

MAGNETORRESISTENCIA EN PELÍCULAS DELGADAS DE ORO

Tesis
Entregada A La
Universidad De Chile
En Cumplimiento Parcial De los Requisitos
Para Optar Al Grado De
Magíster en Ciencias con mención en Física
Facultad de Ciencias

Por

Ana Maria Moncada Arce



Diciembre, 2006

Director de Tesis:

Dr. Raúl Muñoz

UCH-FC
MAG-F
M825
c. 1

FACULTAD DE CIENCIAS

UNIVERSIDAD DE CHILE

INFORME DE APROBACIÓN

TESIS DE MAGISTER

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

ANA MARÍA MONCADA ARCE

Ha sido aprobada por la comisión de Evaluación de la tesis como requisito para optar al grado de Magíster en Ciencias con mención en Física, en el examen de Defensa de Tesis rendido el día 19 de diciembre de 2006

Director de Tesis:

Dr Raúl Muñoz

Comisión de Evaluación de la Tesis

Dr Luis Moraga

Dr Gonzalo Gutiérrez

Dr Víctor Fuenzalida

Dr Patricio Häberle



Ana María Moncada Arce

Nace en Santiago el 12 de marzo del 1978. Ingresó a la Universidad de Chile al plan común de Ingeniería Civil en 1996, se encanta con la matemática, la física y la educación. Posteriormente ingresó al programa de Magíster en Ciencias con mención en Física en la Facultad de Ciencias.

Sus intereses personales son el cine, la literatura, el Kung Fu, la animación y los bosques lluviosos.

Agradecimientos:

A mi familia poco convencional, en especial a mi abuela que se hizo cargo de *tres* niños
y a Manuel que con sus proyectos me motiva a buscar y crear.

A mis amigos, en especial a Ricardo y Camel, testigos de mis primeros pasos en
matemática y compañeros en interminables jornadas de estudio y trabajo, uno buen
conversador y sabio consejero, el otro, siempre presente.

A mis profesores Raúl Muñoz y Víctor Fuenzalida.

Al financiamiento de los proyectos Fondecyt 1010481 y 1040723

INDICE DE MATERIAS

1.	Introducción	1
2.	Materiales y métodos	4
2. 1	Preparación de las muestras	4
2. 2	Caracterización de las muestras	8
3.	Resultados	11
3. 1	Resistividad en función de la temperatura	12
3. 2	Magnetorresistencia longitudinal, E paralelo B, ambos campos contenidos en el plano de la película (configuración 1)	13
3. 3	Magnetorresistencia transversal II, E y B perpendiculares contenidos en el plano de la película (configuración 3 o MacDonald)	16
4.	Discusión	19
4. 1	Ecuación de Boltzmann	19
4. 1. 1	Aproximación del tiempo de relajación	20
4. 2	Resistividad	22
4. 2. 1	Resistividad de un monocristal metálico: teoría de Bloch-Grüneisen	22
4. 2. 2	Resistividad de una película metálica delgada	23
4. 3	Magnetorresistencia	24
4. 3. 1	Solución de la ecuación de Boltzmann por el método de las curvas características	25
4. 3. 2	Colisión entre electrones y una superficie rugosa	26
4. 3. 3	Magnetorresistencia longitudinal, inducida por colisión de electrones y una superficie rugosa	29
4. 3. 4	Comparación entre teoría y experimento	33
4. 4	Magnetorresistencia en la configuración MacDonald	41
4. 5	Conclusiones	42
5.	Bibliografía	43
6.	Apéndice 1	46
7.	Apéndice 2 (programas)	50

LISTA DE FIGURAS

Figura 1:	Configuración 1, Magnetorresistencia Longitudinal	2
Figura 2:	Configuración 2, Magnetorresistencia Transversal caso I	2
Figura 3:	Configuración 3 (MacDonald), Magnetorresistencia Transversal, caso II	3
Figura 4:	Máscara utilizada para preparar películas de oro La región rectangular es de 2.5 mm x 11 mm	5
Figura 5:	Sistema de evaporación	7
Figura 6:	Espectro RBS de una película de oro evaporada sobre mica	9
Figura 7:	Resistividad en función de la temperatura	12
Figura 8:	Resistividad en función del campo magnético para la configuración 1	13
Figura 9:	Magnetorresistencia longitudinal en función del campo magnético, para cada temperatura.	14
Figura 10:	Magnetorresistencia longitudinal en función de la temperatura, para cada campo magnético	15
Figura 11:	Resistividad en función del campo magnético para la configuración MacDonald	16
Figura 12:	Magnetorresistencia transversal II en función del campo magnético, para cada temperatura	17
Figura 13:	Magnetorresistencia transversal II en función de la temperatura, para cada campo magnético	18
Figura 14:	Trayectoria de un electrón en ausencia de campo magnético, $B = 0$	27
Figura 15:	Trayectorias de un electrón en presencia de campo magnético, $B \neq 0$	27
Figura 16:	Caso 1 (el electrón choca con ambas superficies), k_z positivo	28
Figura 17:	Caso 1 (el electrón choca con ambas superficies), k_z negativo	28
Figura 18:	Caso 2 (el electrón sólo choca con la superficie inferior $z = 0$), k_z positivo.	29
Figura 19:	Esquema en que la trayectoria de un electrón intersecta ambos planos de la película	30

Figura 20:	Esquema en que la trayectoria de un electrón interseca uno de los planos de la película	31
Figura 21:	Ajuste de la teoría de Way y Kao a 4 K, con $p_0 = 0.9$	35
Figura 22:	Resistividad en función de la temperatura, con los parámetros α , $p_0 = 0.9$ y p_d que ajustan la magnetorresistencia a 4 K	36
Figura 23:	Magnetorresistencia en función del campo magnético, para $p_0 = 1$, α que ajusta la resistividad a 4 K ($\rho(4)$) para distintos p_d	38
Figura 24:	Magnetorresistencia en función del campo magnético, para $p_0 = 0.9$, α que ajusta la resistividad a 4 K ($\rho(4)$) para distintos p_d	38
Figura 25:	Mejor ajuste de resistividad ($\rho(4)$) y magnetorresistencia, con $p_0 = 0.9$ y $p_d = 0.2$	39

RESUMEN

Este trabajo da cuenta de la medición de magnetorresistencia longitudinal (campo eléctrico paralelo al campo magnético) y la magnetorresistencia en la configuración MacDonal (campo eléctrico perpendicular al campo magnético, ambos contenidos en el plano de la muestra), en películas de oro (con una pureza inicial antes de la depositación de un 99,9999%) depositadas en una cámara de alto vacío sobre sustratos de mica, de espesores: 69 nm, 93 nm, 150 nm, 185 nm.

La importancia de este trabajo radica en el hecho de que, tanto la magnetorresistencia longitudinal como la magnetorresistencia en la configuración de MacDonald, aumentan con el espesor de la muestra. Por lo tanto, estos experimentos confirman que la magnetorresistencia en ambos casos está determinada por el proceso de scattering electrón - superficie rugosa.

SUMMARY

This work presents the measurement of longitudinal magnetoresistance (electric field parallel to the magnetic field) and the measurement of the magnetoresistance in the MacDonald's configuration (electric field perpendicular to the magnetic field, both in the plane of the film), of gold films (purity before deposition of 99.9999%) deposited in high vacuum on mica substrates, with different thickness (69 nm, 93 nm, 150 nm and 185 nm).

The importance of this work is that, the longitudinal magnetoresistance and the magnetoresistance in the MacDonald's configuration turn out increase with increase film thickness. Therefore, these experiments confirm that the magnetoresistance in both cases is determined by the process of electron-rough surface scattering.

1 INTRODUCCIÓN

Uno de los problemas importantes en Física del Sólido es el efecto que la dispersión de electrones por una superficie rugosa, tiene sobre las propiedades de transporte de una película metálica delgada. Interesa entender de qué manera la superficie rugosa, que limita la estructura metálica, afecta las propiedades de transporte de carga de la estructura cuando una o más de las dimensiones que caracterizan la estructura metálica se torna comparable o inferior al camino libre medio de los portadores de carga en el cristal. Los fenómenos que resultan de las condiciones descritas anteriormente se conocen como “efectos de tamaño”. En películas delgadas, donde sólo el espesor es comparable o menor al camino libre medio de los portadores de carga, la idea de que el scattering electrón-superficie rugosa conduce a un aumento de la resistividad es ampliamente aceptada.

Al introducir un campo magnético en una película delgada, la trayectoria de los portadores de carga entre eventos de scattering se curva. Luego, se espera que la frecuencia con que la trayectoria de los portadores es intersectada por la superficie rugosa sea distinta que en ausencia de campo magnético. El cambio en la resistencia debido a la presencia de un campo magnético se conoce como magnetorresistencia y, a diferencia de lo que ocurre con la resistividad, su relación con los efectos de tamaño en películas delgadas no magnéticas aparece en pocas publicaciones a la fecha. Hay tres

casos que podemos diferenciar en magnetorresistencia, suponiendo que (x,y) es el plano de la película delgada.

1. Magnetorresistencia longitudinal. En este caso, el campo magnético es paralelo al campo eléctrico y ambos están contenidos en el plano de la película; es decir:

$$\vec{E} = (E,0,0) \text{ y } \vec{B} = (B,0,0)$$

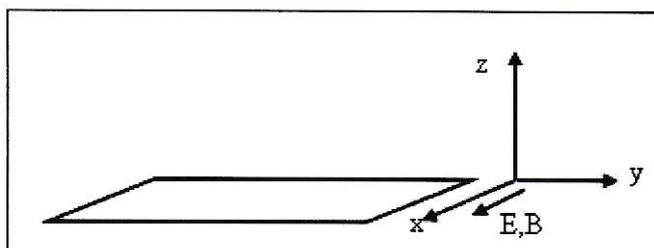


Figura 1: Configuración 1, Magnetorresistencia Longitudinal,

2. Magnetorresistencia transversal caso I. En este caso, el campo magnético \vec{B} es perpendicular al plano de la película, es decir: $\vec{E} = (E_x, E_y, 0)$ y $\vec{B} = (0, 0, B)$

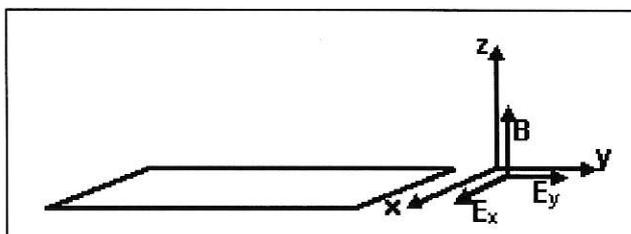


Figura 2: Configuración 2, Magnetorresistencia Transversal caso I

3. Magnetorresistencia transversal caso II. Aquí, los campos son perpendiculares y ambos están contenidos en el plano de la película, es decir: $\vec{E} = (0, E, 0)$ y $\vec{B} = (B, 0, 0)$. Esta configuración se conoce como la de MacDonald.

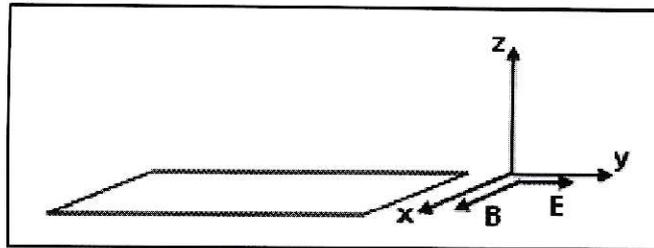


Figura 3: Configuración 3 (MacDonald), Magnetorresistencia Transversal, caso II

Cabe hacer notar que, clásicamente, en un metal cristalino dotado de una superficie de Fermi esférica, por razones de simetría, tanto la señal de magnetorresistencia longitudinal (campo eléctrico \mathbf{E} paralelo al campo magnético \mathbf{B}) como la magnetorresistencia transversal (\mathbf{E} perpendicular a \mathbf{B} , \mathbf{B} perpendicular al plano de la muestra) son nulas; $\Delta\rho = 0$ [1].

La búsqueda bibliográfica revela que sólo para el segundo caso hay una discusión más acabada del tema. Para los otros casos existen pocas publicaciones [2]-[6], y para ambas configuraciones hay una formulación teórica más reciente[7]. Si bien existen trabajos experimentales publicados al respecto [8]-[13], las predicciones teóricas formuladas no han sido sometidas a verificación experimental. Probablemente se debe a que los experimentos requieren películas delgadas de alta calidad, en donde el scattering de electrones debido a impurezas, bordes de grano, dislocaciones, etc. no enmascare el efecto del scattering electrón-superficie rugosa [14],[15]. En este trabajo, se mide la magnetorresistencia longitudinal y la magnetorresistencia transversal (caso II) de películas delgadas de oro depositadas sobre mica, es decir, en las configuraciones 1 y 3.

2 MATERIALES Y METODOS

2.1 Preparación de las muestras

Para la fabricación de las muestras, es necesario tener presente que:

- Las películas son fabricadas, almacenadas y medidas en lugares distintos con diferentes equipos y personas, lo que requiere que sean fácilmente manipulables y que no se oxiden al contacto con la atmósfera.
- Se necesitan muestras en que los efectos de tamaño dominen la señal de magnetorresistencia.

Finalmente se optó por películas de oro evaporadas sobre mica. La pureza del oro a evaporar es de 99,9999% y la mica usada como sustrato es de alta calidad, de manera que la superficie en la cual se deposita el oro es atómicamente plana excepto por pasos de clivaje que están separados por distancias que son órdenes de magnitud más grandes que el camino libre medio de los electrones en el cristal. Esto último garantiza que el sustrato no aporta resistividad vía scattering electrón-superficie rugosa en su interfaz con el oro. Para evaporar la muestra se diseñó una máscara con la siguiente forma, de modo que fuera fácil medir la resistividad y el efecto Hall de manera simultánea.

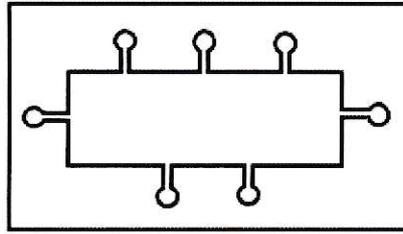


Figura 4: Máscara utilizada para preparar películas de oro.

La región rectangular es de 2.5 mm x 11 mm.

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

Para encontrar las condiciones óptimas de la evaporación, se realizó un trabajo de exploración en un sistema de Alto Vacío (presión del orden de 10^{-5} Pa) provisto de una bomba difusora Edwards con trampa de nitrógeno. A éste sistema se le hicieron las siguientes modificaciones:

1. Para evaporar oro usamos un canastillo de tungsteno, también se probó con un bote de tungsteno. Sin embargo, el bote elevaba demasiado la temperatura del sustrato.
2. La distancia entre el canastillo y la muestra se fijó en 30 cm, con lo cual se asegura una homogeneidad en la evaporación del oro sobre la mica. Para satisfacer este criterio se reemplazó la campana de evaporación existente, por un tubo de Pirex de 45 cm de longitud.

