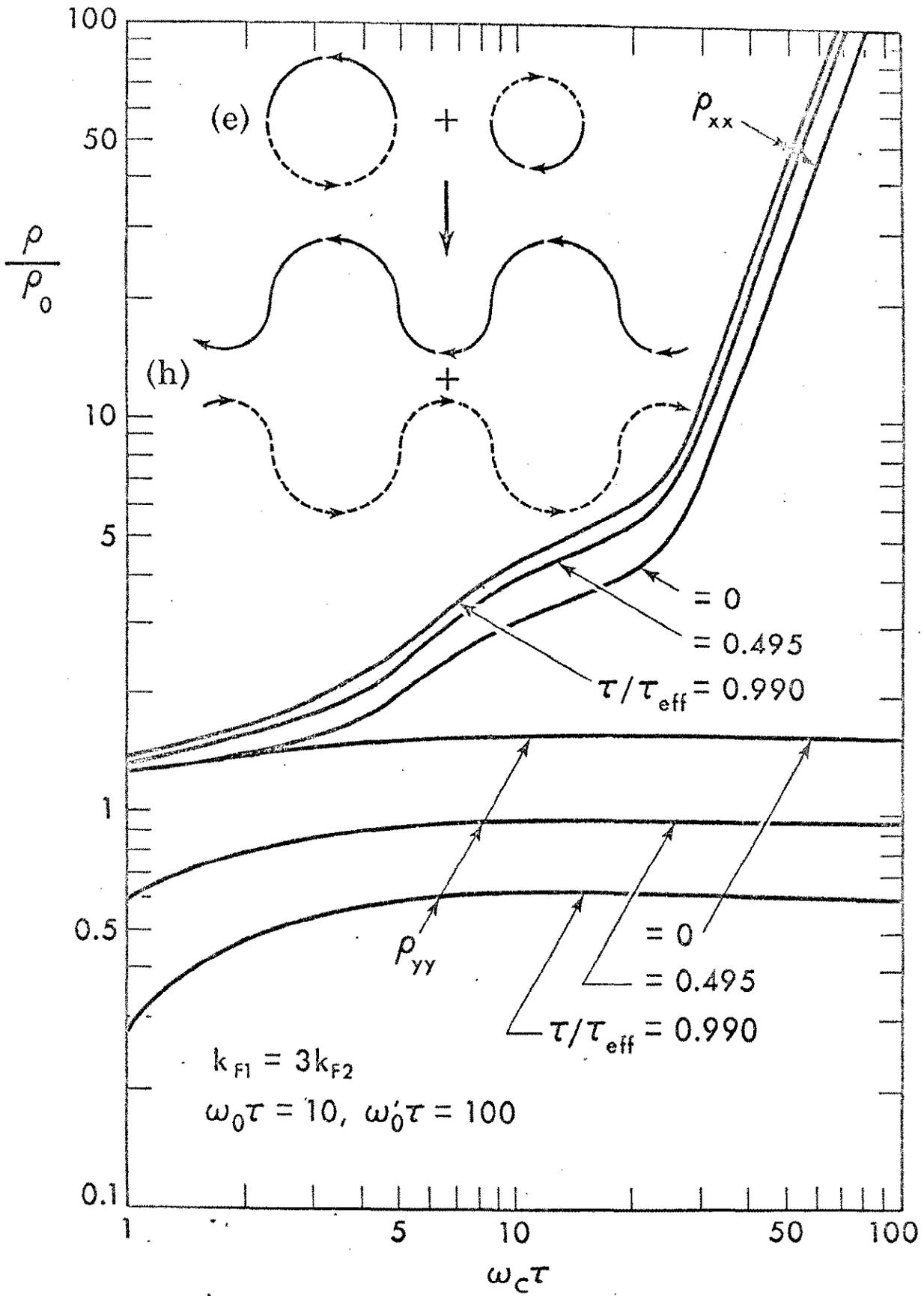


Fig.32

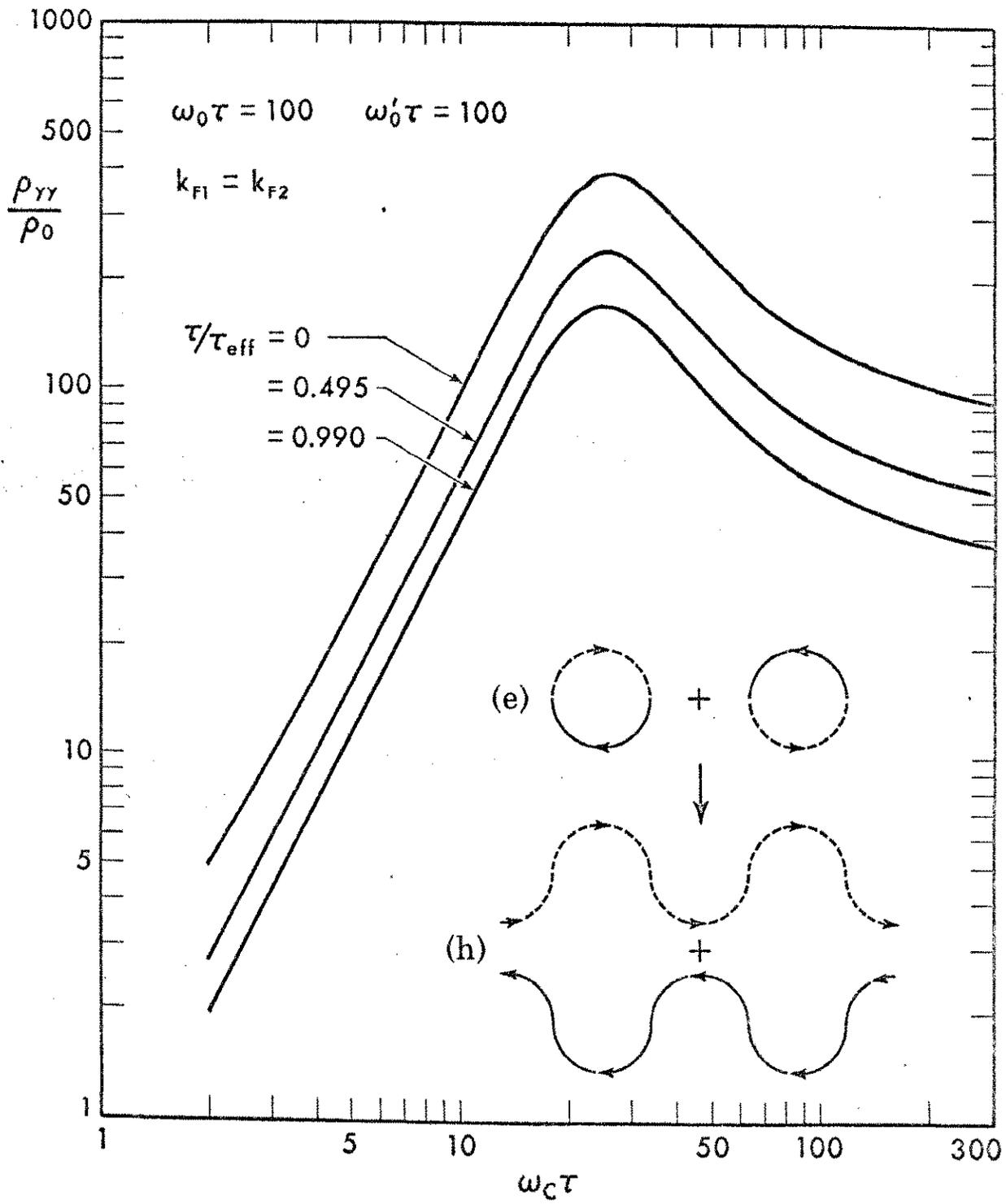
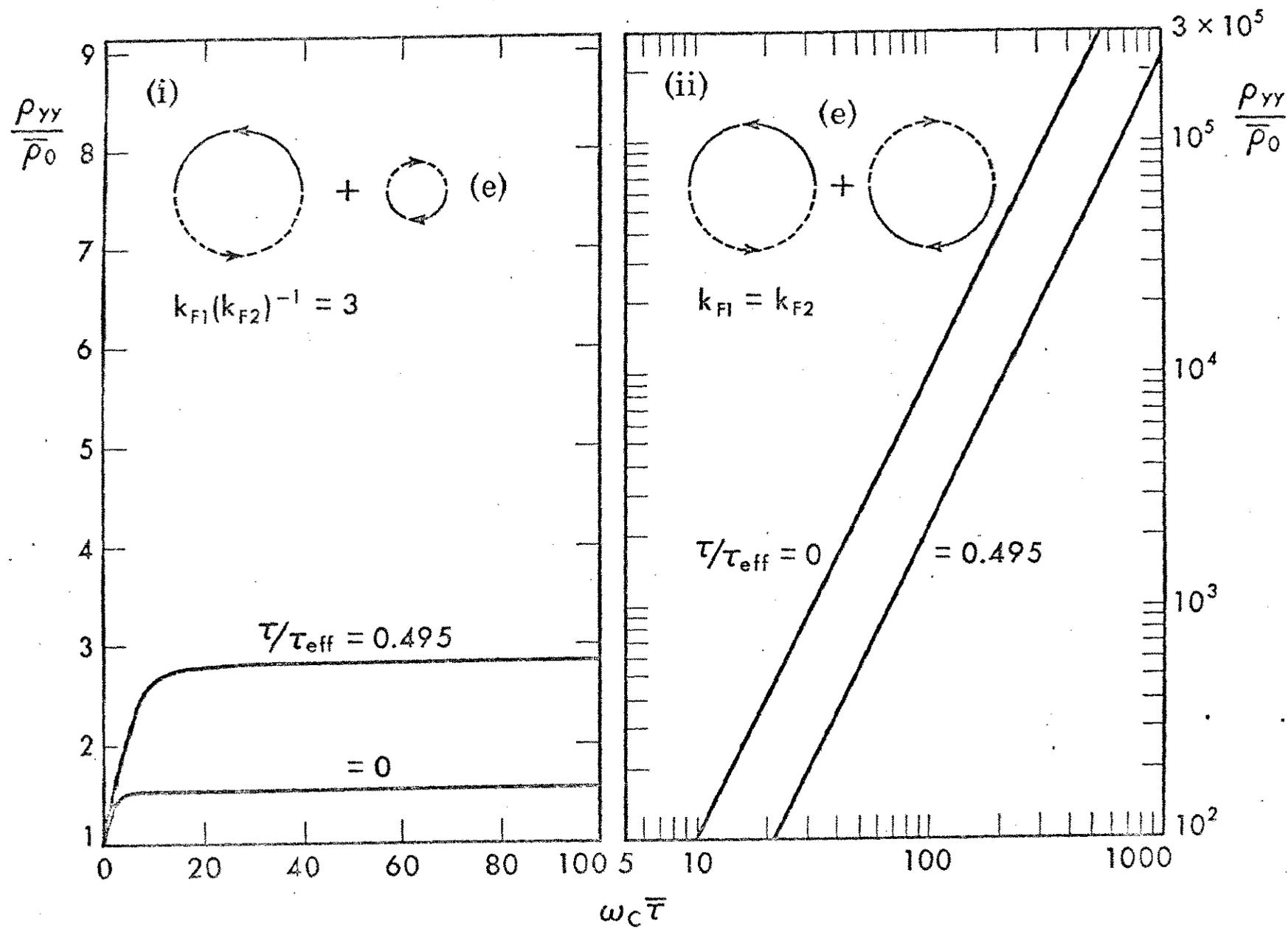


