

**ESTUDIO DE LA TRANSICIÓN DE FASE
METAL-SEMICONDUCTOR EN DIÓXIDO DE VANADIO**

Por

Fabián Blanco Sierra

Una tesis presentada en cumplimiento parcial de los requisitos para el grado de

MAESTRÍA EN CIENCIAS

en

FÍSICA

**UNIVERSIDAD DE PUERTO RICO
RECINTO DE MAYAGÜEZ**

2015

Aprovado por:

Félix Fernández, Ph.D
Miembro, Comité Graduado

Fecha

Sergiy Lysenko, Ph.D
Miembro, Comité Graduado

Fecha

Héctor Jiménez González, Ph.D
Presidente, Comité Graduado

Fecha

Silvestre Colón, M.S.
Representante de Estudios Graduados

Fecha

Rafael Ramos, Ph.D
Director de Departamento

Fecha

Abstract of Thesis Presented to the Graduate School
of the University of Puerto Rico in Partial Fulfillment of the
Requirements for the Degree of Maestría en Ciencias

**STUDY OF METAL-INSULATOR PHASE TRANSITION ON
VANADIUM DIOXIDE**

By

Fabián Blanco Sierra

2015

Chair: Héctor Jiménez
Major Department: Physics

In this thesis we made a study about the Metal-Insulator phase transition with the purpose to determine, particularly, the parameters to play a important rol in the transition. For this we made a study of theories or models that exist currently about materials with different grade of disorder, the importance of correlation between electrons and the dimensionality of the system. Finally we choose for the treatment of our data a model derived from the scaling theory.

We implemented a curve fit to experimental data of Electric Conductance G Vs Temperature, in thin film of Vanadium Dioxide VO_2 , and we obtained a specific functional form for carrier density δn in function of temperature. Additionally we define a rough criteria of critical region in terms of a interval of conductances that include the critical conductance g_c .

We proposed functional forms for curve fit of the conductance g in function of T to regions out of critical region, they been valid for our experimental data. All this for describe a full hysteresis cycle.

Finally we make a brief discussion about the values of found parameters on every one of the region.

Resumen de Tesis Presentado a Escuela Graduada
de la Universidad de Puerto Rico como requisito parcial de los
Requerimientos para el grado de Maestría en Ciencias

**ESTUDIO DE LA TRANSICIÓN DE FASE
METAL-SEMICONDUCTOR EN DIÓXIDO DE VANADIO**

Por

Fabián Blanco Sierra

2015

Consejero: Héctor Jiménez

Departamento: Física

En esta tesis se realizó un estudio sobre la transición de fase metal-aislante en VO_2 con el fin de determinar, en particular, los parámetros que juegan un papel importante en la transición. Para esto se hizo un estudio de las teorías o modelos existentes sobre materiales que presentan diferentes grados de desorden, la importancia de la correlación entre electrones y la dimensionalidad del sistema. Finalmente se escogió para la descripción un modelo derivado de la teoría de escala (*Scaling Theory*).

Se implementó un ajuste de curva a los datos experimentales de conductancia eléctrica G vs temperatura T en película delgada de dióxido de vanadio obteniéndose la forma funcional específica para la densidad de portadores δ en función de la temperatura. Además se determinó un estimativo de la región crítica en términos de un intervalo de conductancias que incluye el valor de la conductancia crítica g_c .

Se proponen formas funcionales para los ajustes de curva de la conductancia g en función de la temperatura para regiones fuera de la región crítica y que incluyan datos experimentales con el objetivo de describir un ciclo de histéresis en una muestra

de V_{O_2} . Finalmente se hace una breve discusión sobre los valores de los parámetros encontrados en cada una de las regiones.

Derechos de autor © 2015

por

Fabián Blanco Sierra

Esta tesis está dedicada a quienes a base de trabajo persistente han logrado, de alguna u otra forma, aportes al desarrollo de la Física. Sus ejemplos han sido para mi una gran fuente de inspiración en momentos de falta de claridad.

AGRADECIMIENTOS

Quisiera dar mis sinceros agradecimientos a mi profesor consejero Dr. Héctor Jiménez por su continuo apoyo y orientación en mi estudio e investigación de tesis. Su motivación, dedicación y constancia fueron de gran apoyo en este proceso.

Tambien quiero agradecer a los miembros del comite graduado por su apoyo y disposición a aclarar dudas en todo momento.

A mis amigos y colegas quienes me apoyaron y me colaboraron durante todo el proceso. En especial a Pedro Torres quien me sugirió la idea de usar el programa para cálculos *R Software*.

Por último a mis padres quienes han sabido alentarme y apoyarme a través de los años en todas mis etapas de formación.

Índice general

	<u>página</u>
ABSTRACT ENGLISH	II
RESUMEN ESPANOL	IV
AGRADECIMIENTOS	VIII
Índice de cuadros	XI
Índice de figuras	XII
1. Introducción	1
1.1. Mecanismos de la MIT	3
1.2. Localización por desorden	4
1.2.1. Transición de filtración	5
1.2.2. Localización de Anderson	6
1.3. Teorías actuales de la MIT	7
1.3.1. Formulacion de escala fenomenológica	7
1.3.2. Teorías de escala de transiciones mediadas por el desorden	8
1.4. Materiales con desorden	8
1.5. El nuevo enfoque	9
1.6. Dióxido de Vanadio	9
2. EL Modelo de escala	10
2.1. Localización de Anderson	10
2.2. Teoría de escala	13
2.3. La función β	14
2.3.1. Debil desorden	15
2.3.2. Gran desorden	16
2.3.3. Transición entre metal y aislante	17
2.3.4. $g = f(\delta n, T)$	18
2.4. Transición metal-aislante	18
3. Resultados Y Discusión	21
3.1. Gráfica de la función de ajuste	21
3.2. Características de la muestra de VO_2	23
3.3. En busca de la región crítica	23
3.3.1. Forma funcional de $g(T)$ en la fase aislante	27
3.3.2. Forma funcional de $g(T)$ en la fase metálica	28

3.4.	Longitud de localización ξ para nuestra muestra de VO_2	30
3.5.	Gráfica de la función β	32
	3.5.1. Posible trabajo futuro	32
4.	CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS	34

Índice de cuadros

Tabla

página

3-1. Valores de los parámetros de ajuste para el ciclo completo de histéresis.
Los parámetros ν^* se escojen como parámetros fijos al implementar el
respectivo ajuste. 30

Índice de figuras

<u>figura</u>		<u>página</u>
1-1.	Barreras de potencial en una muestra de material.	5
1-2.	Estructuras cristalina(ordenada) y amorfa(con desorden).	8
2-1.	Funciones de onda unidimensional extendida y localizada.	11
2-2.	Potencial aleatorio y distribución espacial de las funciones de onda en una muestra.	11
2-3.	Trayectoria de una partícula a través de impurezas.	13
2-4.	Funcion β Vs $\text{Ln}(g)$, [1]	17
3-1.	Gráfica de ajuste con los valores iniciales de los parámetros de ajuste .	23
3-2.	Seis datos experimentales. Sin datos originados por splines	24
3-3.	8 datos experimentales	24
3-4.	10 datos experimentales	25
3-5.	Ciclo de histéresis en una muestra de $V\text{O}_2$	29

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

La transición metal-aislante, *MIT* por sus siglas en inglés, es uno de los mas antiguos y fundamentalmente menos entendidos problemas en materia condensada. Teorías simples han sido exitosas describiendo materiales que son buenos aislantes o buenos metales. Sin embargo las propiedades físicas de esos materiales que describen esas teorías son muy estables lo que impide, por ejemplo, explorar nuevos e interesantes fenómenos.

El panorama es mas prometedor en materiales en donde se adicionan portadores de carga a la red huesped. Los mas comunes son los semiconductores dopados que llevaron al descubrimiento del transistor.

En sistemas compuestos de materiales elementales que están cerca de la MIT las propiedades físicas cambian dramáticamente con la variación de los parámetros de control tales como la densidad de portadores de carga δ , la temperatura T o campos magnéticos externos.

Desde el punto de vista teórico el problema es difícil debido principalmente a que en los límites de buen aislante y buen metal se tienen dos sistemas físicos muy diferentes, donde cada sistema puede ser descrito por medio de excitaciones elementales muy diferentes.

En metales : cuasipartículas fermiónicas que corresponden a electrones con energías por encima de la energía de Fermi

En aislantes : excitaciones bosónicas colectivas tales como fonones o ondas de espín

En el régimen intermedio de la MIT ambos tipos de excitaciones coexisten por lo

que modelos teóricos simples no son muy útiles. Por esta razón este régimen resulta difícil de entender desde el punto de vista práctico y conceptual.