3. Sobre el canastillo (evaporador) se montaron dos pantallas. La primera de ellas con un orificio al medio, con objeto de evitar el aumento de temperatura del portamuestra por radiación desde el evaporador. La segunda pantalla funciona como obturador, lo que nos permite comenzar la evaporación (abrir el obturador) sobre el portamuestra una vez estén presentes las condiciones necesarias y terminar dicha evaporación (cerrar el obturador) cuando se estime conveniente.
4. Se instaló una microbalanza de cuarzo a la misma altura que el portamuestra, para medir la cantidad de oro evaporado y la tasa de depositación.
5. La trampa de nitrógeno, cuya pared inferior es un disco de cobre de 6 mm de espesor, permite alcanzar una presión menor que la de la bomba difusora por sí sola, manteniendo el ambiente más libre de impurezas durante la evaporación. Para lograr una temperatura variable entre $-190\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $300\text{ }^{\circ}\text{C}$ sobre el sustrato, se utilizó un segundo disco de cobre provisto de 2 calefactores. Este segundo disco de cobre se montó bajo el disco de cobre que constituye la pared inferior de la trampa de nitrógeno y se encuentra separado de aquel por argollas de macor. Entre el sustrato y la máscara se coloca un termopar conectado a un control de temperatura que regula la potencia entregada a los calefactores. Con esto logramos una variación de a lo más $2\text{ }^{\circ}\text{C}$ durante la evaporación y el recocido de la muestra.
6. Se construyó un sistema que permite preevaporar contactos, lo que permite medir la resistividad in situ, a medida que va creciendo la película.

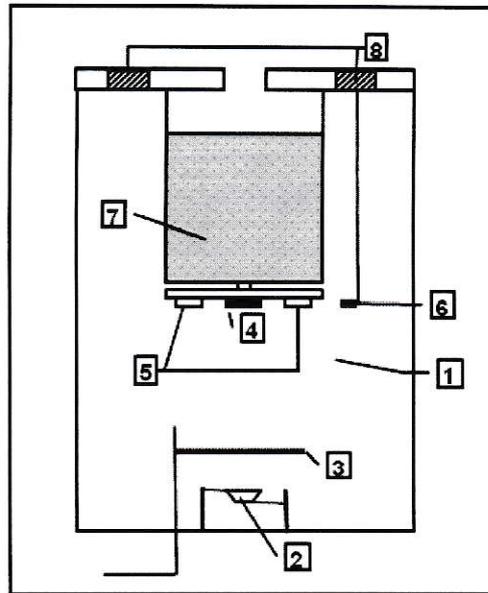


Figura 5: Sistema de evaporación. 1- Vacío. 2- Canastillo. 3- Pantalla. 4- Portamuestra
5- Calefactores 6- Balanza de cuarzo 7- Trampa de nitrógeno 8- Pasamuros.

Con las modificaciones anteriores se fabricaron más de cincuenta películas. Se variaron la temperatura del sustrato entre $-190\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $300\text{ }^{\circ}\text{C}$ durante la evaporación y la temperatura del recocido posterior, hasta determinar las condiciones óptimas de preparación.

Posteriormente, se hizo un pequeño barrido en torno a las condiciones encontradas, cambiando el sistema de vacío, a uno de Ultra Alto Vacío. Este sistema está provisto de una bomba iónica y una bomba turbomolecular, y la evaporación se realiza mediante un cañón de electrones. Con esto, la presión durante la evaporación es de 10^{-7} Pa (dos órdenes de magnitud menor que en el sistema de Alto Vacío), no existiendo contaminación por aceite de bomba difusora y la fuente de evaporación es más puntual (la zona de evaporación que produce el haz de electrones es mucho menor que la producida por el canastillo de tungsteno). Sin embargo, la resistividad de las películas en este sistema resultó *tres veces superior* a la de las películas evaporadas en

un sistema de Alto Vacío bajo iguales condiciones de temperatura de sustrato, temperatura de recocido, tasa de depositación y espesor.

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

- a. Temperatura de Sustrato: entre 180°C y 270 °C.
- b. Recocido: Terminada la evaporación, durante una hora a 270 °C.
- c. Tasa de depositación: 3 nm/min.
- d. Vacío: Alto Vacío con doble trampa de nitrógeno, con 10^{-5} Pa al comienzo de la evaporación.

De esta forma se fabricaron 4 películas de 185, 150, 93 y 69 nm, cuyas resistividades a temperatura ambiente son entre 5 y 30 % más altas que las del cristal ($\rho_{EL-PH}(295) = 22.5 \text{ n}\Omega\text{-m}$), a la misma temperatura.

2.2 Caracterización de las muestras

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

Para medir el espesor empleando el método Tolansky, se evaporó un escalón de oro sobre vidrio simultáneamente a la evaporación de la película. Posteriormente se evaporó plata encima del escalón. Luego, con una lámpara de sodio, se hace incidir un haz de luz sobre un espejo semitransparente y el haz que atraviesa se refleja en la plata del escalón. Así, se forman líneas de interferencia constructiva, las que pueden ser vistas nítidamente con un microscopio óptico. Observando las franjas de interferencia se determina la altura del escalón.

Para medir el espesor empleando RBS, se hace incidir un haz de partículas α de 2 MeV sobre la película de oro, usando un acelerador Van der Graaff, y se analizan la energía y el número de partículas que rebotan a 165° de la dirección incidente. Ajustando la curva de número de cuentas en función de energía, se puede determinar el espesor con un error menor al 5%.

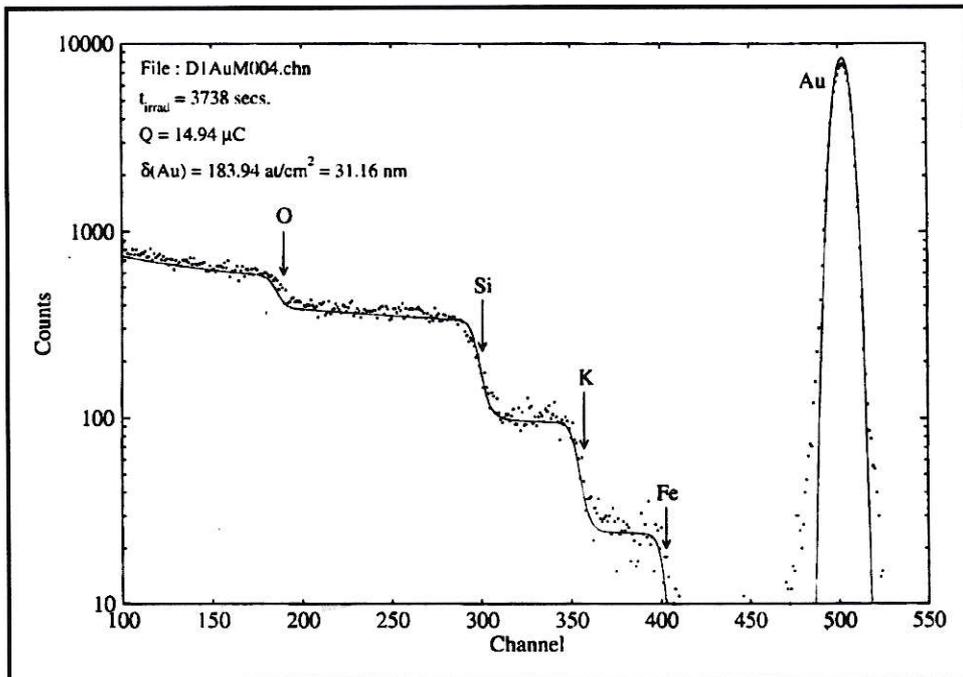


Figura 6: Espectro RBS de una película de oro evaporada sobre mica

Las muestras fueron sometidas a campos magnéticos entre 0 y 9 T orientado como se muestran en las configuraciones 1 y 3 (ver Figura 1 y Figura 3), para esto se usó un imán superconductor construido por Janis Research. El diseño del solenoide garantiza una uniformidad del campo magnético de $\pm 0,5\%$ sobre una esfera de 1 cm de diámetro localizada en el centro de éste. La temperatura de las muestras se varió entre 4 y 50 K con las muestras situadas en el centro del solenoide. El control de temperatura permite mantener la temperatura con una precisión de $\pm 0,1$ K.

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

Se realizaron difractogramas de rayos X de cada muestra, con un difractómetro de Rayos X Siemens D-5000. Los difractogramas obtenidos operando el equipo en el modo θ - 2θ muestran un pico en $2\theta = 38,314^\circ$, que corresponde a la reflexión $\langle 111 \rangle$ del oro. La intensidad de la señal de rayos X obtenida en el modo θ - 2θ es comparable a la obtenida operando el equipo en el modo Rocking-Curve. La evidencia anterior coincide con lo señalado en numerosos trabajos, en donde se concluye que las películas están constituidas por granos que coalescen y crecen de manera tal que la dirección $\langle 111 \rangle$ es perpendicular a la superficie de la mica[16].

3 RESULTADOS

Los resultados se presentan en gráficos de:

- Resistividad ρ en función de la temperatura: $\rho(T, B)$ con B constante
- Resistividad ρ en función del campo magnético B : $\rho(T, B)$ con T constante
- Magnetorresistencia $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ en función del campo magnético para cada temperatura T :

$$\frac{\Delta\rho}{\rho}(T, B) = \frac{\rho(T, B) - \rho(T, 0)}{\rho(T, 0)}, \text{ con } T \text{ constante y}$$

- Magnetorresistencia $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ en función de la temperatura T para cada campo

$$\text{magnético } B: \frac{\Delta\rho}{\rho}(T, B) = \frac{\rho(T, B) - \rho(0, B)}{\rho(0, B)} \text{ con } B \text{ constante}$$

Para cada una de las configuraciones propuestas.

3.1 Resistividad en función de la temperatura

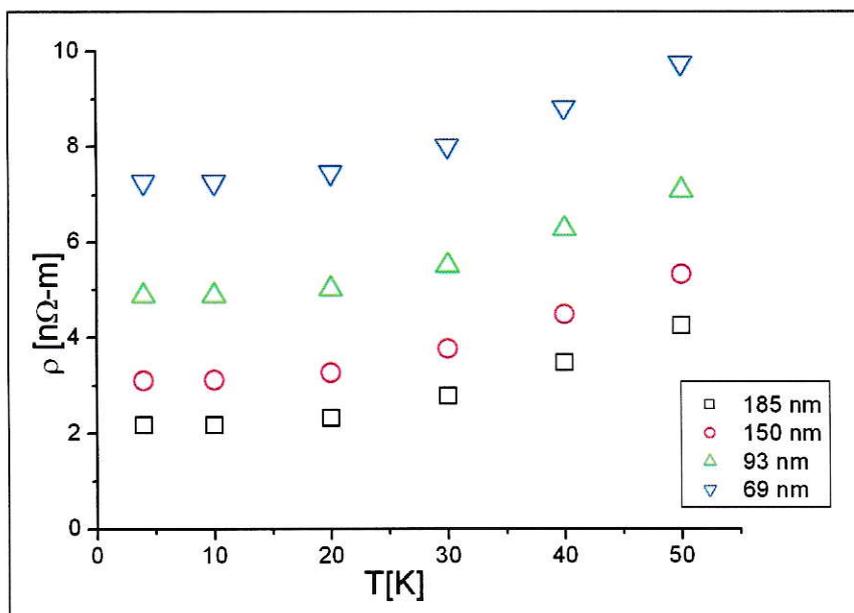


Figura 7: Resistividad en función de la temperatura

- La resistividad se ordena según espesores, siendo la película más delgada la más resistiva.

3.2 Magnetorresistencia Longitudinal, E paralelo B, ambos campos contenidos en el plano de la película (Configuración 1).

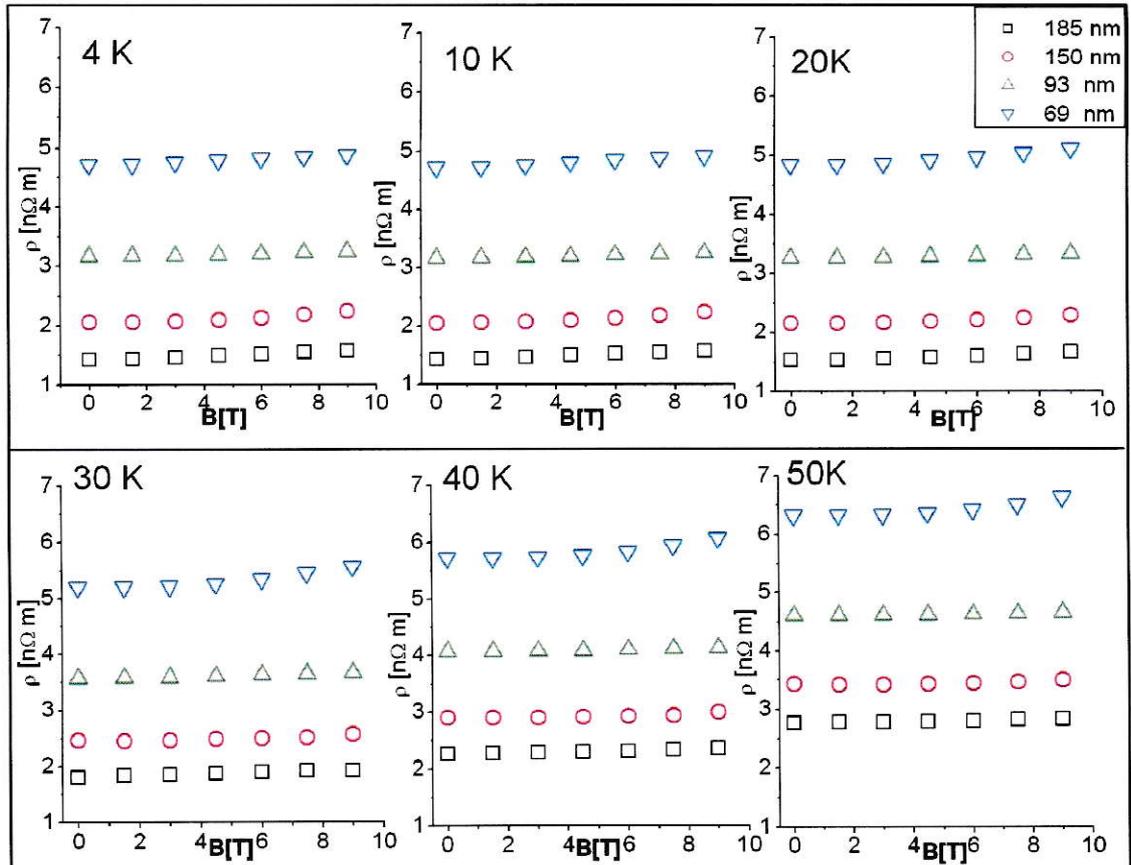


Figura 8: Resistividad en función del campo magnético para la configuración 1

- La resistividad en función del campo magnético se ordena según espesores y aumenta con la temperatura

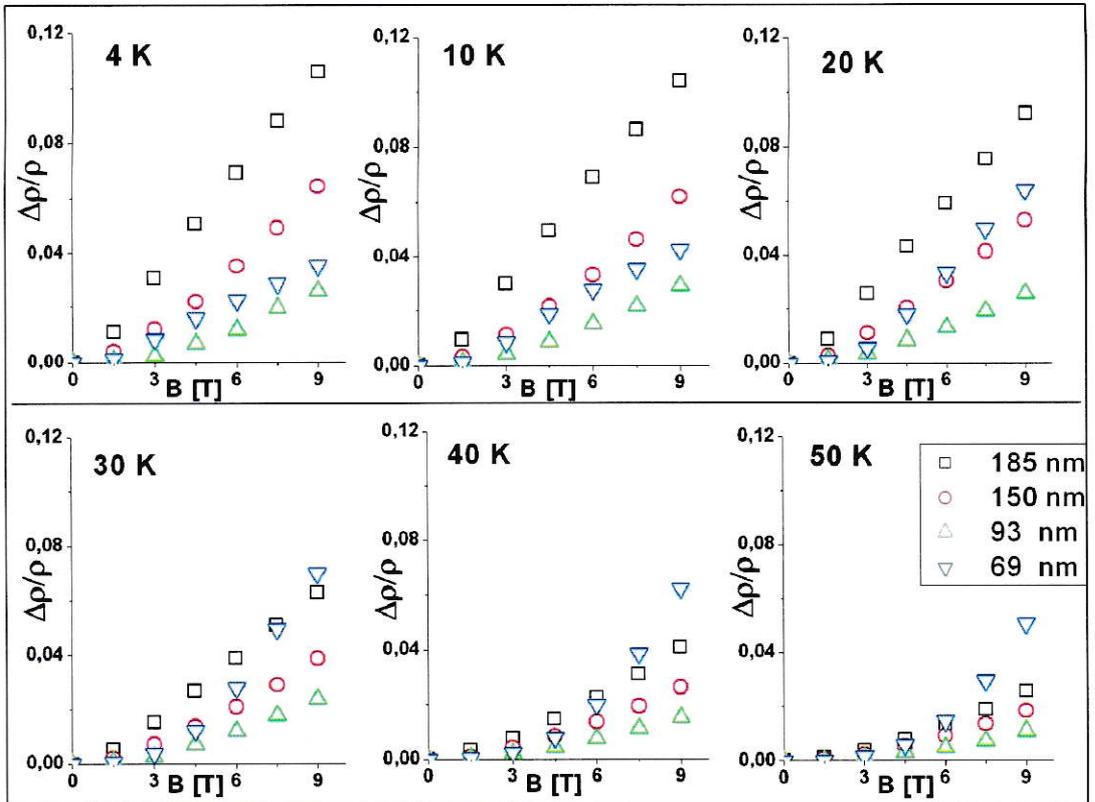


Figura 9: Magnetorresistencia longitudinal en función del campo magnético, para cada temperatura.

