

UCH-FC  
DOC-F  
11827

RESISTIVIDAD ELÉCTRICA DE PELÍCULAS DELGADAS Y ALAMBRES  
FINOS

Tests  
Entregada a la  
Universidad de Chile  
en cumplimiento parcial de los requisitos  
para optar al grado de  
Doctor en Ciencias con Mención en Física

Facultad de Ciencias

por

Luis Alberto Moraga Jaramillo

Diciembre, 1987



Patrocinante : Profesor Jaime Roessler Bonzi

02277

Facultad de Ciencias  
Universidad de Chile

INFORME DE APROBACIÓN

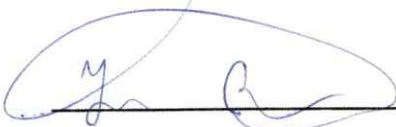
TESIS DE DOCTORADO

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

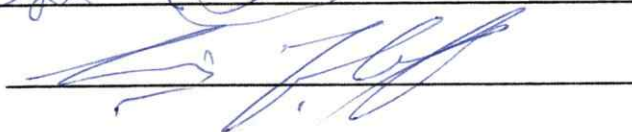
Luis Alberto Moraga Jaramillo

ha sido aprobada por la Comisión Informante de Tesis como requisito para el Doctorado en Ciencias con mención en Física.

Patrocinante de la Tesis



Comisión Informante de Tesis



Ulloa R. D.  
J. d. C. m. S.

## AGRADECIMIENTOS

Esta investigación ha sido financiada en parte por los proyectos DIB E-2437-8723 y FONDECYT 0619.

## INDICE DE MATERIAS

|  |    |
|--|----|
| I. REFLECTIVIDAD CUÁNTICA DE UNA SUPERFICIE RUGOSA<br>ALEATORIA Y LA CONDUCTIVIDAD ELÉCTRICA DE PELÍCULAS<br>DELGADAS Y ALAMBRES FINOS | 1  |
| 1. Introducción  | 1  |
| 2. La reflectividad de una superficie rugosa   | 4  |
| 3. La condición de unitariedad   | 8  |
| 4. La amplitud de reflexión promedio   | 10 |
| 5. La intensidad reflejada promedio  | 13 |
| 6. La resistividad de películas y alambres   | 17 |
| 7. Conclusiones  | 25 |
| II. EFECTOS TERMOELÉCTRICOS EN PELÍCULAS DELGADAS Y<br>ALAMBRES FINOS  | 27 |
| 8. Introducción  | 27 |
| 9. Efectos de tamaño en los coeficientes de transporte   | 31 |
| 10. Conclusiones   | 34 |
| Apéndice al capítulo II  | 36 |
| III. CONDICIONES DE FRONTERA PARA LA ECUACIÓN DE<br>TRANSPORTE DE BOLTZMANN  | 38 |
| 11. Introducción   | 38 |
| 12. La función de onda de un electrón en la vecindad de una<br>interfaz rugosa   | 41 |
| 13. La función de onda promedio  | 50 |
| 14. La corriente promedio  | 58 |
| 15. Los coeficientes de reflexión y transmisión  | 61 |
| 16. Aplicaciones   | 64 |
| 16 A. Conductividad eléctrica en películas delgadas y alambres finos   | 64 |

16 B. *La conductividad eléctrica en películas multicapas*

65

REFERENCIAS

69

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1. La curva continua es la reflectividad  $p$  como función del ángulo de incidencia  $\theta$  [ecuación (6.12) del texto] cuando  $a = 0.5 \text{ au}$  y  $\delta = 1 \text{ au}$  ( $\text{au} = \text{unidad atómica}$ ). En este caso esta función casi coincide con la aproximación de Maradudin (curva M). La curva marcada con S es la aproximación correspondiente de Soffer

20a

Figura 2. Lo mismo que la figura 1, excepto que aquí  $a = 0.2$  y  $\delta = 5 \text{ au}$ . Las curvas marcadas M y S denotan la aproximación de Maradudin y Soffer, respectivamente

20b

Figura 3. Lo mismo que la figura 2. Ahora  $a = 0.3$  y  $\delta = 10 \text{ au}$ . Note que la escala angular ha sido ampliada aquí.

20c

Figura 4. La función de especularidad  $p$  y  $dp/dE_F$  contra el ángulo de incidencia  $\Theta$  para el caso  $\delta = 1$  y  $a = 1 \text{ au}$ .