En diversos materiales complejos, en particular óxidos de metales de transición, la ocurrencia de la MIT a menudo es acompañada por cambios en la simetría magnética y simetría estructural.

Enfoques convencionales para la descripción del problema han resultado insatisfactorios por lo que se ha optado por nuevos enfoques. Estos últimos enfatizan la importancia de la correlación fuerte entre electrones (*strong correlation*) que corresponde a la interacción de Coulomb entre electrones de conducción y electrones que pertenecen a los átomos de la red huésped.

Cuando la correlación entre electrones es importante la condición que presenta el material es la de un aislante de tipo Mott (*Mott Insulator*).

Existen diversos estudios en sistemas en donde la descripción de la MIT tiene en cuenta la correlación entre electrones [2] y [3]

Algunas descripciones teóricas para electrones débil y fuertemente correlacionados :

1. Débilmente correlacionados

- LDA : *Local Density Approximation*
- *Hartree Fock Theory*

2. Fuertemente correlacionados

Los efectos de las correlaciones electrónicas en las propiedades de los materiales son profundos, [4] . La interacción entre los grados de libertad internos de electrones d y f (tales como espín, carga y momento orbital) hacen de estos sistemas muy sensibles a cambios en los parámetros externos tales como temperatura, presión y dopaje. Los modelos o teorías existentes :

- *Hubbard Model*
- *Gutzwiller approximation*
- *Dinamic Mean Field Theory*
- *Lattice Fermions Models* : modelos usados para describir sistemas compuestos de elementos de transición de la tabla periódica

3. Débil o Fuertemente correlacionados

- Teoría de escala(*Scaling Theory*)

En esta tesis se usará un modelo extraido de la teoría de escala

1.1. Mecanismos de la MIT

Según la teoría de estructura de bandas del electrón si la energía de Fermi E_F , el valor de la energía correspondiente al estado más alto ocupado por un electrón, está dentro de una brecha de energía entonces el material presenta la condición de aislante. Si la E_F cae en una banda de energías con estados disponibles entonces el material será un conductor.

Sin embargo, en algunas situaciones prácticas, la teoría de bandas ha probado ser insatisfactoria.

La teoría de bandas describe la dinámica de un electrón que se mueve a través de un sólido mientras que el efecto de los demás electrones está contenido en una aproximación del potencial eléctrico(un pseudopotencial) que siente el electrón de conducción. Esta aproximación es válida cuando la energía cinética K del electrón es considerablemente mayor que las demás escalas de energía, por ejemplo, la correlación entre electrones o la dispersión por impurezas. Estos términos de energía pueden ser incluidos en la teoría siendo tratados como pequeñas perturbaciones.

Al considerar materiales cerca de la MIT los términos de energía potencial derivados de las correlaciones electrónicas o del desorden(interacción impurezas-electrón) son

comparables a la energía de Fermi por lo que el estado base del sistema puede cambiar de condición llegando a estar localizado. El material no conduce, sin embargo la teoría no predice ninguna brecha de energía en esa situación, [5].

1.2. Localización por desorden

Una pequeña concentración de impurezas o defectos producen dispersión aleatoria de los electrones móviles. En metales ordinarios la energía cinética de los electrones es mucho mayor que el potencial aleatorio producido por las impurezas, por lo que pueden ser considerados como pequeñas perturbaciones.

En esta condición la conductividad toma la forma

$$\sigma \approx \frac{ne^2\tau}{m} \quad (1.1)$$

donde n es la concentración de portadores, e y m son la carga y masa del electrón.

La cantidad τ está relacionado con la rata de dispersión de transporte R como

$$R = \frac{1}{\tau}$$

donde $R = f(T)$ es función de la temperatura y da cuenta de las dispersiones por varias fuentes(canales), como por ejemplo, impurezas, fonones, etc.

En esta descripción la resistividad en función de la temperatura tiene la forma

$$\rho(T) \approx \rho_o + AT^n \quad (1.2)$$

con $A > 0$ y n que depende del proceso de dispersión. La resistividad ρ_o se puede ver como una medida de la dispersión por impurezas.

Por otro lado en sistemas con baja densidad de portadores el potencial producido por las impurezas es comparable o mayor que la energía de Fermi por lo que los electrones estarán localizados.

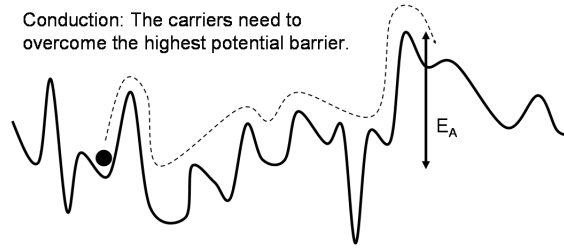


Figura 1–1: Barreras de potencial en una muestra de material.

http://groups.physics.umn.edu/disorder/research_si.html

Al considerar temperaturas $T \neq 0$ los electrones tendrán activación térmica logrando vencer la barrera de potencial por lo que estos dejarán de estar localizados, figura (1–1).

En el límite de temperaturas bajas ($T \rightarrow 0$) típicamente se observa una transición metal-aislante continua al aumentar la energía de Fermi por medio del incremento de la densidad de portadores n

$$\sigma(T = 0) \sim (n - n_c)^\mu \quad (1.3)$$

El exponente μ se conoce como exponente crítico y caracteriza el punto crítico en la transición a través de su valor, que depende de la forma del desorden. Se observa que la forma funcional es de ley de potencias [5].

1.2.1. Transición de filtración

Considere la situación en la que el potencial producido por el desorden es lo suficientemente suave y produce localización de los electrones conocida como *Percolation transition*. A medida que se agregan electrones al sistema el fluido electrónico inicialmente llenará los pozos de potencial más profundos (regiones de menor energía) formando regiones o charcos de electrones. A bajas temperaturas en regiones donde este potencial es mayor que E_F no habrán electrones ocupando estados, esto es, dichas regiones serán aislantes. Si aumentamos la densidad de electrones n (esto es aumentamos E_F) los charcos de electrones crecen en extensión hasta conectarse

entre si logrando establecer la condición metálica para el material.

Algunos valores hallados para μ por algunos autores :

- 2 para el caso tridimensional
- 1,3 para el caso bidimensional

Las predicciones de esta teoría, para determinados sistemas, han sido comparadas con los experimentos obteniendo resultados satisfactorios [5] .

En otros sistemas, semiconductores dopados, se han encontrado valores de $\mu \approx 0,5$ mostrando un alejamiento considerable con los valores aceptados para la teoría.

Lo anterior hace pensar si es necesario incluir los efectos cuánticos o incluir los efectos de correlación de Coulomb para lograr una descripción mas precisa.

La teoría no tiene en cuenta el tunelamiento que pueden hacer los electrones a través de las barreras de potencial que separan las regiones ocupadas por electrones que están localizados.

1.2.2. Localización de Anderson

El primero en discutir la situación de localización de electrones debido a un potencial aleatorio fue P. W. Anderson, [6], en 1958.

Si el desorden es lo suficientemente fuerte los valores de la energía de dichos estados estarán incluidos en una estrecha banda de energía

Si el desorden es débil unicamente los estados en el fondo de la banda estarán localizados. Sin embargo los estados que tienen energías que están por encima de cierto valor de energía crítica E_c , llamada borde de movilidad (*mobility edge*), continúan extendidos.

Si se incrementa la E_F , dopando el material, se incrementan el número de estados extendidos hasta que el sistema experimente una MIT de Anderson.

Para el entendimiento del comportamiento de la transición en el punto crítico se han desarrollado teorías de escala (*scaling theories*) para el problema de localización, [7], y se han obtenido avances en estudios numéricos del problema. Esto se ha logrado para el caso de electrones no-interactuantes.

Para este caso los estados estarán localizados para dos o menos dimensiones mientras que para tres o mas dimensiones se presentará una MIT continua.

En experimentos sobre algunos sistemas se han encontrado valores de $\mu \lesssim 1$. Esto evidencia la necesidad de incluir en la teoría los efectos de las interacciones entre electrones.

1.3. Teorías actuales de la MIT

Las ideas de Anderson y Mott especificaban el mecanismo de la MIT pero no daban detalles del comportamiento crítico o del tipo de la transición de fase.

En la actualidad se sabe que la MIT en semiconductores dopados es una transición de fase continua y de segundo orden lo cual posee algunas similitudes con el fenómeno crítico convencional, [5].

Algunos resultados experimentales han sido interpretados usando conceptos de escala(*scaling*), [7] y [1], y versiones extendidas de las anteriores donde se incluyen los efectos de las interacciones [8] y [9] .

1.3.1. Formulacion de escala fenomenológica

Teorías microscopicas que describen la MIT aún son controversiales y de alguna forma incompletas.