- La magnetorresistencia $\frac{\Delta\rho}{\rho}(T, B)$ con T constante (definida al inicio del capítulo), crece al aumentar el espesor de la película.
- En tres de las muestras este comportamiento es lineal en el intervalo observado y en la película más delgada es exponencial

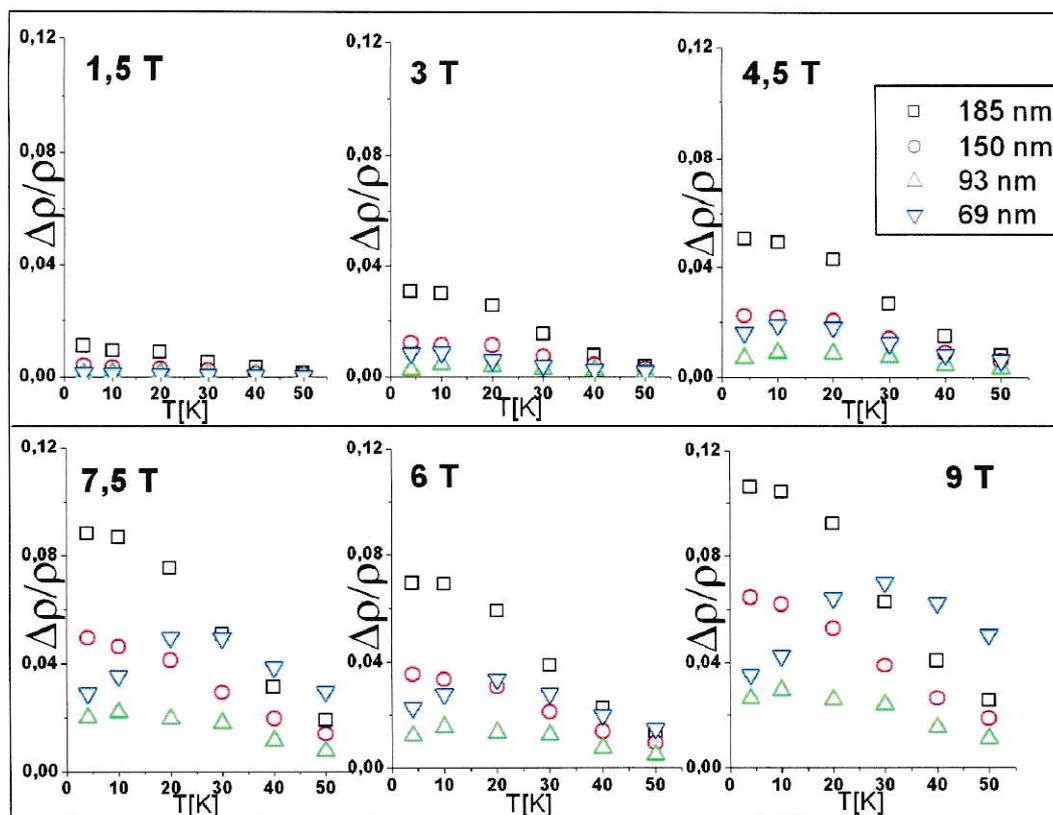


Figura 10: Magnetorresistencia longitudinal en función de la temperatura, para cada campo magnético.

- El efecto de magnetorresistencia se pierde con el aumento de la temperatura.
- La película más delgada exhibe máximos de magnetorresistencia a temperaturas que son crecientes con el campo magnético.

3.3 Magnetoresistencia Transversal II, E y B perpendiculares contenidos en el plano de la película (configuración 3 o MacDonald).

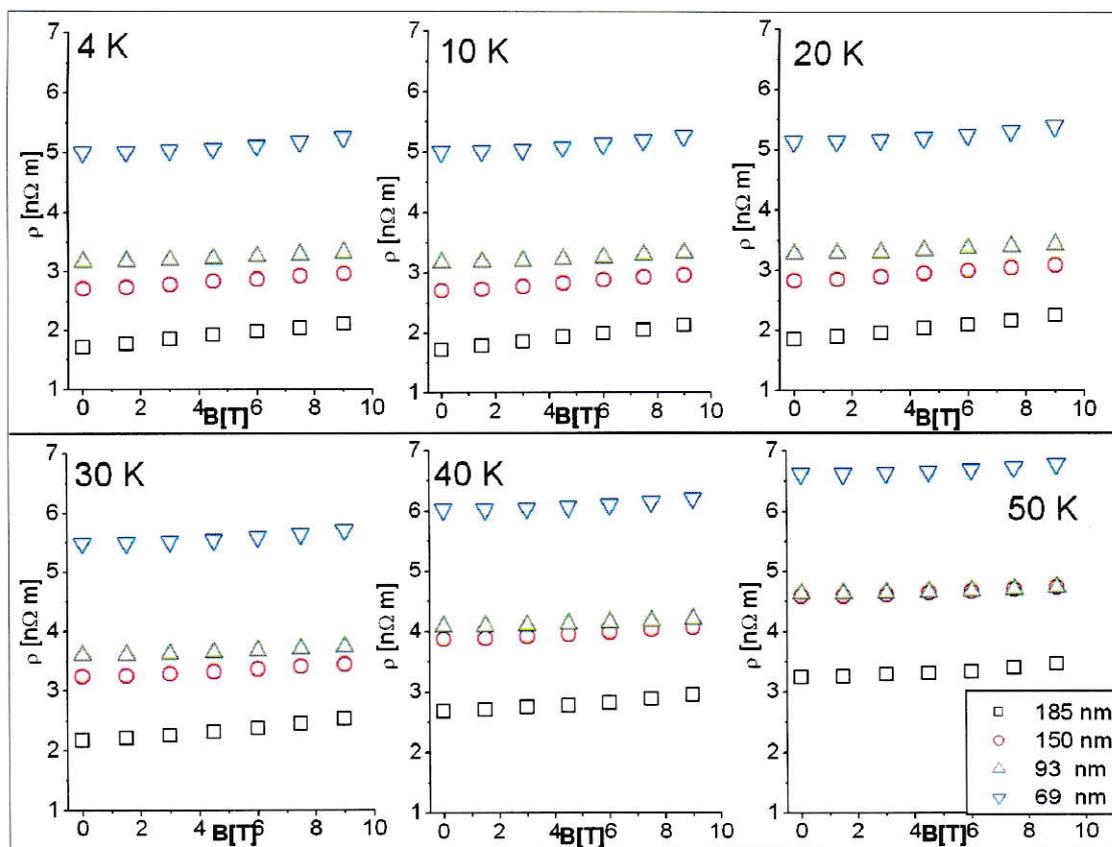


Figura 11: Resistividad en función del campo magnético para la configuración MacDonald

- La resistividad en función del campo magnético se ordena según espesores a 4 K.
- La resistividad para la película de 93 nm tiene una tasa de crecimiento mayor que el de las otras muestras.

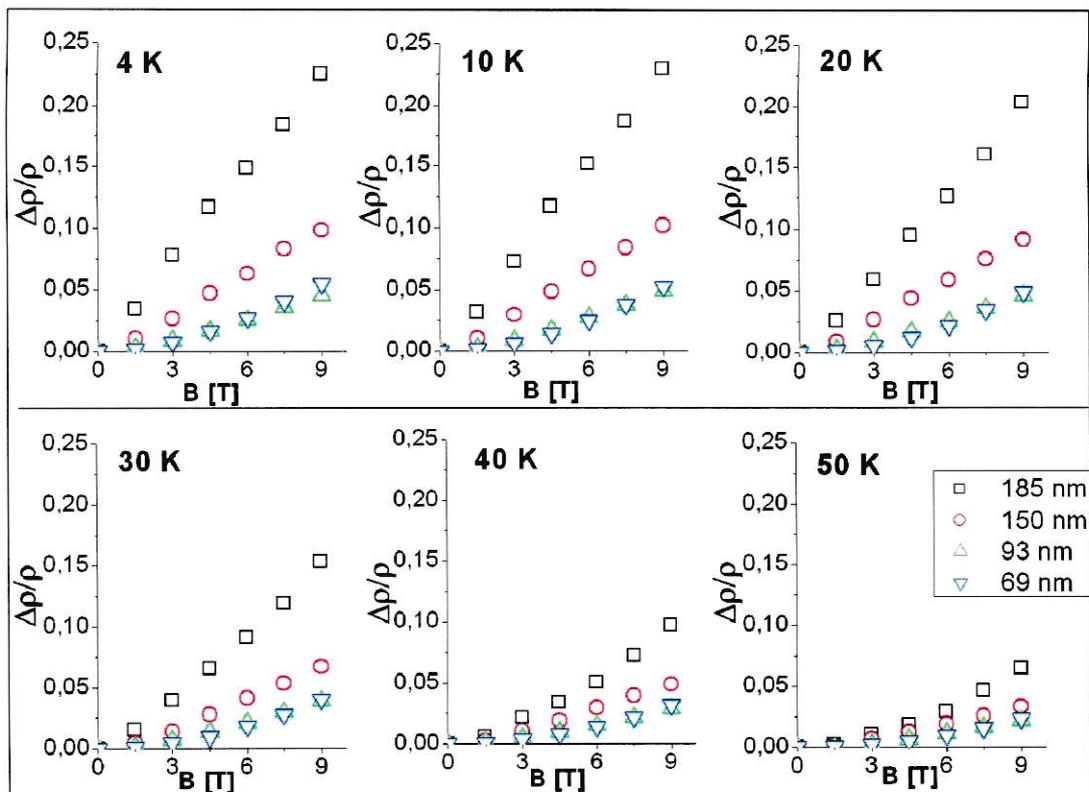


Figura 12: Magnetorresistencia transversal II en función del campo magnético, para cada temperatura.

- La magnetorresistencia crece con el espesor de la muestra
- La película de 93 nm, presenta un comportamiento muy similar a la de 69 nm.

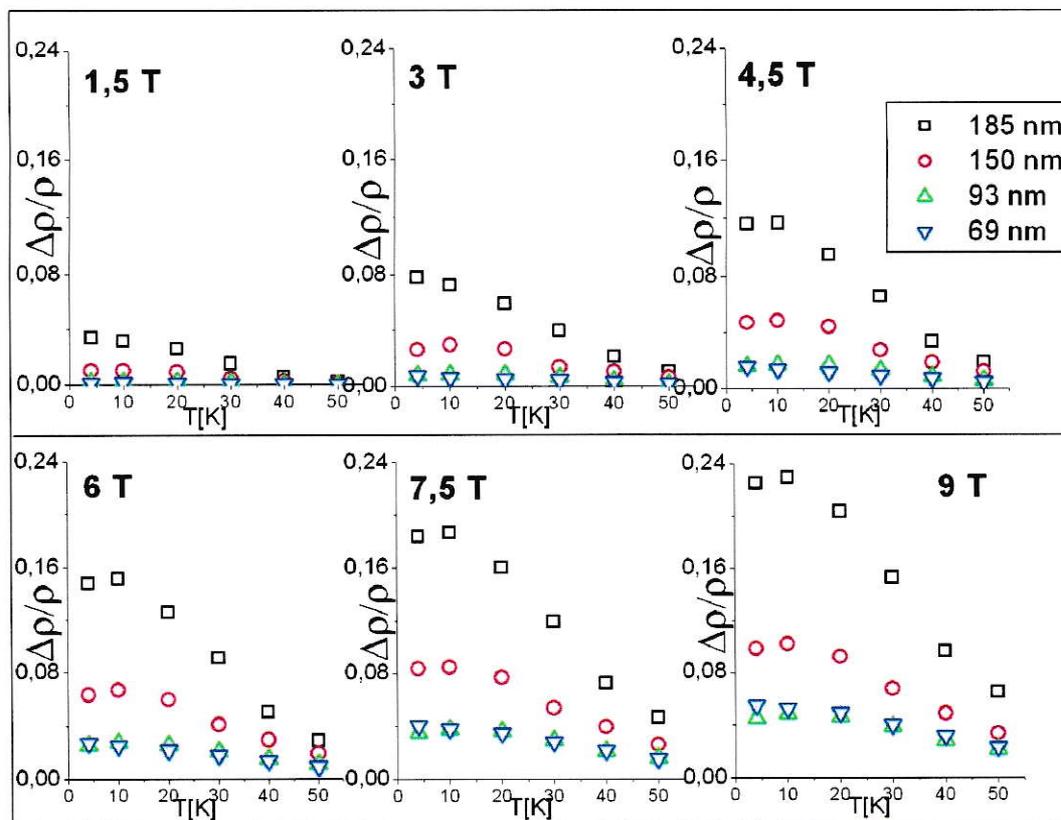


Figura 13: Magnetorresistencia transversal II en función de la temperatura, para cada campo magnético.

- El efecto de magnetorresistencia se pierde con el aumento de la temperatura.
- La película de 93 nm no sigue el comportamiento de las otras muestras.

4 DISCUSIÓN

Para iniciar la discusión es pertinente mencionar una de las teorías que predice la aparición de magnetorresistencia longitudinal debido al scattering electrón-superficie rugosa. Puesto que el tratamiento teórico del problema está basado en la ecuación de Boltzmann, parece apropiado describir brevemente este formalismo.

