

UCH - FC
MAG - F
A681
C. 1

**Resistividad de películas metálicas
delgadas inducida por colisión
electrón-superficie rugosa y colisión
electrón-bordes de grano.**

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



por

Claudio Fernando Arenas Andrade

Enero, 2009

Director de Tesis: **Dr. Raúl Muñoz A.**

FACULTAD DE CIENCIAS
UNIVERSIDAD DE CHILE

INFORME DE APROBACIÓN
TESIS DE MAGÍSTER

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

Claudio Fernando Arenas Andrade

ha sido aprobada por la Comisión de Evaluación de la Tesis como requisito para optar al grado de Magíster en Ciencias con mención Física, en el examen de Defensa de Tesis rendido el día 3 de Noviembre de 2008.

Director y Codirector de Tesis

Dr. Raúl Muñoz A.

Dr. Luis Moraga

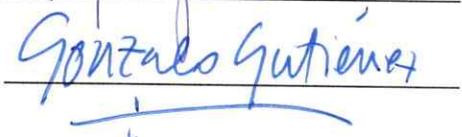
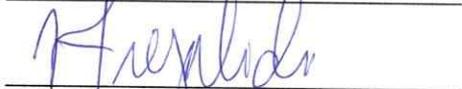
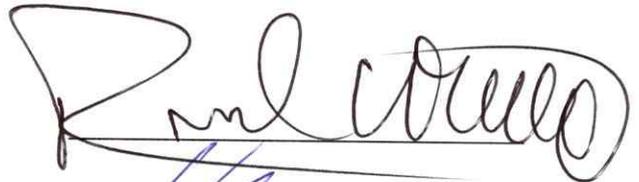
Comisión de Evaluación de la Tesis

Dr. Rodrigo Arias

Dr. Alejandro Cabrera

Dr. Víctor Fuenzalida

Dr. Gonzalo Gutierrez (Presidente)





AGRADECIMIENTOS



II

A mi familia por su apoyo.

A Raúl Muñoz y Luis Moraga, por ser excelentes motivadores.

A Alejandro Villegas y Guillermo Constanzo, por la oportunidad y paciencia brindadas.

A mis abuelos que espero me vean orgullosos desde donde estén.

Y por supuesto a todos quienes tuvieron algo que ver con que este posgrado, y en particular esta tesis llegara a buen término.



Índice

1. Introducción	1
2. Aspectos comunes y notación - Modelo de la película delgada	5
2.1. Camino libre medio.	8
3. Mecanismos de dispersión (scattering)	10
3.1. Scattering electrón-fonón	10
3.2. Scattering electrón-impurezas	11
3.3. Scattering electrón-superficie rugosa	11
3.4. Scattering electrón-dislocaciones-defectos morfológicos	12
4. Teoría de Mayadas y Shatzkes	13
4.1. Ecuación de transporte de Boltzmann	14
4.2. Efectos de los bordes de grano	15
4.3. Influencia de la rugosidad superficial	17
4.4. Expresión final para la conductividad y modificaciones a la teoría original	21
5. Teoría de G. Palasantzas	25
5.1. Formulación D. Calecki - situación de equilibrio térmico	25
5.2. Formulación D. Calecki - influencia de los campos externos.	28

5.3. Formulación D. Calecki - incorporación de la rugosidad superficial . . .	31
5.4. Formulación D. Calecki - aproximación de tiempo de relajación. . . .	34
5.5. Modificación de Palasantzas - scattering electrón-borde de grano. . .	35
5.6. Incorporación de mecanismos de scattering adicionales	38
5.7. Método numérico para invertir C	40
6. Exploración de parámetros	42
6.1. Formulación de Mayadas y Shatzkes - parámetros	42
6.2. Formulación de Mayadas y Shatzkes - resultados	43
6.3. Formulación de George Palasantzas - parámetros	48
6.4. Formulación de George Palasantzas - resultados	50
6.5. Ajustes con temperatura.	52
6.5.1. Resistividad fonónica.	52
6.5.2. Curvas.	54
7. Análisis y conclusiones	58
7.1. Resultados de la teoría de Mayadas y Shatzkes	59
7.2. Resultados de la teoría de Palasantzas	60
7.3. Conclusiones	60
A. Apéndice - Programas y fórmulas usados	62
A.1. Mayadas y Shatzkes	62
A.1.1. Programa principal	62
A.1.2. Función ThinFilmRatio2	63
A.1.3. Función BulkRatio	65
A.1.4. Función fMS	66



	v
A.2. Palasantzas	67
A.2.1. Programa principal	67
A.2.2. Función Palasantzas	68
A.2.3. Función gaussian	71
A.2.4. Función bessj0	72
A.2.5. Función bessj1	72
A.2.6. Función ludcmp	73
A.2.7. Función lubksb	74
Referencias	76





Índice de figuras

2.1. Configuración de la muestra y el campo eléctrico externo	6
2.2. Presencia de granos y de rugosidad superficial en películas metálicas delgadas	8
2.3. Representación de las estructuras en una película metálica delgada . .	8
4.1. Representación de las estructuras en una película metálica delgada de acuerdo al modelo de Mayadas y Shatzkes.	14
4.2. Descomposición del vector de onda \vec{k} , en sus componentes \vec{k}_t y k_x . . .	16
4.3. Condiciones de borde para la perturbación de la función distribución $\Phi(v_z, z)$	18
4.4. Representación de las estructuras en una película metálica delgada de acuerdo al modelo de Mayadas y Shatzkes modificado, considerando distintas reflectividades p_0 y p_t en las caras de la muestra.	21
4.5. Comportamiento de la conductividad y resistividad relativas como función de ℓ/D	24
5.1. Representación de la estructura de potenciales en una película metálica delgada de acuerdo al modelo inicial (no perturbado) de Daniel Calecki.	26

5.2. Representación del rol de la cantidad $W_{\nu,\nu'}(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel})$ en el proceso de scattering.	29
5.3. Representación de la rugosidad superficial, en una película metálica delgada de acuerdo al modelo de Daniel Calecki.	32
5.4. Autocorrelaciones superficiales en una película delgada de oro.	33
5.5. Representación de las estructuras en una película metálica delgada de acuerdo al modelo de George Palasantzas	36
5.6. Función $h(\vec{r}_{\parallel})$, definida como la desviación de la superficie respecto del espesor medido t , de acuerdo al modelo de G. Palasantzas.	37
6.1. Primera exploración de parámetros para la teoría de Mayadas y Shatzkes	44
6.2. Exploración del comportamiento de la resistividad relativa del modelo de Mayadas y Shatzkes.	46
6.3. Exploración del comportamiento de la conductividad relativa del modelo de Mayadas y Shatzkes.	48
6.4. Exploración del comportamiento de la conductividad relativa del modelo de Mayadas y Shatzkes en función del espesor.	48
6.5. Primera exploración de parámetros en la teoría de Palasantzas.	50
6.6. Segunda exploración de parámetros en la teoría de Palasantzas	51
6.7. Tercera exploración de parámetros en la teoría de Palasantzas - δ y ξ	51
6.8. Ajuste tipo spline cúbico de los datos de Matula	53
6.9. Ajuste de datos con temperatura.	55
6.10. Ajuste de datos con temperatura - acercamiento.	56



Índice de tablas

6.1. Parámetros fijos para el modelo de Mayadas y Shatzkes	43
6.2. Parámetros barridos para el modelo de Mayadas y Shatzkes	43
6.3. Parámetros barridos para el modelo de Mayadas y Shatzkes, en una exploración sin rugosidad superficial ni efectos de tamaño.	46
6.4. Parámetro fijo para el modelo de G. Palasantzas, correspondiente al oro.	49
6.5. Parámetros barridos para el modelo de G. Palasantzas.	49
6.6. Películas consideradas para el ajuste con temperatura.	54
6.7. Parámetros obtenidos del ajuste comparados con experimentos	56



RESUMEN

El aumento de la resistividad de una película metálica delgada originado en la dispersión de electrones por superficies rugosas y bordes de grano de una película metálica, constituye un problema que reviste una importancia tecnológica fundamental. Existen sólo dos teorías publicadas que describen este fenómeno y que no han sido comparadas entre sí. El propósito de esta tesis es realizar esta comparación.

La primera teoría de Mayadas y Shatzkes utiliza una descripción basada en la ecuación de transporte de Boltzmann aplicada al gas de electrones del metal, modelando los bordes de grano como deltas de Dirac. Adicionalmente los autores incluyen la influencia de la rugosidad superficial, asimilada a una condición de borde sobre la función de distribución de los portadores de carga. Esta formulación considera como parámetros las reflectividades superficiales, el espesor de la película metálica, la reflectividad del borde de grano, y finalmente, el tamaño promedio y la dispersión típica de estos granos.

La segunda teoría de George Palasantzas propone un formalismo cuántico para el gas de electrones, introducido originalmente por Calecki, incluyendo simultáneamente la influencia de la rugosidad superficial y de los bordes de grano mediante autocorrelaciones superficiales acopladas. Los parámetros de entrada de esta teoría son el tamaño promedio de los granos, el ancho de la película metálica, además de la longitud de correlación lateral ξ y amplitud cuadrática media δ que caracterizan la rugosidad superficial promedio al interior de un grano.

Las predicciones basadas en ambas teorías resultan comparables entre sí, aún cuando la teoría de Palasantzas describe un aumento monótono de la resistividad de la muestra al aumentar la amplitud rms de la rugosidad superficial. Este comportamiento no es compatible con el hecho de que los electrones sufren eventos de

scattering con corrugaciones que tienen lugar sobre una escala de longitudes comparable a la longitud de onda de Fermi. Tal limitación tiene su origen en el formalismo de Calecki, que sirve de marco teórico para la teoría de Palasantzas.

Cabe notar que a lo largo de este trabajo se obtuvieron por primera vez resultados numéricos de ambas teorías, lo que a su vez permitió compararlas entre si y con datos experimentales obtenidos a varias temperaturas.

ABSTRACT

The increment of the resistivity of a thin metallic film due to the scattering of electrons by rough surfaces and by grain boundaries which conform the metallic film, constitutes a problem of a fundamental technological importance. There are only two theories published which describe this phenomenon, that have not yet been compared to each other. The goal of the work presented in this thesis is to perform this comparison.

The first theory is that of Mayadas and Shatzkes, that uses a description based on a Boltzmann transport equation, applied to the electron gas in the metal, modeling the grain boundaries as a succession of Dirac's deltas. The authors add the influence of surface roughness, as a boundary condition imposed on the distribution function of the charge carriers. This formulation considers as parameters the reflectivities of the surfaces, the film thickness, the grain boundary reflection coefficient and, finally, the average and standard deviations of the diameter of the grains.

The second theory is that of George Palasantzas, which considers the quantum formalism, originally introduced by Calecki, including simultaneously the influence of surface roughness and of grain boundaries using a surface autocorrelation function that couples grain boundaries and surface roughness. The input parameters of this

theory are the average size of the grains, the film thickness, the lateral correlation length ξ and the r.m.s. amplitude δ of the average surface roughness within each grain.

The prediccions based on both theories are comparable, even if the Palasantzas's theory describes a monotonic increase of the resistivity of the sample with increasing rms amplitude of the surface roughness. This behavior is not compatible with the fact that electrons undergo scattering events by the corrugations which take place over a scale of length comparable to the Fermi wave length. This limitation arises from the formalism proposed by Calecki, which serves as theoretical framework for the theory of Palsantzas.

It should be noted that due to this work we have obtained, for the first time, numerical results from both theories, which allows us to perform the comparison between them, and also with experimental data obtained at various temperatures.

Capítulo 1

Introducción

Un problema importante en el ámbito de la física del sólido se refiere al efecto que la dispersión (o scattering como se denomina en inglés) 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 película metálica se torna comparable o inferior al camino libre medio de los portadores en el cristal. Este problema se conoce en la literatura bajo el nombre de *efectos de tamaño*.

El modelo de una película metálica delgada considerada como un monocristal limitado por dos superficies rugosas es una simplificación que no corresponde a la morfología observada experimentalmente. Las películas metálicas delgadas en realidad están constituidas por granos que coalescen para formar la película. La resistividad observada en la película metálica refleja un promedio macroscópico sobre los procesos microscópicos de colisión que sufren los portadores de carga al desplazarse por la muestra, en respuesta a un campo eléctrico externo. Estos procesos incluyen tanto los procesos de colisión inherentes a un monocristal (y que determinan la resistivi-

dad del grueso¹), como colisión electrón-superficie rugosa y colisión electrón-borde de grano.

La influencia de estos dos últimos mecanismos de dispersión de electrones (colisión electrón-superficie rugosa y colisión electrón-borde de grano) cobra una importancia tecnológica fundamental debido al esfuerzo de miniaturización que despliega la industria electrónica mundial con el objeto de construir computadores mas rápidos. Está previsto que dentro de los próximos 10 años, las líneas de cobre que conectan los transistores en un microcircuito construido sobre un cristal de silicio, alcancen un ancho típico de alrededor de 22 nm, unas 40 veces superior a la longitud de onda de Fermi, e inferior al camino libre medio ℓ de los electrones en cobre monocristalino a 300 K ($\ell = 39[\text{nm}]$) [1]. El cobre monocristalino a 300 K exhibe una resistividad de 17 n Ω -m. La resistividad del cobre a 300 K, en un sistema de dimensiones reducidas², se estimó inicialmente en 22 n Ω -m [2]. Sin embargo, experimentos recientes con líneas de cobre de 93 nm de ancho donde se midió la resistividad en función de la temperatura entre 4.2 y 523 K, extrapolados a una línea de 30 nm de ancho, sitúan la resistividad de la línea de cobre a 300 K (debido a la influencia de bordes de grano y de la rugosidad superficial) en una cifra que excede los 40 n Ω -m [3]. La descripción teórica apropiada de este aumento de resistividad resulta extremadamente importante.

Hasta el momento, sólo se han publicado dos teorías que describen el aumento de resistividad debido a la dispersión de electrones por una superficie rugosa, y por bordes de grano. A la fecha no se han publicado comparaciones entre estas dos teorías. En esta tesis se estudian y se comparan las predicciones basadas en estas dos teorías.

¹Se entiende al grueso como la estructura cristalina macroscópica -grande pero no infinita- que incluye impurezas.

²Esto se refiere a que el sistema tiene alguna de sus dimensiones comparable al camino libre medio de los electrones en el material.

Ambas teorías se basan en una descripción del movimiento de los electrones en el metal mediante una ecuación de transporte de Boltzmann. La primera teoría, publicada por Mayadas y Shatzkes [4], utiliza el formalismo propuesto por Sondheimer, donde el efecto de la superficie rugosa se introduce mediante la reflectividad de la superficie (definida como la fracción de electrones que son reflejados especularmente al colisionar con la superficie), un parámetro de ajuste que se impone como condición de borde sobre la función de distribución de electrones. Mayadas y Shatzkes utilizan la solución de la ecuación de Boltzmann propuesta por Sondheimer incorporando el efecto del scattering electrón-borde de grano, mediante el uso de un tiempo de relajación efectivo, producido por la colisión de la onda que representa al electrón, con una sucesión aleatoria de barreras de potencial modeladas como deltas de Dirac, orientadas perpendicularmente al campo eléctrico \vec{E} .

La teoría propuesta por Palasantzas [5] en cambio, se apoya en el formalismo publicado por Calecki [6]. En este formalismo se describe el movimiento de los electrones en el metal mediante una ecuación de transporte de Boltzmann, pero el cálculo de las probabilidades de transición (por unidad de tiempo) que intervienen en el operador de colisión de Boltzmann procede desde primeros principios. En efecto, Calecki supone que el vector de onda que caracteriza al electrón en el metal posee una componente perpendicular a la superficie que está cuantizada (debido al confinamiento del gas electrónico entre dos planos paralelos). La expresión final que obtiene Calecki para la conductividad de la película metálica depende de la transformada de Fourier de la autocorrelación de alturas que caracteriza a la superficie rugosa. Palasantzas extiende esta formulación de Calecki, incorporando una distribución gaussiana de granos en la transformada de Fourier de la función que describe la autocorrelación de alturas.

Para finalizar, el contenido de los capítulos es el siguiente: en el capítulo 2 se revisan aspectos comunes a ambas teorías, lo que permite abordar desde un punto de partida común el planteamiento de cada formulación. Posteriormente en el capítulo 3 se analizan los mecanismos de scattering considerados y sus principales características, con el fin de explicar los efectos teórico y práctico de cada mecanismo. En seguida en los capítulos 4 y 5 se revisan las teorías a comparar, tanto en sus aspectos teóricos como en sus detalles prácticos a la hora de producir resultados numéricos. Luego en el capítulo 6 se explora la influencia que los parámetros de cada teoría tienen en la resistividad predicha. Por último en el capítulo 7 se analizan los resultados obtenidos en la exploración de parámetros, además de presentar las primeras conclusiones. Adicionalmente en el apéndice se entregan los códigos fuentes de los programas utilizados.

Capítulo 2

Aspectos comunes y notación - Modelo de la película delgada

En el presente capítulo introduciremos algunos de los conceptos básicos para entender el cálculo de los coeficientes de transporte en una película metálica delgada, así como elementos comunes de ambas teorías. Una película metálica delgada es una estructura metálica cristalina en la cual una de sus dimensiones - que llamaremos *espesor* y que denotaremos por t - es comparable o inferior al *camino libre medio* ℓ (o *mean free path* como se le conoce en inglés) que caracteriza el movimiento de los portadores en el cristal.

Inicialmente consideraremos a la muestra orientada de tal forma que el espesor se mida según el eje \hat{z} . Adicionalmente se conecta un campo eléctrico externo \vec{E} a lo largo del eje \hat{x} , como lo muestra la figura 2.1.

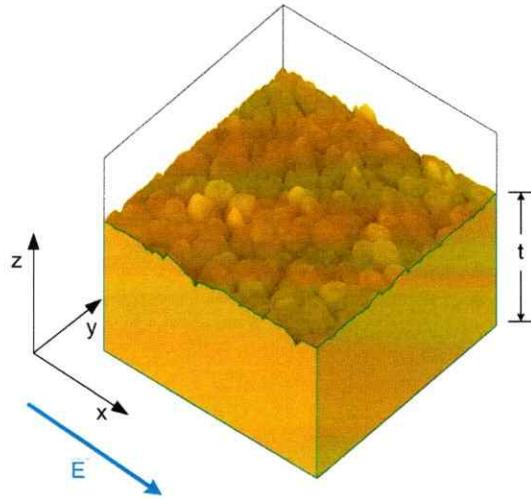


Figura 2.1: Configuración de la muestra y el campo eléctrico externo. Imagen generada usando datos reales obtenidos mediante un microscopio de efecto túnel.

Desde un punto de vista clásico, los electrones (considerados como simples “bolas de billar”) se mueven al interior de esta estructura, encontrándose a intervalos de distancia ℓ (en promedio) con procesos de scattering, producidos por impurezas, fonones u otras formas de dispersión. Las superficies superior e inferior (ubicadas en $z = 0$ y $z = t$), al igual que los bordes de grano, sólo actúan como paredes que reflejan especularmente los electrones, en una cierta proporción R . Si consideramos que los electrones se comportan en estas escalas como ondas, y se plantea un tratamiento cuántico-perturbativo del scattering de la función de onda con los bordes de grano, el resultado es la teoría semiclásica de Mayadas y Shatzkes [4], que constituye la primera formulación a comparar en esta tesis.