Sin embargo una descripción de escala resulta ser mas robusta y general que cualquier enfoque de aproximación o modelo microscópico. Una hipótesis fenomenológica de escala puede ser formulada para el fenómeno cuántico-crítico de manera análoga al fenomeno crítico convencional, [5]. Esta descripción es útil cuando se quiere analizar

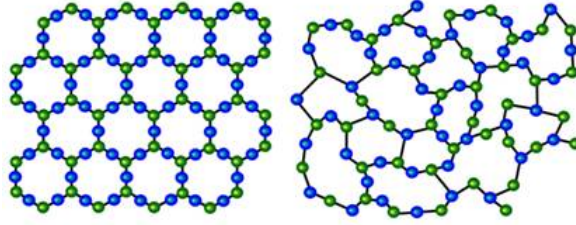


Figura 1-2: Estructuras cristalina(ordenada) y amorfa(con desorden).

<http://www.bnc.hu/?q=node/24>

los datos experimentales de manera sistemática y no se dispone de una teoría microscópica. Esto ocurre en varios sistemas en dos dimensiones.

1.3.2. Teorías de escala de transiciones mediadas por el desorden

Una descripción alternativa del comportamiento crítico se da a través de la formulación de la función β . Esta formulación tiene implícita algunas suposiciones que se verán mas adelante.

1.4. Materiales con desorden

Materiales cristalinos han sido estudiados desde los orígenes de la mecánica cuántica. La periodicidad del cristal permite describir las funciones de onda del electrón por medio de ondas de Bloch y con esto calcular las estructuras de bandas de materiales cristalinos, [1].

En la vida real los materiales poseen diferentes grados de desorden. Esto es, impurezas hospedadas en diferentes sitios de la red cristalina huésped alterando así la periodicidad del cristal, figura (1-2).

En el caso de débil desorden la situación se describe por medio de la dispersión de ondas Bloch por impurezas. Esto conduce a la ecuación de transporte de Boltzmann

$$\sigma(T) = \sigma_o - A\sigma_0^2 T^n \quad (1.4)$$

En el límite de gran desorden el enfoque tradicional consiste en forzar algún tipo de periodicidad promedio sobre el sistema y luego aplicar los conceptos usados para

materiales ordenados. Este enfoque se ha mostrado que es insatisfactorio por lo que se optó por introducir nuevos conceptos.

1.5. El nuevo enfoque

El nuevo enfoque trabaja con dos aspectos diferentes del problema :

1. *Localización de Anderson*

Trata con la función de onda de un electrón que esta inmerso en un potencial de tipo aleatorio.

2. *Correlación de Coulomb*

En esta situación los electrones no se mueven libremente, a través del material, sino que lo hacen de manera difusiva debido a la interacción Coulombiana entre los electrones de conducción y los electrones que hacen parte de los átomos del cristal.

1.6. Dióxido de Vanadio

El dióxido de vanadio(VO_2) es un prototipo de óxido de electrones fuertemente correlacionados. En materiales en 3D(*bulk*) este óxido muestra una transición Metal-Aislante, de primer orden, al descender la temperatura por debajo de los $68\text{ }^\circ\text{C}$. Con la transición se producen cambios en la conductividad eléctrica de algunos ordenes de magnitud lo que hace de este material un excelente candidato para numerosas aplicaciones en óptica, electrónica y en dispositivos optoelectrónicos, [10].

Capítulo 2

EL MODELO DE ESCALA

2.1. Localización de Anderson

En 1958 Anderson señaló que la función de onda de un electrón que está inmerso en un potencial aleatorio podría estar localizada si el potencial es lo suficientemente aleatorio.

Potencial Aleatorio : en un material que presenta algún grado de desorden los valores de las energías para cada eigen-estado están distribuidos espacialmente de manera aleatoria en la muestra, figura 2-2. Dichos valores obedecen a cierta distribución estadística de energías con ancho de la distribución W .

En la descripción clásica las impurezas dispersan al electrón (ondas de Bloch) pero la función de onda (combinación lineal de ondas de Bloch) se mantiene extendida a través del material, figura (2-1).

Si el grado de desorden es grande la función de onda podría estar localizada, esto es,

$$|\Psi(\vec{r})| \sim \text{Exp} \left[\frac{|\vec{r} - \vec{r}_o|}{\xi} \right]$$

donde \vec{r}_o es la posición donde es mas probable encontrar al electrón y ξ es la longitud de localización, figura 2-2 .

El régimen de transporte para materiales con desorden que poseen portadores de

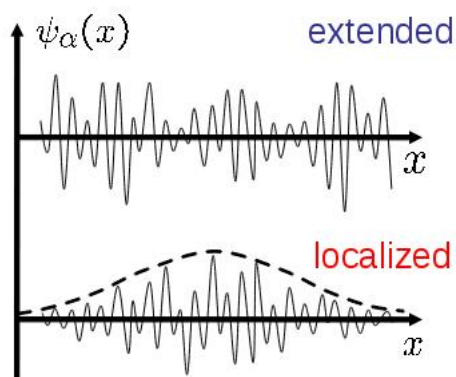


Figura 2-1: Funciones de onda unidimensional extendida y localizada.
<https://www.google.com.pr/search?q=extended+states>

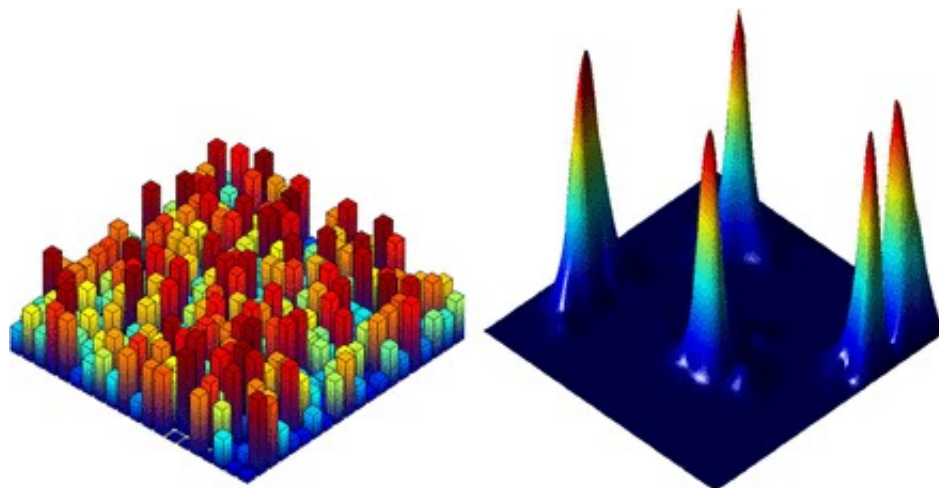


Figura 2-2: Potencial aleatorio y distribución espacial de las funciones de onda en una muestra.

<http://www.pnas.org/content/109/37/14761/F1.expansion.html>

carga localizados es el modo de salto (*Hopping Mode*).

En este régimen los electrones se mueven por medio de tunelamiento mientras que los iones lo hacen venciendo las barreras de potencial eléctrico entre estados espacialmente localizados. Las probabilidades locales de transición entre tales estados tienen una distribución de magnitudes bien ancha siendo exponencialmente dependientes de la energía y de las distancias intersticiales para electrones, y distancias intersticiales de las barreras de potencial para iones.

Transición entre estados de energías E_i y E_f : un electrón en un eigenestado de energía E_i dispone de un valor de energía V para hacer la transición a un estado de energía E_f cuya energía estará comprendida entre E_i y $E_i + V$.

$V \equiv V_{ij}$ es conocido como elemento matricial de salto (*Hopping Matrix Element*) entre niveles de energías E_i y E_j

La condición que se debe cumplir para que un potencial eléctrico sea lo suficientemente aleatorio es que V sea pequeño comparado con el ancho de la distribución W : $V \ll W$. En esta situación el electrón tendrá la posibilidad de hacer la transición a un número reducido de eigenestados con energía entre E_i y $E_i + V$. Esta situación corresponde a una muestra con alto grado de desorden.

Por otro lado, existen diferentes criterios para establecer la relación entre V y W que determinan el grado de desorden, [11].

Se han realizado estudios numéricos para estudiar los efectos del potencial aleatorio, en materiales con diferente grado de desorden, en cuanto a la localización de electrones. Algunos de esos estudios se han realizado en sistemas bidimensionales ya que resultan menos laboriosas las simulaciones que en el caso tridimensional. Un resultado de estos estudios arroja un criterio para la cantidad de desorden (relación entre V y W), en determinados sistemas, necesaria para localizar a los electrones en una banda de energías. Esto resulta en desacuerdo con el criterio establecido por Anderson en su trabajo original.