33a

Figura 5. Gráfico de  $p$  y de  $dp/dE_F$  contra  $\Theta$  para  $\delta = 5$  y  $a = 0.1 \text{ au}$ .

33b

Figura 6. Gráfico de  $p$  y  $dp/dE_F$  contra  $\Theta$  para  $\delta = 5$  y  $a = 5 \text{ au}$ .

33c

Figura 7. Las tres integrales  $I_1, I_2, I_3$  que contribuyen a la función  $K$  como función de  $\kappa = \text{espesor/libre camino medio}$  para el caso  $\delta = 1$  y  $a = 1 \text{ au}$ .

33d

Figura 8. Gráfico de  $I_1, I_2, I_3$  contra  $\kappa$  para el caso  $\delta = 5.0$  y  $a = 0.1 \text{ au}$ .

33e

Figura 9. Gráfico de  $I_1, I_2, I_3$ , para el caso  $\delta = 5$  y  $a = 5 \text{ au}$

33f

Figura 10. Efecto de tamaño hipotético en el coeficiente  $K$ , para una lámina delgada de Al en función de la temperatura para el caso  $\delta = 5$  y  $a = 0.1$  au. 30g

Figura 11. Lo mismo que la figura 10, excepto que el coeficiente Peltier del grueso no es estimado mediante la fórmula de Wilson, sino que se toma como una constante igual a  $-0.12 \mu V$ . 30h

Figura 12. La interfaz entre los metales A y B es modelada por un potencial igual a  $V_A$  para  $z < \xi$ , y  $V_B$  para  $z > \xi$ , en donde  $\xi$  (la distancia entre la superficie real y la ideal) es una función aleatoria de  $x, y$ . 41a

Figura 13. (a) En una interfaz metal-vacío  $p$  es la fracción de electrones que son reflejados especularmente. (b) En una interfaz metal-metal,  $r_A$  es la fracción de electrones provenientes de A que son reflejados especularmente en A, mientras que  $t_B$  es la contribución adicional proveniente de B y siguiendo la trayectoria clásica 61a

Figura 14. Ajuste de las ecuaciones (6.4) y (6.11) a los datos de la figura 3 de Sambles *et al* (1981). 65a

Figura 15. Lo mismo que la figura 14, pero los datos están tomados de la figura 4 de Sambles *et al* (1981). 65b

Figura 16. Película delgada  $0 < z < a$  con una sobrecapa  $a < z < a+b$ . Hay dispersión en todas las superficies rugosas con los coeficientes de reflexión y transmisión que se muestran 66a

## RESUMEN

Mediante teoría de perturbación de orden infinito, se ha calculado la función de onda y las corrientes cuánticas promediadas para un electrón en las vecindades de una superficie rugosa. Las rugosidades se suponen caracterizadas estadísticamente como un proceso gaussiano con una amplitud RMS y una longitud de correlación transversal dadas. Se estudia sucesivamente el caso en que la superficie es una interfaz metal-vacío y metal-metal, y los resultados cuánticos se utilizan para deducir condiciones de frontera para la ecuación de transporte de Boltzmann en el espíritu de las condiciones de Fuchs. A partir de estos resultados, se estudia la conductividad eléctrica de películas delgadas y alambres finos de sección circular, los efectos termoeléctricos correspondientes, y la conductividad eléctrica de películas con sobrecapas metálicas. Los resultados teóricos se contrastan, por último, con las mediciones recientes de resistividad eléctrica en películas y láminas delgadas de aluminio realizadas por Sables *et al* (1982).



# I. REFLECTIVIDAD CUANTICA DE UNA SUPERFICIE RUGOSA ALEATORIA Y LA CONDUCTIVIDAD ELECTRICA DE PELICULAS DELGADAS Y ALAMBRES FINOS

Resumen: La reflectividad cuántica de una superficie rugosa aleatoria, caracterizada estadísticamente por la amplitud RMS de su rugosidad y una longitud de correlación lateral, es calculada por una generalización de un formalismo desarrollado por Maradudin. La intensidad reflejada puede ser separada en una componente especular y otra difusa, la primera de las cuales da origen a un parámetro de specularidad dependiente del ángulo. Se obtiene también otras aproximaciones más exactas, si bien más complejas, para esta última cantidad. Se discute, por último, la aplicación de estos resultados a cálculos semiclásicos de la conductividad eléctrica de películas delgadas y alambres finos, que generalizan teorías anteriores de Fuchs y Sables *et al.*