Por otro lado, desde un punto de vista cuántico, el gas de electrones queda confinado por las superficies que limitan el espesor de la muestra, induciendo una cuantización de la componente z del vector de onda característico de los portadores, es

decir:

$$\vec{k} = k_\nu \hat{z} + \vec{k}_\parallel \quad (2.1)$$

$$k_\nu = \frac{\nu\pi}{t} \quad (2.2)$$

$$\vec{k}_\parallel = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}. \quad (2.3)$$

De igual forma se introduce en la notación la subdivisión para el vector posición:

$$\vec{r} = x \cdot \hat{x} + y \cdot \hat{y} + z \cdot \hat{z} = \vec{r}_\parallel + z \cdot \hat{z}. \quad (2.4)$$

Esta condición supone que los planos que limitan a la película metálica son paralelos entre sí, lo que *no necesariamente* es correcto. En mediciones efectuadas sobre películas de oro recocidas [7], la inclinación entre una superficie y otra es del orden del 1 % (excepto en los bordes de grano), por lo que la suposición hecha por ambos autores es aproximadamente correcta en estas películas recocidas. Si se considera que las dimensiones de la muestra en el plano XY son macroscópicas, entonces el vector de onda en dicho plano es típicamente cuasi-continuo. Debido a esto la población de electrones de la muestra se subdivide en sub bandas, lo que tiene consecuencias profundas en la solución del problema. Este tratamiento es el que desarrolló D. Calecki [6]. Si además se incorpora la existencia de los granos, como una rugosidad de mayor escala, se obtendrá la formulación de G. Palasantzas [5] y que constituye la segunda teoría a comparar. En muestras de oro recocidas obtenidas recientemente, se observa claramente la presencia de granos y de una rugosidad superficial de menor escala al interior de cada grano, como se puede apreciar en la figura 2.2. Si se considera a los granos como estructuras de tipo columna, una imagen pictórica que sirve para modelar la película, los granos y la rugosidad superficial, es la presentada en la figura 2.3.

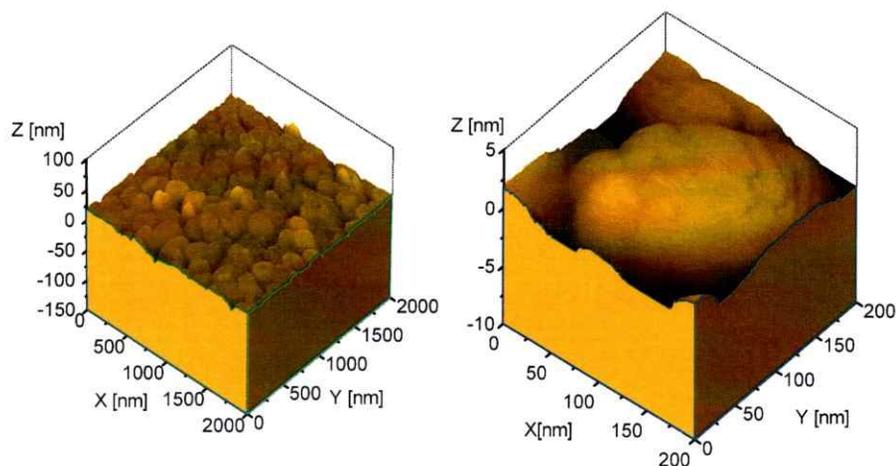


Figura 2.2: Presencia de granos y de rugosidad superficial en películas metálicas delgadas. En la figura de la izquierda, de 2000×2000 nm, se observan los granos. En la de la derecha, de 200×200 nm, se puede observar la rugosidad superficial al interior de un grano.

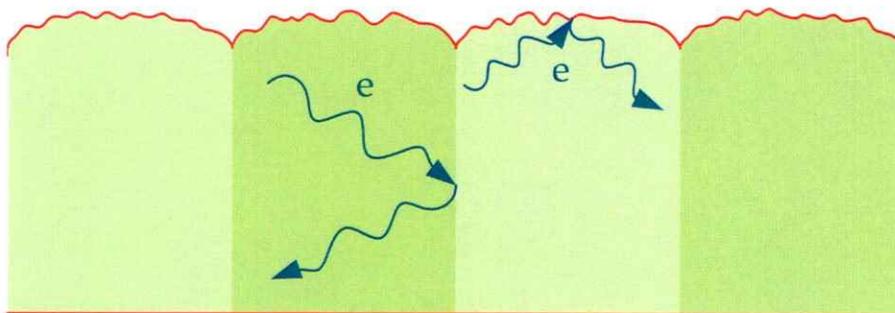


Figura 2.3: Representación de las estructuras en una película metálica delgada. Se observan cuatro granos, además de la rugosidad superficial presente en la cara superior.

2.1. Camino libre medio.

En un sentido aproximado, el camino libre medio ℓ es la distancia promedio que recorre un electrón entre dos colisiones sucesivas. En la ecuación de transporte de

Boltzmann, la interacción entre las partículas (supuestas fermiones) está dada por la *integral de colisión* [8]:

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{Col} = \int d^3k' \{ W(k', k) f_{k'} (1 - f_k) - W(k, k') f_k (1 - f_{k'}) \} \quad (2.5)$$

en donde f_k es la densidad de portadores con momentum $\hbar k$. En ciertos casos, esta integral puede reducirse a la forma [9]:

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{Col} = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (2.6)$$

en donde f_0 es la distribución de Fermi-Dirac. El tiempo de relajación existe en la medida que esta reducción pueda ser llevada a cabo con τ constante. La forma concreta de la constante τ es consecuencia, en cada caso, de la reducción desde la primera forma a la segunda. Con esto en mente, el camino libre medio es el producto de este tiempo de relajación con la velocidad de Fermi:

$$\ell = v_F \tau \quad (2.7)$$

En el caso de monocristales metálicos que cristalizan en una estructura fcc (como el oro), los electrones son dispersados por fonones acústicos y por impurezas (defectos puntuales). Esta colisión puede ser representada, de forma aproximada, por un tiempo de relajación τ . Por lo tanto en el marco de este trabajo nos referiremos en forma reiterada al “camino libre medio en el grueso”, que dada la definición anterior, incluye los mecanismos de scattering:

- electrón-impurezas o defectos puntuales;
- electrón-fonón.

Esta definición excluye el scattering electrón-borde de grano y el scattering electrón-superficie rugosa.

Capítulo 3

Mecanismos de dispersión (scattering)

En una película metálica, existen varios mecanismos de scattering. Las teorías a comparar consideran estos mecanismos, para los cuales se procede a dar una descripción cualitativa de su comportamiento y región de validez.

3.1. Scattering electrón-fonón

El scattering electrón-fonón es uno de los mecanismos más relevantes a la hora de medir las propiedades eléctricas de una película metálica. Representa la interacción de los electrones, con las vibraciones cuantizadas de la red cristalina. Estas vibraciones dependen de la temperatura del material, por lo que el mecanismo de scattering electrón-fonón, es el principal responsable de la dependencia de la conductividad con la temperatura. Este tipo de scattering, puede ser descrito por un tiempo de relajación τ_{Phon} . La dependencia de τ_{Phon} con la temperatura está dada por la teoría de Bloch-Grüneisen y su valor puede ser calculado a partir de la resistividad intrínseca del oro, listada en la página 1209 de la referencia [10].

3.2. Scattering electrón-impurezas

Este mecanismo de scattering, es especialmente relevante a la hora de tener películas metálicas contaminadas con distintos elementos. Representa la interacción de los electrones con los átomos que perturban la red cristalina, alterando el marco en el cual están formadas las ondas de Bloch que representan a los electrones en el material. Al igual que el mecanismo de scattering electrón-fonón, puede ser descrito por un tiempo de relajación τ_{Imp} (en el límite de baja concentración de impurezas), pero difiere de este último, en que no depende de la temperatura.

3.3. Scattering electrón-superficie rugosa

Este mecanismo es uno de los que nos interesa en este trabajo. Representa la interacción de los electrones con alguna de las superficies de la muestra, siendo más relevante en el régimen de parámetros en que el espesor de la película metálica, es comparable o inferior al camino libre medio en el grueso ℓ . Existen varias formas de modelar este mecanismo. En la teoría de Mayadas y Shatzkes la superficie rugosa se modela como una reflectividad clásica introduciendo condiciones de borde sobre la función de distribución de electrones. En la teoría de Palasantzas, la superficie rugosa se modela como una alteración sobre la condición de borde del hamiltoniano que describe el problema tratándolo de manera perturbativa. En mediciones recientes [11], se han obtenido parámetros que caracterizan este mecanismo en una superficie, mientras que la otra se considera atómicamente lisa, salvo pasos de clivaje (que están separados por una distancia varios órdenes de magnitud superior al camino libre medio ℓ de los portadores en el material).

3.4. Scattering electrón-dislocaciones-defectos morfológicos

En este caso, los electrones son dispersados por rupturas en la simetría del potencial periódico que modela la red cristalina. En general este mecanismo no depende de la temperatura, y su existencia es proporcional a la concentración de dislocaciones y defectos morfológicos.

En este sentido los bordes de grano constituyen un tipo particular de defecto morfológico, y el mecanismo de **dispersión electrón-borde de grano**, es el segundo que nos interesa considerar en este trabajo. Representa la interacción de los electrones, con la interfaz que separa un dominio cristalino (grano) de otro. Al romperse la simetría periódica del grano, el estado de Bloch en el que se encuentra el electrón es dispersado para pasar a otros estados en el siguiente grano. Al igual que el scattering electrón-superficie rugosa, su influencia en la conductividad es especialmente relevante en el régimen en que el diámetro promedio de los granos es comparable o inferior al camino libre medio ℓ de los electrones en el cristal. Las teorías que compararemos en este trabajo modelan el scattering electron-borde de grano, en primer lugar, como potenciales tipo *delta de Dirac* que inducen una reflectividad asociada al borde de grano, y en segundo lugar como una rugosidad superficial al interior de cada grano.

Capítulo 4

Teoría de Mayadas y Shatzkes

En el año 1970, A. F. Mayadas y M. Shatzkes [4] elaboraron la primera teoría que describe el aumento en la resistividad de una película metálica delgada provocado simultáneamente por los mecanismos de scattering electrón-superficie rugosa y scattering electrón-borde de grano. En dicho trabajo, los autores se basan en los resultados previamente publicados por Sondheimer [12], donde se resuelve el problema desde un punto de vista semiclásico. Una representación del modelo usado para resolver el problema, se muestra en la figura 4.1.

En dicha figura los granos (de tipo columna) se observan como regiones de tonalidad verde. Las transiciones de un grano a otro están ubicadas en puntos x_i , $i = 1..N$, las cuales son modeladas como barreras de potencial tipo *delta de Dirac* de amplitud S . Adicionalmente, tanto la cara superior como la inferior de la película metálica están caracterizadas por reflectividades iguales p , cantidad que representa la fracción de electrones que son reflejados especularmente al encontrar la superficie. Hasta este punto la teoría presentada no difiere de otras que consideran los electrones como un gas de partículas clásicas.

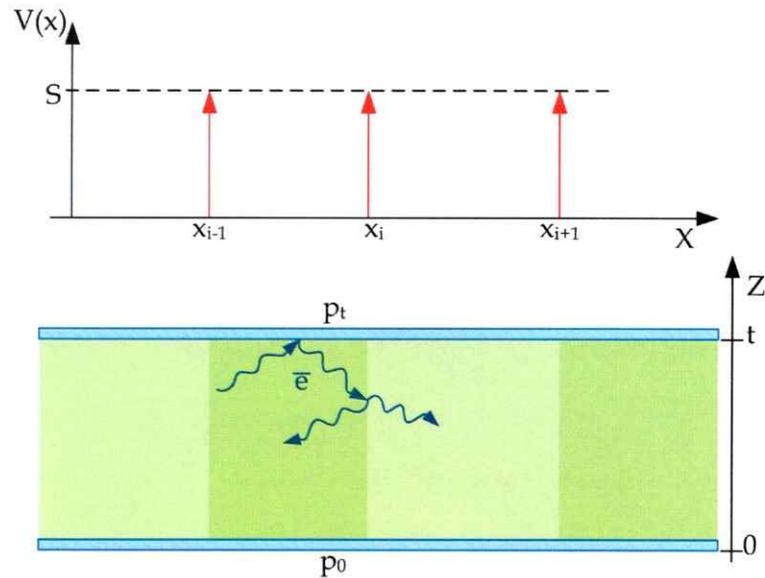


Figura 4.1: Representación de las estructuras en una película metálica delgada de acuerdo al modelo de Mayadas y Shatzkes. En la parte superior se muestra la secuencia de deltas de Dirac de amplitud S , que representan los bordes de grano.

4.1. Ecuación de transporte de Boltzmann

Posteriormente los autores plantean que el gas de electrones, responsables de la conducción eléctrica, obedece a una ecuación de transporte de Boltzmann, en la que se considera el carácter fermiónico de los portadores. La función de distribución de velocidades de los electrones es alterada tanto por los mecanismos de scattering considerados como por los campos externos, planteándose una solución de tipo perturbativa a primer orden, es decir:

$$f(\vec{k}) = f_0(\vec{k}) + \Phi(\vec{k}) \quad (4.1)$$

donde $f_0(\vec{k})$ corresponde a la función de distribución de Fermi-Dirac característica de la situación de equilibrio y $\Phi(\vec{k})$ representa la alteración de ésta, debido a la acción de un campo eléctrico (según \hat{x}) pequeño. Bajo el supuesto de que los mecanismos de

scattering provenientes de fuentes usuales (defectos puntuales, impurezas, fonones) están incluidos en un tiempo de relajación τ (conocida como *aproximación de tiempo de relajación*), la ecuación de transporte de Boltzmann adopta la siguiente forma¹:

$$eEv_x \frac{\partial f_0(\vec{k})}{\partial \epsilon} = \int P(\vec{k}, \vec{k}') [\Phi(\vec{k}) - \Phi(\vec{k}')] d^3k' + \frac{\Phi(\vec{k})}{\tau} \quad (4.2)$$

donde $P(\vec{k}, \vec{k}')$ representa la probabilidad de transición por unidad de tiempo de un electrón desde un estado representado por un vector de onda \vec{k} a uno representado por \vec{k}' debido a la influencia del mecanismo de scattering electrón - borde de grano; e , ϵ y v_x corresponden a la carga, energía y la componente según \hat{x} de la velocidad del electrón, respectivamente.

4.2. Efectos de los bordes de grano

En su teoría, los autores modelan los bordes de grano como un potencial constituido por una serie de *deltas de Dirac* las cuales tienen una amplitud S , es decir:

$$V(x) = S \sum_{n=1}^N \delta(x - x_n) \quad (4.3)$$

De acuerdo a esta expresión, el potencial utilizado para modelar los bordes de grano, es uniforme tanto en el eje \hat{y} como en el eje \hat{z} . Dichos bordes de grano están ubicados en posiciones x_i con $i = 1, \dots, N$ según el eje \hat{x} . Adicionalmente, los autores consideran que el tamaño de estos bordes de grano sigue una distribución gaussiana, de distancia promedio D y dispersión característica s , como lo representa la siguiente distribución de los puntos x_i :

$$g(x_1, \dots, x_N) = \frac{\exp\left(-\sum_{i=1}^{N-1} \frac{(x_{i+1} - x_i - D)^2}{2s^2}\right)}{L_x (2\pi s^2)^{(N-1)/2}} \quad (4.4)$$

¹En secciones posteriores se analiza la validez de esta aproximación

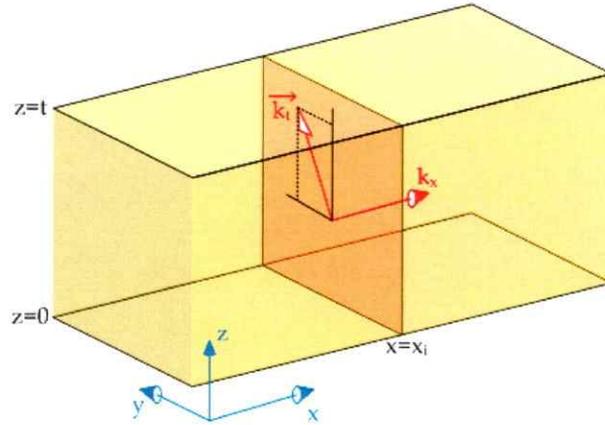


Figura 4.2: Descomposición del vector de onda \vec{k} , en sus componentes \vec{k}_t y k_x .

Con estos elementos, el trabajo continúa introduciendo el efecto de los bordes de grano en la ecuación de transporte de Boltzmann, al calcular el término $P(\vec{k}, \vec{k}')$. Para esto considera que el estado no perturbado de los electrones tiene la forma:

$$\psi_{\vec{k}} = \Omega^{-1} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (4.5)$$

donde $\Omega \equiv L_x L_y L_z$ es el volúmen de la muestra. Entonces se pueden calcular los elementos de matriz:

$$|\langle \vec{k} | V | \vec{k}' \rangle|^2 = \left(\frac{S}{L_x} \right)^2 \Delta(k_t - k'_t) \sum_{n, n'} e^{i(k_x - k'_x)(x_n - x'_n)} \quad (4.6)$$

donde $\Delta(k_t - k'_t)$ es la *delta de Kronecker*, y \vec{k}_t representa la componente de \vec{k} en el plano YZ , como se puede observar en la figura 4.2. Se puede entender que la suma de exponenciales complejas es real debido a que representa un término de la forma $|z|^2 = z^* z$.

Si se promedia esta expresión, utilizando la distribución $g(x_1 \dots x_N)$, descrita en la

ecuación (4.4), se obtiene una expresión para los $P(\vec{k}, \vec{k}')$:

$$P(\vec{k}, \vec{k}') = F(|k_x|)\delta(k_t - k'_t)\delta(k_x + k'_x) \quad (4.7)$$

$$F(|k_x|) = \frac{\alpha k_F}{2\tau |k_x|} \frac{1 - e^{-4k_x^2 s^2}}{1 + e^{-4k_x^2 s^2} - 2e^{-2k_x^2 s^2} \cos(2k_x)D} \quad (4.8)$$

$$\alpha = \frac{m S^2}{\hbar^3 D k_F} 2\tau = \frac{\ell R}{D 1 - R} \quad (4.9)$$

Con estos antecedentes la solución de la ecuación de Boltzmann es:

$$\Phi(\vec{k}) = \tau^* eE v_x \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \quad (4.10)$$

donde

$$\frac{1}{\tau^*} = \frac{1}{\tau} + 2F(|k_x|). \quad (4.11)$$

Dado que en la ecuación (4.2) sólo se incorporó la influencia de los bordes de grano, ubicados en posiciones x_i , la solución entregada resulta uniforme en los ejes y y z . Si se incorpora el hecho que el gas se encuentra confinado entre placas paralelas ubicadas en $z = 0$ y $z = t$, el efecto del scattering electrón-superficie rugosa agrega un término adicional de gradiente en z , que junto con lo expuesto, contribuye a la nueva forma de la ecuación de Boltzmann, para el sistema completo:

$$v_z \frac{\partial \Phi}{\partial z} + eE v_x \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = \frac{\Phi}{\tau^*}. \quad (4.12)$$

Para encontrar una solución explícita, se requiere de condiciones de borde apropiadas.