Como se dijo anteriormente si el grado de desorden es grande en la muestra la función de onda del electrón estará localizada :

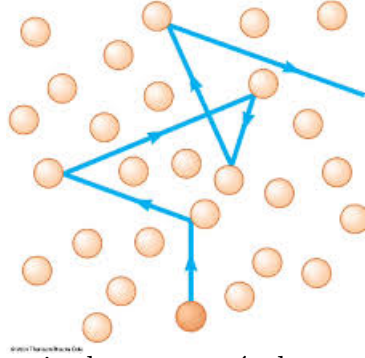


Figura 2-3: Trayectoria de una partícula a través de impurezas.

<https://www.google.com.pr/search?q=mean+free+path>

- Orbitales que tienen un solapamiento significativo corresponden a energías muy diferentes, $E_i + V < E_f$, por lo que la transición entre orbitales con energías E_i y E_f será poco probable.
- Orbitales que corresponden a valores de energías muy cercanas estarán muy alejados espacialmente. En esta situación se satisface $E_i + V > E_f$ pero el solapamiento de las funciones de onda es muy pequeño por lo que estando el electrón en una posición inicial \vec{r}_i será muy poco probable encontrarlo en una posición final \vec{r}_f .

Así en el límite de gran desorden la función de onda del electrón estará localizada.

2.2. Teoría de escala

Consideremos un electrón moviéndose a través de una muestra de material que posea cierto grado de desorden.

La distancia en la cual la fase de su función de onda cambia en 2π define la longitud de camino promedio ℓ , que corresponde a la distancia promedio en la que se mueve el electrón de manera libre. Esta es la longitud de escala microscópica de interés en la condición de la localización del electrón, figura (2-3).

La conductancia $g_o \equiv g(\ell)$ a esta escala corresponde a una medida microscópica del desorden siendo pequeña si el grado de desorden es grande y viceversa.

Para gran desorden $g_o \ll g_c$ y para pequeño desorden $g_c \ll g_o$, donde g_c se conoce

como conductancia crítica.

Dependiendo del grado de desorden la conductancia tendrá dos formas funcionales dependientes con el tamaño de la muestra L , $g_{Met}(L)$ para el caso de pequeño desorden o $g_{ins}(L)$ para el caso de gran desorden, [1]:

- si $g_o < g_c$ entonces la conductancia $g(L)$ disminuirá con el aumento en la longitud de escala L .

Cuando el potencial es lo suficientemente aleatorio la forma funcional para la conductancia será

$$g(L) \propto \exp(-L/\xi) \quad (2.1)$$

con ξ longitud de correlación. Esta longitud determina la región en donde el valor de la función de onda tiene un valor apreciable.

- si $g_c < g_o$ entonces la conductancia $g(L)$ aumentará con el aumento en la longitud de escala L .

En este caso la conductancia de una pieza grande ($L \gg \ell$) esta dada por la Ley de Ohm

$$g(L) = \sigma L^{d-2} \quad (2.2)$$

Aquí d es la dimensionalidad del sistema. Para el caso tridimensional, $d = 3$, la conductancia aumenta con el tamaño del sistema

En situaciones reales las muestras cumplen $L \gg \ell$.

2.3. La función β

La función

$$\beta = \frac{d(\ln g)}{d(\ln L)} \quad (2.3)$$

describe la forma en que la conductancia g cambia con el cambio en el tamaño efectivo del sistema L . Para una bien definida longitud de camino promedio ℓ se

requiere que $L \gg \ell$.

La conductancia G tiene unidades de inverso de la resistencia eléctrica $\frac{1}{\Omega}$. Para el caso de materiales óhmicos

$$G = \frac{1}{R} = \frac{I}{V}$$

La conductancia g , que aparece en esta y en paginas anteriores, está relacionada con G por medio de

$$g = \frac{G}{e^2/\hbar} = G \frac{\hbar}{e^2} \quad (2.4)$$

Esta definición se hace con el objetivo de definir una conductancia sin unidades. Cuando se haga referencia a la conductancia g debe entenderse como la conductancia sin unidades definida en (2.4).

2.3.1. Debil desorden

En un buen metal donde el grado de desorden es bajo la conductividad es grande y finita(aún en $T = 0$).

En este caso la ley de Ohm es válida, ecuación (2.2), por lo que (3.12) está dada por la función β correspondiente [12]

$$\beta = (d - 2) + \frac{C}{g^\alpha} + \dots \quad (2.5)$$

donde C es una constante y α es un exponente que parametriza la forma en que el sistema se acerca a la fase metálica en $g \rightarrow \infty$.

Aunque $g = f(L)$, β depende explícitamente de g y no depende explícitamente de L . Esto significa que el cambio en el valor de la conductancia a una escala determinada(un determinado valor de L) depende del valor de la conductancia a una escala menor.

Originalmente los autores en [7] y [11] supusieron que el cambio efectivo en el grado de desorden del sistema cuando este aumenta de tamaño dependía del valor de este desorden a una escala menor, esto es, de la conductancia.

Para $d = 3$ la función β será positiva indicando que la conductancia aumenta con el tamaño efectivo de la muestra. Esto es consistente con el hecho de que el valor de la conductancia a la menor escala ($\sim \ell$) es mayor que cierto valor crítico g_c : $g_{met} > g_c$.

Para un buen metal se tiene que $g_{met} \gg g_c$

2.3.2. Gran desorden

Para un gran grado de desorden se espera que los electrones formen estados localizados, con ξ longitud característica de localización. En esta situación se tiene que la conductancia a menor escala es menor al valor crítico g_c : $g_{ins} < g_c$. En esta situación la conductancia decrecerá con el aumento del tamaño del sistema L , [1],

$$g_{insulator} \sim \exp(-L/\xi)$$

$$g_{ins} = \frac{A}{e^{\frac{L}{\xi}}}$$

ξ en general es mayor que ℓ aunque $L \gg \xi$, luego,

$$g_{ins} \ll A$$

con A conductancia constante. Para un buen aislante

$$g_{ins} \ll g_c \tag{2.6}$$

por lo que podemos identificar a la constante A como g_c . Al usar en la relación para la conductancia en la fase de aislante

$$g_{ins}(L) = \frac{g_c}{e^{\frac{L}{\xi}}} \tag{2.7}$$

La función β correspondiente es

$$\beta_{ins} = \ln \left[\frac{g_{ins}}{A} \right]$$

$$A \equiv g_c$$

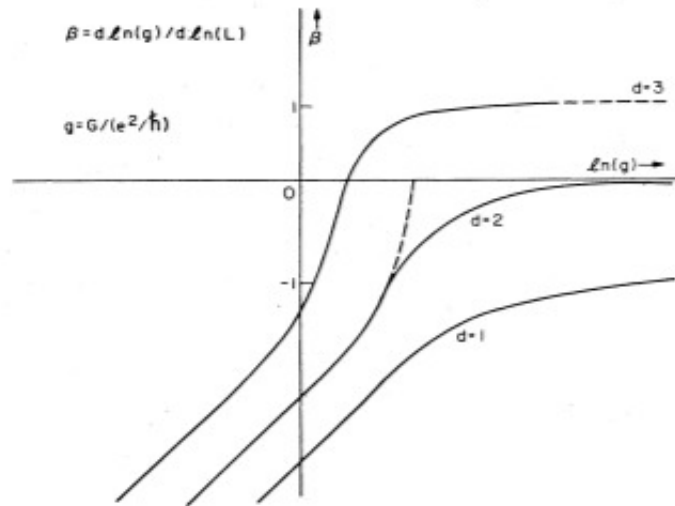


Figura 2-4: Funcion β Vs $\ln(g)$, [1]

$$\beta_{ins} = \ln \left[\frac{g_{ins}}{g_c} \right] \quad (2.8)$$

Note que β_{ins} es negativa en la región en que esta definida

La gráfica que describe las relaciones (2.8) y (2.5) aparece en la figura 2-4.

2.3.3. Transición entre metal y aislante

La función β se conoce en los límites de gran y pequeño desorden y es razonable suponer que es continua entre estos dos límites. En particular habrá un cambio de signo en β al pasar de una región a otra.

En la transición

$$\beta(g)|_{g=g_c} = 0$$

Grado de desorden intermedio

Consideremos la situación de desorden intermedio, esto es, la conductancia en las vecindad de g_c , conocida como región crítica, con g_o radio de la vecindad.