Fig. 33

Fig. 34



6.5 Conclusiones y Discusión.

De las secciones previas pueden obtenerse varias conclusiones de validez general.

(a) Como se vió en la Sec.6.4, la inclusión de un mecanismo de relajación extra no da ningún efecto cualitativo nuevo en el comportamiento de la magnetoresistencia como función de $\omega \tau$. Los cambios más notorios, cuando $\Delta \neq 0$, se reducen a modificaciones de los valores de saturación y de los coeficientes de los regímenes cuadráticos.

(b) No hay factor de escala entre las distintas curvas de la magnetoresistencia para diferentes valores de (τ/τ_{ef}) , cuando son graficadas como funciones de $\omega \bar{\tau}$ y normalizadas con respecto a $\bar{\rho}_0 \sim (1/\bar{\tau})$, donde $\bar{\tau}$ es el tiempo efectivo de relajación para campo magnético nulo. Es decir, en principio, los diferentes casos de (τ/τ_{ef}) podrían distinguirse experimentalmente. Esto puede lograrse preparando muestras de diferente pureza y haciendo mediciones a diferentes temperaturas. Las impurezas normales y los efectos de temperatura modifican principalmente el tiempo normal de relajación τ , mientras que las impurezas magnéticas afectarían fuertemente el tiempo de relajación con spin-flip τ_s . Mediciones de la magnetoresistencia para muestras con diferentes concentraciones de impurezas magnéticas pero con concentraciones totales iguales permitirían distinguir entre los distintos casos de (τ/τ_{ef}) .

(c) A veces las consideraciones de simetría requieren $\Delta \equiv 0$, para la cantidad Δ_L definida mediante la relación (6-2). Un Δ_L no nulo produce un cambio en el número de electrones con spin mayoría y spin minoría, y por lo tanto una pequeña

modificación de las propiedades ferromagnéticas equivalente a un cambio en la separación de energía debida al intercambio.

Un proceso como el mostrado en la Fig.26 aumenta el ferromagnetismo. Procesos con el efecto contrario - reducción de ferromagnetismo - son posibles también.

El efecto combinado de los dos mecanismos de scattering, que conectan las varias hojas de la SF de maneras diferentes, junto con las fuerzas impulsoras puede producir estados con una densidad de spin no uniforme.

De este modo, aunque el mecanismo extra de relajación no da ningún efecto nuevo notable en los tensores galvanomagnéticos - excepto aquellos indicados en (a) - podría producir cambios en las propiedades ferromagnéticas, que a su vez podrían medirse.

(d) La ruptura magnética puede hacer que Δ_L fluctúe como función de $\omega_c \tau$, introduciendo un cambio en el estado de cuasiequilibrio. A modo de ilustración, mostremos lo que pasa para el modelo I de la Fig.27.

El cálculo autoconsistente da para Δ_L el resultado

$$\Delta_L = -\Delta_a = -|e|\tau/\hbar \cdot \frac{\omega_c^2 \tau^2 (1 - e^{-\gamma})}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \cdot \frac{2(S+S')(E+X)(1 + e^{-\gamma/2})}{1 - e^{-\gamma} + 2e^{-\gamma}(S+S') - 4e^{-\gamma}SS'}$$

$$\cdot \left\{ 2\pi(1 - \tau/\tau_{ef}) + (\tau/\tau_{ef})\omega_c \tau \cdot \frac{2(S+S')(1 - e^{-\gamma})^2 - 8e^{-\gamma/2}(1 - e^{-\gamma/2})(1 - e^{-\gamma})SS'}{(1 - e^{-\gamma}) + 2e^{-\gamma}(S+S') - 4e^{-\gamma}SS'} \right\}^{-1}, \quad (6-37)$$

donde

$$\gamma \equiv 2\pi/\omega_c \tau, \quad X \equiv \left| \begin{array}{c} 1/\omega_c \tau \\ 1 \end{array} \right|, \quad (6-38)$$

→
E es el campo eléctrico aplicado y S y S' son las probabilidades (6-26) que un electrón cambie su spin en las junturas.

Para campo magnético nulo tenemos $S=S'=1$ y para campo magnético alto $S=S'=0$, obteniéndose un Δ nulo para ambos límites. Para campos intermedios, sin embargo, cuando la ruptura magnética produce transiciones entre ambos límites, obtenemos un Δ finito, con la consiguiente fluctuación del número de magnetón.

(e) Es importante hacer notar que todos los efectos considerados aquí, que provienen de un Δ no nulo, desaparecen cuando existe un centro de simetría en el cristal. Este es el caso de la fase paramagnética de todos los metales ferromagnéticos, pero el centro de simetría desaparece en presencia de una magnetización finita. Cuando la magnetización apunta según una dirección arbitraria del cristal no hay ninguna simetría presente en el sistema (ver Sec.3.2).

§ 7. CONCLUSIONES FINALES

De los capítulos anteriores y de experimentos realizados recientemente pueden sacarse las siguientes conclusiones:

1. Pareciera que los rasgos más importantes de la SF del Fe están bien establecidos. Sólo faltaría un acuerdo mejor entre la teoría y los experimentos en algunos detalles menores. Estos inevitablemente se alcanzarán cuando se cuente con muestras de mayor pureza, campo magnéticos más altos y cálculos de bandas más refinados.
2. Con respecto a las propiedades galvanomagnéticas, mediciones recientes del efecto Hall en Fe realizadas por Klaffky y Coleman⁷⁶ han dado resultados todavía no entendidos en forma completa, aunque se sospecha que la ruptura magnética está jugando un papel importante. A 4.2°K la resistividad de Hall muestra un comportamiento no lineal con el campo magnético hasta 100 kOe; entre 100 y 150 kOe el comportamiento es lineal. Si además se mira la Fig.10b de la Ref.76 para la magnetoresistencia transversal de la misma muestra, se verá un comportamiento similar al de las Fig.12, 13 y 14, ya discutido en los Cap.3 y 5. El quiebre de la pendiente de la magnetoresistencia transversal se produce para un campo magnético del mismo orden de magnitud que el campo para el cual la resistividad de Hall pasa de no lineal a lineal. Esto sugiere que la ruptura magnética efectivamente está jugando algún papel, aunque el valor del campo para el cual se quiebra la pendiente no es una buena indicación del campo de ruptura.