4.3. Influencia de la rugosidad superficial

Con la expresión (4.10) en mente, más la dependencia tipo *exponencial* en z que se deduce de la ecuación (4.12), los autores incorporan el efecto de la rugosidad superficial como condiciones de borde impuestas a la función de distribución de

velocidades del gas de electrones, en las superficies que confinan al gas. La condición de frontera impuesta a la función distribución es tal que en $z = 0$ la cantidad de electrones que es reflejada especularmente desde dicha superficie, con $v_z > 0$, es una fracción p de la cantidad que llega a ella con $-v_z < 0$. Análogamente, en $z = t$, la cantidad de electrones que es reflejada especularmente desde la superficie, con $v_z < 0$, es una fracción p de la que llega a ella con $-v_z > 0$. Una fracción $(1 - p)$ de los electrones que llegan a las superficies pertenecientes a $\phi(k)$ antes de la colisión con las superficies, son transferidos a la función de distribución del equilibrio f_0 después de la colisión, puesto que se suponen reflejados de manera difusa.

Estas suposiciones son modificadas posteriormente como parte de este trabajo, para dar cuenta de reflectividades superficiales diferentes. Si $\Phi^+(v_z, z)$ es definida

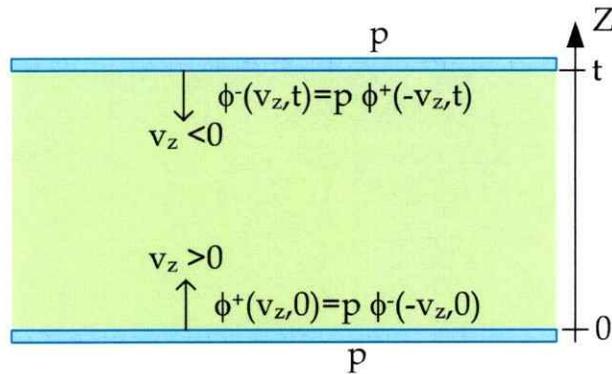


Figura 4.3: Condiciones de borde para la perturbación de la función distribución $\Phi(v_z, z)$.

como la desviación de la función distribución para $v_z > 0$ y $\Phi^-(v_z, z)$ para $v_z < 0$, entonces las condiciones de borde mencionadas se pueden representar de acuerdo al esquema de la figura 4.3. Al establecer un balance para conservar la cantidad de

partículas se puede escribir la relación:

$$f_0 + \Phi^+(v_z, 0) = p (f_0 + \Phi^-(-v_z, 0)) + g, \quad (4.13)$$

donde g es una función que es independiente de la dirección de \vec{v} que garantiza la conservación del número de partículas. Se puede demostrar que²:

$$g = f_0(1 - p), \quad (4.14)$$

y por lo tanto la corriente en la dirección \vec{z} es nula. Siguiendo este razonamiento, las condiciones de borde sobre las funciones ϕ^+ y ϕ^- , se pueden escribir como:

$$\Phi^+(v_z, 0) = p \Phi^-(-v_z, 0) \text{ con } v_z > 0, \quad (4.15)$$

$$\Phi^-(v_z, t) = p \Phi^+(-v_z, t) \text{ con } v_z < 0, \quad (4.16)$$

donde p , con valores reales entre 0 y 1, corresponde a la fracción de electrones reflejados especularmente en las superficies que confinan al gas electrónico. Si $p = 1$ el efecto de la superficie es totalmente descartado (reflexión especular).

Dadas estas condiciones, las funciones $\Phi^\pm(v_z, z)$ están dadas por:

$$\Phi^+(\vec{v}, z) = e\tau^* E v_x \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left\{ 1 - \frac{(1-p) \exp\left(\frac{-z}{\tau^* v_z}\right)}{1 - p \exp\left(\frac{-t}{\tau^* v_z}\right)} \right\}, \quad v_z > 0 \quad (4.17)$$

$$\Phi^-(\vec{v}, z) = e\tau^* E v_x \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left\{ 1 - \frac{(1-p) \exp\left(\frac{t-z}{\tau^* v_z}\right)}{1 - p \exp\left(\frac{t}{\tau^* v_z}\right)} \right\}, \quad v_z < 0 \quad (4.18)$$

Entonces la corriente total (y por consiguiente la conductividad) se puede calcular de la forma usual:

$$J_x(z) = -\frac{e}{4\pi^3} \left(\frac{m}{\hbar}\right)^3 \int d^3v v_x \Phi(\vec{v}, z) \quad (4.19)$$

²Para mayor detalle véase las referencias [12, 13].

Con lo que podemos calcular la corriente promedio en todo el ancho de la película:

$$J_{avg} = \frac{1}{t} \int_0^t J_x(z) dz = -\frac{e}{4\pi^3 t} \left(\frac{m}{\hbar}\right)^3 \int_0^t dz \int d^3v v_x \Phi(\vec{v}, z) \quad (4.20)$$

Luego de incorporar las definiciones de Φ^+ y Φ^- , se puede demostrar que:

$$\begin{aligned} \frac{1}{t} \int_0^t dz \Phi^+ &= \frac{1}{t} \int_0^t dz \Phi^- = \\ &= e\tau^* v_x \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left(1 + \frac{(1-p)(1 - \exp(-\frac{t}{\tau^*|v_z|}))}{1-p \exp(-\frac{t}{\tau^*|v_z|})} \tau^* |v_z| \right) \cdot E \end{aligned} \quad (4.21)$$

por lo que las expresiones finales para la corriente que circula sobre la muestra y su conductividad son:

$$J = \sigma \cdot E \quad (4.22)$$

$$\sigma = \frac{e^2}{4\pi^3} \left(\frac{m}{\hbar}\right)^3 \int d^3v \tau^* v_x \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left(1 + \frac{(1-p)(1 - \exp(-\frac{t}{\tau^*|v_z|}))}{1-p \exp(-\frac{t}{\tau^*|v_z|})} \tau^* |v_z| \right) \quad (4.23)$$

con las definiciones anteriores F y τ^* :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau^*} &= \frac{1}{\tau} + 2F(|k_x|) \\ F(|k_x|) &= \frac{mS^2\ell}{\hbar^3 D k_F} \frac{R}{1-R} \frac{k_F}{|k_x|} \frac{1 - e^{-4k_x^2 s^2}}{1 + e^{-4k_x^2 s^2} - 2e^{-2k_x^2 s^2} \cos(2k_x) D} \end{aligned}$$

En este punto del trabajo de Mayadas y Shatzkes, se encuentra un error algebraico. Al realizar las integraciones (observando el carácter tipo *delta de Dirac* del término $\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}$), los autores presentan un resultado que no considera que τ^* depende de \vec{k} y por lo tanto de \vec{v} ; y en consecuencia aparece como constante con respecto a la variable de integración, lo que simplifica - de manera errónea - notoriamente los cálculos.

4.4. Expresión final para la conductividad y modificaciones a la teoría original

Al corregir el error mencionado en la sección anterior, se puede avanzar en la formulación de una expresión que permita realizar una comparación confiable con otras teorías. Después del cálculo realizado por Mayadas y Shatzkes, Lucas [14] extendió el formalismo original de Sondheimer, incorporando reflectividades distintas para describir la colisión entre los electrones y las caras superior e inferior de la película metálica. Si se incorpora este aspecto a la teoría de Mayadas y Shatzkes, el modelo final considerado en esta tesis corresponde al de la figura 4.4. La expresión

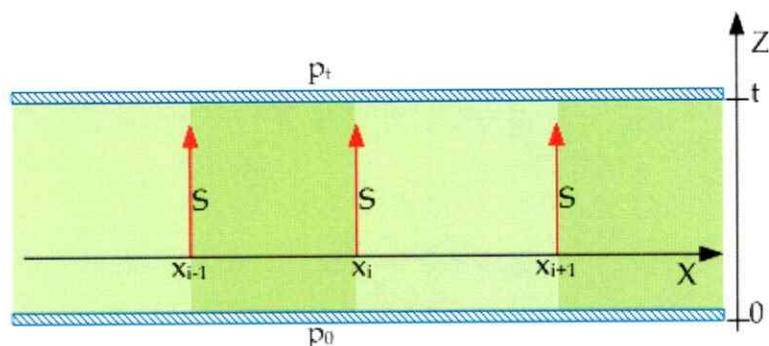


Figura 4.4: Representación de las estructuras en una película metálica delgada de acuerdo al modelo de Mayadas y Shatzkes modificado, considerando distintas reflectividades p_0 y p_t en las caras de la muestra.

final del aumento de resistividad debido tanto a la rugosidad superficial, como a la existencia de los bordes de grano, se puede obtener considerando:

$$\frac{\sigma_{SG}}{\sigma_0} = \frac{\sigma_G}{\sigma_0} - \frac{3}{\pi t k_F} \int_0^1 \int_0^1 \frac{v(1-v^2)\zeta^2}{\left(\zeta + \frac{\ell}{D} \frac{R}{1-R} F_{MS}(D, \zeta, s)\right)^2} \times$$

$$\times \frac{(2 - p_0 - p_t + (p_0 + p_t)E(t, u, v))(1 - E(t, u, v))}{(1 - p_0 p_t E(t, u, v)^2)} dudv \quad (4.24)$$

donde

$$\zeta = \sqrt{(1-u^2)(1-v^2)} \quad (4.25)$$

$$E(t, u, v) = \exp\left(-\frac{tk_F(\zeta + \frac{\ell}{D}\frac{R}{1-R}F_{MS}(D, \zeta, s))}{u\zeta}\right) \quad (4.26)$$

$$F_{MS}(D, \zeta, s) = \frac{1 - e^{(-4\zeta^2 s^2 k_F^2)}}{1 - 2e^{(-2\zeta^2 s^2 k_F^2)} \cos(2\zeta D k_F) + e^{(-4\zeta^2 s^2 k_F^2)}} \quad (4.27)$$

$$\frac{\sigma_G}{\sigma_0} = 3 \int_0^1 \frac{u^3}{u + \frac{\ell}{D}\frac{R}{1-R}F_{MS}(D, u, s)} du \quad (4.28)$$

en donde p_t y p_0 son las reflectividades en $z = t$ y $z = 0$ respectivamente. El término σ_{SG} corresponde a la conductividad asociada a los efectos combinados de los bordes de grano, rugosidad superficial y otros mecanismos de scattering. A su vez, el término σ_G corresponde a la conductividad observable en una muestra en que $p_0 = p_t = 1$ cruzada por bordes de grano. Finalmente σ_0 representa la conductividad del monocristal, en ausencia de bordes de grano y de rugosidad superficial. El aumento de resistividad será:

$$\frac{\rho_{SG}}{\rho_0} = \left(\frac{\sigma_{SG}}{\sigma_0}\right)^{-1} \quad (4.29)$$

Debido a que estas expresiones son difíciles de manipular algebraicamente, para obtener resultados, se utilizaron integraciones numéricas de tipo gaussiano, de 16 puntos y 32 puntos. Para verificar los resultados, se reprodujeron las figuras 2, 3 y 4, del trabajo original de Mayadas y Shatzkes.

En los gráficos 5.4(a) y 5.4(b), se muestran los resultados de la conductividad y resistividad relativas, variando el camino libre medio ℓ manteniendo fijo el diámetro promedio de los granos en $D = 200nm$. En estos gráficos se incluyen además las cantidades, n_{inf} y n_{sup} , donde $n = \frac{\ell}{D}$.

La primera (n_{inf}) representa el límite en que el diámetro medio de los granos D es del orden de $200nm$ y el camino libre medio ℓ es del orden de $0.2nm$ lo que representa

aproximadamente una distancia de un diámetro atómico, por lo que $n_{inf} = 10^{-3}$.

Por otra parte n_{sup} representa el caso en que ℓ es del orden de $200nm$, y $D \sim 0.2nm$, vale decir, se escoge un camino libre medio de los portadores típico, y se disminuye el diámetro promedio de los granos hasta un valor de un diámetro atómico como límite inferior, por lo que $n_{sup} = 10^3$.

Una primera conclusión es que esta teoría tiene límites, en el parámetro ℓ/D . En el caso en que el camino libre medio ℓ (característico *sólo* del grueso) es muy grande comparado con el diámetro promedio de los granos D ($\ell \gg D$), la resistividad resulta 10^3 veces la del grueso. Este aumento de resistividad inducida por los bordes de grano - por encima de la resistividad del grueso - depende fundamentalmente del valor de R , lo que se explica por que en esta teoría los electrones son mayoritariamente dispersados por los bordes de grano, antes que otros mecanismos.

En el límite opuesto ($\ell \ll D$) la conductividad es aproximadamente la del grueso, lo que se explica por que los electrones encuentran con más frecuencia eventos de scattering que caracterizan al cristal, distintos a los bordes de grano. Una exploración más detallada de las predicciones basadas en esta teoría se realiza en el capítulo 6 de este trabajo.

Por último, para incluir la dependencia con temperatura y con la densidad de impurezas, se utilizó la regla de Mathiessen:

$$\frac{1}{\tau_{Bulk}} = \frac{1}{\tau_{Imp}} + \frac{1}{\tau_{Phon}}. \quad (4.30)$$

Esta formulación permite obtener resultados congruentes con los experimentos, como se puede ver en el capítulo 7.

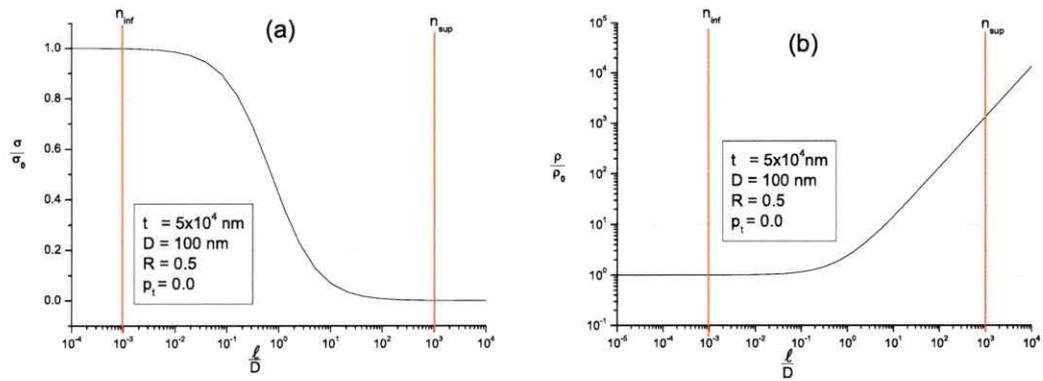


Figura 4.5: Comportamiento de la conductividad y resistividad relativas como función de ℓ/D , para $R = 0.5$, $p_t = 0.0$ y $t = 50000 \text{ nm}$. Aquí se mantiene constante el diámetro promedio de los granos D en 200 nm , y se varía el camino libre medio ℓ .

Capítulo 5

Teoría de G. Palasantzas

A fines de 1997, George Palasantzas publica su trabajo sobre los efectos de los mecanismos de scattering electrón-superficie rugosa y electrón-borde de grano sobre la conductividad eléctrica. En dicho trabajo, el autor propone una formulación de la influencia de ambos mecanismos, basándose en el artículo publicado previamente por D. Calecki en el año 1989, el que *no ocupa parámetros ajustables*. En esta nueva formulación se destaca el uso de una teoría que considera la inclusión de sub bandas para dar cuenta de la cuantización en el eje \hat{z} del vector de onda \vec{k} , como consecuencia del confinamiento del gas electrónico entre los planos $z = 0$ y $z = t$ ¹.

5.1. Formulación D. Calecki - situación de equilibrio térmico

En su trabajo, Daniel Calecki plantea que el comportamiento de la función de distribución de velocidades de los portadores, al interior de una película metálica delgada se rige por una ecuación de transporte de Boltzmann, en la que se supo-

¹Como se dijo anteriormente, esta condición supone que los planos que limitan a la película metálica, son paralelos entre sí, lo que *no necesariamente* es correcto. En mediciones hechas recientemente [7] en películas de oro recocidas, la inclinación entre una superficie y otra es del orden del 1%, salvo por los bordes de grano, por lo que la suposición hecha por ambos autores es aproximadamente correcta.

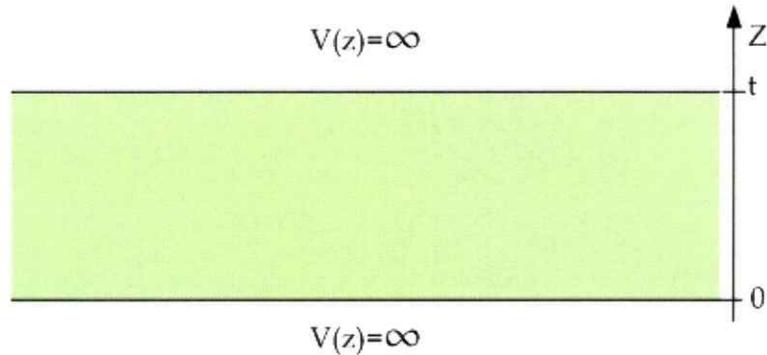


Figura 5.1: Representación de la estructura de potenciales en una película metálica delgada de acuerdo al modelo inicial (no perturbado) de Daniel Calecki.

ne que los campos magnéticos externos son débiles de manera que se desprecia la cuantización de Landau.

El autor modela la película metálica delgada, como superficies paralelas atómicamente lisas, las cuales limitan la película como un pozo de potencial infinito² en el eje z , como se puede apreciar en la figura 5.1.

En este contexto, el vector de onda adquiere una nueva forma, dada por la cuantización en el eje \hat{z} , y por lo tanto introduce una subdivisión de los niveles de energía de los electrones, que el autor denomina *sub bandas*, etiquetadas por el índice ν . La componente del vector de onda paralela al plano resulta cuasicontinua como es usual en una red cristalina, es decir:

$$\vec{k} = k_\nu \hat{z} + \vec{k}_\parallel$$

donde \vec{k}_\parallel es la componente del vector de onda en el plano XY . El hamiltoniano

²Calecki muestra que la condición $V_0 \rightarrow \infty$ introduce simplificaciones que no modifican esencialmente los resultados del análisis.

correspondiente a esta situación es:

$$\mathcal{H}_0 = \frac{p_{\parallel}^2}{2m^*} + \frac{p_z^2}{2m^*} + V(z) \quad (5.1)$$

$$\text{con } V(z) = \begin{cases} 0 & z \in (0, t) \\ V_0 \rightarrow +\infty & z \notin (0, t) \end{cases} \quad (5.2)$$

Para este Hamiltoniano \mathcal{H}_0 , sus autofunciones son características de cada sub banda ν , como se aprecia en la siguiente expresión:

$$\mathcal{H}_0 |\nu \vec{k}_{\parallel}\rangle = \varepsilon_{\nu \vec{k}_{\parallel}} |\nu \vec{k}_{\parallel}\rangle. \quad (5.3)$$

Al representar estas autofunciones en el espacio \vec{r} , adquieren la forma:

$$\langle \vec{r} | \nu \vec{k}_{\parallel} \rangle = \psi_{\nu \vec{k}_{\parallel}}(\vec{r}) = \Lambda^{-1/2} \exp(i \vec{r}_{\parallel} \cdot \vec{k}_{\parallel}) \zeta_{\nu}(z) \quad (5.4)$$

$$\varepsilon_{\nu \vec{k}_{\parallel}} = \varepsilon_{\nu}(t) + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} \quad (5.5)$$

donde

$$\varepsilon_{\nu}(t) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\nu\pi}{t} \right)^2 \quad (5.6)$$

$$\zeta_{\nu}(z) = \sqrt{\frac{2}{t}} \sin\left(\frac{\nu\pi z}{t}\right) \text{ con } \nu = 1, 2, \dots, \nu_{max} \quad (5.7)$$

$$\nu_{max} = INT \left[\varepsilon_F / \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* t^2} \right]^{1/2} \quad (5.8)$$

en donde Λ es una constante de normalización de las autofunciones del problema, m^* representa la masa efectiva del electrón en la red cristalina, $INT(u)$ es la función cajón o "parte entera" de u , y ε_F es la energía de Fermi ($\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$).