En la región crítica

$$g_c - g_o < g < g_c + g_o$$

se encuentra una forma funcional para la función β que preserve una forma logarítmica, característica de la forma funcional de β en la fase aislante (relación 2.8, [12]). Por esta razón se puede aproximar la función β por

$$\beta_{crit} = \frac{1}{\nu} \underbrace{\ln \left[\frac{g_{crit}}{g_c} \right]}_{\equiv t} + O(t^2) \quad (2.9)$$

donde $\frac{1}{\nu}$ es el valor de la pendiente en $g_{crit} = g_c$:

$$\left. \frac{d\beta(g_{crit})}{dg_{crit}} \right|_{g_{crit}=g_c}$$

La variable

$$t = \ln \left[\frac{g_{crit}}{g_c} \right]$$

se introduce como variable de escala. Para determinar el comportamiento de la conductancia en la región crítica es suficiente considerar la aproximación lineal de la función β_{crit} cerca de su valor cero en $t = 0$

2.3.4. $g = f(\delta n, T)$

Se define la distancia al punto crítico δn en términos de la densidad de portadores n :

$$\delta n = \frac{n - n_c}{n_c} \quad (2.10)$$

con n_c la densidad de portadores en el punto crítico, esto es, $n_c \equiv n|_{punto\ crítico}$. Si queremos hallar la forma de $g = f(\delta n, T)$ en un rango de valores de g que incluyan las fases de aislante, la transición y la fase metálica debemos considerar las diferentes formas funcionales de β , relaciones (2.8), (2.9) y (2.5).

2.4. Transición metal-aislante

Como es la forma de $g(T)$ en la MIT ?

En el punto crítico, $g = g_c$, la función beta es 0 : $\beta(g_c) = 0$.

En la fase aislante, $0 < g < g_c$, la función beta es logarítmica en g [12]

$$\beta(g) = \ln\left(\frac{g}{g_c}\right)$$

En la región crítica cerca a g_c , consideramos la aproximación lineal de la función beta . Definimos

$$t = \ln\left(\frac{g}{g_c}\right)$$

con esto

$$\beta = \frac{d \ln(g(L))}{d \ln L} = \frac{dt}{d \ln L} \equiv \beta(t)$$

luego la aproximación lineal

$$\frac{dt}{d \ln L} \approx \frac{1}{\nu} t + O(t^2)$$

Integrando a ambos lados con respecto a L , lado derecho, y con respecto a t , lado izquierdo,

$$t(L) = t_o * \left(\frac{L}{\ell}\right)^{1/\nu}$$

con $t_o = \ln\left(\frac{g_o}{g_c}\right)$. En la MIT $g_o \lesssim g_c$

$$\ln\left(\frac{g(L)}{g_c}\right) = \underbrace{\ln\left(\frac{g_o}{g_c}\right)}_{\text{Taylor expansion}} * \left(\frac{L}{\ell}\right)^{1/\nu}$$

Recordando que $g_o \lesssim g_c$ luego tomamos $g_o = g_c - \varepsilon$ con $\frac{\varepsilon}{g_c} \ll 1$

$$\ln\left(\frac{g_c - \varepsilon}{g_c}\right) = \ln\left(1 - \frac{\varepsilon}{g_c}\right) \approx -\frac{\varepsilon}{g_c} = \underbrace{\frac{g_o - g_c}{g_c}}_{\propto \delta n}$$

donde δn corresponde a la definición (2.10). Con lo anterior

$$\frac{g(L)}{g_c} = \exp\left[A\delta n * \left(\frac{L}{\ell}\right)^{1/\nu}\right]$$

con A una constante adimensional. Al considerar valores de T cada vez mayores existirá un tamaño efectivo de la muestra L_{eff} por lo que

$$\frac{L}{\ell} \rightarrow \frac{L_{eff}}{\ell}$$

Usando la relación

$$\frac{L_{eff}}{\ell} = \frac{1}{T^{1/z}} \quad (2.11)$$

, extraída de la referencia [12], junto con la anterior se obtiene

$$g(L) = g_c * exp \left[sgn(\delta n) * A * \left(\frac{\overbrace{T_o(\delta n)}^{\sim |\delta n|^{\nu z}}}{T} \right)^{\frac{1}{\nu z}} \right]$$

donde z se conoce como exponente dinámico (*dynamical exponent*) y con A del orden de la unidad (~ 1).

Capítulo 3

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Como se sabe la transición de fase de VO_2 ocurre para cristales perfectos, es decir, una transición entre dos estructuras cristalinas. Entonces, ¿por qué se justifica el uso de un modelo basado en localización de Anderson? En nuestra situación se tiene una lámina delgada, condición que dista mucho de ser un cristal perfecto. Las láminas delgadas son policristalinas y tienen una gran cantidad de defectos y desorden. Por esta razón se justifica implementar un ajuste de curva obtenido a partir de un modelo basado en localización de Anderson.

A continuación escogemos los valores de algunas constantes y la forma funcional de $\delta(T)$ previo a la implementación del ajuste a nuestros datos

3.1. Gráfica de la función de ajuste

- La expresión a graficar es

$$g(\delta n, T) = g_c \mathcal{E}^{\delta n * A * B * \left[\frac{1}{T}\right]^{\frac{1}{\nu z}}} \quad (3.1)$$

- δn tiene una dependencia con la temperatura. Se hace cero en el punto crítico :
 - Forma tentativa

$$\delta n(T) = a^* \sqrt[r]{T - T_c} = a [T - T_c]^{\frac{1}{r}} \quad (3.2)$$

donde a y r son parámetros a ser ajustados.

δn se hace cero en la transición por lo tanto se conoce como parámetro de orden,[13].

- A es una constante adimensional y ~ 1
- $T_o(\delta n) \sim |\delta n|^{\nu z}$
 - $T_o(\delta n) = B |\delta n|^{\nu z}$, con $B = 10$. Este valor se puede tomar de manera arbitraria ya que este se absorbe en $B * (a)^{\nu z}$, con a parámetro a ser ajustado.

$$g(\delta n, T) = g_c * \exp\left(10 * a * \left\{T - T_c\right\}^{\frac{1}{r}} * \left[\frac{1}{T}\right]^{\frac{1}{\nu z}}\right)$$

- *correlation length exponent ν* : busqué en la literatura un valor y escogí uno de 0,85(standard percolation theory), [14] y [5]
- Se espera que z tenga valor 2 en el regimen convencional difusivo, [12] .
- Temperatura crítica $T_c = 341$

$$g(T) = g_c * \exp\left(10 * a * \left\{T - 341\right\}^{\frac{1}{r}} * \left[\frac{1}{T}\right]^{\frac{1}{1,7}}\right) \quad (3.3)$$

Los parámetros a ajustar son :

- g_c
- a
- r o $\frac{1}{r}$

Para el ajuste de curva se utilizó el programa para cálculos *R Software*, paquete muy usado en cálculos de Estadística.

Inicialmente trabajé con la función de ajuste (3.3) asignandole valores a los parámetros de ajuste hasta encontrar unos valores que me produjeran una gráfica de la curva de ajuste 3.3 aproximada o cercana a la gráfica que producen los datos experimentales. Los resultados aparecen en la figura 3-1

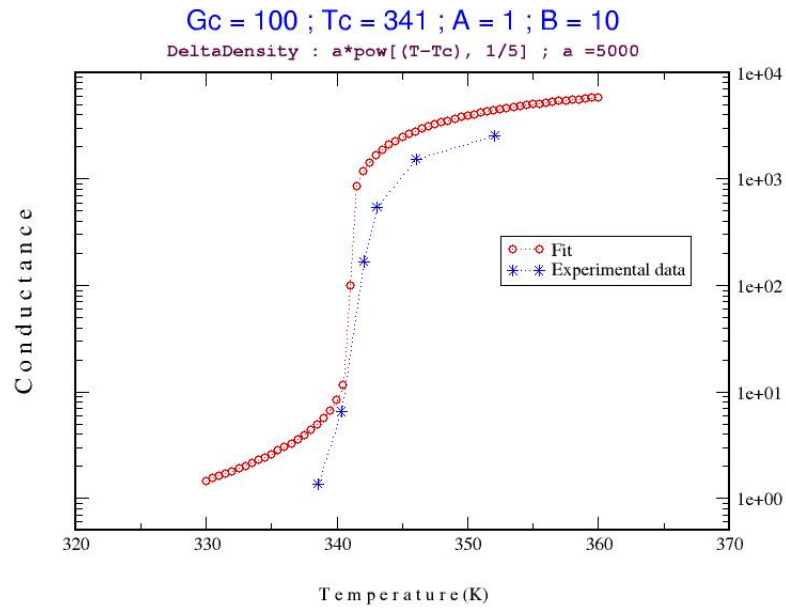


Figura 3–1: Gráfica de ajuste con los valores iniciales de los parámetros de ajuste

3.2. Características de la muestra de VO_2

Los datos experimentales que se usaron para implementar los ajustes de curva corresponden a medidas de resistencia eléctrica vs temperatura en una película delgada de VO_2 , de alta calidad, y de carácter policristalino. El espesor (*thickness*) de la película es de 250nm . El tamaño L de la muestra es de $0,012\text{m}$

3.3. En busca de la región crítica

1. Se realizó un ajuste considerando 6 datos experimentales (para tres valores de temperatura menores a $T_c = 341$ y tres valores de temperatura mayores). Los resultados aparecen en la figura (3–2)
2. Después se consideraron 8 datos experimentales (4 por debajo y 4 por arriba de T_c) mas tres obtenidos con la aplicación de splines. Figura 3–3
3. Finalmente se consideraron 10 datos experimentales más 6 que añado con splines. Figura 3–4

Se observa que el mejor ajuste se obtiene al considerar seis datos experimentales.