La tarea ahora se reduce a formular un modelo que sea consistente con los resultados para la magnetoresistencia transversal y el efecto Hall y cuya topología sea compatible con la información que ya tenemos de la SF.

3. En las curvas de la magnetoresistencia transversal del Fe aparecen también una serie de oscilaciones de frecuencias diferentes a las oscilaciones del efecto de de Haas-van Alphen ^{30,35}. Aunque se sabe que estas oscilaciones están asociadas a la ruptura magnética y a efectos de coherencia de la fase de la función de onda del electrón (y por lo tanto es impropio llamarlas de Shubnikov-de Haas), no existe todavía un modelo que proporcione estas frecuencias, en parte debido a la complejidad de la SF,

4. A temperatura finita el asunto se complica más debido al scattering electrón-magnón. En presencia de una estructura de dominios ferromagnéticos el espectro de magnones tiene dos ramas principales ⁷⁷. Una corresponde a una onda de spin ordinaria en un material ferromagnético (magnones de volumen); la otra corresponde a excitaciones que no se propagan fuera de las paredes de Bloch (magnones de superficie).

El problema de scattering inelástico con producción o absorción de magnones superficiales aún no ha sido estudiado. Sería de interés conocer su contribución a la resistividad y que dependencia con la temperatura produce.

5. Restaría también por explorar otras consecuencias del mecanismo de relajación extra debido a un scattering dependiente del spin (Cap.6); por ejemplo el efecto de un campo magnético variable, tanto en magnitud como en dirección.

Junto a estos problemas hay otros de carácter más fundamental como la justificación misma del tiempo de relajación y el estudio de su variación sobre la SF, la inclusión de efectos de muchos cuerpos y de las modificaciones que producen en la SF y un tratamiento cuántico satisfactorio de los fenómenos de transporte.

El campo de la Fermiología es particularmente atractivo por la diversidad de métodos usados en la determinación de la SF. Para los metales ferromagnéticos, sin embargo, este estudio se ha hecho principalmente en base al efecto de de Haas-van Alphen y a mediciones de la magnetoresistencia debido a las dificultades en la preparación de muestras de pureza adecuada. Para una revisión detallada de otros métodos usados en Fermiología recomendamos las Ref.40, 41 y 78.

Nuestro interés se ha centrado en los fenómenos galvanomagnéticos que ponen de manifiesto las propiedades topológicas de la SF.

APENDICE A

Dinámica de los electrones de Bloch.

La velocidad de un electrón, en ausencia de campo magnético, es proporcional al valor de expectación de su momentum

$$\begin{aligned} \vec{v}_k &= (1/m) \cdot \int \psi_k^* \vec{p} \psi_k \, dr \\ &= -(i\hbar/m) \cdot \int \psi_k^* \nabla \psi_k \, dr \end{aligned} \quad (A1)$$

En (A1) ψ_k es una función de tipo Bloch

$$\psi_k = u_k(r) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (A2)$$

donde la parte $u_k(r)$ satisface una ecuación de la forma

$$H_k u_k(r) = \epsilon_k u_k(r), \quad (A3)$$

con

$$H_k \equiv -(\hbar^2/2m) \{\nabla + i\vec{k}\}^2 + V(r); \quad (A4)$$

derivando (A3) con respecto a \vec{k} obtenemos

$$(\vec{H}_k - \epsilon_k) \vec{\nabla} u_k(r) = -\{\vec{\nabla}(\vec{H}_k - \epsilon_k)\} u_k(r)$$

$$= \{i\hbar^2/m (\nabla + i\mathbf{k}) + \nabla \cdot \boldsymbol{\epsilon}\} \mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (A-5)$$

Multiplicando (A-5) por $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$ e integrando sobre todo el cristal se llega a

$$\int \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) (\mathbf{H}_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}}) \nabla \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} = \nabla \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \hbar \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \quad (A-6)$$

Es bien conocido que $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}$ se obtiene de H mediante la aplicación de una transformación unitaria

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k}} = e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} H e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (A-7)$$

donde $H = -\hbar^2/2m \nabla^2 + V(\mathbf{r})$ es el Hamiltoniano de un electrón. Como H es hermitico, $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}$ expresado por (A-7) también es hermitico. De aquí sigue

$$\int d\mathbf{r} \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) (\mathbf{H}_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}}) \nabla \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \int \{(\mathbf{H}_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}}) \mathbf{u}_{\mathbf{k}}\}^* \nabla \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}} \, d\mathbf{r} = 0 \quad (A-8)$$

La ecuación (A-6) da entonces

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = (1/\hbar) \nabla \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} \quad (A-9)$$

que es la expresión para la velocidad de grupo de un paquete de ondas centrado en \mathbf{k} .

Cuando aplicamos un campo eléctrico uniforme, debemos agregar al Hamiltoniano un potencial de la forma $|e|E \cdot \mathbf{r}$. Este potencial extra no puede ser tratado como una perturbación en un sistema infinito, porque entonces \mathbf{r} se hace indefinida-

mente grande. Este problema debe ser tratado entonces con la teoría dependiente del tiempo.

En este caso, uno de los caminos posibles es introducir un potencial vectorial que proporcione un campo eléctrico uniforme, procedimiento usado por Kohn y Shockley ⁷⁹. El cuadro obtenido puede interpretarse como una variación del vector de onda \vec{k} en el tiempo. Nosotros argumentaremos en base a la conservación de la energía.

La variación de la energía que experimenta un electrón de vector de onda \vec{k} en presencia de un campo eléctrico uniforme \vec{E} es $-|e|\vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{k}}$. Por otro lado, si suponemos que esta variación de energía se manifiesta en un cambio del vector de onda \vec{k} , tendremos

$$d\epsilon_{\vec{k}}/dt = -|e|\vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{k}} = \nabla_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \cdot \dot{\vec{k}} = \hbar \dot{\vec{k}} \cdot \vec{k} \quad (\text{A-10})$$

Para que los dos cuadros sean equivalentes debemos tener

$$\hbar \dot{\vec{k}} = -|e|\vec{E} \quad (\text{A-11})$$

Es decir, un electrón en un estado $\psi_{\vec{k}}$ en $t=0$ cuando no hay campo, después de un tiempo t estará en un estado con el \vec{k} original, pero con todas las otras propiedades - como la energía - del estado originalmente en $\vec{k} - |e|\vec{E}t$. Así un electrón en un estado dado parecerá cambiar sus propiedades en término de los estados clasificados para $t=0$, según la relación (A-11).

Cuando además hay un campo magnético aplicado, argumentando por analogía,

el vector de onda \vec{k} parecerá evolucionar en el tiempo como

$$\dot{\vec{k}} = -|e| \{ \vec{E} + \vec{V}_{\vec{k}}/c \times \vec{H} \} , \quad (A-12)$$

si el campo es uniforme.

En efecto, si sólo se aplica un campo eléctrico, el Hamiltoniano efectivo para un electrón tendrá la forma

$$H = \vec{p}^2/2m + |e|\vec{E} \cdot \vec{r} + V(\vec{r}) , \quad (A-13)$$

donde $V(\vec{r})$ es el potencial periódico de la red cristalina.

La ecuación del movimiento para \vec{p} es :

$$\dot{\vec{p}} = (1/i\hbar) [\vec{p}, H] = -|e|\vec{E} + (1/i\hbar) [\vec{p}, V(\vec{r})] . \quad (A-14)$$

Si ahora consideramos el caso cuando solamente se aplica un campo magnético, el Hamiltoniano será

$$H = 1/2m(\vec{p} + |e|/c \cdot \vec{A})^2 + V(\vec{r}) , \quad (A-15)$$

donde \vec{A} es el potencial vectorial y $\vec{H} = \nabla \times \vec{A}$.