Adicionalmente, el autor considera que en equilibrio térmico a temperatura T , los portadores (fermiones) son caracterizados por la función distribución $f_0(\varepsilon_{\nu \vec{k}_{\parallel}})$ de Fermi-Dirac:

$$f_0(\varepsilon_{\nu \vec{k}_{\parallel}}) = \frac{1}{1 + e^{(\varepsilon_{\nu \vec{k}_{\parallel}} - \varepsilon_F)/k_B T}}. \quad (5.9)$$

Finalmente, la densidad de portadores satisface la condición de normalización, por cada sub banda y también en el sistema completo, de acuerdo a la siguiente expresión:

$$n = \sum_{\nu=1}^{\nu_{max}} n_{\nu} = \sum_{\nu=1}^{\nu_{max}} \int_0^{\infty} g_{\nu}(\varepsilon) f_0(\varepsilon_{\nu}) d\varepsilon = \sum_{\nu=1}^{\nu_{max}} \int_0^{\infty} \frac{\Lambda m^*}{\pi \hbar^2} \Theta(\varepsilon - \varepsilon_{\nu}) f_0(\varepsilon_{\nu}) d\varepsilon \quad (5.10)$$

donde $\Theta(z)$ corresponde a la función escalón.

De esta forma, Calecki fija el marco inicial para construir su ecuación de transporte de Boltzmann que luego resolverá. En este punto la formulación del sistema sólo ha considerado:

- la película es metálica,
- la película es cristalina,
- el ancho de la película es del orden del camino libre medio de los portadores.

5.2. Formulación D. Calecki - influencia de los campos externos.

Para continuar, Calecki introduce fuerzas externas, originadas por campos eléctrico \vec{E} y magnético \vec{B} , los cuales alteran la función de distribución de equilibrio $f_0(\varepsilon_{\nu}, \vec{k}_{\parallel})$.

Con estos antecedentes, Calecki plantea un sistema de ν_{max} ecuaciones de transporte de Boltzmann:

$$-\frac{e}{\hbar} \left(\vec{E} + \frac{\hbar \vec{k}_{\parallel}}{m} \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}_{\parallel}} f_{\nu}(\vec{k}_{\parallel}) = \sum_{\nu=1}^{\nu_{max}} \sum_{\vec{k}'_{\parallel}} W_{\nu\nu'}(\vec{k}'_{\parallel}, \vec{k}_{\parallel}) f_{\nu'}(\vec{k}'_{\parallel}) (1 - f_{\nu}(\vec{k}_{\parallel})) - W_{\nu\nu'}(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) f_{\nu}(\vec{k}_{\parallel}) (1 - f_{\nu'}(\vec{k}'_{\parallel})) \quad (5.11)$$

$$\nu = 1, 2, \dots, \nu_{max}.$$

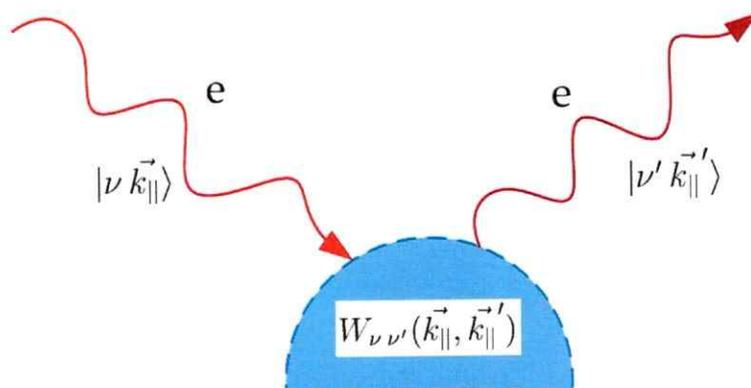


Figura 5.2: Representación del rol de la cantidad $W_{\nu\nu'}(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel})$ en el proceso de scattering.

El lado izquierdo de la ecuación (en la primera línea) corresponde a la variación de la función de distribución debido a fuerzas externas, en un régimen estacionario o como se le denomina en inglés, “steady state”. El lado derecho (segunda línea) corresponde a la expresión del operador de colisión, aplicado a los electrones en la película metálica ocupando sub bandas de energía $\varepsilon(\vec{k}_{\parallel}, \nu)$. La cantidad $W_{\nu\nu'}(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel})$ que aparece en el operador de colisión, corresponde a la probabilidad de transición, por unidad de tiempo, de que un portador pase desde el estado $|\nu \vec{k}_{\parallel}\rangle$ de la sub banda ν , al estado $|\nu' \vec{k}'_{\parallel}\rangle$ de la sub banda ν' , debido a mecanismos de scattering presentes en la película (no especificados aún). Desde el punto de vista del sistema de ecuaciones (5.11), el factor W es el responsable de acoplar las funciones f_{ν} , como consecuencia del mecanismo de scattering en cuestión, como se ve en la figura 5.2.

Para resolver este sistema de ecuaciones, el autor supone que \vec{B} es pequeño, mientras que el efecto de \vec{E} puede ser descrito por la ley de Ohm; de manera que es

válida una solución perturbativa de la siguiente forma:

$$f_\nu(\vec{k}_\parallel) = f_0(\varepsilon_\nu \vec{k}_\parallel) + \phi_\nu(\vec{k}_\parallel), \quad \nu = 1, \dots, \nu_{max}, \quad (5.12)$$

en que $f_0(\varepsilon_\nu \vec{k}_\parallel)$ es la función distribución de Fermi-Dirac, y $\phi_\nu(\vec{k}_\parallel)$ (lineal en el campo \vec{E}) es el desplazamiento de la función de distribución debido a la acción de las fuerzas inducidas por los campos externos \vec{E} y \vec{B} , en la sub banda ν , en el estado representado por \vec{k}_\parallel . Si los mecanismos de scattering son tales que:

1. a nivel microscópico son procesos reversibles en el tiempo ($\nu \leftrightarrow \nu'$ y $\vec{k}_\parallel \leftrightarrow \vec{k}'_\parallel$),
2. las transiciones se producen entre estados de igual energía ($\varepsilon_\nu \vec{k}_\parallel = \varepsilon_{\nu'} \vec{k}'_\parallel$),
3. son posibles de representar mediante un hamiltoniano de interacción \mathcal{H}_i utilizando la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo,

entonces $W_{\nu\nu'}(\vec{k}_\parallel, \vec{k}'_\parallel)$ satisface las relaciones:

$$\begin{aligned} W_{\nu\nu'}(\vec{k}_\parallel, \vec{k}'_\parallel) &= W_{\nu'\nu}(\vec{k}'_\parallel, \vec{k}_\parallel) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \nu \vec{k}_\parallel | \mathcal{H}_i | \nu' \vec{k}'_\parallel \rangle|^2 \delta(\varepsilon_\nu \vec{k}_\parallel - \varepsilon_{\nu'} \vec{k}'_\parallel). \end{aligned} \quad (5.13)$$

Luego de un trabajo algebraico extenso, el autor encuentra la solución $\{f_\nu\}_{\nu=1}^{\nu_{max}}$ al sistema de ecuaciones de Boltzmann planteado:

$$\begin{aligned} f_\nu(\vec{k}_\parallel) &= f_0(\varepsilon_\nu \vec{k}_\parallel) + e\vec{E} \cdot \frac{\hbar \vec{k}_\parallel}{m^*} \frac{\partial f_0(\varepsilon_\nu \vec{k}_\parallel)}{\partial \varepsilon_\nu \vec{k}_\parallel} \frac{1}{2} \times \\ &\times \sum_{\nu'} \left(e^{i\theta} \left\{ \left[1 + \omega_c T(\varepsilon_\nu \vec{k}_\parallel) \right]^{-1} \times T(\varepsilon_\nu \vec{k}_\parallel) \right\}_{\nu\nu'} + c.c. \right) \end{aligned} \quad (5.14)$$

$$\nu = 1.. \nu_{max}$$

donde θ es el ángulo entre \vec{k}_\parallel y \vec{E} , $\omega_c = e|\vec{B}|/m^*$ es la frecuencia ciclotrónica, y $T(\varepsilon)$ es la *matriz de tiempo de relajación* definida por:

$$T(\varepsilon) = C^{-1}(\varepsilon)F(\varepsilon), \quad (5.15)$$

en que:

$$C_{\nu\nu'}(\varepsilon) = \delta_{\nu\nu'} \sum_{\mu=1}^{\nu_{max}} \sum_{\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}} k_{\parallel}^2 W_{\nu\mu}(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mu \vec{k}'_{\parallel}}) - \sum_{\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}} \vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{k}'_{\parallel} W_{\nu\nu'}(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\nu \vec{k}_{\parallel}}) \quad (5.16)$$

$$F_{\nu\nu'}(\varepsilon) = \delta_{\nu\nu'} \sum_{\vec{k}_{\parallel}} k_{\parallel}^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\nu \vec{k}_{\parallel}}) \equiv F_{\nu}(\varepsilon) \quad (5.17)$$

$$(5.18)$$

donde las matrices tienen dimensión $\nu_{max} \times \nu_{max}$.

Finalmente si el campo magnético externo \vec{B} es nulo, la conductividad queda expresada por:

$$\sigma = \sum_{\nu} \frac{n_{\nu} e^2}{m^*} \sum_{\nu'} [C^{-1}(\varepsilon)]_{\nu\nu'} F_{\nu'}(\varepsilon) \quad (5.19)$$

donde n_{ν} es la densidad de electrones en la sub banda ν dada por la expresión:

$$n_{\nu} = \int_0^{\infty} g_{\nu}(\varepsilon) f_0(\varepsilon) d\varepsilon \quad (5.20)$$

donde

$$g_{\nu}(\varepsilon) = \frac{\Lambda m^*}{\pi \hbar^2} \Theta(\varepsilon - \varepsilon_{\nu}). \quad (5.21)$$

5.3. Formulación D. Calecki - incorporación de la rugosidad superficial

Para incluir la rugosidad superficial, el autor considera que en la cara superior de la película metálica, se agrega una perturbación $u_+(\vec{r}_{\parallel})$ y en la cara inferior $u_-(\vec{r}_{\parallel})$, como se muestra en la figura 5.3. Se supone además que $u_{\pm} \ll t$. Bajo esta suposición, Calecki introduce esta rugosidad como una perturbación al hamiltoniano original \mathcal{H}_0 mediante el hamiltoniano de interacción \mathcal{H}_i , de la forma:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_i \quad (5.22)$$

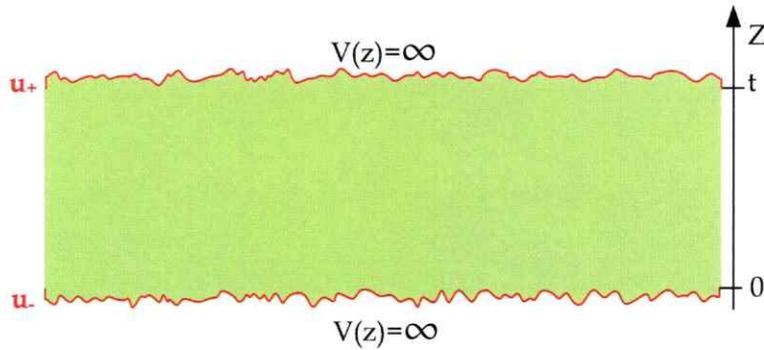


Figura 5.3: Representación de la rugosidad superficial, en una película metálica delgada de acuerdo al modelo de Daniel Calecki.

$$\text{con } \mathcal{H}_i \approx -V_0 [u_+(r_{\parallel})\delta(z-t) + u_-(r_{\parallel})\delta(z)]. \quad (5.23)$$

Con estos antecedentes, el autor usa la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo para encontrar el término $W_{\nu\nu'}(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel})$, considerando a \mathcal{H}_i como el hamiltoniano de interacción. Para todos los efectos, se consideró que $V_0 \rightarrow \infty$ (pozo de potencial infinito):

$$W_{\nu\nu'}(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel}) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{\Lambda} \sum_{\eta=\pm} \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{m^* t^3} \right)^2 \nu^2 \nu'^2 F(\langle u_{\eta}, u_{\eta} \rangle) \delta(\varepsilon_{\nu \vec{k}_{\parallel}} - \varepsilon_{\nu' \vec{k}'_{\parallel}}) \quad (5.24)$$

donde $F(\cdot)$, en el límite $\Lambda \rightarrow \infty$, representa la transformada de Fourier $\mathcal{F}(\cdot)$, y $\langle u_{\eta}, u_{\eta} \rangle$ representa el promedio de la autocorrelación de las funciones u_{\pm} .

Al observar datos obtenidos de películas de oro, se encuentra que el perfil de la autocorrelación superficial no sigue un patrón establecido. Sin embargo si se tiene en consideración que el fenómeno de la conducción eléctrica representa un promedio de los eventos de scattering del electrón con los mecanismos en cuestión, se llega a la conclusión que la teoría debe incorporar el promedio de los perfiles de autocorrelación (véase figura 5.3).

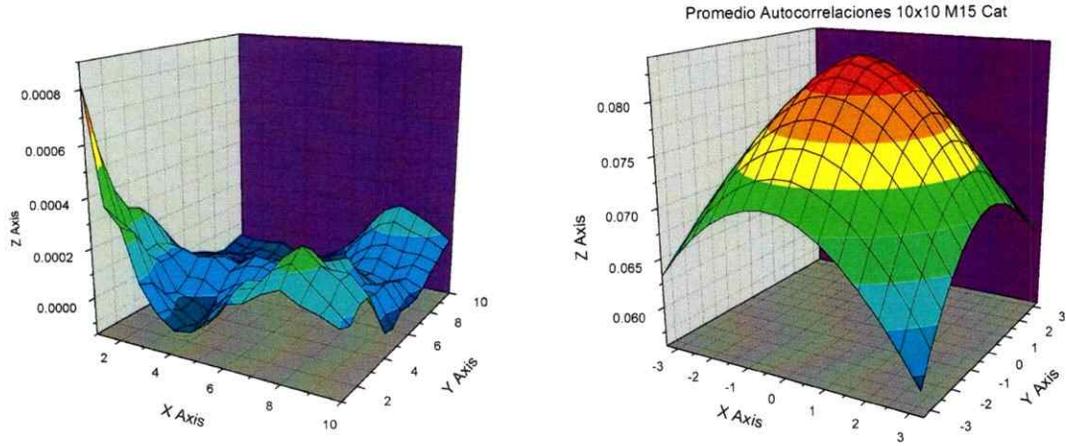


Figura 5.4: Autocorrelaciones superficiales en una película delgada de oro. A la izquierda se observa la autocorrelación superficial de una muestra de la película, mientras que a la derecha se observa el promedio de 20 autocorrelaciones medidas en diferentes regiones de la película.

Suponiendo que la autocorrelación promedio de las funciones u_{\pm} es de tipo *gausiano*, entonces se puede escribir:

$$\langle u_{\eta}, u_{\eta} \rangle = \delta_{\eta}^2 e^{-r_{\parallel}^2 / \xi_{\eta}^2}, \quad (5.25)$$

donde δ corresponde a la amplitud de la gaussiana en el origen, y ξ representa la distancia en que la función cae en un factor $1/e$ respecto del origen. Ambos parámetros son característicos de dicha distribución.

Considerando además que los portadores que participan en la conducción se encuentran en la vecindad de $\varepsilon \approx \varepsilon_F$, se puede aproximar $C_{\nu\nu'}(\varepsilon)$ a :

$$C_{\nu\nu'}(\varepsilon \approx \varepsilon_F) = \frac{\Lambda \pi^2}{4 \hbar t^6} \sum_{\eta=\pm} \delta_{\eta}^2 \xi_{\eta}^2 \left[\delta_{\nu,\nu'} \nu^2 k_{\nu}^2 \sum_{\mu=1}^{\nu_F} \mu^2 I_{\eta,\nu\mu} - k_{\nu} k_{\nu'} \nu^2 \nu'^2 J_{\eta,\nu\nu'} \right] \quad (5.26)$$

$$\text{con } k_{\nu} = \sqrt{k_F^2 - \left(\frac{\pi \nu}{t}\right)^2} \quad (5.27)$$

$$I_{\eta,\nu\mu} = 2\pi^2 e^{-\xi_{\eta}^2(k_{\nu}^2 - k_{\mu}^2)/4} I_0(\xi_{\eta}^2(k_{\nu} k_{\mu})/2) \quad (5.28)$$

$$J_{\eta,\nu\mu} = 2\pi^2 e^{-\xi_\eta^2(k_\nu^2 - k_\mu^2)/4} I_1(\xi_\eta^2(k_\nu k_\mu)/2) \quad (5.29)$$

donde $I_0(z)$ e $I_1(z)$ denotan las funciones de Bessel modificadas, regulares en el origen, de orden 0 y 1 respectivamente.

Bajo estas aproximaciones ($\vec{B} = 0$, $u_\pm \ll t$, $V_0 \rightarrow \infty$, y perfil gaussiano de la autocorrelación superficial), la expresión para la conductividad (resistividad) contenida en la ecuación (5.19) - que depende de la matriz C de la ecuación (5.26) - incluye los efectos de la rugosidad superficial, y la cuantización del vector de onda. Con el fin de comparar estas expresiones con aquellas de Mayadas y Shatzkes, se incorporaron los mecanismos de scattering electrón-borde de grano, electrón-impurezas y electrón-fonón, en las secciones siguientes.

5.4. Formulación D. Calecki - aproximación de tiempo de relajación.

En el marco de la ecuación de transporte de Boltzmann, la aproximación de tiempo de relajación permite resolver una serie de problemas, tratando el término colisional de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$J_{Col} = \left[\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial t} \right]_{Col} \cong \frac{f_1(\varepsilon) - f_0(\varepsilon)}{\tau} = \frac{\phi(\varepsilon)}{\tau} \quad (5.30)$$

donde $f_0(\varepsilon)$ representa la función de distribución correspondiente al equilibrio termodinámico (en ausencia de campos externos) y $f_1(\varepsilon)$ representa la función de distribución que se alcanza al conectar los campos externos. De acuerdo a este marco conceptual, $\phi(\varepsilon)$ es una cantidad pequeña (por que f_1 es muy proxima a f_0), y τ representa el tiempo que demora la función $f_1(\varepsilon)$ en relajarse hacia $f_0(\varepsilon)$ (por el efecto restaurador de las colisiones), si los campos externos fueran desconectados en $t = 0$. De allí el nombre de "tiempo de relajación". Esta aproximación es válida sólo si la

integral correspondiente al operador de colisión de Boltzmann admite una representación como la ecuación (5.30).