Dicho ajuste produjo los valores de los parámetros de ajuste :

- $g_c = 28,075$

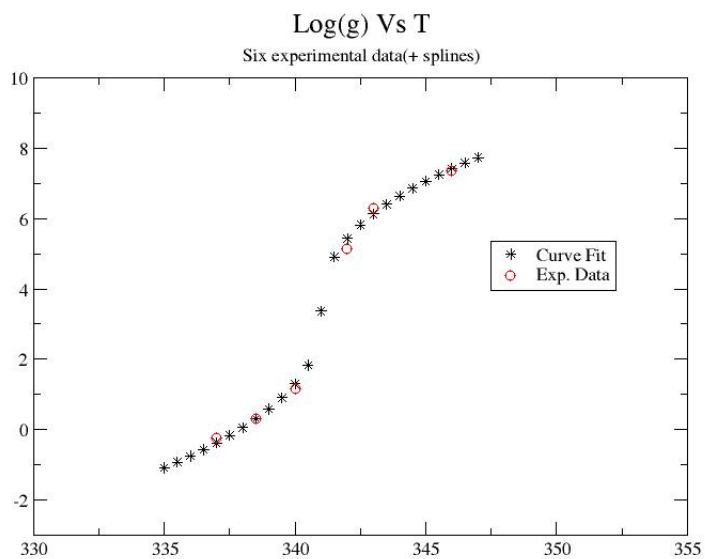


Figura 3-2: Seis datos experimentales. Sin datos originados por splines

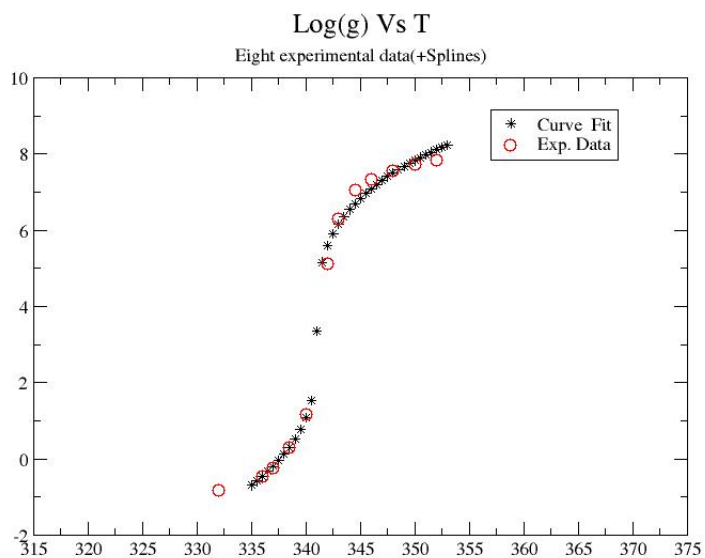


Figura 3-3: 8 datos experimentales

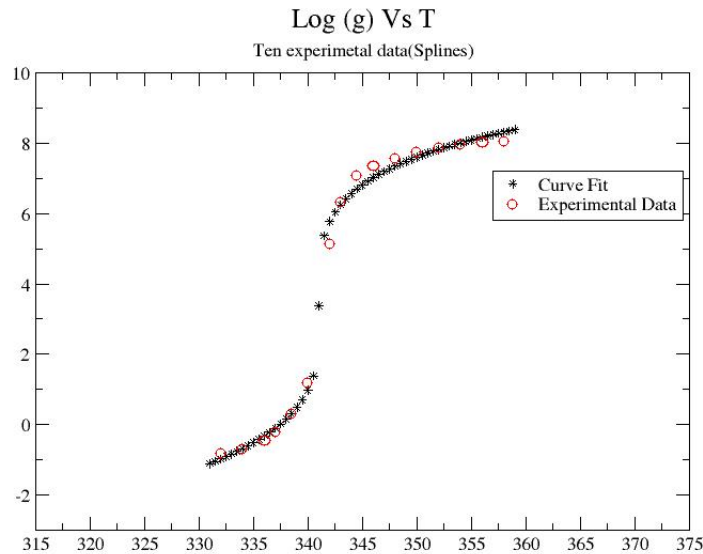


Figura 3–4: 10 datos experimentales

- $a = 6,343$
- $r = 2,402$

El valor de la constante g_c corresponde al valor de la conductancia g para el cual ocurre la transición.

Con los parámetros a y r se tiene la siguiente relación

$$\delta n(T) = 6,343 \left[T - T_c \right]^{\frac{1}{2,402}}$$

, obtenida a partir de la expresión (3.2).

- $\delta n(T)$ se conoce como el parámetro de orden ya que se hace cero en el punto crítico.
- $r = 2,402$ se conoce como exponente crítico y se dice que caracteriza a la transición con la variación de la temperatura. Para las tres regiones
 - Aislante : $r = 10,213$ (*se verá mas adelante*)
 - Transición : $r = 2,402$
 - Metal : $r = 12,06$ (*se verá mas adelante*)

Se observa que para la transición este exponente es menor siendo esto consistente con un cambio mayor en el valor de g , para un mismo incremento en la temperatura, si se compara cuando se tienen las regiones de aislante y metal, figura 3-5.

- La constante $a = 6,343$ es una constante de proporcionalidad que caracteriza el parámetro de orden con la región en cuestión :
 - Aislante : $a = 6,072$ (*se verá mas adelante*)
 - Transición : $a = 6,343$
 - Metal : $a = 41,1$ (*se verá mas adelante*)

Se observa entonces que el cambio en el parámetro de orden δn , para un mismo cambio en la temperatura, será mayor para la fase de buen conductor, es decir, metálica.

Criterio que define nuestra región crítica

En la referencia [15] el autor considera una buena aproximación de la curva (3.3) a los datos experimentales en un amplio intervalo de conductancias dado por

$$\frac{1}{4}g_c < g < 4g_c \quad (3.4)$$

Si consideramos dicho intervalo en nuestros datos experimentales encontramos que la variación en la temperatura es de apenas dos grados, es decir, un grado por encima de T_c y un grado por debajo. Esto implica considerar unicamente dos datos experimentales, un dato por arriba y otro por abajo de T_c .

Al considerar tres datos experimentales por arriba de T_c y tres por abajo el rango de conductancias correspondiente es de

$$\frac{1}{33}g_c < g < 56g_c$$

o

$$\frac{1}{8} * \left(\frac{1}{4}g_c\right) < g < 14 * (4g_c) \quad (3.5)$$

que es considerablemente mayor al rango (3.4). Por lo tanto el rango de valores de g dado por (3.5) es un buen estimativo para la región crítica determinada por nuestros datos.

3.3.1. Forma funcional de $g(T)$ en la fase aislante

Para regiones fuera de la región crítica y en la fase aislante : en la región crítica se escogió el valor de la pendiente en (2.9) como $\frac{1}{\nu} = \frac{1}{0,85}$. Fuera de la región crítica y en la fase aislante podemos usar la relación (2.9) pero asignando el valor de 1 a dicha pendiente.

Al hacer esto se estará considerando la forma de β en la fase de buen aislante, relación (2.8). Aunque existe un rango grande de conductancias(o temperaturas) entre la región crítica y la región de buen aislante el ajuste de curva obtenido justificará o no haber tomado $\frac{1}{\nu} = \frac{1}{1}$ como un buen estimativo para la pendiente en (2.9). La motivación para esto es que se tiene cierta libertad en los valores de los parámetros de ajuste para obtener un buen ajuste de curva.

Repitiendo el procedimiento realizado en la sección 2.3 se llega al ajuste de curva (3.1) donde se debe usar $\nu = 1$. Con esto

$$g(\delta n, T) = g_c E^{\delta n * A * B * \left[\frac{1}{T}\right]^{\frac{1}{z}}}$$

y luego se procede hasta obtener el ajuste de curva (3.3) pero en la versión de la fase aislante

$$g_{ins}(T) = g_c * exp\left(10 * a * \left\{T - 341\right\}^{\frac{1}{r}} * \left[\frac{1}{T}\right]^{\frac{1}{2}}\right) \quad (3.6)$$

Los valores de los parámetros $g_c = 28,075$ y $T_c = 341$ ya son conocidos de la sección anterior. El nuevo ajuste debe implementarse con los nuevos datos experimentales, para temperaturas por debajo de T_c , donde este tiene únicamente dos parámetros a ser ajustados, a y r .