4.1 Ecuación de Boltzmann

Uno de los formalismos utilizados para calcular las propiedades de transporte es la ecuación de transporte de Boltzmann

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{CAMPOS} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{COLISIONES} \quad (1)$$

Ésta es una ecuación clásica, donde f representa la función distribución de un gas de partículas puntuales. El lado izquierdo representa la tasa de cambio de la función de distribución debido a campos externos, y el lado derecho, la tasa de cambio debido a colisiones. Este último término lo podemos escribir, en función de $T(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$, la probabilidad por unidad de tiempo de que una partícula con velocidad \mathbf{v} después de colisionar adquiera una velocidad \mathbf{v}' . Para procesos de scattering elástico que satisfacen el principio de balance detallado el operador $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{COLISIONES}$ puede escribirse como:

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{v})}{\partial t}\right)_{COLISIONES} = \int d^3\mathbf{v}' T(\mathbf{v}, \mathbf{v}') (f(\mathbf{v}') - f(\mathbf{v})) \quad (2)$$

4 DISCUSIÓN

Para iniciar la discusión es pertinente mencionar una de las teorías que predice la aparición de magnetorresistencia longitudinal debido al scattering electrón-superficie rugosa. Puesto que el tratamiento teórico del problema está basado en la ecuación de Boltzmann, parece apropiado describir brevemente este formalismo.

4.1 Ecuación de Boltzmann

Uno de los formalismos utilizados para calcular las propiedades de transporte es la ecuación de transporte de Boltzmann

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{CAMPOS}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{COLISIONES}} \quad (1)$$

Ésta es una ecuación clásica, donde f representa la función distribución de un gas de partículas puntuales. El lado izquierdo representa la tasa de cambio de la función de distribución debido a campos externos, y el lado derecho, la tasa de cambio debido a colisiones. Este último término lo podemos escribir, en función de $T(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$, la probabilidad por unidad de tiempo de que una partícula con velocidad \mathbf{v} después de colisionar adquiera una velocidad \mathbf{v}' , Para procesos de scattering elástico que satisfacen

el principio de balance detallado el operador $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{COLISIONES}}$ puede escribirse como:

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{v})}{\partial t}\right)_{\text{COLISIONES}} = \int d^3 \mathbf{v}' T(\mathbf{v}, \mathbf{v}') (f(\mathbf{v}') - f(\mathbf{v})) \quad (2)$$

donde $f(\mathbf{v})$ es la función de distribución, proporcional a la densidad de partículas que viajan con velocidad \mathbf{v} .

Para aplicar esta ecuación a electrones que se mueven en un sólido cristalino, se considera que los efectos cuánticos no son dominante. Los electrones son tratados mediante una aproximación semiclásica implícita en la ecuación de transporte de Boltzmann. Suponemos que los electrones se mueven dentro de un potencial periódico, y por lo tanto están dotados de una masa efectiva m^* . Estos electrones son fermiones dotados de spin $\frac{1}{2}$, lo que conduce a que la función de distribución en equilibrio $f_0(\mathbf{v})$ sea la distribución de Fermi-Dirac.

4.1.1 Aproximación del tiempo de relajación

Para simplificar el cálculo del término de colisiones, podemos usar la aproximación que se denomina *tiempo de relajación*. Esta aproximación supone que el efecto de las colisiones es restaurar la función de distribución $f(\mathbf{v})$ (en presencia de campos externos) hacia la distribución de equilibrio $f_0(\mathbf{v})$ (en ausencia de campos externos), en un tiempo característico $\tau(\mathbf{v})$. De acuerdo a esta aproximación, el operador que describe el efecto de las colisiones (ecuación (2)), puede expresarse por:

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

Como se trata de describir el movimiento de muchos electrones itinerantes en un cristal, en lugar de electrones libres, resulta conveniente escribir la función distribución

en términos de la posición \mathbf{r} y el vector de onda \mathbf{k} [20]. Por lo tanto, la ecuación de transporte queda expresada de la siguiente forma:

$$\left(\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} - \frac{e}{\hbar} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \right) f = - \left(\frac{f - f_0}{\tau} \right) \quad (3)$$

donde $-e$ es la carga de un electrón $\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon$ es la velocidad de un electrón (ε es su energía cinética), τ es el tiempo de relajación, f es la función de distribución para los electrones fuera del equilibrio termodinámico y f_0 es la distribución correspondiente al equilibrio, en ausencia de \mathbf{E} y \mathbf{B}

La función de distribución está constituida por dos partes: $f_0(\mathbf{v})$ la distribución del equilibrio, que es la función de Fermi-Dirac; y la parte fuera del equilibrio, que depende de la velocidad y de la posición según \mathbf{r} . De esta forma:

$$f = f_0 + f_1(\mathbf{v}, \mathbf{r}); \quad f_0 = 1 / \left(1 + e^{\beta(\varepsilon_F - \mu)} \right)$$

donde $f_1 \ll f_0$, y ε_F es la energía de Fermi.

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

$$e\mathbf{v} \cdot \mathbf{E} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) - \frac{e}{\hbar} (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_1 + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_1 = -\frac{f_1}{\tau} \quad (4)$$

4.2 Resistividad

Un objetivo central de esta tesis es medir la influencia del campo magnético sobre el transporte de los electrones para las configuraciones propuestas. Esto requiere considerar las fuentes de scattering presentes en nuestra película, las cuales indicamos a continuación:

- a) Scattering electrón-fonón
- b) Scattering electrón-impurezas
- c) Scattering electrón-superficie rugosa
- d) Scattering electrónico por otros defectos de la película metálica.

4.2.1 Resistividad de un monocristal metálico: Teoría de Bloch-Grüneisen

La teoría de Bloch-Grüneisen describe la resistividad $\rho_0(T)$ en un metal cristalino con superficie de Fermi esférica, debido a scattering electrón-fonón. El resultado es:

$$\rho_0(T) = \rho_R + A \left(1 + \frac{BT}{\theta - CT} \right) \phi \left(\frac{\theta - CT}{T} \right)$$

$$\text{con } \phi(x) = 4x^{-5} \int_0^x \frac{z^5 \exp(z)}{(\exp(z) - 1)^2} dz$$

donde A, B, C y θ son constantes (tabuladas en el caso del oro [17]) y ρ_R (que es independiente de la temperatura) se conoce como resistividad residual, representa el efecto de scattering electrón-impurezas y electrón-defecto. La dependencia de $\rho_0(T)$ con la temperatura, originada en el scattering electrón-fonón, está contenida en la función $\phi(x)$.

4.2.2 Resistividad de una película metálica delgada

Recapitulando tenemos cuatro mecanismos de scattering electrónico que generan resistividad en una película metálica:

- a) Scattering electrón-fonón, que puede ser caracterizado por un tiempo de relajación τ_f (que depende de la temperatura), descrito por la teoría de Bloch-Grüneisen
- b) Scattering electrón-impureza, que puede ser caracterizado por un tiempo de relajación τ_i (independiente de la temperatura) en el límite de baja concentración, que corresponde al término aditivo ρ_R de la teoría de Bloch-Grüneisen
- c) Scattering electrón-superficie rugosa
- d) Scattering electrónico por otros defectos de la película metálica, tales como bordes de grano, dislocaciones, etc.

Los mecanismos a) y b) dan origen a la resistividad del grueso $\rho_0(T)$, esto es, la resistividad del monocristal a una temperatura T . Por otro lado, nuestras películas fueron preparadas de modo tal que se minimizó el efecto que tienen sobre la resistividad total los mecanismos de scattering mencionados en el punto d).

Para describir la resistividad en función de la temperatura, consideramos que a 4K los fonones están enteramente congelados; por lo que el camino libre medio (λ) en el grueso está determinado por el scattering electrón-impureza. Por lo tanto, cuando determinamos el tiempo de relajación a 4K, obtenemos el tiempo de relajación debido a impurezas.

Si tenemos dos mecanismos de scattering diferentes que son descritos por tiempos de relajación τ_1 y τ_2 , la aditividad de las probabilidades de transición $T_1(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$ y $T_2(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$ debido a diferentes mecanismos de scattering conduce a:

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

Si los tiempos de relajación no dependen del momentum de los electrones, entonces la aditividad de los inversos de los tiempos de relajación conduce a la aditividad de las resistividades, lo que se conoce como la regla de Mathiessen:

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

En el caso del movimiento de electrones en una muestra metálica cristalina, se ha encontrado que el scattering de electrones-impureza (en el límite de concentraciones bajas) y por electrón-fonón, puede ser descrito por el formalismo de tiempo de relajación. Por esta razón podemos escribir la resistividad del grueso:

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 = \frac{m}{ne^2} \left(\frac{1}{\tau_{\text{fonones}}} + \frac{1}{\tau_{\text{impurezas}}} \right) \quad (5)$$

El valor para el tiempo de relajación debido a fonones se obtiene de la tabla de resistividad intrínseca del oro cristalino debido a scattering electrón-fonón[17]

4.3 Magnetorresistencia

Para calcular la magnetorresistencia de una película metálica delgada se utilizó una solución de la ecuación de Boltzmann basada en el método de las curvas características.

4.3.1 Solución de la ecuación de Boltzmann por el método de las curvas características

La ecuación (4) se puede resolver por medio del método de *las características*.

Las curvas características son las soluciones de las ecuaciones:

$$-e(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) = \hbar \frac{d}{dt} \mathbf{k} \quad \text{y} \quad \frac{d}{dt} \mathbf{r} = \mathbf{v} \quad (6)$$

las cuales pasan por un determinado punto en el espacio de seis dimensiones que alberga a los vectores \mathbf{k} y \mathbf{r} (t es un número que parametriza la característica; en este caso es el tiempo transcurrido al recorrer la órbita). A lo largo de una característica se cumple que:

$$e\mathbf{v} \cdot \mathbf{E} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) + \frac{d}{dt} f_1 = -\frac{f_1}{\tau}$$

Integrando tenemos:

$$f_1 = -e \left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) e^{-t/\tau} \int_0^t (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}) e^{t'/\tau} dt' + f_s \quad (7)$$

Aquí t es el tiempo que le tomó al electrón recorrer la distancia entre la superficie de la muestra y el punto en el cual estamos calculando la función distribución f_1 , y f_s es el valor de la función de distribución evaluada en la superficie de la muestra.

Para continuar, consideremos el caso más simple, que es el de una superficie de Fermi esférica $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / (2m^*)$. Tomemos, además, $\mathbf{B} = B\hat{x}$, entonces a partir de las ecuaciones (6) se tiene

$$v_x = v_{\parallel} = \sqrt{v_F^2 - v_{\perp}^2}, \quad v_y = v_{\perp} \cos(\omega_c t + \phi_0), \quad v_z = v_{\perp} \sin(\omega_c t + \phi_0)$$

$$x = v_{\parallel} t, \quad y = r_c^* \sin(\omega_c t + \phi_0), \quad z = r_c^* \cos(\omega_c t + \phi_0)$$

En donde $\omega_c = eB/m^*$ es la frecuencia ciclotrónica y $r_c^* = v_{\perp} m^*/(eB)$ es el radio ciclotrónico efectivo.

Utilizando estas expresiones, podemos integrar para el caso general la ecuación (7). En el caso más simple $\mathbf{E} = E\hat{x}$, es decir, el caso de la magnetorresistencia longitudinal, se obtiene

$$f_1 = -e \tau v_{\parallel} \mathbf{E} \left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) (1 - \Phi e^{-t/\tau}) \quad (8)$$

donde la función Φ depende de las condiciones de frontera.

4.3.2 Colisión entre electrones y una superficie rugosa

Consideramos aquí el caso de una película metálica muy delgada, infinita en las direcciones x e y , pero que tiene un espesor d en la dirección z . Una característica puede sufrir una reflexión difusa o especular. (Una reflexión especular ocurre cuando una partícula conserva su momento en el plano de la superficie, e invierte su momento en la dirección perpendicular a este plano). Para poder incluir los efectos de las dos superficies en $z = 0$ y $z = d$ es necesario sumar todas las características que pasan por el punto con coordenadas \mathbf{r} , \mathbf{k} . Una característica dada, solo puede sufrir una reflexión especular en una superficie (con una probabilidad p , con $0 \leq p \leq 1$) o bien originarse en esa superficie (con una probabilidad $q = 1 - p$). La suma de todas las características (que intervienen con el mismo peso) da origen a la función $\Phi e^{-t/\tau}$.

La presencia de un campo magnético longitudinal, si bien no modifica la velocidad de deriva de los electrones, si modifica su trayectoria, como se muestra en las figuras siguientes.

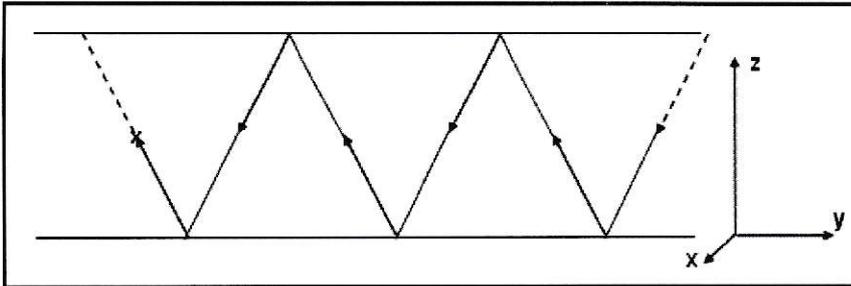


Figura 14: Trayectoria de un electrón en ausencia de campo magnético, $\mathbf{B} = 0$.

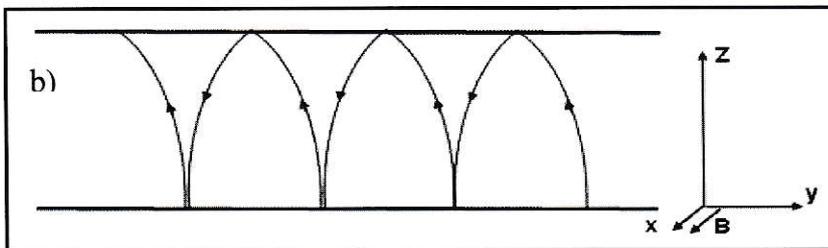
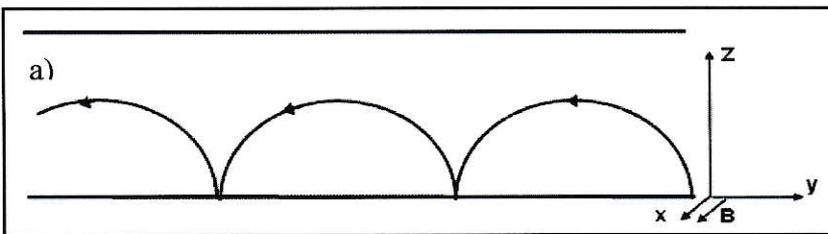


Figura 15: Trayectorias de un electrón en presencia de campo magnético, $\mathbf{B} \neq 0$. a) la partícula se refleja en sólo una superficie, b) la partícula se refleja en ambas superficies

Suponemos, además, que la superficie $z = 0$ tiene un coeficiente de reflectividad p_0 (la fracción de electrones que son reflejados especularmente al colisionar con la superficie $z = 0$ es p_0); que no necesariamente es igual al coeficiente de reflectividad p_d de la superficie $z = d$. En la Figura 16 se ilustran las características que atraviesan un punto \mathbf{r} en el interior de la película con dirección \mathbf{k} y k_z positivo:

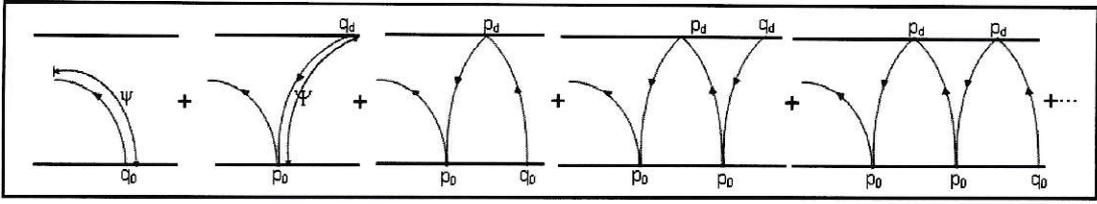


Figura 16: caso 1 (el electrón choca con ambas superficies), k_z positivo

En este caso, la suma de las características es (en donde cada uno de los términos es la expresión algebraica correspondiente de la Figura 16),

$$\Phi e^{-t/\tau} = q_0 e^{-\psi/\lambda} + p_0 q_d e^{-(\psi+\Psi)/\lambda} + p_0 q_d q_0 e^{-(\psi+2\Psi)/\lambda} + p_0^2 q_d q_0 e^{-(\psi+3\Psi)/\lambda} + p_0^2 q_d^2 q_0 e^{-(\psi+4\Psi)/\lambda} \dots$$

$$\Phi e^{-t/\tau} = \frac{q_0 + p_0 q_d e^{-\Psi/\lambda}}{1 - p_0 p_d e^{-2\Psi/\lambda}} e^{-\psi/\lambda}$$

en donde $q_0 = 1 - p_0$, $q_d = 1 - p_d$, $\lambda = v_F \tau$ es el libre camino medio en el material, ψ es la longitud del camino curvo que va desde la superficie $z = 0$ hasta el punto \mathbf{r} y Ψ es la longitud de la correspondiente trayectoria que va desde una superficie a otra.