## 1. Introducción

Cuando alguna de las dimensiones lineales de una muestra metálica llega a ser menor que una longitud del orden del libre camino medio de los electrones de conducción, su resistividad eléctrica aumenta. Este efecto de tamaño fue descubierto por Stone (1898), y prontamente explicado por Thomson (1901) mediante un raciocinio basado en la teoría cinética de gases: Suponiendo que las superficies del espécimen dispersan los electrones que llegan a ellas de una manera completamente difusa, las trayectorias libres de los electrones de conducción que se mueven cerca de las superficies disminuyen, notó Thomson, en una cantidad dependiente de su orientación. Así, la resistividad promedio (que es inversamente proporcional a este libre camino) se ve proporcionalmente aumentada.

Los resultados cuantitativos obtenidos a partir de estas hipótesis no son, sin embargo, muy precisos porque en ellos se desprecian las trayectorias que comienzan en las superficies del espécimen. Inversamente, existen cálculos que toman en cuenta solamente los electrones que parten desde las superficies (Lovell 1936 para el caso de películas delgadas; Andrew 1949 para alambres finos). Claramente estas últimas teorías son solo aplicables a muestras muy pequeñas.

Las primeras teorías que proporcionaron resultados cuantitativamente correctos para todos los tamaños —excepto aquellos para los cuales los efectos

cuánticos comienzan a ser aplicables— son aquellas que incorporaron a una solución apropiada de la ecuación de transporte de Boltzmann una condición de frontera introducida por Fuchs (1938). De acuerdo a Fuchs, en cada superficie una fracción  $p$  ( $0 \leq p \leq 1$ ) de los electrones incidentes es reflejada en forma especular, mientras que el resto es dispersado de un modo completamente difuso (Fuchs 1938 y Sondheimer 1952 para el caso de películas delgadas; Dingle 1950, y Mac Donald y Sarginson 1950 para alambres finos de sección circular y cuadrada, respectivamente; para un recuento de otras aplicaciones, vease por ejemplo Chambers 1969).

Las teorías de efecto de tamaño basadas en las condiciones de frontera de Fuchs han probado ser útiles en la interpretación de resultados experimentales en la medida que se sepa poco acerca de la naturaleza de las superficies de los especímenes y la especularidad  $p$  pueda ser considerada un parámetro libre de ser variado para obtener el mejor ajuste de la teoría a los hechos. Pero, si se quiere relacionar las propiedades de transporte con características observables de las superficies es necesario modificar estos modelos simples y suponer que las condiciones de frontera son dependientes del ángulo con el cual los electrones inciden en cada superficie. Parrot (1965) y Brandly Cotti (1965) estudiaron las consecuencias de postular que  $p$  varía de un modo discontinuo de cero a uno según si el ángulo de incidencia es menor o no que un cierto ángulo crítico. Por otra parte, Ziman (1960) calculó aproximadamente la reflectividad para los electrones de conducción de superficies rugosas aleatorias caracterizadas por una distribución gaussiana de sus amplitudes, y obtuvo un parámetro de especularidad como función analítica del cociente entre la amplitud RMS de estas rugosidades y la longitud de onda de los electrones. Soffer (1967) generalizó el cálculo de Ziman para ángulos de incidencia distintos de cero, y obtuvo fórmulas explícitas para la resistividad eléctrica de películas delgadas. Posteriormente, Sambles, Elsom y Preist (1982) desarrollaron las expresiones correspondientes para la resistividad eléctrica de alambres finos de sección circular.

Recientemente, estas teorías han sido sujetas a una comparación rigurosa con datos experimentales (Sambles y Elsom 1980 para el caso de películas delgadas; Sambles, Elsom y Preist 1982, para alambres finos). La

interpretación de resultados experimentales por medio de fórmulas del tipo de la de Fuchs, se ha encontrado, requiere a menudo de supuestos adicionales arbitrarios y a veces improbables. Por el contrario, se obtiene acuerdos satisfactorios bajo condiciones bien naturales cuando se emplean teorías del tipo de la de Soffer.