Los resultados obtenidos después de implementar el ajuste son :

- $a = 6,072$
- $r = 10,213$

El ajuste de curva correspondiente para la fase aislante aparece en la figura 3-5. Como se observa el buen ajuste a los datos justifica el uso de $\frac{1}{\nu} = 1$ en la pendiente de (2.9).

3.3.2. Forma funcional de $g(T)$ en la fase metálica

Para regiones fuera de la región crítica y en la fase metálica : en esta situación podemos dejar a ν como parámetro libre. Con esto

$$g_{met}(T) = g_c * exp\left(10 * a * \{T - 341\}^{\frac{1}{r}} * \left[\frac{1}{T}\right]^{\frac{0,5}{\nu}}\right) \quad (3.7)$$

por lo que los nuevos parámetros a ser determinados son a , r y ν . Para implementar el ajuste se requieren datos experimentales con temperaturas mayores a T_c y fuera de la región crítica.

Los valores obtenidos para los parámetros fueron

- $a = 41,1$
- $r = 12,06$
- $\nu = 0,625$

produciendo un ajuste de curva en la figura (3-5).

Al considerar los valores de ν en fase aislante($\frac{1}{\nu} = 1$), transición($\frac{1}{\nu} = \frac{1}{0,85} = 1,18$) y metal($\frac{1}{\nu} = \frac{1}{0,625} = 1,6$) observamos que la pendiente de la curva en la función β se

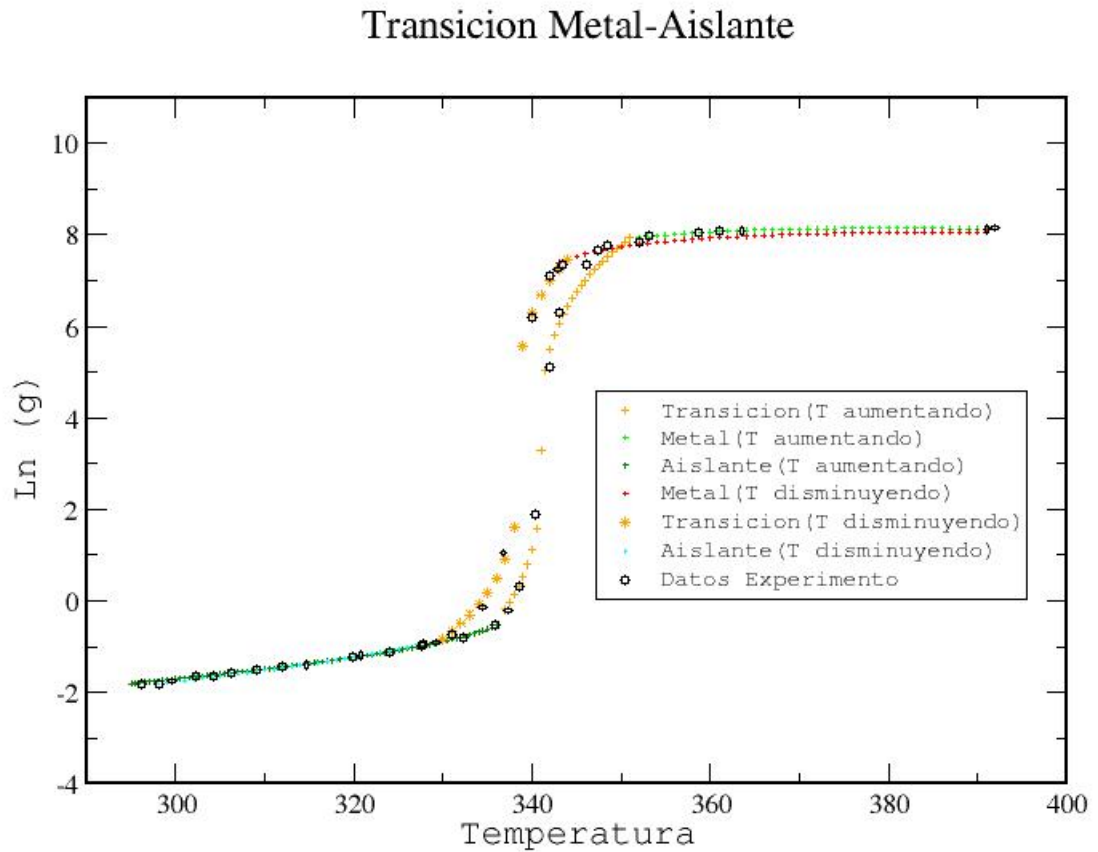


Figura 3-5: Ciclo de histéresis en una muestra de V_0_2 incrementa lo que es consistente con la figura (2-4). En la figura 3-5 también aparecen los ajustes de curva (aislante, transición y metal) cuando la temperatura desciende.

Los valores de los parámetros de ajuste obtenidos para el ciclo completo de histéresis aparecen en la tabla 3-1

Al comparar con la situación en la que la temperatura aumenta lo más evidente es que existen dos temperaturas T_c a las cuales sucede la transición.

Se observa que los valores de los parámetros ν , a y r para temperaturas en ascenso son aproximados a sus correspondientes valores para temperaturas en descenso. Sin

cc	Temperatura en aumento. $T_c = 341$	Temperatura en descenso . $T_c = 338$
	$\nu^* = 1$	$\nu^* = 1$
Aislante	$a = 6,072$	$a = 6,556$
	$r = 10,213$	$r = 10,273$
	$\nu^* = 0,85$	$\nu^* = 0,85$
Transición	$a = 6,343$	$a = 7,391$
	$r = 2,402$	$r = 3,571$
	$\nu = 0,625$	$\nu = 0,622$
Metal	$a = 41,1$	$a = 36,7$
	$r = 12,06$	$r = 9,1$

Cuadro 3–1: Valores de los parámetros de ajuste para el ciclo completo de histéresis. Los parámetros ν^* se escogen como parámetros fijos al implementar el respectivo ajuste.

embargo se observa una menor aproximación para la fase metálica. Esto se debe principalmente a que el número de datos experimentales que se usaron para el ajuste fueron cuatro , para temperatura en ascenso, frente a tres datos para temperatura en descenso. Por otro lado los datos para temperaturas mayores podrian corresponder a la fase de buen metal, donde la conductancia cambia de comportamiento, es decir, empieza a decrecer con la temperatura. Como se observa del ajuste de curva 3.7 la conductnacia aumenta con el aumento de la temperatura para la fase metálica

3.4. Longitud de localización ξ para nuestra muestra de VO_2

Al considerar la relación (2.7) quisimos determinar el valor de la longitud de localización ξ para nuestra muestra de VO_2 . La relación es

$$g_{ins}(L) = \frac{g_c}{e^{\frac{L}{\xi}}}$$

Reescribiendo esta expresión

$$\ln \left[\frac{g_{ins}(\ell)}{g_c} \right] = -\frac{L}{\xi}$$

el valor del logaritmo natural es negativo, ya que $g_{ins} \ll g_c$, luego

$$\ln \left[\frac{g_{ins}(\ell)}{g_c} \right] = \frac{L}{\xi} \quad (3.8)$$

Para esto se requieren los valores de g_c , el tamaño de la muestra L y el valor de $g_{ins}(L)$ hallado a partir de la relación para β_{ins} (relación 2.8).

Partiendo de la relación (2.8)

$$\beta_{ins} \equiv \frac{d \ln g}{d \ln L} = \frac{d \ln g}{dg} \frac{dg}{d \ln L} = \ln \left[\frac{g_{ins}}{g_c} \right] \quad (3.9)$$

Después del procedimiento de integración, donde se usa la relación

$$\int \frac{1}{x \ln(x)} dx = \ln | \ln(x) |$$

, y después de algunos procedimientos algebraicos se obtiene

$$\frac{L}{\ell} | \ln(g(\ell)/g_c) | = | \ln(g(L)/g_c) |$$

El signo de los logaritmos será negativo. Simplificando la escritura

$$\ln \left[\frac{g(L)}{g_c} \right] = \frac{L}{\ell} \ln \left[\frac{g(\ell)}{g_c} \right]$$

Retomando la expresión (3.8), y usando el anterior resultado obtenemos

$$\frac{L}{\xi} = \ln \left[\frac{g(L)}{g_c} \right] = \frac{L}{\ell} \ln \left[\frac{g(\ell)}{g_c} \right]$$

Reescribiendo para ξ

$$\xi = \frac{\ell}{\ln \left[\frac{g(\ell)}{g_c} \right]} \quad (3.10)$$

Esto es, requerimos de la longitud de camino medio ℓ y valor de la conductancia a esa escala $g(\ell)$. El valor de g_c para nuestra muestra es conocido.