Del mismo modo, la suma que incluye todas las características que van de una superficie a la otra, pero tienen k_z negativo en el punto \mathbf{r} (Figura 17).

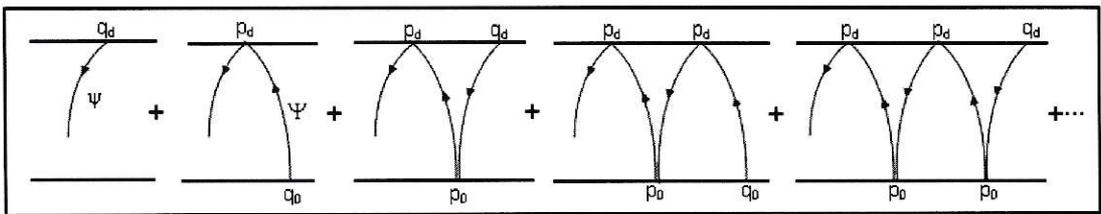


Figura 17: caso 1 (el electrón choca con ambas superficies), k_z negativo

La correspondiente expresión algebraica es

$$\Phi e^{-t/\tau} = q_0 e^{-(\Psi-\psi)/\lambda} + q_0 q_d e^{-(2\Psi-\psi)/\lambda} + p_0 p_d q_d e^{-(3\Psi-\psi)/\lambda} + p_0 p_d^2 q_d e^{-(4\Psi-\psi)/\lambda} + \dots$$

$$\Phi e^{-t/\tau} = \frac{q_d + q_0 p_d e^{-\Psi/\lambda}}{1 - p_0 p_d e^{-2\Psi/\lambda}} e^{-\psi/\lambda}$$

con la misma notación

Se tiene, además, el caso en que el electrón interactúa repetidamente sólo con la superficie $z = 0$ (Figura 18).

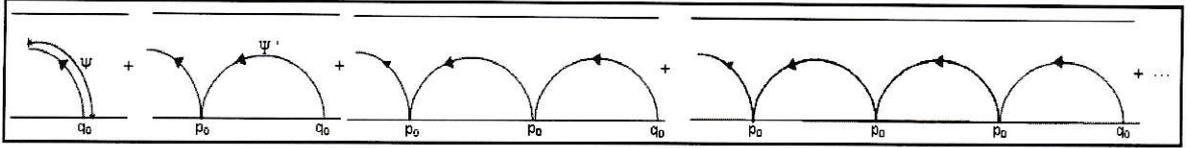


Figura 18: caso 2 (el electrón sólo choca con la superficie inferior $z = 0$), k_z positivo

El resultado algebraico es

$$\Phi e^{-t/\tau} = q_0 e^{-\psi/\lambda} + p_0 q_0 e^{-(\psi+\Psi)/\lambda} + p_0^2 q_0 e^{-(\psi+2\Psi)/\lambda} + p_0^3 q_0 e^{-(\psi+3\Psi)/\lambda} + \dots$$

$$\Phi e^{-t/\tau} = \frac{q_0 e^{-\psi/\lambda}}{1 - p_0 e^{-\Psi/\lambda}}$$

en donde Ψ' es la longitud de una trayectoria que va desde la superficie $z = 0$ hasta la $z = 0$. Finalmente, se tiene el caso en que la interacción repetida ocurre en $z = d$. El resultado tiene la misma forma que el anterior intercambiando p_0 y q_0 por p_d y q_d respectivamente. Para más detalles ver Anexo 1.

4.3.3 Magnetorresistencia longitudinal, inducida por colisión de electrones y una superficie rugosa

Tomando la función distribución de los electrones f , podemos calcular la conductividad eléctrica σ de una película delgada.

$$f = \frac{\partial f_0}{\partial v_{\parallel}} \Delta v_{\parallel}$$

La densidad de corriente esta dada por:

$$j(O) = 2 \int e v_k f_k dk$$

$$j(O) = \int_0^{\infty} v^2 dv \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta v_{\parallel} f = \sigma \cdot E$$

De aquí se obtiene el valor de σ porque f_l (la distribución fuera del equilibrio) es proporcional al campo E . La conductividad del grueso es:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi e^2 \tau}{3m} \int_0^{\infty} v^3 \frac{\partial f_0}{\partial v_x} dv$$

Haciendo, además, un análisis geométrico como sigue:

Caso a: La trayectoria del electrón intersecta los dos planos de la película

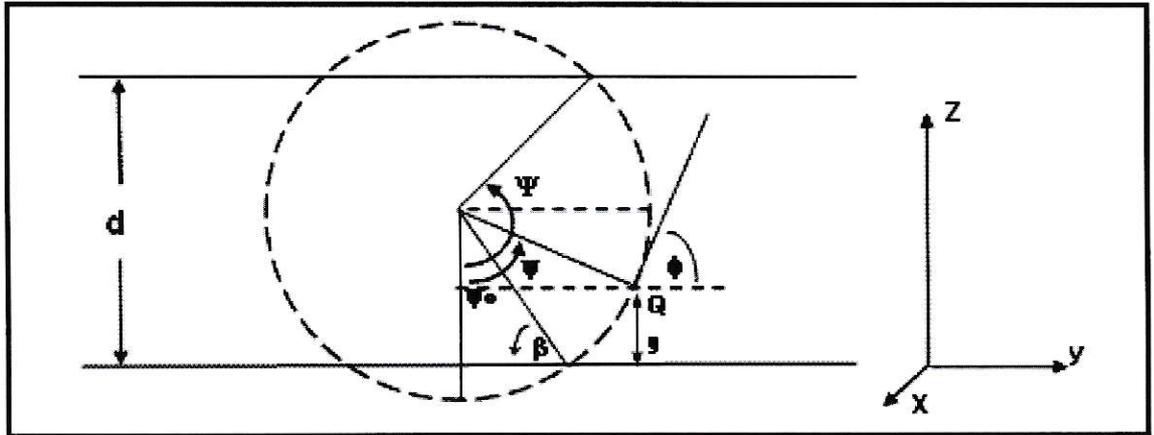


Figura 19: esquema en que la trayectoria de un electrón intersecta ambos planos de la película.

$$\phi = \psi + \psi_0; \quad \beta = \frac{1}{2}\pi - \psi_0; \quad \text{Sen}\beta = \frac{r \cos\psi_0}{r} = \frac{z + r \cos\phi}{r}$$

$$\Rightarrow \psi = \phi - \psi_0 = \phi + \arcsen\left(\frac{z + r \cos\phi}{r}\right) - \frac{\pi}{2}$$

$$\Psi = \arcsen\left(\frac{z + r \cos\phi}{r}\right) + \arcsen\left(\frac{d - z - r \cos\phi}{r}\right)$$

Caso b: la trayectoria del electrón intersecta un plano de la película

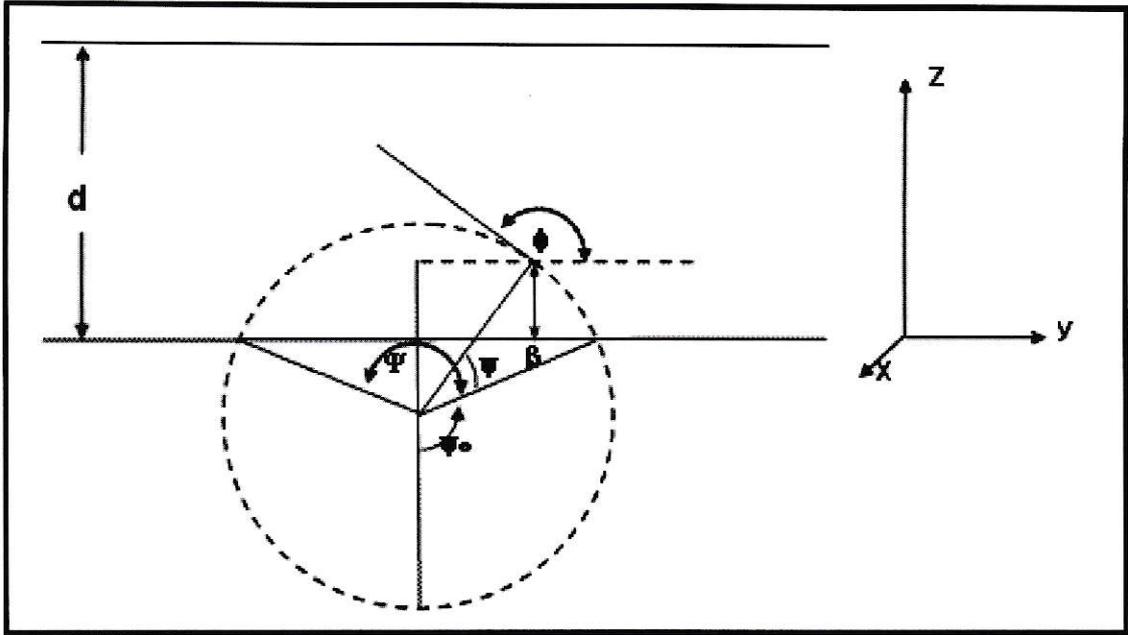


Figura 20: esquema en que la trayectoria de un electrón intersecta uno de los planos de la película.

$$\phi = \psi + \psi_0; \quad \beta = \psi_0 - \frac{1}{2}\pi; \quad \text{Sen}\beta = -\frac{z + r \cos\psi_0}{r}$$

$$\Rightarrow \psi = \phi + \arcsen\left(\frac{z + r \cos\phi}{r}\right) - \frac{\pi}{2}$$

$$\Psi = \pi + 2 \cdot \arcsen\left(\frac{z + r \cos\phi}{r}\right)$$

Siguiendo el mismo análisis podemos determinar los ángulos en los cuales se pasa de un caso al otro. Finalmente la expresión para la magnetorresistencia es:

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = 1 - \frac{3}{4\pi} \int_0^1 u^2 du \int^{\min(1, 2r_c \sqrt{1-u^2}/d)} Id(z/d)$$

en donde I es

$$I = \int_{\phi_m}^{\pi} (e^{-\psi} + e^{\psi-\Psi}) \left(\frac{1-p_0}{1-p_0 e^{-\psi}} + \frac{1-p_d}{1-p_d e^{-\Psi}} \right) d\phi \quad \text{si } \frac{d}{r_c \sqrt{1-u^2}} \geq 2$$

en caso contrario

$$I = \int_{\phi_m}^{\phi_c} e^{-\psi} \left(\frac{s - ue^{-\psi}}{1 - p_0 p_d e^{-2\psi}} \right) d\phi + \int_{\phi_c}^{\pi} (e^{-\psi} + e^{\psi-\Psi}) \left(\frac{1 - p_0}{1 - p_0 e^{-\Psi}} + \frac{1 - p_d}{1 - p_d e^{-\Psi}} \right) d\phi.$$

Aquí el radio ciclotrónico es $r_c = v_F m^* / (eB)$. Para simplificar la notación de las ecuaciones hemos utilizado $s = (1 - p_0) + (1 - p_d)$, $u = p_0(1 - p_d) + p_d(1 - p_0)$,

$$\phi_m = \frac{\pi}{2} - \arcsin \left(1 - \frac{z}{r_c \sqrt{1 - u^2}} \right),$$

$$\phi_c = \frac{\pi}{2} - \arcsin \left(\frac{d - z}{r_c \sqrt{1 - u^2}} - 1 \right),$$

$$\psi = F \left(\phi, \frac{z}{r_c \sqrt{1 - u^2}}, \frac{z}{l} \right),$$

en donde la función $F(\phi, a, b)$ se define como

$$F(\phi, a, b) = \frac{b}{a} \left(\phi + \arcsin(a + \cos \phi) - \frac{\pi}{2} \right).$$

Notemos que, si $a / \sin^2 \phi$ es suficientemente pequeño (menor que alrededor de 0.1) es preferible, para propósitos numéricos, utilizar la expansión

$$F(\phi, a, b) = \frac{b}{|\sin \phi|} + \frac{ab}{2! |\sin \phi|^3} \cos \phi + \frac{a^2 b}{3! |\sin \phi|^5} (1 + 2 \cos \phi) + \frac{a^3 b}{4! |\sin \phi|^7} (9 + 6 \cos \phi) + \dots$$

Por último

$$\Psi = 2 \left(\frac{r_c \sqrt{1 - u^2}}{l} (\pi - \phi) + \psi \right),$$

$$\Psi' = \psi - F \left(\phi, \frac{z-d}{r_c \sqrt{1-u^2}}, \frac{z-d}{l} \right).$$

En el caso $p_0 = p_d = \varepsilon$ estas expresiones coinciden con las ecuaciones (7)-(9) de Way y Kao[6]

Notemos que para este modelo σ_0 no depende de la superficie y $\alpha = \frac{d}{\lambda}$ es un parámetro de ajuste.

4.3.4 Comparación entre teoría y experimento

Way y Kao, en 1971, obtuvieron curvas de magnetorresistencia longitudinal en función del inverso del campo magnético: $\frac{\rho}{\rho_0} \text{ v/s } \frac{1}{\mu}$, donde $\frac{1}{\mu} = \frac{eBd}{m^* v_F}$ describiendo para un

α dado, una serie de curvas que dependen de la especularidad de la superficie, dicha especularidad es la misma para ambas superficies. Para verificar el formalismo precedente, se reprodujeron las curvas obtenidas por Way y Kao con un programa escrito en Fortran, las integrales se hicieron empleando una cuadratura gaussiana de 32 puntos. Por simplicidad, para el análisis de los resultados experimentales cambiaremos la notación y utilizaremos curvas de magnetorresistencia $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ en función del campo

magnético B, por otro lado tenemos que $v_F = \frac{\hbar k_F}{m^*}$, por lo tanto, resulta ser que

$$\frac{\hbar k_F}{\mu e} \frac{1}{d} = B.$$

Nuestro rango experimental de campos magnéticos es entre 0 y 9 Tesla, y el grosor de nuestras películas es menor que 200 nm, por lo tanto, el cálculo de la magnetorresistencia, para campos tan pequeños, se hace siguiendo la aproximación numérica dada para $F(\phi, a, b)$. Además, el programa incluye la posibilidad de que los parámetros de especularidad puedan ser distintos para cada una de las dos superficies. Finalmente el programa entrega la magnetorresistencia en función del campo magnético, utilizando los siguientes parámetros de ajuste: α , p_0 (especularidad de la superficie en contacto con la mica) y p_d (especularidad de la superficie libre).