En su trabajo Calecki demuestra que en el sistema de la película metálica delgada, no es posible ocupar la aproximación de tiempo de relajación a menos que el número máximo de sub-bandas $\nu_{Max} = 1$, debido a que el hamiltoniano de interacción, que representa el scattering electrón-superficie rugosa, induce transiciones entre distintas sub-bandas.

5.5. Modificación de Palasantzas - scattering electrón-borde de grano.

En las secciones anteriores se resumieron los resultados obtenidos por Calecki, que permiten calcular el aumento de resistividad en una película metálica delgada en presencia de rugosidad superficial desde primeros principios.

George Palasantzas modifica la formulación de Calecki, agregando la presencia de bordes de grano al material. Para esto el autor inicialmente simplifica el modelo propuesto por Calecki, suponiendo que sólo en la cara superior de la película metálica delgada existe rugosidad, suposición válida en nuestro caso. Adicionalmente considera que los granos constituyen en realidad una rugosidad de mayor escala, como se observa en la figura 5.5.

Dada esta suposición, el autor introduce la presencia de los granos en la autocorrelación superficial, modificando el perfil gaussiano original de la expresión (5.25), utilizando la siguiente función de autocorrelación de alturas:

$$\mathcal{F}(\langle u_{\eta=+}, u_{\eta=+} \rangle) = \langle |h(k_{\parallel})|^2 \rangle = \delta^2 \frac{\pi \xi^2 D^2}{\pi \xi^2 + D^2} e^{-\frac{1}{4} \frac{k_{\parallel}^2 \xi^2 D^2}{\pi \xi^2 + D^2}}. \quad (5.31)$$

donde δ , ξ representan la amplitud cuadrática media y longitud de correlación lateral

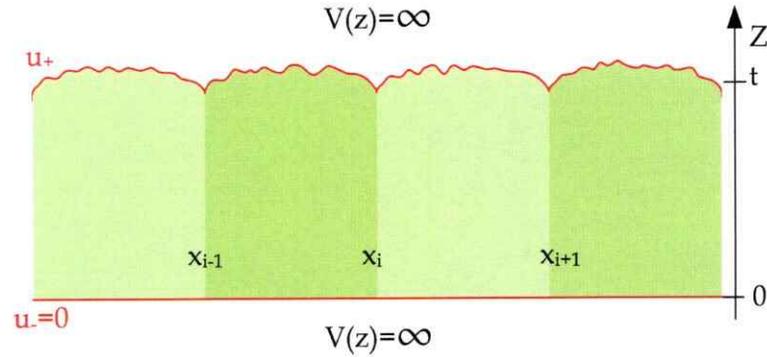


Figura 5.5: Representación de las estructuras en una película metálica delgada de acuerdo al modelo de George Palasantzas. Se aprecia que la perturbación sólo ocurre en la cara superior de la película metálica, además de incluir a los granos como una rugosidad adicional.

respectivamente, de la rugosidad superficial (presente al interior de un grano), D es el diámetro promedio de los granos, k_{\parallel} es la proyección del vector de onda en el plano de la película XY y $h(k_{\parallel})$ es la transformada de Fourier de la función de autocorrelación de alturas, representada en la figura 5.6, identificada en el trabajo de Calecki como u_+ . Si se introduce esta última expresión en la ecuación (5.24), se obtiene una nueva expresión para la conductividad:

$$\sigma(t) = \frac{e^2 \hbar^3}{m^{*2} t} \sum_{\nu=1}^N \sum_{\nu'=1}^N k_{\nu}^2 k_{\nu'}^2 [C^{-1}]_{\nu\nu'} , \quad (5.32)$$

$$C_{\nu\nu'} = \delta_{\nu\nu'} A_{\nu} k_{\nu}^2 \left[\sum_{\mu=1}^N A_{\mu} [F_1]_{\mu\nu} \right] - A_{\nu} A_{\nu'} k_{\nu} k_{\nu'} [F_2]_{\nu\nu'} , \quad (5.33)$$

donde N es el número de sub bandas ocupadas, y :

$$[F_1]_{\nu\nu'} = \delta^2 \frac{2\pi \xi^2 D^2}{\pi \xi^2 + D^2} e^{\left\{ -\frac{\xi^2 D^2 (k_{\nu}^2 + k_{\nu'}^2)}{4(\pi \xi^2 + D^2)} \right\}} I_0 \left[\frac{\xi^2 D^2}{2(\pi \xi^2 + D^2)} k_{\nu} k_{\nu'} \right] , \quad (5.34)$$

$$[F_2]_{\nu\nu'} = \delta^2 \frac{2\pi \xi^2 D^2}{\pi \xi^2 + D^2} e^{\left\{ -\frac{\xi^2 D^2 (k_{\nu}^2 + k_{\nu'}^2)}{4(\pi \xi^2 + D^2)} \right\}} I_1 \left[\frac{\xi^2 D^2}{2(\pi \xi^2 + D^2)} k_{\nu} k_{\nu'} \right] , \quad (5.35)$$

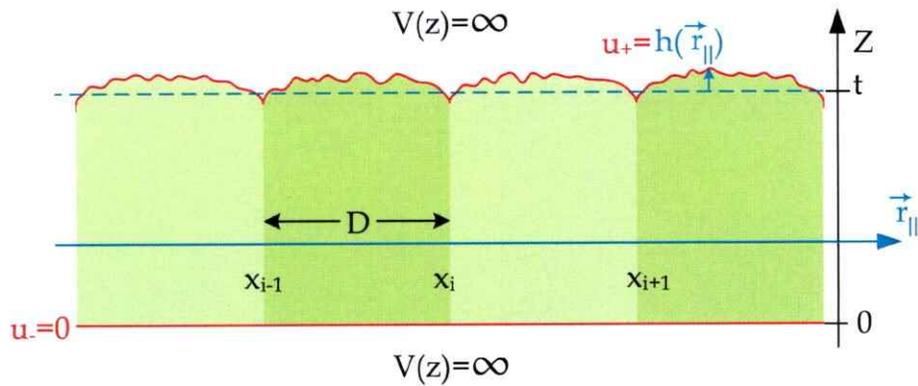


Figura 5.6: Función $h(\vec{r}_{\parallel})$, definida como la desviación de la superficie respecto del espesor medido t , de acuerdo al modelo de G. Palasantzas.

$$A_{\nu} = \frac{\hbar^2 \pi^2 \nu^2}{m^* t^3}, \quad (5.36)$$

$$k_{\nu} = \frac{2m^*}{\hbar^2} \sqrt{\varepsilon_F - \varepsilon_{\nu}}, \quad (5.37)$$

$$\varepsilon_{\nu} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi \nu}{t} \right)^2, \quad (5.38)$$

donde ε_F corresponde a la energía de Fermi. Aquí $I_0[z]$ e $I_1[z]$ son las funciones modificadas de Bessel, de orden 0 y 1 respectivamente. En estas expresiones se ha corregido un error algebraico contenido en el trabajo original de Palasantzas.

Al igual que en las expresiones de Calecki, la formulación de Palasantzas carece de la incorporación de los mecanismos usuales de scattering en el cristal metálico, como son el scattering electrón-impurezas y electrón-fonón, entre otros.

5.6. Incorporación de mecanismos de scattering adicionales

Con el fin de comparar las expresiones para la conductividad de una película metálica delgada, basadas tanto en la formulación de Palasantzas como en la de Mayadas y Shatzkes, es necesario agregar mecanismos de scattering presentes en el material que constituye las muestras. En particular interesa incorporar los mecanismos de scattering electrón-impurezas y electrón-fonón, que caracterizan al grueso (el monocristal metálico en ausencia de granos y de superficies rugosas). Debido a que ambos mecanismos de scattering son independientes del espesor de la muestra, se puede suponer que los elementos de matriz $W_{\nu\nu'}$ de la ecuación (5.13) *no dependen del índice de sub banda ν* .

Esto significa que en ausencia de bordes de grano y en ausencia de superficies rugosas, la probabilidad por unidad de tiempo que un electrón ocupando un estado con vector de onda \vec{k}_{\parallel} , sea dispersado por un fonón o una impureza, a un estado con vector de onda \vec{k}'_{\parallel} , es independiente del tamaño y forma de la muestra. Como consecuencia, los mecanismos de scattering electrón-fonón y electrón-impureza, no producen transiciones entre sub bandas, y por lo tanto la matriz de tiempo de relajación que los representa en el formalismo de Calecki resulta diagonal, independiente del índice ν . Si ocupamos la regla de Mathiessen para agrupar ambos mecanismos en un tiempo τ_{Bulk} o tiempo de relajación que caracteriza al monocristal (al grueso), entonces podemos escribir (ecuación 4.30):

$$\frac{1}{\tau_{Bulk}} = \frac{1}{\tau_{Imp}} + \frac{1}{\tau_{Phon}}.$$

En este punto ambas teorías se separan en su tratamiento de la inclusión de los mecanismos de scattering que caracterizan al grueso. Por una parte en el formalismo

de Mayadas y Shatzkes se infiere la validez de la aproximación de tiempo de relajación τ^* de la ecuación (4.11), para representar las colisiones electrón-borde de grano (con los bordes de grano representados por una sucesión de deltas de Dirac). En este contexto resulta natural incorporar el efecto del scattering electrón-fonón y electrón-impurezas mediante la aplicación de la regla de Mathiessen:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau^*} + \frac{1}{\tau_{Imp}} + \frac{1}{\tau_{Phon}}. \quad (5.39)$$

Por otra en el formalismo de Palasantzas, que se apoya en el formalismo de Calecki, se demuestra la no aplicabilidad de la aproximación de tiempo de relajación para representar el efecto de la colisión electrón-superficie rugosa. Debido a ello se define la matriz de tiempo de relajación T :

$$T(\varepsilon) = C^{-1}(\varepsilon)F(\varepsilon). \quad (5.40)$$

Como $F(\varepsilon)$ es diagonal y no depende del mecanismo de scattering, podemos escribir:

$$C_{1+2}(\varepsilon) = C_1(\varepsilon) + C_2(\varepsilon) = F(\varepsilon)(T_1^{-1}(\varepsilon) + T_2^{-1}(\varepsilon)). \quad (5.41)$$

Si una matriz incorpora la interacción con el grueso del material, y la otra los efectos de la rugosidad superficial y de los bordes de grano, entonces:

$$C_{Tot}(\varepsilon) = F(\varepsilon) \frac{1}{\tau_{Bulk}} + C_{Superficie+Granos}(\varepsilon). \quad (5.42)$$

Con esta nueva definición para C , queda completa la formulación de Palasantzas, para su comparación con la teoría de Mayadas y Shatzkes:

$$\sigma(t) = \frac{e^2 \hbar^3}{m^* 2t} \sum_{\nu=1}^N \sum_{\nu'=1}^N k_{\nu}^2 k_{\nu'}^2 \left([\tilde{C}^{-1}]_{\nu\nu'} \right), \quad (5.43)$$

$$\tilde{C}_{\nu\nu'} = \delta_{\nu\nu'} k_{\nu}^2 \left\{ A_{\nu} \left[\sum_{\mu=1}^N A_{\mu} [F_1]_{\mu\nu} \right] + \tau_{Bulk}^{-1} \right\} - A_{\nu} A_{\nu'} k_{\nu} k_{\nu'} [F_2]_{\nu\nu'}, \quad (5.44)$$

$$[F_1]_{\nu\nu'} = \delta^2 \frac{2\pi\xi^2 D^2}{\pi\xi^2 + D^2} e^{\left\{-\frac{\xi^2 D^2 (k_\nu^2 + k_{\nu'}^2)}{4(\pi\xi^2 + D^2)}\right\}} I_0 \left[\frac{\xi^2 D^2}{2(\pi\xi^2 + D^2)} k_\nu k_{\nu'} \right], \quad (5.45)$$

$$[F_2]_{\nu\nu'} = \delta^2 \frac{2\pi\xi^2 D^2}{\pi\xi^2 + D^2} e^{\left\{-\frac{\xi^2 D^2 (k_\nu^2 + k_{\nu'}^2)}{4(\pi\xi^2 + D^2)}\right\}} I_1 \left[\frac{\xi^2 D^2}{2(\pi\xi^2 + D^2)} k_\nu k_{\nu'} \right], \quad (5.46)$$

$$A_\nu = \frac{\hbar^2 \pi^2 \nu^2}{m^* t^3}, \quad (5.47)$$

$$k_\nu = \frac{2m^*}{\hbar^2} \sqrt{\varepsilon_F - \varepsilon_\nu} \text{ que corresponde a } k_{\parallel}, \quad (5.48)$$

$$\varepsilon_\nu = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi\nu}{t} \right)^2, \quad (5.49)$$

donde ε_F corresponde a la energía de Fermi. Aquí $I_0[z]$ e $I_1[z]$ son las funciones modificadas de Bessel, de orden 0 y 1 respectivamente.

5.7. Método numérico para invertir C

Con el fin de obtener resultados numéricos de la formulación de Palasantzas presentada en la ecuación (5.43), fue necesario invertir la matriz C . Sin embargo es mas rápido, y reduce considerablemente los errores numéricos, el descomponer la matriz C (que se pretende invertir) en su forma $L \cdot U$ - es decir descomponer a la matriz C en la multiplicación de dos matrices, la primera L *triangular inferior* y la segunda U *triangular superior* - y posteriormente resolver el sistema de ecuaciones lineales:

$$C(\varepsilon) \cdot \vec{x} = F(\varepsilon), \quad (5.50)$$

con lo cual se evita el cálculo explícito de la matriz inversa. Si se considera esta alternativa, el sistema de ecuaciones se puede resolver como:

$$C\vec{x} = (L \cdot U) \vec{x} = F$$

$$\Rightarrow L(\underbrace{U \cdot \vec{x}}) = F$$

$$L\vec{x}' = F$$

$$\text{donde } \vec{x}' = U\vec{x}$$

La ventaja de este método es que resulta trivial resolver un sistema de ecuaciones triangular³. Para verificar si la descomposición $L \cdot U$ del programa y la resolución del sistema de ecuaciones lineales era correcto, se procedió a verificar que el producto de la matriz por su inversa conducía efectivamente a la matriz identidad. En general se obtuvo que esto resultaba en una matriz tal que, 1 menos el promedio de los elementos de su diagonal era menor a 10^{-16} , y que la suma de sus valores absolutos de todos los elementos no diagonales era menor a 10^{-16} , lo que verifica el correcto funcionamiento del programa.

³Para más detalles sobre este método véase la referencia [15]

Capítulo 6

Exploración de parámetros

Para comparar las teorías de Mayadas y Shatzkes, con la de G. Palasantzas, se procedió a barrer el espacio de parámetros de entrada de ambas teorías, conservando algunos parámetros como constantes. Con el fin de estudiar el comportamiento de ambas teorías en escalas que recorran varios ordenes de magnitud, se variaron dichos parámetros utilizando una escala logarítmica. Cabe recordar que estos resultados *se obtienen por primera vez sin incurrir en aproximaciones de ninguna especie.*

6.1. Formulación de Mayadas y Shatzkes - parámetros

La teoría de Mayadas y Shatzkes tiene como parámetros de entrada las siguientes cantidades:

1. D - diámetro promedio de los granos,
2. s - dispersión típica de D ,
3. t - espesor de la muestra,
4. p_0, p_t - reflectividades de las caras inferior y superior de la película,

5. R - reflectividad del borde de grano,
6. ℓ - camino libre medio de los portadores en el cristal,
7. k_F - vector de onda de Fermi del material que compone la película.

Debido a las condiciones experimentales expuestas para las películas sólo algunos de los parámetros fueron variados mientras que se mantuvieron fijos los restantes. Para el caso de la teoría de Mayadas y Shatzkes, se fijaron los parámetros de la tabla 6.1, mientras que se variaron los de la tabla 6.2.

Parámetro	Valor
p_0	1
$k_F \text{ nm}^{-1}$	12.1

Tabla 6.1: Parámetros fijos para el modelo de Mayadas y Shatzkes

Parámetro	Valor
R	0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 0.9
p_t	0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 0.9
$\ell \text{ nm}$	5, 10, 20, 50, 100, 200, 500, 1000, 2000, 5000
$D \text{ nm}$	5, 10, 20, 50, 100, 200
$s \text{ nm}$	$0.1 \times D$
$t \text{ nm}$	5, 10, 20, 50, 100, 200

Tabla 6.2: Parámetros barridos para el modelo de Mayadas y Shatzkes

Como se puede observar, los parámetros escogidos para recorrer una escala logarítmica fueron ℓ , D y t .

6.2. Formulación de Mayadas y Shatzkes - resultados

Para organizar los resultados obtenidos, se decidió primero estudiar las predicciones de la teoría, a lo largo de la cantidad adimensional $\frac{\ell}{D}$.

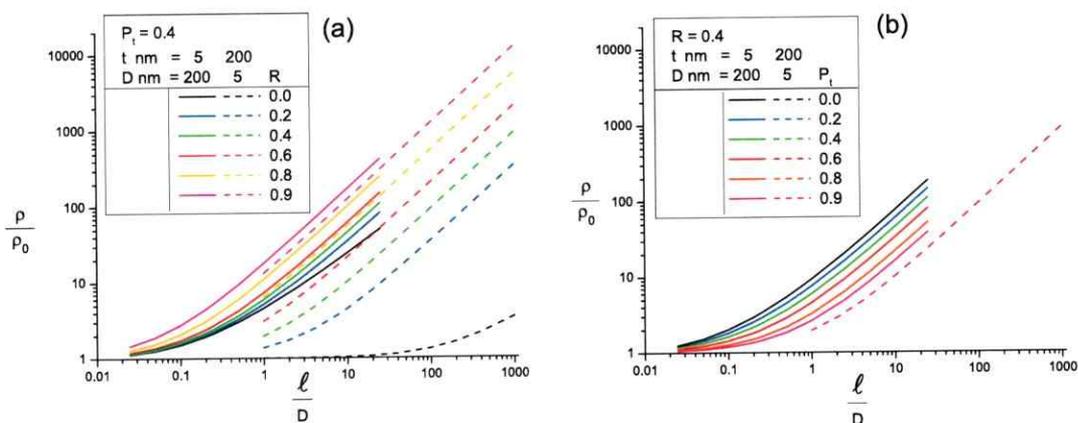


Figura 6.1: Primera exploración de parámetros para la teoría de Mayadas y Shatzkes. La línea continua simboliza la situación $t = 5nm \ll D = 200nm$, mientras que la línea segmentada representa el caso inverso. (a) p_t queda fijo en 0.4 y se varía R entre 0 y 0.9. (b) R queda fijo en 0.4 y se varía p_t entre 0 y 0.9.

En la figuras 6.1 (a) y (b) se puede observar el comportamiento de las predicciones basadas en la teoría de Mayadas y Shatzkes para varios límites.