La ecuación para el movimiento de \vec{p} queda ahora como

$$\dot{\vec{p}} = (1/i\hbar) [\vec{p}, H] = -|e|/2c [\vec{v} \times \vec{H} - \vec{H} \times \vec{v}] + (1/i\hbar) [\vec{p}, V(\vec{r})] . \quad (A-16)$$

En general \vec{v} no conmuta con \vec{H} , pero si \vec{H} es un campo uniforme, podemos escribir

$$\dot{\vec{p}} = -|e|\hbar/c \cdot \vec{v} \times \vec{H} + (1/i\hbar) [\vec{p}, V(\vec{r})] \quad . \quad (A-17)$$

En la relación (A-14) hemos logrado identificar el término $-|e|\hbar \dot{\vec{E}}$ con $\hbar \dot{\vec{k}}$, de suerte que se obtiene

$$\dot{\vec{p}} - \hbar \dot{\vec{k}} = (1/i\hbar) [\vec{p}, V(\vec{r})] \quad . \quad (A-18)$$

Esta última relación es de carácter bien general, pues establece que un cambio $\dot{\vec{k}}$ del vector de onda está asociado a un cambio $\dot{\vec{p}}$ del momentum; sin embargo no se preocupa por la causa que determina la variación del momentum.

Aceptando la validez general de (A-18) y reemplazando en (A-17) obtenemos

$$\dot{\vec{p}} = -|e|\hbar/c \cdot \vec{v} \times \vec{H} + \dot{\vec{p}} - \hbar \dot{\vec{k}} \quad ,$$

es decir

$$\hbar \dot{\vec{k}} = -|e|\hbar/c \cdot \vec{v} \times \vec{H} \quad . \quad (A-19)$$

El efecto combinado del campo eléctrico y del campo magnético está dado entonces por (A-12) siempre que el electrón permanezca en una misma banda.

En el Cap.5 se analiza el efecto de ruptura, es decir de transiciones entre bandas que pueden conectar distintas piezas de la SF. La probabilidad de ruptura (5-16) está determinada por el parámetro λ dado por (5-15).

Si $\lambda \gg 1$, el efecto de ruptura no se presentará.

Según (5-15)

$$\lambda \equiv |\mathbf{v}_G|^2 / (\hbar \dot{\epsilon})$$

Si la variación de energía $\dot{\epsilon}$ se debe a un campo eléctrico se tendrá

$$\dot{\epsilon} = |e| |\vec{E} \cdot \vec{v}_G/2| = |e| E v_G/2 \cos\theta \quad . \quad (\text{A-20})$$

Suponemos $G \sim k_F$ y $k_F \sim 1/a$, donde a es la constante de la red. Entonces

$$\lambda \sim \Delta^2 / (\epsilon_F |e| E a) \quad , \quad (\text{A-21})$$

y la condición que no haya ruptura se expresa por

$$|e| E a \ll \Delta^2 / \epsilon_F \quad , \quad (\text{A-22})$$

donde Δ es el gap de energía entre las bandas y ϵ_F es la energía de Fermi.

La relación (A-22) significa que no habrá ruptura mientras que la energía para acelerar un electrón en una distancia del orden del parámetro de la red sea substancialmente menor que la razón Δ^2 / ϵ_F .

Si la condición (A-22) no se cumple, se dice que ocurre ruptura de Zener.

Para el caso de ruptura magnética, la condición análoga a (A-22) es

$$\hbar \omega_c \ll \Delta^2 / \epsilon_F \quad , \quad (\text{A-23})$$

donde ω_c es la frecuencia de ciclotrón dada por

$$\omega_c = |e| \hbar / mc \quad . \quad (\text{A-24})$$

Sin embargo la ruptura magnética tiene un carácter distinto, ya que debe

conectar distintas órbitas sobre las diferentes hojas de la SF, es decir hay transiciones entre bandas pero a energía constante.

APENDICE B

La Densidad de Probabilidad de Supervivencia $P(t, t_0)$.

Definimos $P(t, t_0) dt$ como la probabilidad que un electrón sufra una colisión en el intervalo infinitesimal de tiempo $[t, t+dt]$ y después se mueva un tiempo $(t_0 - t)$ sin sufrir otra colisión.

Calculemos primero la probabilidad $\Pi(t)$, que un electrón pase un tiempo t sin sufrir un choque y la probabilidad $W dt$ que un electrón sufra una colisión en el intervalo de tiempo $[t, t+dt]$.

Obviamente estas dos probabilidades no son independientes. Se tendrá

$$\Pi(t+dt) = \Pi(t)[1-W dt] \quad , \quad (B-1)$$

ya que la probabilidad que el electrón pase un tiempo $t+dt$ sin chocar es igual a la probabilidad que pase un tiempo t sin sufrir una colisión por la probabilidad que no choque en el intervalo $[t, t+dt]$.

Desarrollando $\Pi(t+dt)$ en serie de Taylor obtenemos

$$\Pi(t+dt) = \Pi(t) + d\Pi(t)/dt \cdot dt = \Pi(t) - \Pi(t) W dt \quad , \quad (B-2)$$

es decir

$$d\Pi(t)/dt + W \Pi(t) = 0 \quad , \quad (B-3)$$

Supongamos primero que W es una constante independiente del tiempo. En este caso

$$\Pi(t) = A e^{-Wt} \quad , \quad (B-4)$$

La constante Λ se determina por la condición

$$\Pi(0) = 1 \quad , \quad (B-5)$$

lo cual da necesariamente

$$\Pi(t) = e^{-Wt} \quad . \quad (B-6)$$

Nuestra probabilidad $P(t, t_0) dt$ estará dada por el producto de la probabilidad que el electrón choque en el intervalo de tiempo $[t, t+dt]$ por la probabilidad que pase un tiempo $t_0 - t$ sin chocar:

$$P(t, t_0) dt = W e^{-W(t_0 - t)} dt \quad . \quad (B-7)$$

Obviamente se cumplen las propiedades siguientes:

i) el electrón debe chocar en algún momento, lo cual se expresa por

$$\int_{-\infty}^t P(t, t_0) dt = 1 \quad , \quad (B-8)$$

ii) la probabilidad que el electrón nazca en $t = -\infty$ de una colisión y llegue al tiempo t_0 sin sufrir otra es nula

$$P(-\infty, t_0) = 0 \quad . \quad (B-9)$$

Calculemos ahora el tiempo medio τ entre colisiones. Este estará dado por

$$\tau \equiv \int_{-\infty}^t t P(t, t_0) dt = W^{-1} \quad . \quad (B-10)$$

De ahora en adelante usaremos τ en lugar de W^{-1} .

Consideremos ahora el caso en que τ depende del tiempo, por ejemplo a través del vector de onda \vec{k} .

La integración de la ecuación diferencial (B-3) queda entonces

$$\Pi(t) = \exp\left\{-\int_t^0 ds/\tau(s)\right\} \quad , \quad (B-11)$$

y la probabilidad $P(t, t_0) dt$

$$P(t, t_0) dt = dt/\tau(t) \cdot \exp\left\{-\int_t^0 ds/\tau(s)\right\} \quad . \quad (B-12)$$

Puede verse mediante inspección, que las propiedades (B-8) y (B-9) se cumplen.

APENDICE C

(1)
Cálculo del Coeficiente α_{xy} de la conductividad, responsable del Efecto

Hall.

Calcularemos σ_{yx} en el límite de campo alto, es decir en ausencia de colisiones ($\omega_c \tau \gg 1$), para electrones que se mueven en órbitas cerradas sobre la SF.

Suponemos que nuestro sistema de coordenadas es tal que el eje Z apunta según la dirección del campo magnético \vec{H} . Consideramos además una sección cilíndrica de la SF de altura Δk_z , limitada por dos planos perpendiculares al campo magnético.

Calculemos entonces la corriente J_y debida a la aplicación de un campo eléctrico constante E_x . El campo eléctrico hace variar la energía y el movimiento ya no se produce sobre una superficie de energía constante. La variación de la energía está dada por

$$\frac{d}{dt} \epsilon = -|e| \vec{E} \cdot \vec{v} = -|e| v_x E_x \quad (C-1)$$

La evolución temporal del vector \vec{k} está dada por la ecuación semiclásica (discutida en el Apéndice A)

$$\hbar \dot{\vec{k}} = -|e| \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{H} \right) \quad (C-2)$$

Proyectando (C-2) según el eje Y obtenemos

$$\hbar \dot{k}_y = |e| \left(\frac{v_x}{c} H_x \right) \quad (C-3)$$

y reemplazando en(C-1)

$$\frac{d}{dt} \varepsilon = -c\hbar(E/H) \frac{k_x}{Y} \quad . \quad (C-4)$$

Luego, el electrón se mueve en una órbita que se sale de la SF, cuya energía varía según

$$\Delta\varepsilon \equiv \varepsilon - \varepsilon_F = -c\hbar(E/H) \left(\frac{k_x}{X} + \text{cte.} \right) \quad . \quad (C-5)$$