Para el análisis de los resultados obtenidos de resistividad y magnetorresistencia longitudinal, se pueden emplear dos métodos alternativos:

- a) Se utiliza la teoría para determinar los parámetros de especularidad de las superficies (p_0 y p_d) y el camino libre medio a 4 K ($\lambda(4)$) que permite describir mejor la magnetorresistencia a 4 K, $\frac{\Delta\rho}{\rho}(4)$. Luego, empleando estos parámetros (λ , p_0 y p_d) se calcula la dependencia la resistividad en función de la temperatura ρ (T) para $B = 0$. Para calcular el camino libre medio a temperaturas mayores de 4 K en el grueso, se calcula el inverso del tiempo de relajación total usando la ecuación (5).
- b) Se utiliza el formalismo teórico para determinar los parámetros de especularidad de las superficies (p_0 y p_d) y el camino libre medio $\lambda(4)$ que permite una mejor descripción de la resistividad a 4 K, es decir, $\rho(4)$. Empleando estos parámetros

se calcula la resistividad en función de la temperatura $\rho(T)$ y la magnetorresistencia $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ (4) como función del campo magnético B .

Las superficies inferiores de nuestras películas son atómicamente planas, salvo por pasos de clivaje, sin embargo, la distancia entre estos pasos es mucho mayor que el camino libre medio de los electrones en las muestras, por lo tanto, el efecto de rugosidad del sustrato podemos ignorarlo o al menos considerarlo muy pequeño, esto es $p_0 = 1$ o $p_0 = 0.9$.

Para el primer método buscamos para las distintas películas el ajuste óptimo, en el sentido de mínimos cuadrados, a partir de los datos obtenidos de magnetorresistencia experimental a 4 K variando los parámetros de ajuste (α , p_0 y p_d). Al utilizar el parámetro $p_0 = 1$ el mejor ajuste que se obtiene es un orden de magnitud menor que lo observado experimentalmente. En el caso de $p_0 = 0.9$ el ajuste conduce a $p_d = 0.9$ para las cuatro muestras; los resultados se despliegan en la Figura 21:

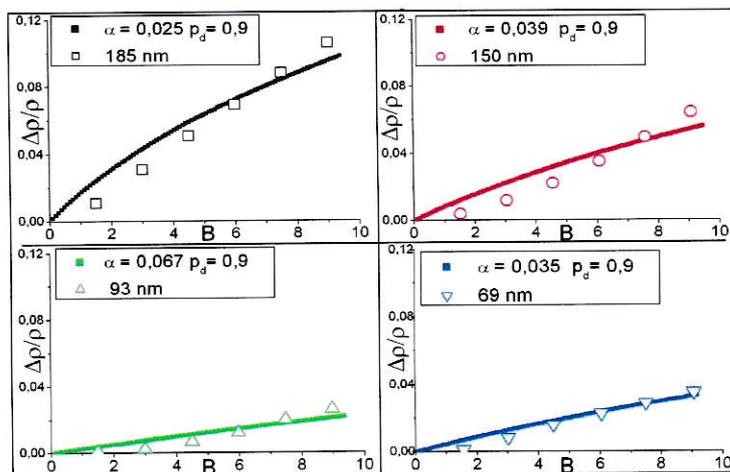


Figura 21: Ajuste de la teoría de Way y Kao a 4 K, con $p_0 = 0.9$

Para cada uno de los casos obtuvimos el tiempo de relajación debido a impurezas (τ_i), suponiendo que la población de fonones a 4 K es cercana a cero, luego calculamos la resistividad en función de la temperatura. El resultado se muestra en la Figura 22.

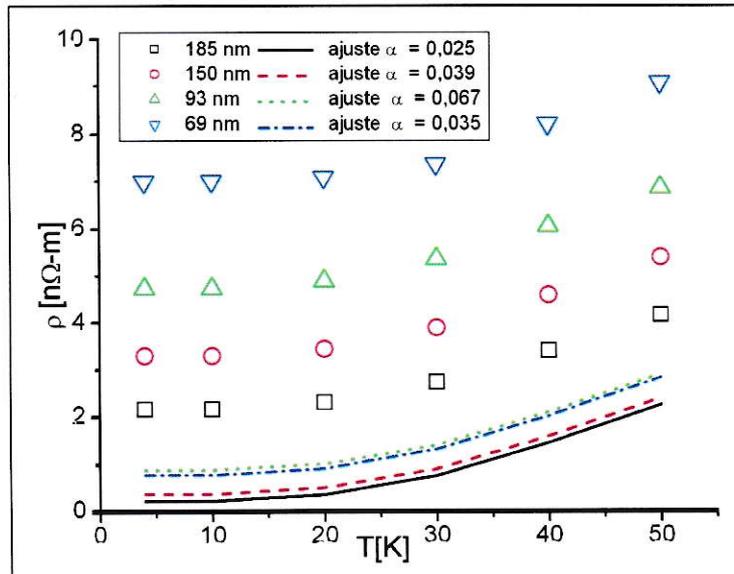


Figura 22: Resistividad en función de la temperatura, con los parámetros α , $p_0 = 0.9$ y p_d que ajustan la magnetorresistencia a 4 K

De este primer método de análisis podemos concluir que:

- La mejor representación para los datos de magnetorresistencia longitudinal a 4 K en función del campo magnético B, ocurre en todas las películas para los parámetros $p_0 = 0.9$ y $p_d = 0.9$ (es decir, con ambas superficies caracterizadas por scattering casi especular).
- La forma de la curva de magnetorresistencia teórica es cualitativamente diferente a la experimental.
- No se observa una relación monótona de los valores de α con el espesor.

- Referente a la dependencia de la resistividad en función de temperatura, se observa una discrepancia severa entre la predicción teórica y los datos experimentales. Los parámetros que mejor ajustan la magnetorresistencia predicen una resistividad como función de la temperatura a campo cero que resulta un orden de magnitud menor que lo observado.

Siguiendo el segundo método de análisis, se buscan los parámetros α y p_d para $p_0 = 1$ y $p_0 = 0.9$, que ajusten mejor los valores experimentales de resistividad a 4 K. Estos valores permiten calcular los tiempos de relajación debido a impurezas y por ende, la resistividad en función de la temperatura usando la ecuación (5). Para diferentes valores de p_d existe un α que predice de manera adecuada los valores de resistividad en función de la temperatura, por lo tanto, el criterio para elegir la mejor aproximación fue minimizar el error en la predicción de la magnetorresistencia. Los resultados se despliegan en las Figura 21- 25.

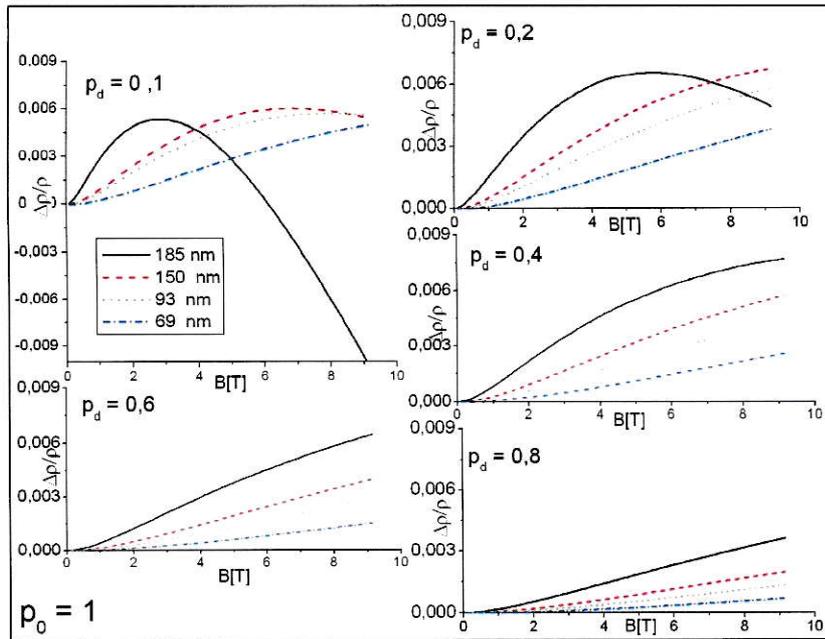


Figura 23: Magnetorresistencia en función del campo magnético, para $p_0 = 1$, α que ajusta la resistividad a 4 K ($\rho(4)$) para distintos p_d .

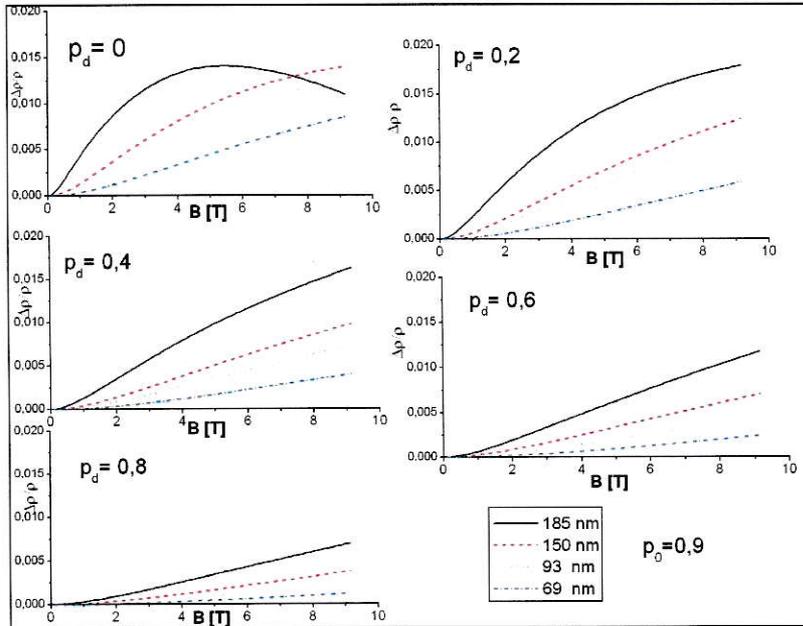


Figura 24: Magnetorresistencia en función del campo magnético, para $p_0 = 0.9$, α que ajusta la resistividad a 4 K ($\rho(4)$) para distintos p_d .

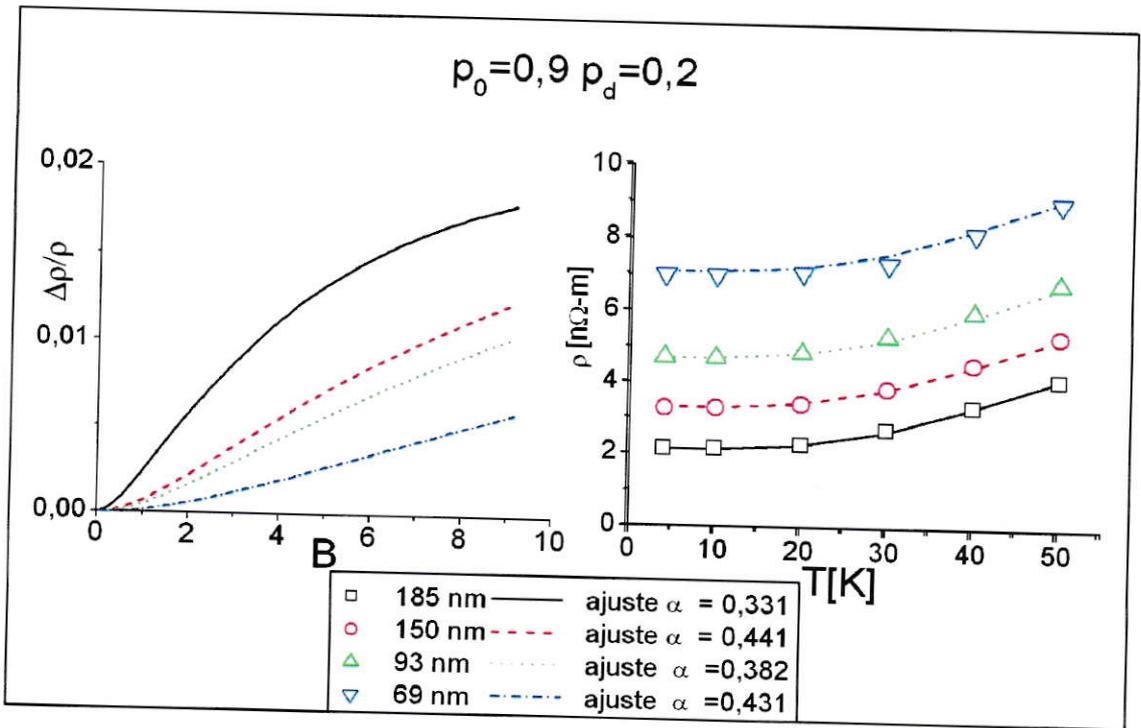


Figura 25: Mejor ajuste de resistividad ($\rho(4)$) y magnetorresistencia, con $p_0 = 0.9$ y $p_d = 0.2$.

Con este segundo método de análisis, la concordancia entre el valor teórico y el valor experimental de resistividad en función de la temperatura es notable, sin embargo, la magnetorresistencia calculada teóricamente resulta ser un orden de magnitud menor que lo observado experimentalmente. Nuevamente la forma de la curva teórica es cualitativamente diferente a la que siguen los valores experimentales. Corresponde destacar que para ciertos valores de espesor y de especularidad, la teoría predice una magnetorresistencia que no es una función monótonamente creciente al aumentar el campo magnético, como se ilustra en la Figura 23, sino que para ciertos espesores la

magnetorresistencia aumenta y luego disminuye, alcanzando incluso valores negativos para campos magnéticos suficientemente intensos.

Por último, al comparar este trabajo con los realizados con las mismas películas y metodología similar para la magnetorresistencia transversal del caso I (configuración 2) [18] y el efecto Hall [19], notamos una discrepancia fundamental.

En el caso de la magnetorresistencia transversal, el ajuste óptimo de la teoría se obtuvo al suponer el parámetro de especularidad de la superficie oro-mica igual a uno (describiendo una superficie perfectamente lisa); mientras que el valor del parámetro de la superficie libre del oro era nulo (correspondiendo a una superficie enteramente rugosa). En la notación de esta tesis, $p_0 = 1$ y $p_d = 0$.

Como conclusión, a partir de los resultados experimentales recientes —expuestos en esta tesis y en la referencia [18]— creemos que el ajuste con $p_0 = 0.9$ y $p_d = 0.9$ no tiene un sustento físico: si bien proporciona una descripción aproximada de los datos de magnetorresistencia $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ (4) como función del campo magnético, la resistividad ρ que se obtiene a partir de este ajuste subestima severamente los datos experimentales. Además, el ajuste del parámetro de especularidad para la superficie libre, indica que es una superficie tan lisa como la interfaz oro-mica, los resultados que se obtuvieron en los trabajos anteriores [18][19] mostraban que era una superficie totalmente difusa. Por otro lado, al considerar el segundo método de análisis, las predicciones de magnetorresistencia están lejanas de ser una buena aproximación. Con lo anterior, concluimos que la teoría de Way y Kao no describe adecuadamente los efectos de un campo magnético longitudinal en los fenómenos de transporte en una película delgada.

4.4 Magnetorresistencia en la configuración MacDonald

Existe escasa literatura con algún formalismo teórico que permita describir la magnetorresistencia observada en la configuración MacDonald [7]. Por ahora nos conformaremos con señalar el hecho de que la magnetorresistencia encontrada para estas películas a 9 T y 4 K es del mismo orden de magnitud que la magnetorresistencia transversal, siendo un 25% para la película más gruesa.