Para tener una idea del orden de magnitud de el valor de ξ usamos un valor de $\ell \approx 2,8\text{\AA}$ a $T = 360^\circ K$ extraido de la referencia ([16])

La cantidad en el denominador se halla por medio de la relación (3.6), usando (2.11) y tomando $L = \ell$. Haciendo eso se obtiene

$$\ln \left[\frac{g(\ell)}{g_c} \right] \sim 10^2$$

Finalmente se tiene para la longitud de localización ξ , relación (3.10),

$$\xi = 10^{-2} * \ell \tag{3.11}$$

Este resultado indica una localización extrema que no corresponde a un comportamiento físicamente razonable. Este resultado es indicativo de las limitaciones físicas de nuestro modelo.

3.5. Gráfica de la función β

3.5.1. Posible trabajo futuro

La función β para la fases aislante, transición y metálica se puede graficar a apartir de nuestros ajustes de curva (3.6) (3.3) y (3.7). Para esto se considera la definición de la función β

$$\beta = \frac{d \ln g}{d \ln L}$$

usando la regla de la cadena

$$\beta = \frac{d \ln g}{d \ln L} = \frac{d \ln g}{dg} \frac{dg}{d \ln L} = \frac{d \ln g}{dg} \frac{dg}{dL} \frac{dL}{d \ln L} \tag{3.12}$$

el término importante es

$$\frac{dg}{dL}$$

Para hacer esa derivada se requiere hallar $g(L)$ a partir de (3.3)

$$g(T) = g_c * exp\left(10 * a * \left\{T - T_c\right\}^{\frac{1}{r}} * \left[\frac{1}{T}\right]^{\frac{1}{\nu z}}\right) \quad (3.13)$$

y usando la relación

$$\frac{L}{\ell} = \frac{L_{eff}}{\ell} = \frac{1}{T^{1/z}} \quad (3.14)$$

Una vez se obtiene $g(L)$ se hace la derivada y se reemplaza en (3.12) obteniendose la forma final para la función beta

$$\beta = \frac{10a}{\ell^\nu} \left[\nu \ell^{\nu-1} (T - T_c)^{1/r} T^{(1-\nu)/z} - \frac{z \ell^{\nu-1}}{r} T^{(z+1-\nu)/z} (T - T_c)^{-1+1/r} \right] \quad (3.15)$$

esta relación está en terminos de T ya que se volvió a usar la relación (2.11).

Para un valor de temperatura T se hallan

- $g(T)$ con la relación (3.13) y con este valor se halla $ln g$
- el valor de β con la relación (3.15)

El procedimiento se repite para todos los valores de T , en las tres regiones : aislante ($\nu = 1$), transición ($\nu = 0,85$) y metal ($\nu = 0,625$). Hay que considerar que para cada región existen valores diferentes de los parámetros ν , r y a .

Finalmente se podría graficar β vs $ln(g)$. El objetivo de hacer esa gráfica sería comparar con el resultado de la figura 2-4.

Capítulo 4

CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

1. La forma funcional asumida para $\delta n(T)$, forma (3.2), define un ajuste de la curva a los datos experimentales para la región crítica en nuestros datos, figura 3-2.
2. Se encuentra que la forma funcional para β en la transición preserva una forma logarítmica(forma (2.9)) y funciona para nuestros datos.
3. El valor de la temperatura crítica encontrada a partir del ajuste de cuatro parámetros fue de $T_c = 340,6 \text{ }^\circ K$ muy aproximado al valor encontrado en la literatura por otros autores, $341^\circ K$, para películas delgadas de Dioxido de Vanadio VO_2 .

Para el caso de temperatura en descenso el valor fue de $T_c = 338,525$

4. El valor de la conductancia crítica encontrada es de $g_c = 23$, cantidad adimensional. Con este valor y con la relación (2.4) se halla la conductancia que tiene unidades de inverso de resistencia como $G_c = 28,075 * 2,57 \times 10^{-4} \frac{1}{\Omega} = 7,2 \times 10^{-3} \frac{1}{\Omega}$
5. El rango de conductancias que definen la región crítica para nuestros datos es de $\frac{1}{33}g_c < g < 56g_c$. Comparando este rango con el rango de conductancia (3.4), encontrado para otro tipo de muestra, se concluye que el tamaño de la región crítica depende del tipo de material de la muestra.
6. Considerando un incremento de temperatura constante se observa que los valores obtenidos del parámetro a para las tres regiones, aislante, transición y metal dan cuenta del hecho de que el parámetro de orden δn es mayor para el caso de la fase metálica. Esto implica que la densidad de portadores n es mayor en la fase metálica. Estos parámetros resultaron ser físicamente razonables.

7. Los valores de los parámetros r obtenidos para las tres regiones evidencian que los cambios en el valor de g son mayores en la región crítica cuando se consideran iguales incrementos de temperatura para las tres regiones. Dichos parámetros resultaron ser físicamente razonables.
8. El método de ajuste es bien efectivo ya que se tiene la flexibilidad en los valores que pueden tomar los parámetros a , r y ν en las formas (3.3), (3.6) y (3.7). El buen ajuste de los datos a los valores experimentales se puede apreciar en la figura 3-5. Una condición que se debe cumplir al momento de implementar los ajustes es el de no considerar valores experimentales de temperaturas muy cercanas a la temperatura crítica ya que esto produce valores muy grandes (infinitos) en la rutina que generan errores en el código de ajuste.
9. Como posible trabajo futuro se debería implementar el método usando un nuevo conjunto de datos experimentales con el objetivo de evaluar la efectividad del método.

Bibliografía

- [1] Patrick A. Lee and T. V. Ramakrishnan . Disordered electronic systems. *Review of Modern Physics, Vol. 57, No. 2*, 2:1029–1032, April 1985.
- [2] Atsushi Fujimori Masatoshi Imada and Yoshinori Tokura. Metal-insulator transitions. *Review Of Modern Physics*, 70, 1998.
- [3] B. I. Shklovskii A. L. Efros. Coulomb gap and low temperature conductivity of disordered systems. *J. phys. C: Solid State Phys*, 8:L49–L51, 1975.
- [4] Gabriel Kotliar and Dieter Vollhardt. *Strongly Correlated Materials : Insights From Dynamical Mean-Field Theory*. Physics Today, march edition, 2004.
- [5] V. Dobrosavljević. Introduction to metal-insulator transitions. *arXiv:1112.6166v1 [cond-mat.str-el]*, Dec 2011.
- [6] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *PHYSICAL REVIEW*, 109(5), 1958.
- [7] D. C. Licciardello T V. Ramakrishnan E. Abrahams, P. W. Anderson. Scaling theory of localization : Absence of quantum diffusion in two dimensions. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, 42(10):673–676, 1979.
- [8] A. M. Finkel'stein. Zh. eksp. teor. fiz. *Sov. Phys. JETP*, 57(97), 1983.
- [9] Castro C. Di Lee P.A. Castellani, C. and M. *PHYSICAL REVIEW b*, 30, 1984.
- [10] I. N. Ivanov J. D. Budai J. Z. Tischler E. Strelcov A. Kolmakov A. Teselev, A. Luk'yanchuk and S . V. Kalinin. Symmetry relationship and strain-induced transitions between insulating m1 and m2 and metallic r phases of vanadium dioxide. *Nano Letters*, 10:4409 – 4416, 2010.
- [11] D.C. Licciardello and D. J. Thouless. Conductivity and mobility edges for two-dimensional disordered systems. *J. Phys C: Solid State Phys*, 8, 1975.

- [12] E. Miranda V. Dobrosavljević, Elihu Abrahams and Sudip Chakravarty. Scaling theory of two-dimensional metal-insulator transitions. *arXiv: cond-mat/9704091v2 [cond-mat.dis-nm] 17 April 1997*, Apr 1997.
- [13] H. Eugene Stanley. *Introduction of Phase Transitions and Critical Phenomena*. Oxford Science Publications, 1987.
- [14] WEB. http://en.wikipedia.org/wiki/percolation_critical_exponents.
- [15] G. E. Bower J. E. Forneaux V. M. Pudalov S. V. Kravchenko, W. E. Mason and M. DiIorio. Scaling of an anomalous MIT in a two dimensional system in silicon at $b = 0$. *Physical review B*, 51, No 11, 1995.
- [16] D. Whisler D. Shrekenhamer B. G. Chae H. T. Kim M. M. Qazilbash, K. S. Burch and D. N. Basov. Correlated metallic state of vanadium dioxide. *arXiv:cond-mat/0611724v1 [cond-mat.str-el] 28 de Nov 2006*, 2008.