Los desplazamientos Δk_x y Δk_y con respecto a la SF en cualquier punto de la órbita, están dados por

$$\Delta\varepsilon = \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial k_x} \right) \Delta k_x = \hbar v \frac{\Delta k_x}{X} \quad , \text{ para } k_y = \text{cte.} \quad (C-6)$$

$$\Delta\varepsilon = \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial k_y} \right) \Delta k_y = \hbar v \frac{\Delta k_y}{Y} \quad , \text{ para } k_x = \text{cte.}$$

Como el electrón se mueve sobre una órbita desplazada, Δk_x y Δk_y no son independientes. A la corriente J_z contribuyen todos los estados entre la órbita desplazada y la correspondiente órbita sobre la SF, que llamaremos Γ . Así pues

$$\Delta J_z = -|e|/4\pi^3 \cdot \Delta k_z \cdot \oint_{\Gamma} v \frac{\Delta k_y}{Y} \frac{dk_x}{X} \quad , \quad (C-7)$$

donde hemos multiplicado por Δk_z para obtener la contribución de la sección cilíndrica. El reemplazo de (C-6) en (C-7) da

$$\begin{aligned} \Delta J_Y &= -|e|/4\pi^3 \cdot \Delta k_Z \cdot \oint_{\Gamma} (1/\hbar) \Delta \epsilon \, dk_X = \\ &= \oint_{\Gamma} |e|/4\pi^3 \cdot c \Delta k_Z \cdot (E/H) k_Y \, dk_X, \end{aligned} \quad (C-8)$$

ya que la integral de una constante sobre una trayectoria cerrada es nula. El resultado final es

$$\Delta J_Y = |e|c/4\pi^3 \cdot \Delta k_Z (E/H) \cdot \Omega(k_Z), \quad (C-9)$$

donde $\Omega(k_Z)$ es el área de la sección de la SF para k_Z dado.

La corriente total estará dada por

$$J_Y = |e|c \cdot (E/H) \int_{ZB} (1/4\pi^3) \cdot \Omega(k_Z) \, dk_Z, \quad (C-10)$$

donde la integración se efectúa sobre una zona de Brillouin. La integral de (C-10) da el número de portadores, es decir

$$J_Y = |e|c (E/H) \cdot \int_{ZB} (1/4\pi^3) \cdot \Omega(k_Z) \, dk_Z = |e|c (E/H) n. \quad (C-11)$$

Si la hoja de la SF considerada es de tipo electrón, n en la expresión (C-11) representa el número de estados electrónicos por unidad de volumen. Sin embargo, notemos que la relación (C-10) es también válida para direcciones del campo magnético

que den lugar a órbitas con carácter de hueco. En este caso la velocidad apunta hacia el interior de la órbita y por lo tanto hay un cambio de signo con respecto a la relación (C-11) correspondiente a electrones.

En el caso general, las penínsulas y las islas de tipo hueco, dan una contribución tal que tienden a cancelar los efectos de los portadores de tipo electrón. La relación (C-11) se escribe ahora

$$J_Y = |e| c(E/H) n_{ef} = |e| c(E/H) (n_X - n_h) \quad (C-12)$$

Así obtenemos el coeficiente $\alpha_{XY}^{(1)} = -\alpha_{YX}^{(1)}$ de la conductividad. El resultado que nos interesa lo expresamos como

$$\alpha_{YX}^{(1)} = -\alpha_{XY}^{(1)} = e^2 \tau / m^* (n_X - n_h) \quad (C-13)$$

donde m^* es la masa efectiva de ciclotrón para la órbita dada, y se expresa por

$$m^* \equiv \hbar / 2\pi \cdot \oint_{\Gamma} (1/v_{\perp}) dk \quad (C-14)$$

donde v_{\perp} es la proyección de la velocidad en el plano de la órbita en el espacio recíproco y dk es el elemento de arco.

APENDICE D

1. Las funciones que aparecen en (4-54) y (4-56) están dadas por las siguientes expresiones :

a) P_M y P_m están explícitamente dados por las fórmulas (4-49) y las Tablas 2, 3 y 4.

b)

$$\Gamma(\nu) = 0.5 \frac{[Q_m(\nu) - P_m(\nu)] + \nu^3 [Q_M(\nu) - P_M(\nu)]}{[1 - P_m(\nu)] + \nu^3 [1 - P_M(\nu)]} \quad (D-1)$$

donde

$$Q_s(\nu) \equiv 3 \int_0^1 d\eta R_s(\eta) \quad s \equiv m, M \quad (D-2)$$

y $R_m(\nu)$ y $R_M(\nu)$ son los coeficientes de reflexión dados por (4-42) y (4-43);

$$\Gamma(\nu=1) = 0 \quad (D-3)$$

c) Las funciones $T_{Ks}(\nu)$, donde $K = 1, 2, 3$ y $s = m, M$, están definidas por

$$T_{Ks}(\nu) \equiv \frac{3}{4\pi} \left\{ \int_{\substack{k_y > 0 \\ R_s < 1}} U_K(\theta, \phi) [1 - R_s(\theta, \phi; \nu)]^{-1} d\phi d\theta \right. \\ \left. - \int_{\substack{k_y < 0 \\ R_s < 1}} U_K(\theta, \phi) [2R_s(\theta, \phi; \nu) - 1] [1 - R_s(\theta, \phi; \nu)]^{-1} d\phi d\theta \right\} \quad (D-4)$$

donde

$$k_y \equiv k_{FS} \sin\theta \sin\phi \equiv k_{FS} \eta$$

$$0 \leq \theta \leq \pi \tag{D-5}$$

$$-\pi \leq \phi \leq \pi$$

y

$$U_1(\theta, \phi) = \sin^3\theta \sin\phi (\sin\phi - \phi \cos\phi)$$

$$U_2(\theta, \phi) = \sin^3\theta \cos\phi (\sin\phi - \phi \cos\phi) \tag{D-6}$$

$$U_3(\theta, \phi) = \sin^2\theta \cos\theta (\sin\phi - \phi \cos\phi)$$

Cuando $\nu \rightarrow 1$, $R_s \rightarrow 0$, los valores l mites son

$$T_{1s}(\nu=1) = 3/2$$

$$T_{2s}(\nu=1) = 0$$

$$T_{3s}(\nu=1) = 0$$

(D-7)

2. La expresi n completa para el camino efectivo en $Y = 0$ para

$$k_x = k_F \sin\theta \cos\phi$$

$$k_y = k_F \sin\theta \sin\phi$$

$$k_z = k_F \cos\theta$$

(D-8)

es

$$\Lambda_{\sigma z}(\theta, \phi; y=0) = \Lambda_{\sigma 0} \cos \theta \quad (D-9)$$

$$\Lambda_{\sigma x}(\theta, \phi; y=0^-) = \frac{\Lambda_{\sigma 0} \sin \theta}{(1+\chi^2) [1 - \exp(-2|\phi|/\chi)]} \left\{ e^{-\frac{2|\phi|}{\chi}} (\chi |\sin \phi| - \cos \phi) + \cos \phi + \chi |\sin \phi| \right\}$$

(D-10)

$$\Lambda_{\sigma y}(\theta, \phi; y=0^-) = \frac{\Lambda_{\sigma 0} \sin \theta}{(1+\chi^2) [1 - \{2R_{\sigma}(\theta, \phi) - 1\} \exp(-2|\phi|/\chi)]} \times$$

$$\times \left\{ e^{-\frac{2|\phi|}{\chi}} (\chi \cos \phi + |\sin \phi|) + |\sin \phi| - \chi \cos \phi \right\} \times$$

$$\times \begin{cases} 1 & \text{if } k_y > 0 \\ [2R_{\sigma}(\theta, \phi) - 1] & \text{if } k_y < 0. \end{cases}$$

(D-11)

APENDICE E

La Superficie de Fermi y los efectos de Muchos Cuerpos.

La Teoría de Bandas y la definición de SF dada en el Cap.2 considera a los electrones como partículas independientes cuya función de onda satisface una ecuación de Schrödinger de una partícula y en donde se incluye el scattering como una perturbación.

Es evidente que ésto constituye una sobresimplificación del problema y a primera vista es sorprendente el éxito alcanzado por la teoría de bandas, ya que la repulsión coulombiana entre los electrones de un metal es una interacción muy fuerte. El caso del sodio (Na) es muy ilustrativo; mientras que la energía electrostática entre dos electrones situados a una distancia interatómica entre sí es del orden de 4 eV, el ancho de la banda de conducción es del orden de 3 eV. Luego se esperaría que la interacción electrón-electrón produjera cambios dinámicos significativos cerca de la SF, dando como resultado un cuadro donde el scattering habría borrado la discontinuidad de la distribución de momentum en la SF de los electrones tratados como fermiones independientes.