En la figura 6.1(a) se grafica la influencia de la reflectividad de los bordes de grano R en la resistividad relativa, teniendo en cuenta dos límites de interés. Primero, las líneas continuas representan el caso en que $t = 5nm \ll D = 200nm$, observándose que las curvas suben a medida que aumenta la reflectividad del borde de grano R . Al invertir el límite, es decir considerando $t = 200nm \gg D = 5nm$, observado en las curvas segmentadas, la influencia que tiene la reflectividad del borde de grano es mucho mayor, cambiando de un orden de magnitud (en el caso $t \ll D$, entre $R = 0.0$ y $R = 0.9$), a tres órdenes de magnitud (en el caso $t \gg D$, entre $R = 0.0$ y $R = 0.9$).

Por otro lado, en la figura 6.1(b), se grafica la influencia de la reflectividad superficial p_t sobre la resistividad relativa de la película, teniendo en cuenta dos límites de interés. Nuevamente se considera primero, en líneas continuas, el caso en que

$t = 5nm \ll D = 200nm$. Se observa que al fijar $R = 0.4$ y variar p_t entre 0.0 y 0.9, la influencia de éste parámetro es bastante menor a la observada en la figura 6.1(a). Cabe recordar que el orden de las curvas se invierte debido a que a mayor reflectividad superficial, aumenta la conductividad, al contrario de lo que pasa con la reflectividad del borde de grano. Finalmente si se invierte el límite, es decir $t = 200nm \gg D = 5nm$, se detecta que todas las curvas se agrupan en una, dando cuenta de la nula influencia que tiene la reflectividad superficial en este límite.

Si bien es cierto este tipo de comportamiento concuerda con lo esperado a priori, se desconocía su influencia cuantitativa. En la figura 6.2 se puede observar el comportamiento en los dos límites. En el caso (a), la tasa de cambio de la resistividad con la reflectividad del borde de grano R , es similar a la tasa de cambio de la misma con la reflectividad de la superficie P_t , esto a pesar de que $t \ll D$. En el caso (b) se observa que el comportamiento de la resistividad resulta completamente determinado por la reflectividad del borde de grano R .

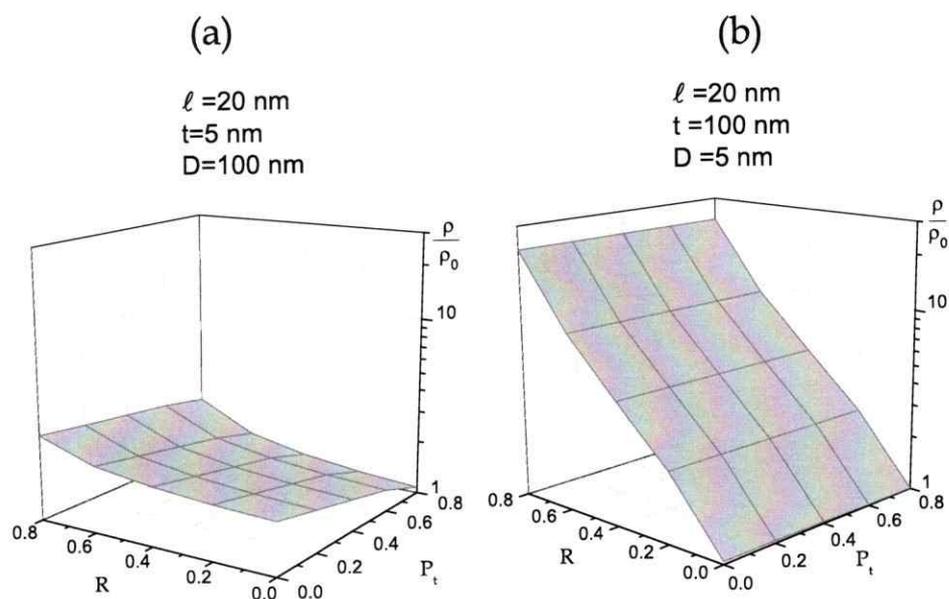


Figura 6.2: Exploración del comportamiento de la resistividad relativa del modelo de Mayadas y Shatzkes. (a) Corresponde al límite $t \ll \ell \ll D$. (b) corresponde a $D \ll \ell \ll t$.

Parámetro	Variación 1	Variación 2
R	0.1 .. 0.9	0.1 .. 0.9
p_t	1.0	1.0
$s \text{ nm}$	$0.1 \times D$	$0.1 \times D$
$t \text{ nm}$	50000	50000
$\ell \text{ nm}$	100 (fijo)	$10^{-2} \dots 10^6$
$D \text{ nm}$	$10^{-6} \dots 10^2$	100 (fijo)
$\Rightarrow \frac{\ell}{D}$	$10^{-4} \dots 10^4$	$10^{-4} \dots 10^4$

Tabla 6.3: Parámetros barridos para el modelo de Mayadas y Shatzkes, en una exploración sin rugosidad superficial ni efectos de tamaño. Se realizaron dos iteraciones - Variación 1 y Variación 2 - con el fin de determinar la concordancia entre las dos posibilidades de barrido.

Adicionalmente se exploró en un rango amplio la influencia de la reflectividad del borde de grano sobre la resistividad, sin considerar la rugosidad superficial ni los efectos de tamaño de acuerdo a la tabla 6.3. En una primera iteración (Variación 1) se fijó el camino libre medio en $\ell = 100nm$ y se varió el tamaño de los granos D . Para contrastar estos resultados se procedió a variar luego (Variación 2) el camino libre medio ℓ fijando el diámetro promedio de los granos $D = 100nm$ coincidiendo los resultados con la primera iteración.

En el gráfico se muestra el resultado de la conductividad relativa, variando el camino libre medio ℓ manteniendo fijo el diámetro promedio de los granos en $D = 200nm$. En estos gráficos se incluyen además las cantidades, n_{inf} y n_{sup} .

La primera (n_{inf}) representa el límite en que el diámetro medio de los granos D es del orden de $200nm$ y el camino libre medio ℓ es del orden de $0.2nm$ lo que representa aproximadamente la distancia de un diámetro atómico.

Por otra parte n_{sup} representa el caso en que ℓ es del orden de $200nm$, y $D \sim 0.2nm$, vale decir, se escoge un camino libre medio de los portadores típico, y se disminuye el diámetro promedio de los granos hasta un valor de un diámetro atómico como límite inferior.

El gráfico obtenido se despliega en la figura 6.3. Cabe notar que el efecto de la variación de R - la reflectividad de los bordes de grano - produce un desplazamiento de la curva de σ/σ_0 con respecto del parámetro ℓ/D . Este desplazamiento origina un cambio en σ/σ_0 que puede llegar aproximadamente a dos ordenes de magnitud. Para finalizar la exploración del modelo de Mayadas y Shatzkes se buscó la influencia en la conductividad y resistividad relativas, como función del espesor comparado con el diámetro promedio de los granos. En las figuras 6.4(a) y 6.4(b) se puede observar dicha influencia.

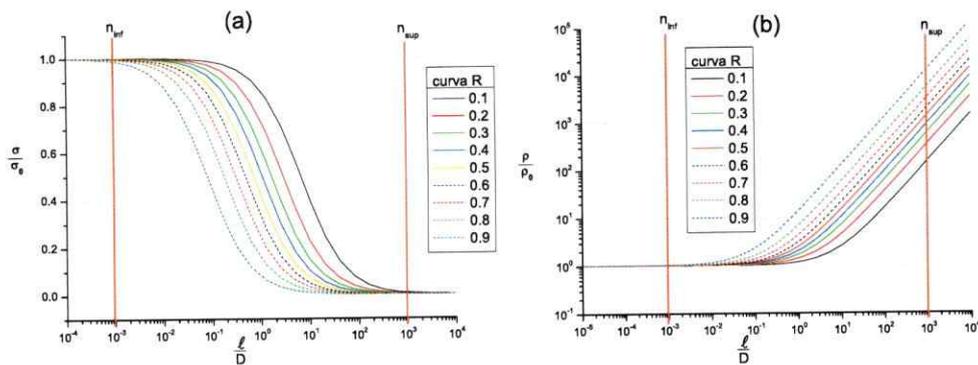


Figura 6.3: Exploración del comportamiento de la conductividad relativa del modelo de Mayadas y Shatzkes a espesor $t = 50,000\text{nm}$ y $p_t = p_0 = 1$. Aquí n_{inf} y n_{sup} representan límites físicos dado por el rango accesible de los parámetros ℓ y D . La figura (a) corresponde a la conductividad relativa y la figura (b) a la resistividad relativa.

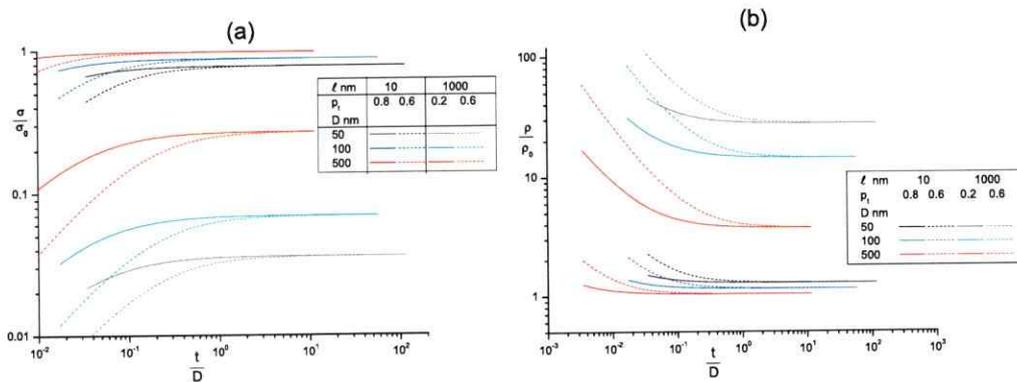


Figura 6.4: Exploración del comportamiento de la conductividad relativa del modelo de Mayadas y Shatzkes en función del espesor t , para diversas reflectividades p_t ($R = 0.5$) y diámetros promedio D de los granos.

6.3. Formulación de George Palasantzas - parámetros

La teoría (modificada) de G. Palasantzas tiene como parámetros de entrada:

1. D - diámetro promedio de los granos,
2. t - espesor de la muestra,
3. δ y ξ amplitud r.m.s. y longitud de correlación lateral de la rugosidad superficial al interior de un grano,
4. ℓ - camino libre medio de los portadores en el monocristal,
5. k_F - vector de onda de Fermi del material que compone la película.

Al igual que en el proceso de barrido de parámetros para la teoría de Mayadas y Shatzkes, en la teoría de Palasantzas se fijó un parámetro (k_F - vector de onda de Fermi). El hecho de que la teoría de Palasantzas esté basada en primeros principios, se ve reflejado en que no hay parámetros fenomenológicos ajustables que considerar.

Parámetro	Valor
k_F	$12.1 \times 10^9 m^{-1}$

Tabla 6.4: Parámetro fijo para el modelo de G. Palasantzas, correspondiente al oro.

Parámetro	Valor
ℓ nm	5, 10, 20, 50, 100, 200, 500, 1000, 2000, 5000
D nm	5, 10, 20, 50, 100, 200
δ nm	0.2, 0.5, 1.0, 2.0, 5.0
ξ nm	0.2, 0.5, 1.0, 2.0, 5.0, 10.0
t nm	5, 10, 20, 50, 100, 200

Tabla 6.5: Parámetros barridos para el modelo de G. Palasantzas.

También en el caso de la exploración de la teoría de Palasantzas, se variaron parámetros recorriendo escalas logarítmicas.

6.4. Formulación de George Palasantzas - resultados

Nuevamente, para organizar los resultados obtenidos, se decidió primero estudiar las predicciones de la teoría, a lo largo de la cantidad adimensional $\frac{\ell}{D}$.

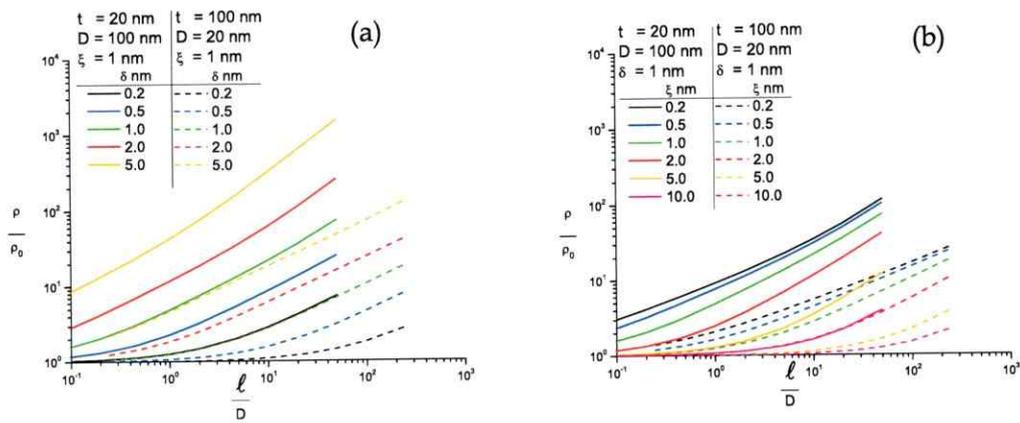


Figura 6.5: Primera exploración de parámetros en la teoría de Palasantzas. La línea continua simboliza la situación $t = 20\text{nm} < D = 100\text{nm}$, mientras que la línea segmentada representa el caso inverso. (a) ξ queda fijo en 1.0 nm y se varía δ entre 0.2 y 5.0 nm. (b) δ queda fijo en 1.0 nm y se varía ξ entre 0.2 y 10.0 nm.

A continuación se observa el comportamiento de la teoría de Palasantzas, fijando $\delta = 0.2\text{nm}$ y $\xi = 10.0\text{nm}$, variando D y t .

Se puede observar que en la formulación de Palasantzas, la influencia del borde de grano resulta muy disminuída. Esto es consecuencia del supuesto que se pueden acoplar las longitudes y amplitud que caracterizan tanto a los bordes de grano, como a la rugosidad superficial al interior de cada grano. Los valores de los parámetros δ y ξ son similares a los recientemente obtenidos en mediciones de películas delgadas de oro [11]. En la teoría de Palasantzas llama la atención el hecho de que ρ/ρ_0 exhibe un crecimiento monótono (que abarca varios órdenes de magnitud) al aumentar δ .

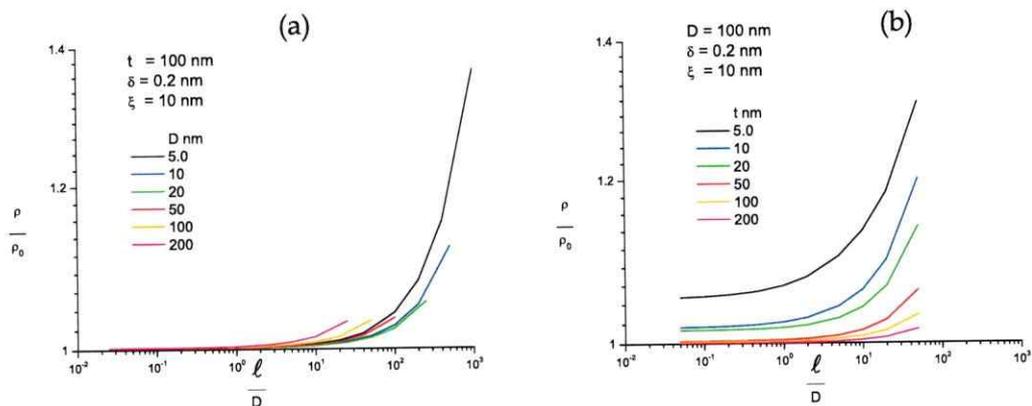


Figura 6.6: Segunda exploración de parámetros en la teoría de Palasantzas. La línea continua simboliza la situación $t = 20\text{nm} < D = 100\text{nm}$, mientras que la línea segmentada representa el caso inverso. (a) ξ queda fijo en 1.0 nm y se varía δ entre 0.2 y 5.0 nm . (b) δ queda fijo en 1.0 nm y se varía ξ entre 0.2 y 10.0 nm .

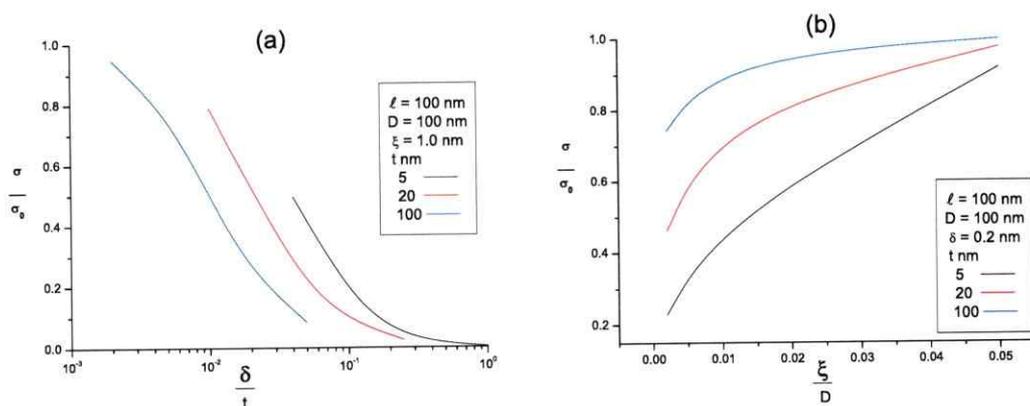


Figura 6.7: Tercera exploración de parámetros en la teoría de Palasantzas - δ y ξ . Se fijaron $D = 100\text{nm}$ y $\ell = 100\text{nm}$. En (a) se fijó $\xi = 1.0\text{nm}$ y se varió δ para tres espesores - $5, 20$ y 100 nm -. En (b) se fijó $\delta = 0.2\text{nm}$ y se varió ξ para los mismos tres espesores.

Desde un punto de vista intuitivo basado en argumentos geométricos que se derivan de la dualidad onda-partícula, cabría esperar que el electrón fuese dispersado por rugosidades superficiales que tuviesen lugar sobre una escala de distancias compa-

table - o ligeramente superior - a la longitud de onda del electrón: la longitud de onda de Fermi ($\xi, \delta \approx \lambda_{Fermi}$). El crecimiento monótono de ρ/ρ_0 al aumentar δ muy por encima de $\lambda_{Fermi} = 0.52nm$ constituye una limitación severa de la teoría original formulada por Calecki, que sirve de marco conceptual para la formulación de Palasantzas.

6.5. Ajustes con temperatura.

En esta sección se explorará la capacidad de ajustar datos experimentales obtenidos recientemente, utilizando las teorías en cuestión¹. El método usado para agregar efectos adicionales es el de la regla de Mathiessen, aunque presenta sutilezas que se aclararán oportunamente.

6.5.1. Resistividad fonónica.

Con el fin de incluir la influencia de la temperatura en los modelos teóricos, se utilizaron los datos publicados por Matula [10]. En su trabajo Matula presenta una tabla de resistividades intrínseca y total, para oro de un 99.999 % de pureza. En particular el autor consideró un gran número de mediciones, las cuales ajustó usando un modelo de Bloch-Grunheissen de dependencia con temperatura.

La resistividad intrínseca denominada por el autor corresponde a la que se conoce como resistividad fonónica y es la manifestación del scattering electrón-fonón. Por otro lado la resistividad total incluye los efectos de la resistividad residual². Dicha resistividad residual se estimó en $0.0220 \times 10^{-8} \Omega m$.