La magnetorresistencia en la configuración MacDonald fue la última medición que se realizó. Notemos también que la película de 93 nm tiene un comportamiento que difiere del resto. Cabe destacar que al correr varias veces el experimento, obtuvimos resultados que exhiben una reproducibilidad cuestionable.

Considerando lo expuesto anteriormente es probable que algunas de las muestras se dañaran en el proceso de soldar y desoldar contactos para cambiar de un portamuestras a otro. Esto sugiere repetir los experimentos con nuevas muestras de características similares y preparadas especialmente para repetir estos experimentos.

Actualmente se ha confeccionado otra serie de películas con similares características de manera de medir nuevamente la magnetorresistencia en la configuración de MacDonald.

4.5 Conclusiones

1. Se ha encontrado un método de fabricación de películas delgadas en alto vacío (presión 10^{-5} Pa al comenzar la evaporación) que permite poner en evidencia la influencia de la superficie rugosa en el transporte.
2. Se ha medido la magnetorresistencia longitudinal y la magnetorresistencia transversal caso II en películas delgadas de oro sobre mica, a bajas temperaturas $4K \leq T \leq 50K$ y campos magnéticos intensos $B \leq 9$ Tesla. Los resultados experimentales demuestran que el transporte a bajas temperaturas está dominado por el scattering electrón- superficie rugosa, esto se refleja en la dependencia que tiene tanto la resistividad como la magnetorresistencia del espesor.
3. Este trabajo muestra que no existen teorías que describan en forma apropiada la magnetorresistencia longitudinal debido a la presencia de una superficie rugosa, cuando el camino libre medio de los electrones es comparable al espesor de la muestra. Esto evidencia la necesidad de nuevas teorías que describan dicho efecto.

5 Bibliografía.

- [1] Ziman J. M. 1960. *Electrons and Phonons*. Clarendon Press. Oxford.
- [2] MacDonald D. K. 1949. Influence of a magnetic field on the size variation of electrical conductivity. *Nature* **163**, 637
- [3] Sarginson K. and MacDonald D. K. 1949. Influence of a magnetic field on the size variation of electrical conductivity. *Nature* **164**, 920.
- [4] MacDonald D. K. 1950. The magnetoresistance of the alkali metals. *Proc. Royal Society* **A203**, 223
- [5] Ditlefsen E. and Lothe J. 1966. Theory of Size Effects in Electrical Conductivity, *Phil. Mag* **14**, 759-773
- [6] Way Y. S. and Kao Y. H. 1972. Longitudinal Magnetoresistance of Thin Metallic Films with Partially Specular Boundary Scattering. *Phys Rev* **4-5: B** 2039-2046
- [7] Joyez P. and Esteve D. 2001. Surface-scattering-limited magnetotransport in thin metallic films. *Phys. Rev.* **B 64**, 155402
- [8] MacDonald D. C. K. and Sarginson K. 1950. Size effect variation of the electrical conductivity of metals. *Proc. Royal Society* **A203**, 223
- [9] Grindn V. V. Datars W. R. and Ning Y. B. 1988. Size effects in the magnetoresistance of rolled potassium films. *Phys. Rev.* **B 38**, 12144
- [10] Grindn V. V. Datars W. R. and Ning Y. B. 1989. Angular dependence of the magnetoresistance of potassium films at 4.2 K. *Phys. Rev.* **B 39**, 8725

- [11] Grindn V. V. Datars W. R. and Ning Y. B. 1989. Magnetoresistance of potassium films in the Sondheimer geometry *J. Phys. Condens Matter* **1**,713-724
- [12] Datars W. R. and Gridin V. V. 1990. Size-Dependent Kohler Slope in the Transverse Magnetoresistance of Potassium. *Journal of Low Temperature Physics*, Vol **79** 193-200
- [13] Mikhailov G. M. et al, 2000. The edge and bulk electron state dominated magnetotransport in multi-terminal single-crystalline refractory metal nanostructures. *Nanotechnology* **11**, 379-382
- [14] Pippard B. 1989. Magnetoresistance in Metals. Cambridge University Press. Chapter VI.
- [15] Van Attekum P. M. Th. M et al, 1984. Influence of grain boundary and surface Debye temperature on the electrical resistance of thin gold films. *Phys. Rev.* **B29**
- [16] Munoz R. C. et al, 2000. Surface roughness and surface-induced resistivity of gold films on mica: Application of quantitative scanning tunneling microscopy. *Phys. Rev.* **B62** 4686-4697.
- [17] Matula R. A. 1979. Electrical Resistivity of Copper, Gold, Palladium and Silver. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **8** 1147
- [18] Muñoz R. et al. 2006. Size effects under a strong magnetic field: transverse magnetoresistance of thin gold films deposited on mica. *J. Phys. Condens Matter* **18** 3401-3408

- [19] Muñoz R. et al. 2006. Size effects under a strong magnetic field: Hall Effect induced by electron-surface scattering on thin gold films deposited onto mica substrates under high vacuum Phys. Rev Letter **96** 206803.
- [20] Ziman J. M. 1972. Principles of the Theory of Solids. pp 211-212. Cambridge. London.

6 Apéndice 1

La prescripción para calcular la solución de la ecuación de transporte de Boltzmann f como suma sobre las características es consecuencia de la condición de frontera (debida a K. Fuchs) que se expresa en términos del parámetro de specularidad. Comenzaremos por mostrar la validez de esta prescripción en el caso en que los portadores interactúen repetidamente con dos superficies S_1 y S_2 . El caso más simple, en que los portadores interactúan repetidamente sólo con una superficie, resulta ser una consecuencia de éste caso más general.

Sea $f_{S_1}^+$ la función de distribución que describe a los portadores en las cercanías de la superficie S_1 que se alejan de esta superficie, después de haber interactuado con ella. De la misma manera, denotamos por $f_{S_1}^-$ la distribución de portadores que se acercan a la misma superficie S_1 y están a punto de colisionar con ella. La condición de frontera de Fuchs afirma que el número de partículas que abandonan la superficie es una fracción fija p_1 (con $0 \leq p_1 \leq 1$) de los portadores que inciden sobre ella. El resto de los portadores aparece en forma de una contribución difusa g_1 .

$$f_{S_1}^+ = p_1 f_{S_1}^- + g_1 \quad (a)$$

Aquí p_1 denota el valor del parámetro de specularidad de la superficie S_1 . Las partículas que egresan de la superficie S_1 son las mismas que ingresan a la superficie S_2 ,

mientras que las que impactan en la superficie S_1 son las que han egresado de S_2 . De este modo, en la superficie S_2 opera la condición de frontera

$$f_{S_2}^- = p_2 f_{S_2}^+ + g_2 \quad (\text{b})$$

$f_{S_2}^\pm$ denota el valor de la función f^\pm calculado sobre S_2 y p_2 es el parámetro de especularidad de esta segunda superficie.

De acuerdo a la ecuación (8), esta función f^\pm es

$$f^\pm = f_0 - e\tau(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) (1 - \Phi^\pm e^{-s/\lambda}) \quad (\text{c})$$

Donde f_0 es la distribución de portadores en equilibrio termodinámico (distribución de Fermi-Dirac). Introduciendo el resultado en (a) y (b), se concluye que $g_1 = (1 - p_1)f_0$, $g_2 = (1 - p_2)f_0$, y que las condiciones de frontera para Φ son

$$[\Phi^+ e^{-s/\lambda}]_{S_1} - p_1 [\Phi^- e^{-s/\lambda}]_{S_1} = 1 - p_1 \quad (\text{d})$$

$$[\Phi^- e^{-s/\lambda}]_{S_2} - p_2 [\Phi^+ e^{-s/\lambda}]_{S_2} = 1 - p_2 \quad (\text{e})$$

La prescripción del texto afirma que $\Phi^+ e^{-s/\lambda}$ es igual a la suma de todas las características que pasan por un punto dado y que, partiendo de S_1 , son reflejadas n veces por esta superficie y otras n veces por S_2 . Se afirma que cada reflexión por S_1 lleva aparejada un factor p_1 , cada reflexión por S_2 lleva aparejada un factor p_2 y la superficie de origen 1 o 2 lleva aparejado un único factor $q_1 = 1 - p_1$ o bien $q_2 = 1 - p_2$, respectivamente. Además, todas las contribuciones tienen igual peso. De este modo,

$$\Phi^+ e^{-s/\lambda} = \sum_0^{\infty} (q_1 p_1^n p_2^n e^{-(2n\Lambda+s)/\lambda} + q_2 p_1^{n+1} p_2^n e^{-[(2n+1)\Lambda+s]/\lambda}) \quad (f)$$

Donde Λ es la longitud de las características desde su intersección con S_1 hasta el punto en donde interseca S_2 .

La expresión para la función $\Phi^- e^{-s/\lambda}$ se obtiene de aquí intercambiando en todas partes p_1 por p_2 (y, por lo tanto, q_1 por q_2) y, al mismo tiempo, s por $\Lambda - s$. El resultado es

$$\Phi^- e^{-s/\lambda} = \sum_0^{\infty} (q_2 p_1^n p_2^n e^{-[(2n+1)\Lambda-s]/\lambda} + q_1 p_1^n p_2^{n+1} e^{-[2(n+1)\Lambda-s]/\lambda}) \quad (g)$$

El valor de las funciones en la superficie S_1 se obtiene poniendo $s = 0$, su valor en S_2 se obtiene poniendo $s = \Lambda$. Podemos, entonces, verificar que se cumplen las condiciones de frontera (d) y (e). Así,

$$\begin{aligned} q_1 + p_1 \Phi^- - \Phi^+ &= q_1 + \sum_0^{\infty} (p_1^{n+1} p_2^n q_2 e^{-(2n+1)\Lambda/\lambda} + q_1 p_1^{n+1} p_2^{n+1} e^{-2(n+1)\Lambda/\lambda}) \\ &\quad - q_1 p_1^n p_2^n e^{-2n\Lambda/\lambda} - q_2 p_1^{n+1} p_2^n e^{-2(n+1)\Lambda/\lambda} = 0 \end{aligned} \quad (h)$$

$$\begin{aligned} q_2 + p_2 \Phi^+ e^{-\Lambda/\lambda} - \Phi^- e^{-\Lambda/\lambda} &= q_2 + \sum_0^{\infty} (p_2^{n+1} p_1^n q_1 e^{-(2n+1)\Lambda/\lambda} + q_2 p_1^{n+1} p_2^{n+1} e^{-2(n+1)\Lambda/\lambda}) \\ &\quad - q_2 p_1^n p_2^n e^{-2n\Lambda/\lambda} - q_1 p_2^{n+1} p_1^n e^{-2(n+1)\Lambda/\lambda} = 0 \end{aligned} \quad (i)$$

Como la ecuación diferencial (en este caso, la ecuación de transporte de Boltzmann) junto con las condiciones de frontera determinan unívocamente la solución, esto concluye la demostración de la validez de las expresiones (f) y (g) para la función Φ .

Las expresiones (f) y (g) para Φ pueden sumarse. Tenemos, por ejemplo, que (en la notación de este apéndice)

$$\Phi^+ e^{-s/\lambda} = \frac{q_1 + p_1 q_2 e^{-\Lambda/\lambda}}{1 - p_1 p_2 e^{-2\Lambda/\lambda}} e^{-s/\lambda} \quad (\text{j})$$

Para el caso en que el portador sufre interacciones repetidas con sólo una superficie se obtiene el resultado

$$\Phi^+ e^{-s/\lambda} = \frac{q e^{-\Lambda/\lambda}}{1 - p e^{-2\Lambda/\lambda}} = \sum_0^{\infty} q p^n e^{-(s+n\Lambda)/\lambda} \quad (\text{k})$$

que es la expresión obtenida gráficamente de la Figura 18

7 Apéndice 2 (programas)

```
*****
* Encuentra el mejor ajuste de d/l (espesor sobre libre camino medio) *
* para un conjunto de medidas a campos magneticos diversos dados los *
* valores de los parametros de especularidad p0 y pt (aqui ambos son *
* nulos). Determina ademas la medida chisq de la bondad del ajuste de *
* minimos cuadrados (cuanto menor es chisq, mejor es el ajuste). *
*****
```

```
implicit real*8 (a-h,o-z)
dimension datos(7),espesor(4),dror (7,4)
data dror/0.d0,10.86d-3,3.082d-2,5.08d-2,6.94d-2,8.809d-2,0.106d0,
2 0.d0,3.99d-3,1.205d-2,2.228d-2,3.532d-2,4.956d-2,6.467d-2,
3 0.d0,9.39147d-4,0.00238d0,6.84d-3,1.202d-2,0.01993d0,0.02625d0,
4 0.d0,1.4d-3,8.48d-3,0.01617d0,0.02271d0,0.02899d0,0.03548d0/
```

```
c T = 4
data espesor/185.d-09,150.d-09,93.0d-09,69.d-09/
open (1, FILE = 'op93-4Kp09-32.dat')
```

```
Numpelicula=3
do i=1,7
datos(i) = dror (i,Numpelicula)
end do
d=espesor(Numpelicula)
```

```
p0=0.9d0
pd=0.0d0
do kk=1,6
ax=dlog(1.d-02)
bx=dlog(1.d-01)
call mnbrak(ax,bx,cx,d,datos,fa,fb,fc,p0,pd)
chisq=brent (ax,bx,cx,d,datos,p0,pd,1.d-04,xmin)
write (1,*) 'd/l=',dexp(xmin),'chisq=',chisq,' p0=',p0,' pd=',pd
pd=pd+0.2d0
end do
```

```
stop
end
```

```
function brent (ax,bx,cx,df,datos,p0,pd,tol,xmin)
```

```
*****
* Dado un trio de valores de ax, bx, cx tales como los calculados por *
* mnbrak, calcula el valor de dol=exp(xmin) que minimiza Chis para un *
* conjunto dado de datos y unos dados p0 y pd *
*****
```

```
implicit real*8 (a-h,o-z)
integer iter,ITMAX
```

```

dimension datos (7)
PARAMETER (ITMAX=100,CGOLD=.3819660,ZEPS=1.0d-10)
a=min(ax,cx)
b=max(ax,cx)
v=bx
w=v
x=v
e=0.d0
fx= Chis(df,datos,x,p0,pd)
fv=fx
fw=fx
do 11 iter=1,ITMAX
  xm=0.5d0*(a+b)
  tol1=tol*dabs(x)+ZEPS
  tol2=2.d0*tol1
  if(dabs(x-xm).le.(tol2-.5*(b-a))) goto 3
  if(dabs(e).gt.tol1) then
    r=(x-w)*(fx-fv)
    q=(x-v)*(fx-fw)
    p=(x-v)*q-(x-w)*r
    q=2.*(q-r)
    if(q.gt.0.d0) p=-p
    q=abs(q)
    etemp=e
    e=d
    if
      *(dabs(p).ge.dabs(.5d0*q*etemp).or.p.le.q*(a-x).or.p.ge.q*(b-x))
  *goto 1
  d=p/q
  u=x+d
  if(u-a.lt.tol2 .or. b-u.lt.tol2) d=sign(tol1,xm-x)
  goto 2
endif
1  if(x.ge.xm) then
  e=a-x
else
  e=b-x
endif
d=CGOLD*e
2  if(abs(d).ge.tol1) then
  u=x+d
else
  u=x+sign(tol1,d)
endif
fu= Chis(df,datos,u,p0,pd)
if(fu.le.fx) then
  if(u.ge.x) then
    a=x
  else
    b=x
  endif
  v=w
  fv=fw
  w=x