Sin embargo los experimentos en metales indican la presencia de una discontinuidad con una precisión de 10^{-4} eV, y mediante el efecto de de Haas-van Alphen se ha podido detectar pequeñas hojas de la SF que para algunos metales encierran menos de 10^{-5} electrones por átomo y que aparecen en la forma de bolsillos en las esquinas de la zona de Brillouin⁸⁰.

La conclusión general obtenida de los experimentos es que la noción de SF existe en algún sentido y que el cuadro de electrones independientes puede salvarse si se interpreta de un modo apropiado.

El asunto fue aclarado desde el punto de vista teórico por Migdal ⁸¹ y Luttinger ⁸², quienes mostraron que el tratamiento de partículas independientes es una descripción adecuada con tal que lo que antes se pensaba como un electrón cerca de la SF se imagine ahora como una excitación de vida media muy larga sobre un estado fundamental de muchas partículas, con todas las características propias de una partícula cargada. Esta excitación recibe comunmente el nombre de cuasi-partícula y se habla de cuasi-electrones y cuasi-huecos.

Físicamente los cuasi-electrones pueden visualizarse como un electrón rodeado de una nube de huecos. Un electrón real repele a otros electrones, de modo que es seguido por una nube de carga positiva que apantalla la carga propia y reduce considerablemente la interacción con los otros electrones.

Sea $|\Psi_0^N\rangle \equiv |0^N\rangle$ el estado fundamental exacto de un sistema de N fermiones incluyendo las interacciones y a temperatura cero.

Asociamos al sistema operadores (C_p, C_p^\dagger) de destrucción y creación que satisfacen la estadística de Fermi, es decir con las siguientes reglas de anti-conmutación

$$\{ C_p^\dagger, C_{p'} \} = \delta_{pp'} \quad , \quad (E-1)$$

$$\{ C_p, C_{p'} \} = \{ C_p^\dagger, C_{p'}^\dagger \} = 0 \quad ,$$

en el cuadro de Schrödinger y donde p es un índice que designa el estado (momentum y spin).

En el cuadro de Heisenberg se define la función de Green de una partícula por

$$G(\vec{p}, \tau) \equiv -i \langle T \left(C_{\vec{p}}(\tau) C_{\vec{p}}^\dagger(0) \right) \rangle, \quad (E-2)$$

donde T es el operador de ordenamiento temporal y el paréntesis $\langle \dots \rangle$ denota promedio segun el ensemble gran canónico para $T \neq 0$ y para $T=0$ es el valor de expectación tomado para el estado base exacto.

Las propiedades de las funciones de Green pueden encontrarse en muchos textos ya clásicos sobre el problema de muchos cuerpos ⁸³⁻⁸⁵. A continuación enumeramos algunas de ellas:

1. La función de Green de una partícula puede expresarse en términos de una densidad espectral $A(\vec{p}, \omega)$ (representación de Lehman)

$$G(\vec{p}, p_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A(\vec{p}, \omega) e^{ip_0 \delta}}{p_0 - \omega - i + i\omega\delta} d\omega, \quad (E-3)$$

donde δ es una cantidad infinitesimal positiva.

2. $A(\vec{p}, \omega)$ es positiva y real:

$$A(\vec{p}, \omega) = A^*(\vec{p}, \omega) > 0. \quad (E-4)$$

3. $A(\vec{p}, \omega)$ satisface una regla de suma

$$\int_{-\infty}^{\infty} A(\vec{p}, \omega) d\omega = 1. \quad (E-5)$$

4. Para un sistema de fermiones libres la densidad espectral se expresa por

$$\begin{aligned} A(\vec{p}, \omega) &= (1 - n_{\vec{p}}) \delta(\omega - (\epsilon_{\vec{p}} - \mu)) + n_{\vec{p}} \delta(\omega - (\epsilon_{\vec{p}} + \mu)) \\ &= \delta(\omega - (\epsilon_{\vec{p}} - \mu)), \end{aligned} \quad (E-6)$$

donde μ es el potencial químico.

5. Para el caso que incluye la interacción entre los fermiones esperamos que todavía la función $\Lambda(p, \omega)$ tenga un pico marcado en el eje real cerca de $\bar{\epsilon}_p - \mu$, para que la noción de cuasi-partícula tenga sentido: la interacción cambia la densidad espectral de una función delta de Dirac a una función lorentziana.

Supongamos entonces que $\Lambda(p, \omega)$ tiene un polo simple en $\bar{\epsilon}_p - \mu - i\Gamma_p$, en el plano complejo ω , con residuo $iZ_p/2\pi$. Como $\Lambda(p, \omega)$ es real para ω real, debe haber otro polo simple en $\bar{\epsilon}_p - \mu + i\Gamma_p$ con residuo $(iZ_p/2\pi)^*$.

La expansión según Mittag-Leffler de $\Lambda(p, \omega)$ da

$$\Lambda(p, \omega) = \frac{(iZ_p/2\pi)}{\omega - (\bar{\epsilon}_p - \mu - i\Gamma_p)} + \frac{(iZ_p/2\pi)^*}{\omega - (\bar{\epsilon}_p - \mu + i\Gamma_p)} + \dots$$

(E-7)

+ (otros términos de la expansión en otros polos)

Cuando no hay interacción se tiene

$$Z_p = 1, \quad \Gamma_p \rightarrow 0.$$

(E-8)

Puede demostrarse que $|Z_p| < 1$ para el caso que incluye interacción⁸².

6. El cálculo de la función $G(p, \tau)$, para $\tau > 0$ da⁸⁶

$$G(p, \tau) = iZ_p e^{-i\bar{\epsilon}_p \tau} e^{-\Gamma_p \tau} + \text{Im } Z_p / \{\pi(\bar{\epsilon}_p - \mu)\tau\} \cdot \left(1 + \alpha_p \tau / (\mu - \bar{\epsilon}_p) + \dots \right) - \\
 - (\text{Re } Z_p) \Gamma_p \tau / \{\pi \tau^2 (\bar{\epsilon}_p - \mu)^2\} \cdot \left(1 + \gamma_p \tau / (\mu - \bar{\epsilon}_p) + \dots \right) + \dots$$

$$+ (\text{expansión correspondiente a otros polos}), \quad (\text{E-9})$$

de modo que la descripción simple de cuasi-partícula tiene sentido para tiempos τ tales que

$$(\bar{\epsilon}_p^+ - \mu)^{-1} \ll \tau \approx \Gamma_p^{-1} \quad . \quad (\text{E-10})$$

Γ_p^{-1} se llama el tiempo de vida media de la cuasi-partícula.

7. Puede demostrarse, en base al principio de exclusión de Pauli, que ⁶⁴

$$\Gamma_p^{-1} \propto (p - p_F)^2 \quad (\text{E-11})$$

cerca de la SF. Es decir a medida que la cuasi-partícula se acerca a la SF la vida media se hace muy grande.

8. La transformada de Fourier $G(\vec{p}, \omega)$ tiene ahora la forma

$$G(\vec{p}, \omega) = \frac{Z_p^+}{\omega - (\bar{\epsilon}_p^+ - \mu) + i\Gamma_p^+} \quad . \quad (\text{E-12})$$

Debe distinguirse dos casos:

i) cuasi-electrón, descrito por $p > p_F$, $\bar{\epsilon}_p^+ - \mu > 0$ y $\Gamma_p^+ > 0$. Esto proporciona un polo de $G(\vec{p}, \omega)$ en el cuadrante inferior positivo de la variable compleja ω ;

ii) cuasi-hueco, descrito por $p < p_F$, $\bar{\epsilon}_p^+ - \mu < 0$ y $\Gamma_p^+ < 0$. Esto proporciona un polo de $G(\vec{p}, \omega)$ en el cuadrante superior negativo de la variable compleja ω .

Tomando en cuenta las aproximaciones del punto 5 obtenemos el resultado compacto

$$G(\vec{p}, \tau) = -i\theta(\tau)\theta(p-p_F) \cdot Z_p^\dagger e^{-i(\tilde{\epsilon}_p^\dagger - \mu)\tau} e^{-\Gamma_p^\dagger \tau} + \\ + i\theta(-\tau)\theta(p_F - p) \cdot Z_p^\dagger e^{-i(\tilde{\epsilon}_p^\dagger - \mu)\tau} e^{\Gamma_p^\dagger \tau} . \quad (E-13)$$

La densidad de cuasi-electrones n_p^\dagger se determina en terminos de $G(\vec{p}, \tau)$ como sigue

$$n_p^\dagger = -i \lim_{\tau \rightarrow 0^-} G(\vec{p}, \tau) \quad . \quad (E-14)$$

Si consideramos la expresión (E-13) tendremos

$$n_p^\dagger = \theta(p-p_F) \cdot Z_p^\dagger \quad , \quad (E-15)$$

es decir obtenemos en $p=p_F$ un salto de altura Z_p^\dagger .