¹Los datos mencionados están publicados en las referencias [16], [11] y [17], sin embargo algunos datos mas recientes no han sido publicados aún por el grupo del laboratorio de superficies de la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de Chile

²Corresponde a la resistividad del oro a 4K, donde se desprecia la resistividad de origen fonónico debido a que los fonones están "congelados"

Con el fin de calcular la resistividad a cualquier temperatura, se generaron los datos usando un ajuste tipo spline cúbico, que dieron los resultados que se muestran en la figura 6.8.

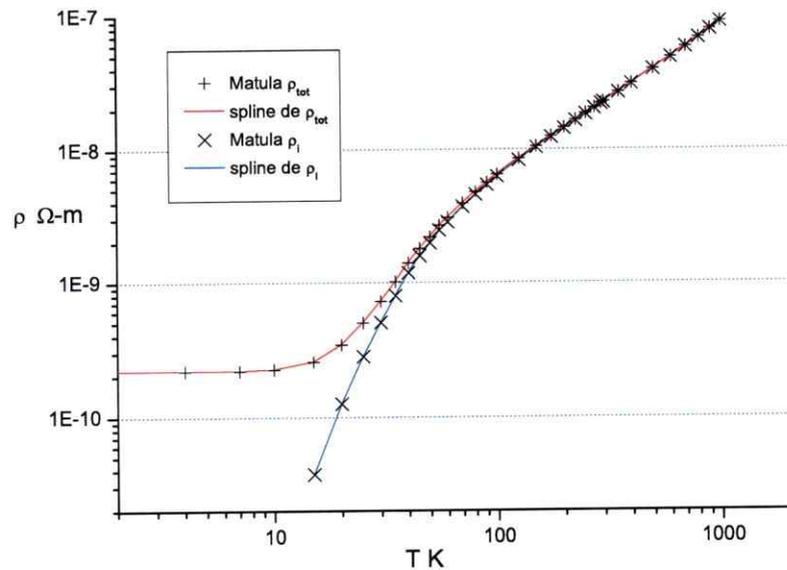


Figura 6.8: Ajuste tipo spline cúbico de los datos de Matula, tanto en el caso de resistividad intrínseca (fonónica) - azul - como en el caso de resistividad total, para oro de 99.999 % de pureza.

Con la función de resistividad fonónica o total con respecto a temperatura, se puede obtener una estimación del camino libre medio de los portadores en presencia del mecanismo de scattering en cuestión, utilizando el modelo de Drude:

$$\ell(T) = \frac{m^* v_F}{ne^2} \frac{1}{\rho(T)} \quad (6.1)$$

donde m^* es la masa reducida del electrón, v_F la velocidad de Fermi, n la densidad de electrones libres y e la carga del electrón.

6.5.2. Curvas.

Los datos experimentales usados fueron obtenidos para dos tipos de muestra, cuyas características se entregan en la tabla a continuación.

Película	Espesor	$\delta(^*)$	$\xi(^*)$	D
1	93 nm	0.046 nm	2.94 nm	230 nm
2	50 nm	0.05 nm	3.0 nm	10 nm

Tabla 6.6: Películas consideradas para el ajuste con temperatura.

(*) En el caso de la película 2, no se cuentan con datos de la rugosidad superficial, por lo que se utilizaron los valores disponibles de δ y ξ de la película 1.

En el caso de la teoría de Mayadas y Shatzkes se incluyó el efecto de los fonones, utilizando la regla de Mathiessen, aplicada al camino libre medio como función de la resistividad total, y se iteró en el espacio de parámetros R y p_t hasta minimizar el error porcentual cuadrático medio de acuerdo a la fórmula:

$$err = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{i=1}^{i=N} \left(\frac{\rho_{exp\ i} - \rho_{teo}(T_i)}{\rho_{exp\ i}} \right)^2}, \quad (6.2)$$

donde ρ_{teo} es la resistividad obtenida por el modelo teórico en cuestión, ρ_{exp} corresponde a los datos experimentales.

En el caso de la teoría de Palasanzas, el efecto de los fonones se incluye de acuerdo a la formulación presentada la sección 5.6, es decir, se incluyen efectos de impurezas y fonones como elementos diagonales a la matriz C de tiempos de relajación inversos. En esta teoría se iteró en el camino libre medio de impureza solamente, puesto que no cuenta con parámetros extra de ajuste. Los resultados de estos ajustes se presentan en las figuras 6.9 y 6.10 (acercamiento de la primera figura). Los parámetros obtenidos

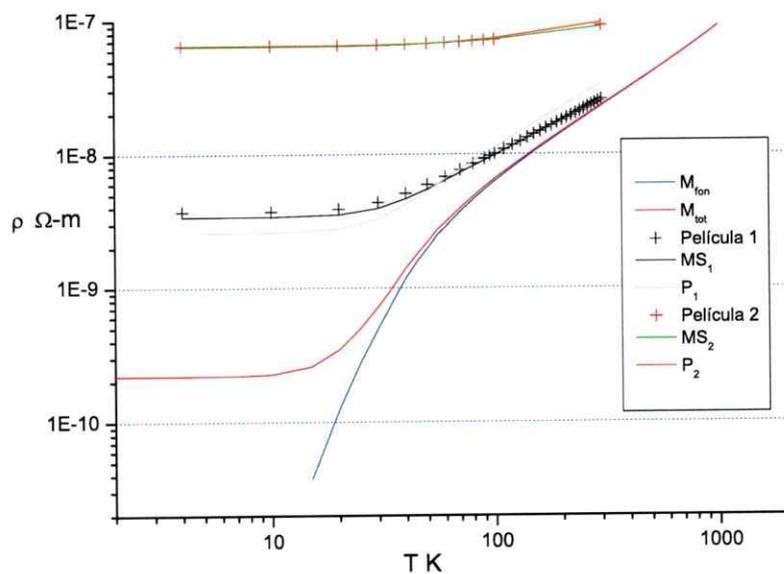


Figura 6.9: Ajuste de datos experimentales como función de la temperatura. Las curvas azul (M_{fon}) y roja (M_{tot}) representan las resistividades intrínseca y total respectivamente, de Matula vía spline cúbico. Las cruces negras (Película 1) y rojas (Película 2) representan las mediciones hechas a las películas de 93 y 50 nm de espesor respectivamente. Las curvas negra (MS_1) y gris (P_1) corresponden al ajuste de las teorías de Mayadas y Shatzkes, y Palasanzas respectivamente, sobre los datos de la película de 93 nm de espesor. De la misma forma las curvas verde (MS_2) y roja (P_2) representan los ajustes de Mayadas y Shatzkes, y Palasanzas sobre los datos de la película de 50 nm de espesor.

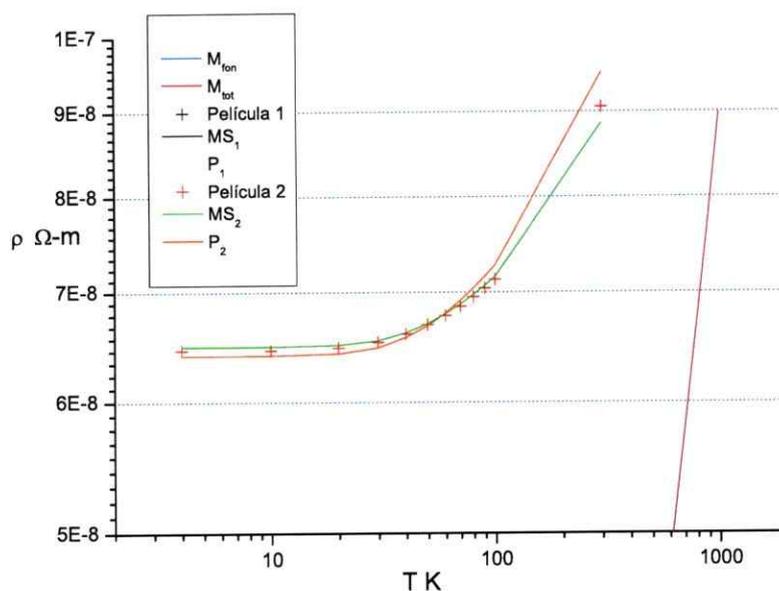


Figura 6.10: Ajuste de datos experimentales como función de la temperatura - acercamiento a las curvas relacionadas con la película de 50 nm de espesor.

para cada curva se entregan en la tabla 6.7. El error cometido por las curvas al ajustar los puntos experimentales no superó el 5%.

Curva	Teoría	Parámetros	Comparación
MS_1	Mayadas y Shatzkes	$R = 0.867, p_t = 1.0$	$\frac{\tau_{imp}}{\tau_{Phon}(300K)} \sim 10^8 \gg 1$
P_1	Palasantzas	$\tau_{imp} = 2.3 \times 10^{-13} s$	$\frac{\tau_{imp}}{\tau_{Phon}(300K)} \sim 8.5$
MS_2	Mayadas y Shatzkes	$R = 0.852, p_t = 0.98$	$\frac{\tau_{imp}}{\tau_{Phon}(300K)} \sim 10^8 \gg 1$
P_2	Palasantzas	$\tau_{imp} = 9.3 \times 10^{-15} s$	$\frac{\tau_{imp}}{\tau_{Phon}(300K)} \sim 0.3$

Tabla 6.7: Parámetros obtenidos del ajuste comparados con experimentos. Aquí se utilizó $\tau_{Phon}(300K) = 2.7 \times 10^{-14} s$. Los tiempos de colisión asociados a impurezas ($10^{-6} s$), corresponden a valores mucho mayores que el fonónico a 300 K.

Llama la atención que para reproducir la resistividad observada a 4 K, de acuerdo con ambas teorías, resulta necesario introducir como parámetro de ajuste, un τ_{imp} que resulta comparable o superior a $\tau_{Phon}(300K)$ ³. Debido a que en el caso de la teoría de Mayadas y Shatzkes el camino libre medio que representa a τ_{imp} , resulta del orden de metros, este término se eliminó del espacio de parámetros de exploración.

³Cabe recordar que para ajustar las curvas de Mayadas y Shatzkes se iteró en el parámetro l_{imp} desde $10^{-10}m$ hasta 10^1m , decreciendo monótonicamente en este parámetro, lo que a todas luces representa una complicación de la teoría.

Capítulo 7

Análisis y conclusiones

Hasta el momento, no han sido publicadas las predicciones de las teorías alternativas de Mayadas y Shatzkes o de G. Palasantzas referentes a los efectos de tamaño en el transporte de carga en películas delgadas, incluyendo el scattering debido a los bordes de grano. En esta tesis, se presentan por primera vez resultados numéricos detallados de las predicciones de estas teorías, *sin aproximaciones*.

Debe destacarse que la comparación de ambas teorías - en el sentido de homologar parámetros de una con otra - resulta no ser trivial. Esto es debido a que los parámetros (R y p_t) en una teoría son esencialmente constantes fenomenológicas (parámetros ajustables), mientras que, en la otra, (δ y ξ) son cantidades medibles vía STM.

Los resultados numéricos que son el fundamento de los análisis contenidos en esta tesis se obtuvieron así: Tanto en el caso de la teoría de Mayadas y Shatzkes como en la de Palasantzas utilizamos un algoritmo de integración de Gauss-Legendre de 32 puntos. En el último caso se recurrió además a un método de inversión de matrices más eficiente que el usual, lo que permitió encontrar por primera vez la solución de las ν_{Max} ecuaciones de movimiento.

7.1. Resultados de la teoría de Mayadas y Shatzkes

En el caso de la teoría de Mayadas y Shatzkes, se puede concluir que la resistividad es controlada primordialmente por la reflectividad del borde de grano. Sólo en el régimen de parámetros en que $t \ll D$ (espesor mucho menor que el diámetro promedio de los granos), la influencia de la reflectividad superficial es apreciable.

Otra característica de las curvas mostradas es que para la región en que $\ell \ll D$ la conductividad se aproxima al valor del grueso, lo que se explica por que los electrones encuentran más frecuentemente mecanismos de scattering diferentes al de electrón borde de grano. Por otro lado la conductividad se reduce a un valor finito muy inferior a la del grueso, en la región opuesta ($\ell \gg D$), lo que se explica por que los electrones se encuentran preferentemente con los bordes de grano. Estas afirmaciones son corroboradas con los ajustes de las curvas con temperatura. En efecto, para el caso de la película de 50 nm de espesor, el diámetro promedio del borde de grano de 10 nm, hace que la curva sea casi horizontal en la escala del gráfico, lo que se debe a que el cociente entre resistividad a 273 K y resistividad a 4 K es de 1.48, mientras que para el caso de la película de 93 nm de espesor este mismo cociente es de 6.25 aproximadamente.

Las predicciones teóricas concuerdan intuitivamente con lo esperado. En el caso de la reflectividad superficial, la conductividad disminuye a medida que disminuye p_t , lo que se explica por que al disminuir dicho parámetro los electrones son reflejados especularmente cada vez menos. Por otro lado, en el caso de la reflectividad del borde de grano, la conductividad disminuye al aumentar R , lo que se explica por que R aumenta la probabilidad de que los electrones no atraviesen la barrera representada

por los bordes de grano.

7.2. Resultados de la teoría de Palasantzas

En el caso de la teoría de G. Palasantzas la influencia de la rugosidad superficial es menor comparada con la del borde de grano. Esta afirmación contrasta a primera vista con la formulación de la autocorrelación superficial acoplada contenida en esta teoría:

$$\mathcal{F}(\langle u_{\eta=+}, u_{\eta=+} \rangle) = \langle |h(k_{\parallel})|^2 \rangle = \delta^2 \frac{\pi \xi^2 D^2}{\pi \xi^2 + D^2} e^{-\frac{1}{4} \frac{k_{\parallel}^2 \xi^2 D^2}{\pi \xi^2 + D^2}}. \quad (7.1)$$

Es esta forma de la autocorrelación superficial la que complica mayormente el análisis cuantitativo.

En el caso de la influencia de δ y ξ comparadas con D , la influencia de δ comparada con D es mucho menor en la mayor parte del rango de parámetros (R , p_t y t). Sólo cuando el espesor es mucho menor que el diámetro promedio de los granos ($t \ll D$) la influencia de la rugosidad - representada por sus parámetros δ y ξ - se ve acentuada. Por el contrario la influencia de D en todo el espacio de parámetros es importante, controlando todos los gráficos mostrados.

Finalmente cuando se comparan directamente δ con t y ξ con D surgen algunos aspectos adicionales. En el caso de la comparación de ξ con D el factor rugosidad superficial influye en la resistividad sólo en la región en que la longitud de correlación lateral de la rugosidad superficial es mucho menor que el diámetro promedio de los granos y que el espesor ($\xi \ll D, t$).

7.3. Conclusiones

Para finalizar se puede afirmar que en el régimen de los parámetros observados en las mediciones hechas a la fecha la influencia de la rugosidad superficial es mucho

menor que la del borde de grano, para ambas teorías. En otras palabras, ambas formulaciones apuntan a un hecho en común, esto es que la resistividad de la película metálica delgada es controlada mayoritariamente por el scattering electrón - borde de grano. Esto se hace evidente en el caso de las curvas de ajuste de los modelos como función de la temperatura, en las que el hecho de que el diámetro promedio del borde de grano sea menor que el espesor de la película hace que tanto los datos experimentales como las curvas ajustadas (y por lo tanto los modelos involucrados) den como resultado curvas casi horizontales (figura 6.9).

Como ambas teorías son aproximaciones de un comportamiento intrínsecamente cuántico, surge la necesidad de elaborar una descripción del scattering electrón-borde de grano y electrón - superficie rugosa, basada en un formalismo que proceda desde primeros principios, abandonando la ecuación de transporte de Boltzmann como ecuación de partida que describe el transporte de carga en películas metálicas delgadas.

El esfuerzo de miniaturización desplegado por la industria electrónica mundial, con el propósito de construir computadores mas rápidos, subraya la importancia de lograr una descripción teórica coherente del aumento de resistividad de una nanoestructura metálica originada por scattering electrón-superficie rugosa y electrón-borde de grano. Esto permitirá predecir el comportamiento eléctrico de dichas estructuras a priori, y con ello reducir costos de fabricación importantes.

Un primer paso para lograr esta descripción teórica coherente lo constituye la comparación entre los dos únicos modelos disponibles, que se presentan en este trabajo.

Apéndice A

Programas y fórmulas usados

A.1. Mayadas y Shatzkes

A.1.1. Programa principal

Programa usado para calcular el cociente de conductividad, predicho por Mayadas y Shatzkes. Este programa itera sobre la serie de parámetros considerados para explorar el comportamiento de la conductividad.

```
implicit real*8 (a-z)
real*8 D,t,pd,mfp,R,s
real*8 D_dat(6), mfp_dat(10)
real*8 SsS0
parameter (kF=12.1d9,p0=1.0d0,s_dat(3))
data D_dat/5.d0,10.d0,20.d0,50.d0,100.d0,200.d0/
data s_dat/0.001d0,0.01d0,0.1d0/
data mfp_dat/5.d0,10.d0,20.d0,50.d0,100.d0,200.d0,500.d0
* ,1000.d0,2000.d0,5000.d0/
data t_dat/5.d0,10.d0,20.d0,50.d0,100.d0,200.d0/
data pd_dat/0.0d0,0.2d0,0.4d0,0.6d0,0.8d0,0.9d0/
open (2, FILE = 'm&S_comp.dat')
write (2,*) 'mfp D R S SsS0'
do n1=0,9
do n2=1,6
do n3=1,10
t=50000.0d-9
pd=1.0d0
D=D_dat(n2)*1.0d-9
```

```

R=0.1d0*n1
mfp=mfp_dat(n3)*1.0d-9
s=0.1d0*D
alpha=mfp*R/(1.d0-R)/D
dp=D*kF
sp=s*kF
tp=t/mfp
SsS0=ThinFilmRatio(alpha,dp,p0,pd,sp,tp)
write(2,15) mfp,D,R,s,SsS0
15 format(ES20.10,ES20.10,ES20.10,ES20.10,ES20.10)
end do
end do
end do
stop

```

A.1.2. Función ThinFilmRatio2

Programa usado para calcular la función:

$$\begin{aligned}
 \frac{\sigma_{SG}}{\sigma_0} &= \frac{\sigma_G}{\sigma_0} - \frac{3}{\pi t k_F} \int_0^1 \int_0^1 \frac{v(1-v^2)\zeta^2}{\left(\zeta + \frac{\ell}{D} \frac{R}{1-R} F_{MS}(D, \zeta, s)\right)^2} \times \\
 &\times \frac{(2 - p_0 - p_t + (p_0 + p_t)E(t, u, v))(1 - E(t, u, v))}{(1 - p_0 p_t E(t, u, v)^2)} dudv. \quad (A.1)
 \end{aligned}$$

Requiere de las funciones fMS y BulkRatio. Las integrales están realizadas mediante una expansión gaussiana de 32 puntos [18]. Todos los parámetros son pasados de manera adimensional como se observa en el código del apéndice A.

```

real*8 function ThinFilmRatio2(alpha,d,p0,pt,s,t)
implicit real*8 (a-h,o-z)
parameter (Np=32,pi=3.141592653589793238462643d0)
dimension x(Np),w(Np)
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, 0.065822222776361846838d0,
*      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,
*      0.065822222776361846838d0, 0.058684093478535547145d0,
*      0.050998059262376176196d0, 0.042835898022226680657d0,
*      0.034273862913021433103d0, 0.025392065309262059456d0,
*      0.016274394730905670605d0, 0.007018610009470096600d0/
q0=1.d0-p0
qt=1.d0-pt
A=q0+qt
B=p0*qt+q0*pt
C=p0*pt
ThinFilmRatio2=0.d0
do i=1,Np
  v=0.5d0*(x(i)+1.d0)
  vp=dsqrt(1.d0-v*v)
  sum=0.d0
do j=1,Np
  u=0.5d0*(x(j)+1.d0)
  up=dsqrt(1.d0-u*u)*vp
  factor=up/(up+alpha*fMS(d, up, s))
  Et=dexp(-t/factor/u)

```

```

sum=sum+w(j)*factor*factor*u*(1.d0-u*u)*(A+B*Et)
* *(1.d0-Et)/(1.d0-C*Et*Et)
end do
ThinFilmRatio2=ThinFilmRatio2+w(i)*vp*sum
end do
ThinFilmRatio2=BulkRatio2(alpha,d,s)-0.75d0*ThinFilmRatio2/(pi*t)
return
end

```

A.1.3. Función BulkRatio

Función BulkRatio que calcula la fórmula:

$$\frac{\sigma_G}{\sigma_0} = 3 \int_0^1 \frac{u^3}{u + \frac{\ell}{D} \frac{R}{1-R} F_{MS}(D, u, s)} du. \quad (\text{A.2})$$

Las integrales están realizadas mediante una expansión gaussiana de 32 puntos [18].