```

```

    fw=fx
    x=u
    fx=fu
else
    if(u.lt.x) then
        a=u
    else
        b=u
    endif
    if(fu.le.fw .or. w.eq.x) then
        v=w
        fv=fw
        w=u
        fw=fu
    else if(fu.le.fv .or. v.eq.x .or. v.eq.w) then
        v=u
        fv=fu
    endif
endif
11 continue
pause 'brent exceed maximum iterations'
3  xmin=x
   brent=fx
   return
END

```

```

subroutine mnbrak(ax,bx,cx,d,datos,fa,fb,fc,p0,pd)
*****
* Datos valores iniciales ax y bx del logaritmo natural de dol, calcula*
* nuevos valores de ax, bx, cx tales que Chis de exp(bx) es menor que *
* el valor de Chis tanto para exp(ax) como exp(cx) *
*****
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    dimension datos (7)
    parameter (GOLD=1.618034d0, GLIMIT=100.d0, TINY=1.d-20)
    fa=Chis (d,datos,ax,p0,pd)
    fb=Chis (d,datos,bx,p0,pd)
    if(fb.gt.fa)then
        dum=ax
        ax=bx
        bx=dum
        dum=fb
        fb=fa
        fa=dum
    endif
    cx=bx+GOLD*(bx-ax)
    fc=Chis (d,datos,cx,p0,pd)
1  if(fb.ge.fc)then
    r=(bx-ax)*(fb-fc)
    q=(bx-cx)*(fb-fa)
    u=bx-((bx-cx)*q-(bx-ax)*r)/(2.*sign(max(abs(q-r),TINY),q-r))
    ulim=bx+GLIMIT*(cx-bx)
    if((bx-u)*(u-cx).gt.0.)then
        fu=Chis (d,datos,u,p0,pd)

```

```

if(fu.lt.fc)then
  ax=bx
  fa=fb
  bx=u
  fb=fu
  return
else if(fu.gt.fb)then
  cx=u
  fc=fu
  return
endif
u=cx+GOLD*(cx-bx)
fu=Chis (d,datos,u,p0,pd)
else if((cx-u)*(u-ulim).gt.0.)then
fu=Chis (d,datos,u,p0,pd)
if(fu.lt.fc)then
  bx=cx
  cx=u
  u=cx+GOLD*(cx-bx)
  fb=fc
  fc=fu
  fu=Chis (d,datos,u,p0,pd)
endif
else if((u-ulim)*(ulim-cx).ge.0.)then
  u=ulim
  fu=Chis (d,datos,u,p0,pd)
else
  u=cx+GOLD*(cx-bx)
  fu=Chis (d,datos,u,p0,pd)
endif
ax=bx
bx=cx
cx=u
fa=fb
fb=fc
fc=fu
goto 1
endif
return
END

```

subroutine Way_Kaop (cratio,dol,pd,p0,dor)

```

*****
* Devuelve el valor del cociente de conductividades cratio      *
* =sigma/sigma0 para la magnetoresistencia longitudinal de una *
* delgada de espesor d, como funcion de los parametros adimensionales *
* dol=espesor/libre camino medio y dor=espesor/radio de la orbita *
* ciclotronica; [Y.-S. Way & Y.-H. Kao, Phys. Rev. B v 5 p 2039 (1972)]*
* ademas de los valores de los parametros de reflectividad (supuestos *
* constantes) p0 y pd de las caras inferior y superior de la pelicula, *
* respectivamente [M. S. Lucas, J. Appl. Phys v 38 p 1710,1965] *
* INTEGRACION GAUSSIANA CON 32 PUNTOS *
*****

```

```

implicit real*8 (a-h,o-z)
integer Nintg
parameter (Nintg=32)
dimension w(Nintg),x(Nintg)
data x/-0.997263861849481563545d0,-0.985611511545268335400d0,
* -0.964762255587506430774d0,-0.934906075937739689171d0,
* -0.896321155766052123965d0,-0.849367613732569970134d0,
* -0.794483795967942406963d0,-0.732182118740289680387d0,
* -0.663044266930215200975d0,-0.587715757240762329041d0,
* -0.506899908932229390024d0,-0.421351276130635345364d0,
* -0.331868602282127649780d0,-0.239287362252137074545d0,
* -0.144471961582796493485d0,-0.048307665687738316235d0,
* 0.048307665687738316235d0,0.144471961582796493485d0,
* 0.239287362252137074545d0,0.331868602282127649780d0,
* 0.421351276130635345364d0,0.506899908932229390024d0,
* 0.587715757240762329041d0,0.663044266930215200975d0,
* 0.732182118740289680387d0,0.794483795967942406963d0,
* 0.849367613732569970134d0,0.896321155766052123965d0,
* 0.934906075937739689171d0,0.964762255587506430774d0,
* 0.985611511545268335400d0,0.997263861849481563545d0/

data w /0.007018610009470096600d0,0.016274394730905670605d0,
* 0.025392065309262059456d0,0.034273862913021433103d0,
* 0.042835898022226680657d0,0.050998059262376176196d0,
* 0.058684093478535547145d0,0.06582222776361846838d0,
* 0.072345794108848506225d0,0.078193895787070306472d0,
* 0.083311924226946755222d0,0.087652093004403811143d0,
* 0.091173878695763884713d0,0.093844399080804565639d0,
* 0.095638720079274859419d0,0.096540088514727800567d0,
* 0.096540088514727800567d0,0.095638720079274859419d0,
* 0.093844399080804565639d0,0.091173878695763884713d0,
* 0.087652093004403811143d0,0.083311924226946755222d0,
* 0.078193895787070306472d0,0.072345794108848506225d0,
* 0.06582222776361846838d0,0.058684093478535547145d0,
* 0.050998059262376176196d0,0.042835898022226680657d0,
* 0.034273862913021433103d0,0.025392065309262059456d0,
* 0.016274394730905670605d0,0.007018610009470096600d0/

```

c Requiere de las funciones Asinp,psif

```

q0=1.d0-p0
qd=1.d0-pd
u1=q0+qd
v1=p0*qd+pd*q0
v2=p0*pd
res2=0.d0

```

```
do kk=1,Nintg
```

```
u=0.5d0*(x(kk)+1.d0)
```

```
us=u*u
```

```

st=dsqrt(1.d0-us)
dorp=dor/st
dolp=dol/st

res1=0.d0
if (dor.eq.0.d0) then
    a2=0.5d0
else
    a2=dmin1(0.5d0,1.d0/dorp)
end if

do jj=1,Nintg
    yod=a2*(x(jj)+1.d0)
    yorp=yod*dorp
    yolp=yod*dolp
    phim=1.570796327d0-Asinp(1.d0-yorp)
    if (dorp.ge.2.0d0) then
rolp=dol/dorp

        a1=0.5d0*(3.141592654d0-phim)
        b1=0.5d0*(3.141592654d0+phim)
        res=0.d0
        do ii=1,Nintg
            phi=a1*x(ii)+b1
            psi=psif(phi,yorp,yolp)
            Bpsi=2.d0*(rolp*(3.141592654d0-phi)+psi)
            psip=Bpsi-psi
            et=dexp(-psi)
            etp=dexp(-psip)
            Bet=dexp(-Bpsi)

```

```

res=res+w(ii)*(et+etp)*(q0/(1.d0-p0*Bet)+qd/
*
(1.d0-pd*Bet))
end do
res=a1*res
else
phic=1.570796327d0-Asinp(dorp-yorp-1.d0)
a1=0.5d0*(phic-phim)
b1=0.5d0*(phic+phim)
resa=0.d0
do ii=1,Nintg
phi=a1*x(ii)+b1
psi=psif(phi,yorp,yolp)
Bpsi=psi-psif(phi,yorp-dorp,yolp-dolp)
et=dexp(-psi)
Bet=dexp(-Bpsi)
resa=resa+w(ii)*et*(u1+v1*Bet)/(1.d0-v2*Bet*Bet)
end do
resa=a1*resa
a1=0.5d0*(3.141592654d0-phic)
if (dabs(a1).le.1.d-05) then
res=resa
else
b1=0.5d0*(3.141592654d0+phic)
rolp=dol/dorp
resb=0.d0
do ii=1,Nintg
phi=a1*x(ii)+b1

```

```

psi=psif (phi,yorp,yolp)

Bpsi=2.d0*(rolp*(3.141592654d0-phi)+psi)

psip=Bpsi-psi

et=dexp(-psi)

etp=dexp(-psip)

Bet=dexp(-Bpsi)

resb=resb+w(ii)*(et+etp)*(q0/(1.d0-p0*Bet)+qd/

*
(1.d0-pd*Bet))

end do

res=resa+a1 *resb

end if

end if

res1=res1+w(jj)*res

end do

res2=res2+us*a2*w(kk)*res1

end do

cratio=1.d0-0.75d0*res2/3.141592654d0

return

end

real*8 function psif (phi,x,y)

*****
* Retorna      psi=(r/l)*(phi+beta-1.570796327d0); donde      *
* beta = dasin(y/r+dcos(phi))                               *
*****

implicit real*8 (a-h,o-z)

z=dcos(phi)

zs=z*z

d=1.d0-zs

```

```

xp=x/d
if (dabs(xp).lt.1.d-01) then
    b0=y/dsqrt(d)
    b1=0.5d0*z
    b2=0.1666666667d0+0.3333333333d0*zs
    b3=z*(0.375d0+0.25d0*zs)
    b4=0.075d0+zs*(0.6d0+zs*0.2d0)
    b5=z*(0.3125d0+zs*(0.8333333333d0+zs*0.1666666667d0))
    psif=b0*(1.d0+xp*(b1+xp*(b2+xp*(b3+xp*(b4+xp*b5))))
    return
end if

psif=y*(phi+Asinp(x+z)-1.570796327d0)/x

return

end

real*8 function Asinp (x)
implicit real*8 (a-h,o-z)
if (x.ge.1.d0) then
    Asinp= 1.570796326794897d0
else if (x.le.-1.d0) then
    Asinp= -1.570796326794897d0
else
    Asinp=dasin(x)
endif
return
end

```

```
real*8 function Chis (d,datos,u,p0,pd)
```

```
*****
* Retorna el valor de Chis = chi cuadrado = suma del los cuadrados de *
* las desviaciones entre la teoria de Way & Kao y los datos experimen- *
* tales de delta rho sobre rho, dados los valores de los parametros de *
* reflectividad p0 y pd *
*****
```

```
implicit real*8 (a-h,o-z)
```

```
dimension datos(7), B(7)
```

```
data B/0.d0,1.5d0,3.d0,4.5d0,6.d0,7.5d0,9.d0/
```

```
Chis=0.d0
```

```
dol=dexp(u)
```

```
call Way_Kaop(cratipl,dol,pd,p0,0.d0)
```

```
coeff=1.256d5*d
```

```
do ii=1,7
```

```
    dor=coeff*B(ii)
```

```
    call Way_Kaop (cratio,dol,pd,p0,dor)
```

```
    res=cratipl/cratio-1.d0
```

```
    Chis=Chis+(res-datos(ii))**2
```

```
end do
```

```
return
```

```
end
```

```
***** Ajuste de la resistividad *****
* carga=1.60219*10**(-19)d0carga electron en coulomb *
* espesor= espesor de la pelicula *
* alpha=espesor/libre libre: camino libre medio *
* sigcero=resistividad del grueso
* cambio(5,100)
* campo(100)=campo magnetico en tesla
*****
```

```
c subroutine falsa
```

```
implicit complex*16 (a-h,o-z)
```

```
real*8 carga,espesor,kF,ene,hbarra,cte,tesis,masa
```

```

real*8 ii,kk,pd,p0,cratio,alpha,resistividad,tauimp
real*8 cres,diferencia,dif,aa,pp,dd,test,sigcero

open (1, FILE = 'resisricardo1-tauimp.dat')

carga=1.6021917d-19
hbarra=1.0545919d-34
ene=5.9d28
kF=12.0d9
cte=ene*carga*carga/(hbarra*kF)
p0=1.0d0
masa=9.103897d-31
*****69*****
espesor=69.0d-9
c resistividad=7.26843d0
resistividad=7.01213d0

pd=0.0d0

do kk=1,10
dif=10.0d0
alpha=0.001d0

do ii=1,100
sigcero=cte*espesor/alpha
call Way_Kao (cratio,alpha,pd,p0,0.0d0)
cres=1.0d0/cratio
resis=(cres/sigcero)*1.0d9
diferencia=(resistividad-resis)**2
if (diferencia<dif) then
dif=diferencia
aa=alpha
pp=p0
dd=pd
test=resis
endif
alpha=alpha+0.01d0
end do
tauimp=masa*espesor/(hbarra*kF*aa)
write (1,10) espesor,aa,pp,dd,test,tauimp

pd=pd+0.1d0

end do
*****
*****93*****
espesor=93.0d-9
resistividad=4.72577d0
c resistividad=4.8825d0

pd=0.0d0

do kk=1,10

```

```

dif=10.0d0
alpha=0.001d0

do ii=1,100
    sigcero=cte*espesor/alpha
    call Way_Kao (cratio,alpha,pd,p0,0.0d0)
    cres=1.0d0/cratio
    resis=(cres/sigcero)*1.0d9
    diferencia=(resistividad-resis)**2
    if (diferencia<dif) then
        dif=diferencia
        aa=alpha
        pp=p0
        dd=pd
    test=resis
    endif
    alpha=alpha+0.01d0
end do
tauimp=masa*espesor/(hbarra*kF*aa)
write (1,10) espesor,aa,pp,dd,test,tauimp

pd=pd+0.1d0

end do
*****
*****150*****
espesor=150.0d-9
resistividad=3.28419d0

c    resistividad=3.11326d0

pd=0.0d0

do kk=1,10
    dif=10.0d0
    alpha=0.001d0

do ii=1,100
    sigcero=cte*espesor/alpha
    call Way_Kao (cratio,alpha,pd,p0,0.0d0)
    cres=1.0d0/cratio
    resis=(cres/sigcero)*1.0d9
    diferencia=(resistividad-resis)**2
    if (diferencia<dif) then
        dif=diferencia
        aa=alpha
        pp=p0
        dd=pd
    test=resis
    endif
    alpha=alpha+0.01d0
end do
tauimp=masa*espesor/(hbarra*kF*aa)
write (1,10) espesor,aa,pp,dd,test,tauimp

```

```

pd=pd+0.1d0

end do
*****
*****185*****
    espesor=185.0d-9
    resistividad=2.14457d0

c    resistividad=2.1747d0

    pd=0.0d0

    do kk=1,10
        dif=10.0d0
        alpha=0.001d0

        do ii=1,100
            sigcero=cte*espesor/alpha
            call Way_Kao (cratio,alpha,pd,p0,0.0d0)
            cres=1.0d0/cratio
            resis=(cres/sigcero)*1.0d9
            diferencia=(resistividad-resis)**2
            if (diferencia<dif) then
                dif=diferencia
                aa=alpha
                pp=p0
                dd=pd
            test=resis
            endif
            alpha=alpha+0.01d0
        end do

        tauimp=masa*espesor/(hbarra*kF*aa)
        write (1,10) espesor,aa,pp,dd,test,tauimp

        pd=pd+0.1d0

    end do
*****
10  format (D22.10,D22.10,D22.10,D22.10,D22.10,D22.10)
    stop
end

```

///aquí la subrutina de Way y Kao