En el caso general se obtendrá

$$n_p^\dagger = \theta(p-p_F) \cdot Z_p^\dagger + f(\vec{p}) \quad , \quad (E-16)$$

donde $f(\vec{p})$ es una función continua en $p = p_F$.

Gracias a la discontinuidad de n_p^\dagger en $p = p_F$ es razonable llamar a p_F el momentum en la SF y a μ el nivel de Fermi.

En presencia de un campo eléctrico, la cuasi-partícula se comportará como una partícula cargada. Resta saber la carga efectiva e^* que debe atribuírsele bajo la aplicación del campo. El resultado es que e^* es precisamente e , la carga elemental ⁸⁴.

La interacción de los electrones, sin duda, deformará la SF , pero bajo ciertas condiciones ⁸¹⁻⁸² siempre habrá una discontinuidad en la distribución de momentum para $p = p_F$. Además el número de cuasi-electrones que se puede excitar no puede sobrepasar el número de electrones libres del cuadro inicial sin interacción. Es decir la interacción no cambia el volumen en el espacio \vec{k} encerrado por la SF ⁸².

APENDICE F

Algunos Resultados Exactos para los Modelos del Cap.6.

1. Los valores de saturación de la magnetoresistencia transversal para la órbita (e) de la Fig.27, con $k_{F1} \neq k_{F2}$ (caso parcialmente compensado), pueden darse en forma exacta

$$(\rho_{xx}/\rho_0) = \frac{1 + C \cdot (\tau/\tau_{ef})}{\left(\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}\right) \left[\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} + C \cdot \frac{\tau}{\tau_{ef}} \cdot \frac{k_{F1} - k_{F2}}{k_{F1} + k_{F2}} \right]}, \quad (F-1)$$

$$(\rho_{yy}/\rho_0) = \frac{1 - (8/\pi^2) (\tau/\tau_{ef}) \frac{k_{F1} - k_{F2}}{k_{F1} + k_{F2}} \cdot \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}}{\left(\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}\right) \left[\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} + C \cdot (\tau/\tau_{ef}) \cdot \frac{k_{F1} - k_{F2}}{k_{F1} + k_{F2}} \right]}, \quad (F-2)$$

donde C es una constante del orden de la unidad, dada por

$$C = 2 - 8/\pi^2 = 1.169430531 \quad (F-3)$$

y $n_{1,2} = (2\pi)^{-1} k_{F1,2}$ son las correspondientes densidades para electrones y huecos.

2. Definamos

$$Y \equiv 2\pi/\chi, \quad \chi \equiv \omega_c \tau \quad (F-4)$$

Entonces la función W que aparece en la relación (6-29) se expresa por

$$W = (1+\chi^2)^{-1} \times \tag{F-5}$$

$$\times \frac{(8/\pi)SS'\chi^2(1-e^{-\gamma})(1-\tau/\tau_s)[(1-e^{-\gamma})(S+S')+4e^{-\gamma/2}(1+e^{-\gamma/2})SS']}{\chi(1-\tau/\tau_s)[(1-e^{-\gamma})(S+S')-4e^{-\gamma/2}(1-e^{-\gamma/2})SS'] + (\tau/\tau_s)[(1-e^{-\gamma})+2e^{-\gamma}(S+S')-4e^{-\gamma}SS']}$$

de modo que para el caso $S=1$ ($T=0$), $S'=0$ ($T'=1$) obtenemos

$$\begin{matrix} W \\ S \rightarrow 1 \\ S' \rightarrow 0 \end{matrix} \rightarrow \frac{2\chi}{\pi(1+\chi^2)} \frac{1-e^{-\gamma}}{1+e^{-\gamma}} \left\{ 1 - \frac{\chi(1-e^{-\gamma})/(1+e^{-\gamma})(1-\tau/\tau_s)}{\pi(\tau/\tau_s) + (1-\tau/\tau_s)(1-e^{-\gamma})/(1+e^{-\gamma})} \right\}. \tag{F-6}$$

Para campo magnético pequeño ($\chi \rightarrow 0$) obtenemos los límites

$$\begin{matrix} W \rightarrow 0 \\ \chi \rightarrow 0 \end{matrix}, \quad \begin{matrix} (\rho/\rho_0) \rightarrow 1 \\ \chi \rightarrow 0 \end{matrix}, \tag{F-7}$$

y para campo magnético alto ($\chi \rightarrow \infty$)

$$\begin{matrix} W \sim \\ \chi \rightarrow \infty \end{matrix} \frac{2(\tau/\tau_s)}{\chi^2}, \quad \begin{matrix} (\rho/\rho_0) \rightarrow \\ \chi \rightarrow \infty \end{matrix} 3-2(\tau/\tau_s). \tag{F-8}$$

3. Cuando no hay ruptura magnética, el tensor conductividad para el modelo II de la Fig.27 tiene la forma general

$$\underline{\underline{\sigma}} = e^2 \tau n_1 / [2m(1+\chi^2)] \cdot \begin{vmatrix} 1 & \chi \\ \chi & 1 \end{vmatrix} + e^2 \tau n_2 / [2m(1+\chi^2)] \begin{vmatrix} 1 & \chi \\ -\chi & 1 \end{vmatrix} - \pi |e| \hbar / 2m \cdot (n_1 + n_2) (\tau / \tau_S) \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ \Delta_X & \Delta_Y \end{vmatrix} + \delta \underline{\underline{\sigma}} \quad , \quad (F-9)$$

donde $\delta \underline{\underline{\sigma}}$ es un tensor que se anula en el límite $\chi \rightarrow 0$, y Δ_X y Δ_Y se definen como

$$\Delta \equiv \Delta \uparrow \equiv [\vec{\Delta} \uparrow \cdot \vec{E}] = [\vec{\Delta} \cdot \vec{E}] = -\Delta \downarrow = -[\vec{\Delta} \downarrow \cdot \vec{E}] = \Delta_X \vec{E}_X + \Delta_Y \vec{E}_Y \quad , \quad (F-10)$$

donde Δ es la distribución uniforme de (5-2).

Para campos magnéticos pequeños ($\chi \rightarrow 0$) obtenemos el límite

$$\Delta \xrightarrow{\chi \rightarrow 0} -2 |e| \hbar / 2m \cdot 1 / \pi (\tau / \tau_S) \cdot E_Y \equiv \Delta_Y E_Y \quad . \quad (F-11)$$

Resulta entonces que en el límite $\chi \rightarrow 0$ el tensor conductividad es diagonal

$$\lim_{\chi \rightarrow 0} \underline{\underline{\sigma}} = e^2 \tau (n_1 + n_2) / 2m \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} - \pi |e| \hbar (\tau / \tau_{ef}) (n_1 + n_2) / 2m \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \Delta_Y \end{vmatrix} \quad (F-12)$$

Luego, para el tensor resistividad se obtiene

$$\left(\frac{\rho_{XX}}{\rho_0}\right) \xrightarrow{\chi \rightarrow 0} 1, \quad (\text{F-13})$$

$$\left(\frac{\rho_{YY}}{\rho_0}\right) \xrightarrow{\chi \rightarrow 0} \frac{1 - (\tau/\tau_{ef})}{1 + (\tau/\tau_{ef})}, \quad (\text{F-14})$$

donde

$$\rho_0 \equiv 2m/[e^2\tau(n_1 + n_2)] .$$

REFERENCIAS

1. P. WEISS, J. de Phys. 6, 667 (1907).
2. C. KITTEL y J.K. GALT, Ferromagnetic Domain Theory, en Solid State Physics, Vol.3, editado por F. Seitz y D. Turnbull, Academic Press, New York (1956).
3. P.A.M. DIRAC, Proc. Roy. Soc. A, 123, 714 (1929).
4. W. HEISENBERG, Z. Phys. 49, 619 (1928).
5. F. BLOCH, Z. Phys. 61, 206 (1930).
6. J.C. SLATER, Phys. Rev. 35, 509 (1930).
7. F. BLOCH, Z. Phys. 57, 545 (1929).
8. E.P. WIGNER, Trans. Faraday Soc. 34, 678 (1938).
9. J.C. SLATER, Phys. Rev. 52, 198 (1937).
10. J.C. SLATER, Phys. Rev. 49, 537 y 931 (1936).
11. E.C. STONER, Proc. Roy. Soc. 169A, 339 (1939).
12. C. HERRING, Exchange Interaction among Itinerant Electrons, en Magnetism, Vol. IV, editado por G.T. Rado y H. Suhl, Academic Press, 1966.
13. S. MAKOH y J. YAMASHITA, J. Phys. Soc. Jap. 21, 1712 (1966).
14. R.A. TAMIL y J. CALLAWAY, Phys. Rev. B 7, 4242 (1973).
15. E.T. ZORNBERG, Phys. Rev. B 1, 305 (1970).
16. J. CALLAWAY y C.S. WANG, Phys. Rev. B 7, 1096 (1973).
17. S. MAKOH y J. YAMASHITA, J. Phys. Soc. Jap. 28, 1151 (1970).
18. A.V. GOLD, L. HODGERS, P.T. PANOUSIS y D.R. STONE, Int. J. Magn. 2, 357 (1971).
19. A.V. GOLD, J. Low Temp. Phys. 16, 3 (1974).
20. W. HEISENBERG, Z. Phys. 69, 237 (1931).
21. F. BLOCH, Z. Phys. 74, 295 (1932).
22. L. LANDAU y E.M. LIFSHITZ, Phys. Z. SU 8, 153 (1935).