Todos los parámetros son pasados de manera adimensional como se observa en el código del apéndice A.

```

real*8 function BulkRatio2(alpha,d,s)
implicit real*8 (a-h,o-z)
parameter (Np=32)
dimension x(Np),w(Np)
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,
*      0.058684093478535547145d0,0.065822222776361846838d0,
*      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,
*      0.065822222776361846838d0,0.058684093478535547145d0,
*      0.050998059262376176196d0,0.042835898022226680657d0,
*      0.034273862913021433103d0,0.025392065309262059456d0,
*      0.016274394730905670605d0,0.007018610009470096600d0/
BulkRatio2=0.d0
do i=1,Np
  u=0.5d0*(1.d0+x(i))
  BulkRatio2=BulkRatio2+w(i)*u**3/(u+alpha*fMS(d,u,s))
end do
BulkRatio2=1.5d0*BulkRatio2
return
end

```

A.1.4. Función fMS

Función fMS, que calcula la fórmula:

$$F_{MS}(D, \zeta, s) = \frac{1 - e^{-4\zeta^2 s^2 k_F^2}}{1 - 2e^{-2\zeta^2 s^2 k_F^2} \cos(2\zeta D k_F) + e^{-4\zeta^2 s^2 k_F^2}}. \quad (\text{A.3})$$

Las integrales están realizadas mediante una expansión gaussiana de 32 puntos [18].

Todos los parámetros son pasados de manera adimensional como se observa en el código del apéndice A.

```

real*8 function fMS(d,u,s)
implicit real*8 (a-z)
parameter (eps=1.d-05)
if (u.lt.eps) then

```

```

fMS=(s/d)**2
else
E=dexp(-2.d0*u*u*s*s)
Es=E*E
fMS=(1.d0-Es)/(1.d0-2.d0*E*d*cos(2*u*d)+Es)
endif
return
end

```

A.2. Palasantzas

En este apéndice se muestran los códigos fuente de los programas usados, para evaluar la teoría de Palasantzas.

A.2.1. Programa principal

Programa principal para iterar.

```

implicit real*8 (a-h,o-z)
real*8 kc,kF,lambda,zeta
real*8 sigma0, sigma1, sigma2
real*8 dd(3),zet(20),timp
data dd/10.d0,50.d0,100.d0/
data zet/4.d0,5.d0,8.d0,10.d0,20.d0,40.d0,50.d0,80.d0,100.d0,
*200.d0,400.d0,500.d0,800.d0,1000.d0,2000.d0,4000.d0,5000.d0,
*8000.d0,10000.d0,40000.d0/
parameter (B=0.0d0,
*Delta0=0.d-10,
*Deltad=0.18d-9,
*H=.5d-10,
*kF=12.1d9,
*kc=13.4d10,
*xi0=2.d-10,
*xid=10.0d-9)
open (2, FILE = 'datos_3.dat')
write (2,*) 'd lambda zeta sigma0'
timp=9.3d-15
do n1=1,3
do n2=1,20

```

```

lambda =400.0d-9
zeta=zeta(n2)*1.0d-9
d=dd(n1)*1.0d-9
call Palasantzas (B,d,Delta0 ,Deltad ,kF,lambda ,
* sigma0 ,sigma1 ,sigma2 ,xi0 ,xid ,zeta ,timp)
write (*,*) d,lambda ,zeta ,sigma0
write (2,15) d,lambda ,zeta ,sigma0
15 format (ES20.10 ,ES20.10 ,ES20.10 ,ES20.10)
end do
end do
stop
end

```

A.2.2. Función Palasantzas

función usada para calcular la conductividad de Palasantzas.

```

subroutine Palasantzas (B,d,Delta0 ,Deltad ,kF,
* lambda ,sigma0 ,sigma1 ,sigma2 ,xi0 ,xid ,zeta ,timp)
implicit real*8 (a-h,o-z)
integer nF,Nmax
real*8 kd,kds ,kF,lambda
parameter (Nmax=3000,pi=3.141592653589793238462643d0)
integer indx(Nmax)
dimension c(Nmax,Nmax) ,s(Nmax) ,ss(Nmax) ,T(Nmax,Nmax) ,
* Ts(Nmax,Nmax)
ds=d*d
Bs=B*B
omega=1.5193d15*ds*B
omegas=omega*omega
cm=pi/d
kd=kF/cm
kds=kd*kd
xip0=xi0*cm
xipd=xid*cm
deltap0=Delta0*cm
deltapd=Deltad*cm
zetap=zeta*cm
nF=kd
zetaps=zetap*zetap
x0=xip0*zetap/dsqrt(pi*xip0*xip0+zetaps)

```

```

xd=xipd*zetap/dsqrt(pi*xipd*xipd+zetaps)
do i=1,nF
  ss(i)=kds-i*i
  s(i)=dsqrt(ss(i))
end do
call gaussian(c,deltap0,deltapd,nF,Nmax,s,ss,x0,xd)
cn=(nF+0.5d0)*pi*d/lambda
vfermi=1.39d6
escala=8.64d3*d*d
do n=1,nF
  % se debe elegir entre esta expresi3n (impurezas de Calecki)
  c(n,n)=c(n,n)+cn*ss(n)
  % o esta expresi3n que considera impurezas con
  % timp= tiempo de vuelo medio en presencia de impurezas
  % c(n,n)=c(n,n)+ss(n)*escala*((1.0d0/timp)+(vfermi/lambda))
  do np=1,nF
    T(n,np)= 0.d0
  end do
  T(n,n)=ss(n)
end do
call ludcmp(c,nF,Nmax,indx,q)
do j=1,nF
  call lubksb(c,nF,Nmax,indx,T(1,j))
end do
sigma0=0.d0
do n=1,nF
  term=0.d0
  do np=1,nF
    term=term+T(n,np)
  end do
  sigma0=sigma0+ss(n)*term
end do
sigma0=3.8234d-4*sigma0/d
do n=1,nF
  do np=1,nF
    Ts(n,np)=0.d0
    do m=1,nF
      Ts(n,np)=Ts(n,np)+T(n,m)*T(m,np)
    end do
  end do
end do
end do

```

```
do n=1,nF
  do np=1,nF
    c(n,np)=omegas*Ts(n,np)
  end do
  c(n,n)=1.d0+c(n,n)
end do
call ludcmp(c,nF,Nmax,indx,q)
do j=1,nF
  call lubksb(c,nF,Nmax,indx,Ts(1,j))
end do
sigma1=0.d0
do n=1,nF
  term=0.d0
  do np=1,nF
    term=term+Ts(n,np)
  end do
  sigma1=sigma1+ss(n)*term
end do
sigma1=3.8234d-4*omega*sigma1/d
do n=1,nF
  do np=1,nF
    c(n,np)=0.d0
    do m=1,nF
      c(n,np)=c(n,np)+Ts(n,m)*T(m,np)
    end do
  end do
end do
sigma2=0.d0
do n=1,nF
  term=0.d0
  do np=1,nF
    term=term+c(n,np)
  end do
  sigma2=sigma2+ss(n)*term
end do
sigma2=3.8234d-4*omegas*sigma2/d
return
end
```

A.2.3. Función gaussian

Función que entrega la matriz C, dado un perfil gaussiano de autocorrelación.

```

subroutine gaussian (c, deltap0, deltapd, nF, Nmax, s, ss, xip0, xipd)
implicit real*8 (a-h, o-z)
integer n, nF, ns, np
      dimension c(Nmax, Nmax), s(Nmax), ss(Nmax)
parameter (pi=3.141592653589793238462643d0)
cm0s=pi*(xip0*deltap0)**2
cmds=pi*(xipd*deltapd)**2
xip0s=xip0*xip0/2.d0
xipds=xipd*xipd/2.d0
xip0q=xip0s/2.d0
xipdq=xipds/2.d0
do n=1, nF
  cp0=xip0s*s(n)
  cpd=xipds*s(n)
  ns=n*n
  cm0skn=cm0s*s(n)*ns
  cmdskn=cmds*s(n)*ns
  do np=1, n
    cq0=cp0*s(np)
    cqd=cpd*s(np)
    y=(s(n)-s(np))**2
    c(n, np)=-np*np*s(np)*(cm0skn*dexp(-xip0q*y)*bessi1(cq0)
* +cmdskn*dexp(-xipdq*y)*bessi1(cqd))
    c(np, n)=c(n, np)
  end do
end do
do n=1, nF
  cp0=xip0s*s(n)
  cpd=xipds*s(n)
  sum=0.d0
  do m=1, nF
    cq0=cp0*s(m)
    cqd=cpd*s(m)
    y=(s(n)-s(m))**2
    sum=sum+m*m*(cm0s*dexp(-xip0q*y)*bessi0(cq0)
* +cmds*dexp(-xipdq*y)*bessi0(cqd))
  end do

```

```

    c(n,n)=c(n,n)+ss(n)*n*n*sum
end do
return
end

```

A.2.4. Función *bessi0*

Función de Bessel de orden 0, $I_0(x)$.

```

real*8 function bessio(x)
real*8 ax,x
real*8 p1,p2,p3,p4,p5,p6,p7,q1,q2,q3,q4,q5,q6,q7,q8,q9,y
save p1,p2,p3,p4,p5,p6,p7,q1,q2,q3,q4,q5,q6,q7,q8,q9
data p1,p2,p3,p4,p5,p6,p7/1.0d0,3.5156229d0,3.0899424d0,
*1.2067492d0,0.2659732d0,0.360768d-1,0.45813d-2/
data q1,q2,q3,q4,q5,q6,q7,q8,q9/0.39894228d0,0.1328592d-1,
*0.225319d-2,-0.157565d-2,0.916281d-2,-0.2057706d-1,0.2635537d-1,
*-0.1647633d-1,0.392377d-2/
ax=dabs(x)
if (ax.lt.3.75d0) then
y=(x/3.75d0)**2
bessio=dexp(-ax)*(p1+y*(p2+y*(p3+y*(p4+y*(p5+y*(p6+y*p7))))))
else
y=3.75d0/ax
bessio=(q1+y*(q2+y*(q3+y*(q4+y*(q5+y*(q6+y*
*(q7+y*(q8+y*q9)))))))/dsqrt(ax)
endif
return
end

```

A.2.5. Función *bessi1*

Función de Bessel de orden 1, $I_1(x)$.

```

real*8 function bessil(x)
real*8 ax,x
real*8 p1,p2,p3,p4,p5,p6,p7,q1,q2,q3,q4,q5,q6,q7,q8,q9,y
save p1,p2,p3,p4,p5,p6,p7,q1,q2,q3,q4,q5,q6,q7,q8,q9
data p1,p2,p3,p4,p5,p6,p7/0.5d0,0.87890594d0,0.51498869d0,
*0.15084934d0,0.2658733d-1,0.301532d-2,0.32411d-3/

```

```

data q1,q2,q3,q4,q5,q6,q7,q8,q9/0.39894228d0,-0.3988024d-1,
*-0.362018d-2,0.163801d-2,-0.1031555d-1,0.2282967d-1,-0.2895312d-1,
*0.1787654d-1,-0.420059d-2/
ax=dabs(x)
if (ax.lt.3.75d0) then
  y=(x/3.75d0)**2
  bessil=dexp(-ax)*x*(p1+y*(p2+y*(p3+y*(p4+y*(p5+y*(p6+y*p7))))))
else
  y=3.75d0/ax
  bessil=(q1+y*(q2+y*(q3+y*(q4+y*(q5+y*(q6+y*
*(q7+y*(q8+y*q9)))))))/dsqrt(ax)
  if(x.lt.0.d0) bessil=-bessil
endif
return
end

```

A.2.6. Función ludcmp

Función que genera la descomposición LU de una matriz.

```

SUBROUTINE ludcmp(a,n,np,indx,d)
integer n,np,indx(n),NMAX
real*8 d,a(np,np),TINY
parameter (NMAX=3000,TINY=1.0d-20)
integer i,imax,j,k
real*8 aamax,dum,sum,vv(NMAX)
d=1.d0
do i=1,n
  aamax=0.d0
  do j=1,n
    if (dabs(a(i,j)).gt.aamax) aamax=dabs(a(i,j))
  end do
  if (aamax.eq.0.d0) pause 'singular matrix in ludcmp'
  vv(i)=1.d0/aamax
end do
do j=1,n
  do i=1,j-1
    sum=a(i,j)
    do k=1,i-1
      sum=sum-a(i,k)*a(k,j)
    end do

```

```

    a(i,j)=sum
end do
aamax=0.d0
do i=j,n
    sum=a(i,j)
    do k=1,j-1
        sum=sum-a(i,k)*a(k,j)
    end do
    a(i,j)=sum
    dum=vv(i)*dabs(sum)
    if (dum.ge.aamax) then
        imax=i
        aamax=dum
    endif
end do
if (j.ne.imax) then
    do k=1,n
        dum=a(imax,k)
        a(imax,k)=a(j,k)
        a(j,k)=dum
    end do
    d=-d
    vv(imax)=vv(j)
endif
indx(j)=imax
if (a(j,j).eq.0.d0) a(j,j)=TINY
    if (j.ne.n) then
        dum=1.d0/a(j,j)
        do i=j+1,n
            a(i,j)=a(i,j)*dum
        end do
    endif
end do
return
end

```

A.2.7. Función lubksb

Subrutina que entrega la solución de un sistema lineal $A\vec{x} = \vec{b}$.

SUBROUTINE lubksb (a, n, np, indx, b)

```
integer n,np,indx(n)
real*8 a(np,np),b(n)
integer i,ii,j,ll
real*8 sum
ii=0
do i=1,n
  ll=indx(i)
  sum=b(ll)
  b(ll)=b(i)
  if (ii.ne.0) then
    do j=ii,i-1
      sum=sum-a(i,j)*b(j)
    end do
  else if (sum.ne.0.) then
    ii=i
  endif
  b(i)=sum
end do
do i=n,1,-1
  sum=b(i)
  do j=i+1,n
    sum=sum-a(i,j)*b(j)
  end do
  b(i)=sum/a(i,i)
end do
return
end
```

Referencias

- [1] International technology roadmap for semiconductors. <http://www.itrs.net/Links/2003ITRS/Home2003.htm>.
- [2] P. Kapur and J. P. McVittie. Technology and reliability constrained future copper interconnects.I. Resistance modeling. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 49:590, 2002.
- [3] J.F.Guillaumond, L.Arnaud, T.Mourier, M.Fayolle, O.Pesci, and G.Reimbold. Analysis of resistivity in nano-interconnect: full range (4.2-300K) temperature characterization. *International Interconnect Technology Conference (IITC)*, 2-4 June 2003, pages 132-134, 2003.
- [4] A. F. Mayadas and M. Shatzkes. Electrical-resistivity model for polycrystalline films: the case of arbitrary reflection at external surfaces. *Physical Review B*, 1(4):1382, 1970.
- [5] G. Palasantzas. Surface roughness and grain boundary scattering effects on the electrical conductivity of thin films. *Physical Review B*, 58(15):9685, 1998.
- [6] D. Calecki. Galvanomagnetic phenomena and surface roughness in thin metallic films. *Physical Review B*, 42(11):6906, 1990.

- [7] Raúl C Munoz, Guillermo Vidal, Germán Kremer, Luis Moraga, and Claudio Arenas. Surface-induced resistivity of gold films on mica: comparison between the classical and the quantum theory. *Journal of physics: condensed matter*, 11: L299, 1999.
- [8] A. H. Wilson, M.A., and F.R.S. *The Theory Of Metals*. Cambridge at the university press, second edition, 1954. 194 pp.
- [9] A. H. Wilson, M.A., and F.R.S. *The Theory Of Metals*. Cambridge at the university press, second edition, 1954. 195 pp.
- [10] R.A. Matula. Electrical resistivity of copper, gold, palladium and silver. *Journal of Physical Chemistry Reference Data*, 8:1147, 1979.
- [11] Raúl C. Munoz, Juan Pablo García, Ricardo Henríquez, Ana María Moncada, Andrés Espinosa, Marcelo Robles, Germán Kremer, Luis Moraga, Simón Cancino, José Roberto Morales, Adán Ramírez, Simón Oyarzún, Marco Antonio Suárez, David Chen, Ernesto Zumelzu, and Claudio Lizama. 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. *Physical Review letters*, 96(206803), 2006.
- [12] E. H. Sondheimer. The mean free path of electrons in metals. *Advances in Physics*, 1(1):1, January 1952. A Quaterly Supplement of the Philosophical Magazine.
- [13] A. H. Wilson, M.A., and F.R.S. *The Theory Of Metals*. Cambridge at the university press, second edition, 1954. 243-245 pp.

- [14] M. S. P. Lucas. Electrical conductivity of thin metallic films with unlike surfaces. *Journal of Applied Physics*, 36(5):1632–1635, May 1965.
- [15] W. H. Press et al. *Numerical recipes: The Art of Scientific Computing (FORTRAN version)*. Cambridge University Press, second edition, 1992. 34-40 pp.
- [16] Raúl C Munoz, Adán Ramírez, Ricardo Henríquez, Juan Pablo García, Germán Kremer, and Luis Moraga. Resistivity, transverse magnetoresistance, and hall voltage induced by electron-surface scattering on thin gold films deposited on mica substrates under high vacuum. *Physical Review B*, 74(233402), 2006.
- [17] Raúl C Munoz, Ricardo Henríquez, Juan Pablo García, Ana María Moncada, Andrés Espinoza, Marcelo Robles, Germán Kremer, Luis Moraga, Simón Cancino, José Roberto Morales, Adán Ramírez, Simón Oyarzún, Marco Antonio Suárez, David Chen, Ernesto Zumelzu, and Claudio Lizama. Size effects under a strong magnetic field: transverse magnetoresistance of thin gold films deposited on mica. *Journal of physics: condensed matter*, 18:3401, 2006.
- [18] Abramowitz and Stegun. *HandBook of Mathematical Functions*. Dover Publications, 1970. 917 pp.