23. L.D.LANDAU, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. 30, 1058 (1956); Soviet Phys. JETP (traducción inglesa) 3, 920 (1957).
24. L.M.FALICOV y J.RUVALDS, Phys.Rev. 172, 498 (1968).
25. M.SINCH, C.S.WANG y J.CALLAWAY, Phys. Rev.B , Nov. 1974.
26. W.A.REED y E.FANCETT, Phys. Rev. 136, A422 (1964).
27. G.R.TAYLOR, A.ISIN y R.V.COLEMAN, Phys.Rev. 165, 621 (1968).
28. P.W.SHUMATE Jr., R.V.COLEMAN y R.C.FIVAZ, Phys. Rev.B 1, 394 (1970).
30. R.V.COLEMAN, R.C.MORRIS y D.J.SELLMYER, Phys. Rev.B 8, 317 (1973).
31. G.G.CABRERA y L.M.FALICOV, phys. stat. sol. (b) 61, 539 (1974).
32. G.G.CABRERA y L.M.FALICOV, phys. stat. sol. (b) 62, 217 (1974).
33. R.V.COLEMAN, comunicación privada.
34. G.G.CABRERA y L.M.FALICOV, Phys. Rev.B 10, 4803 (1974).
35. R.V.COLEMAN, W.H.LOWREY, R.C.MORRIS y D.J.SELLMYER, Proceedings of Colloquium on Physics in High Magnetic Fields, Grenoble, Francia, Sept. 1974.
36. G.G.CABRERA y L.M.FALICOV, a publicarse en Phys. Rev.B (1975).
37. R.G.CHAMBERS, Proc. Phys. Soc. A 65, 468 (1952).
38. I.M.LIFSHITZ, M.YA.AZBEL' y M.I.KAGANOV, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. 30, 220 (1956) y 31, 63 (1956); traducción inglesa : Soviet Phys. JETP 3, 143 (1956) y 4, 41 (1957).
39. L.M.FALICOV y P.R.SIEVERT, Phys. Rev. 138, A88 (1965).
40. W.MERCOUROFF, La Surface de Fermi des Métaux, Masson, Paris, 1967.
41. L.M.FALICOV, Fermi Surface Studies, en "Electrons in Crystalline Solids", International Atomic Energy Agency, Viena, 1973.

42. A.P.CRACKNELL, The Fermi Surface of Metals, Taylor y Francis, Londres, 1971.
43. W.A.HARRISON y M.B.WEBB, editores, The Fermi Surface, Wiley, New York, 1960.
44. L.M.FALICOV y V.HEINE, Adv. Phys. 10, 57 (1961).
45. N.F.MOTT y H.JONES, The Theory of Properties of Metals and Alloys, Dover, New York , 1958, pag.176.
46. J.M.ZIMAN, Principles of the Theory of Solids, Cambridge University Press, 1972, segunda edición, pag.292.
47. I.M.LIFSHITZ y V.G.PESCHANSKII, Zh. Eksperim. Teor. Fiz. 35, 1251 (1950) y 38, 188 (1960); traducción inglesa: Soviet Phys. JETP 8, 875 (1959) y 11, 137 (1960).
48. N.F.MOTT, Proc. Phys. Soc. 47, 571 (1937); N.F.MOTT y H.JONES, The Theory of the Properties of Metals and Alloys, Dover, N.Y., 1958.
49. H.DANAN, A.HERR y A.J.P.MEYER, J.Appl. Phys. 39, 669 (1968).
50. J.H.WOOD, Phys.Rev. 126, 517 (1962).
51. E.FAWCETT, Adv. in Phys. 13, 139 (1964), A.ISIN y R.V.COLEMAN, Phys. Rev. 137, A1609 (1965); E. FAWCETT y W.A.REED, Proceedings of the International Conference of Magnetism, Nottingham 120, 1964.
52. M.M.ANCADI, E.FAWCETT y M.RASOLT, Phys. Rev. Lett. 32, 613 (1974).
53. L.P.BOUCKAERT, R.SMOLUCHOWSKI y E.P.WIGNER, Phys. Rev. 50, 58 (1936).
54. C.BERRING, J. Franklin Inst. 233, 525 (1942).
55. E.TATSUOTO, Phys. Rev. 109 (1958).
56. L.BERGER y A.R. de VROOMEN, J. Appl. Phys. 36, 2777 (1965).
57. A.V.SCHEMELER y B.C.LARON, J. Appl. Phys. 37, 3610 (1966).
58. R.V.COLEMAN y G.C.SCOTT, Phys. Rev. 107, 1276 (1957); J. Appl. Phys. 29, 526 (1958).

59. A.V.GOLD, J. Appl. Phys. 39, 786 (1968).
60. R.W.STARK y L.M.FALICOV, Magnetic Breakdown in Metals, en Prog. in Low Temperature Physics, Vol.V, editado por C.J.Gorter, North-Holland, Amsterdam, 1967, pag.235.
61. C.ZENER, Proc. Roy. Soc.A 137, 696 (1932).
62. C.ZENER, Proc. Roy. Soc. 145, 523 (1934).
63. M.H.COHEN y L.M.FALICOV, Phys. Rev. Lett. 7, 231 (1961).
64. A.B.PIPPARD, Proc. Roy. Soc.A 270, 1 (1962).
65. W.A.HARRISON, Phys. Rev. 126, 497 (1962).
66. A.S.JOSEPH, W.L.GORDON, J.R.REITZ y T.G.ECK, Phys. Rev. Lett. 7, 334 (1961).
67. E.L.BLOUNT, Phys. Rev. 126, 1636 (1962).
68. C.B.DUKE y W.A.HARRISON, no publicado.
69. P.M.MORSE y H.FESHBACH, Methods of Theoretical Physics, Vol.1, Mc Graw-Hill Book Co., New York, 1953, pag.605.
70. J.M.ZIMAN, Principles of the Theory of Solids, Cap.9, Segunda Edición, Cambridge, 1972.
71. R.W.STARK, T.G.ECK y W.L.GORDON, Phys. Rev. 133, A443 (1964) y referencias citadas allí.
72. R.W.STARK, Phys. Rev. 135, A 1698 (1964).
73. A.B.PIPPARD, Proc. Roy. Soc.A 287, 165 (1965).
74. L.M.FALICOV, A.B.PIPPARD y P.R.SIEVERT, Phys. Rev. 151, 498 (1966).
75. C.E.T.GONÇALVES da SILVA y L.M.FALICOV, Phys. Rev.B 8, 527 (1973).
76. R.W.KLAPFKY y R.V.COLEMAN, a ser publicado en Phys. Rev.B.
77. J.M.WINTER, Phys. Rev. 124, 452 (1961).
78. D.SHOENBERG, Electronic Structure: The Experimental Results, en "The

Physics of Metals. 1: Electrons ", editado por J.M.Ziman, Cambridge, 1969.

79. C.KITTEL, Quantum Theory of Solids, Cap.9, John Wiley & Sons, New York, 1963.
80. D.SHOENBERG, Prog. Low Temp. Phys. 2, 226 (1957).
81. A.B.MIGDAL, Soviet Phys. JETP, 5, 333 (1957).
82. J.M.LUTTINGER, Phys. Rev. 119, 1153 (1960).
83. J.R.SCHRIBER, Theory of Superconductivity, Benjamin, 1964, Cap.5.
84. A.A.ABRIKOSOV, L.P.GORKOV y I.E.DZYALOSHINSKII, Method of Quantum Field Theory in Statistical Physics, Prentice Hall, New York, 1963.
85. A.L.PETTER y J.D.WALECKA, Quantum Theory of Many-Particles Systems, Mc Graw Hill, 1971.
86. T.D.SCHULTZ, Quantum Field Theory and the Many-Body Problem, Gordon and Breach, 1964.