En éste capítulo se obtendrá otra expresión cerrada para el parámetro de especularidad que generaliza el resultado de Soffer. Para hacer esto, se calculará la reflectividad cuántica de una superficie rugosa mediante teoría de perturbación de orden infinito; y se promediará la intensidad dispersada que resulta de aquí sobre una asamblea estadística de distribución de rugosidades. Este cálculo se hará siguiendo estrechamente el tratamiento de Shen y Maradudin (1980); a cuyos resultados se reducen los nuestros en el caso que la amplitud de las rugosidades sea pequeña. El nuevo parámetro que resulta de aquí será comparado con el de Soffer y el de Shen y Maradudin.

En vista que la teoría de Soffer parece dar adecuada cuenta de la realidad, ¿cual puede ser la utilidad de nuevas fórmulas —mas precisas, pero quizás mas complicadas— para la resistividad de películas delgadas y alambres finos?. Debe tomarse en cuenta, primero, que la fórmula de Soffer (en la manera que se la interpreta usualmente) se obtiene en el límite en que la correlación lateral es nula; y que esta condición puede ser violada en la práctica. Además, comparaciones numéricas muestran que la expresión de Soffer se hace poco exacta en el límite en que la amplitud de las rugosidades es pequeña, exagerando seriamente la contribución de las superficies a la resistividad de la muestra. Recientemente, se ha hecho posible producir mediante crecimiento epitaxial películas metálicas muy delgadas con superficies extremadamente lisas, de modo tal que este límite puede ser explorado en la práctica. Por último, es claramente posible medir independientemente las propiedades estadísticas de superficies rugosas (Rasigni *et al* 1984) y correlacionar estas cantidades con mediciones de la resistividad eléctrica. Es claro que los resultados de experimentos de esta última clase no pueden ser interpretados sino mediante teorías del tipo de la desarrollada aquí.

## 2. La reflectividad de una superficie rugosa

Calculos numéricos de la resistividad eléctrica de películas delgadas han mostrado que esta cantidad es bien poco sensible a la conducta detallada de la densidad de electrones en la vecindad de las superficies de la muestra. Podemos aprovechar aquí este hecho, y describir el efecto de cada superficie sobre los electrones de conducción mediante un potencial que es nulo dentro del metal, e infinito fuera de el

$$V(x) = 0 \quad \text{para} \quad z > \xi_X$$

$$= \infty \quad \text{para} \quad z < \xi_X \quad (2.1)$$

en donde  $\xi_X$  es la amplitud de la rugosidad medida a partir de la posición de la superficie en promedio ( $z = 0$ ). La aproximación más importante de las que se harán aquí —y quizás la más grave y más dudosa— consiste en suponer que cada superficie dispersa electrones con independencia de las otras. En esto, por supuesto, seguimos el procedimiento usual.

A partir del teorema de Green, es fácil ver que la función de onda exacta satisface la identidad

$$\psi(x) = \int \frac{d^2 K}{(2\pi)^2} \psi_K^0 e^{i(KX + \gamma_K z)} +$$

$$+ \int d^2 X_b \int \frac{d^2 Q d^2 K}{(2\pi)^4} \psi_K(\xi_{X_b}) \frac{i}{2\gamma_Q} \exp \{ i [ KX_b + Q(X - X_b) - \gamma_Q |z - \xi_{X_b}| ] \}$$

en donde el primer término representa la función de onda incidente de amplitud arbitraria  $\psi_K^0$ ; y el segundo, la onda reflejada. De aquí en adelante descompondremos sin previo aviso los vectores en componentes paralelas y perpendiculares a la superficie ideal

$$x = X + z e_z, \quad k = K + k_z e_z$$

respectivamente, para vectores en el espacio real y recíproco; y denotamos además por

$$\gamma_K = \sqrt{2mE/\hbar^2 - K^2} \quad (2.3)$$

en donde  $E$  y  $m$  son la energía y masa de los electrones. Así, todas las cantidades que aparecen en el segundo miembro de (2.2) son conocidas, excepto la función  $\psi^k_K$  —que es de hecho la componente de Fourier de la derivada normal, evaluada en la superficie, de la función de onda exacta. En el resto de esta sección evaluaremos  $\psi^k_K$  por un método perturbativo empleado por primera vez por Masel, Merrill y Miller (1975). Esta evaluación dará como resultado una expresión para la función de onda que será muy exacta para  $z > \xi_{max}$ ; pero será sólo aproximada para  $\xi_{min} < z < \xi_{max}$ .

Pongamos primero  $z < \xi_{min}$ . Entonces, el primer miembro de (2.2) se anula y  $|z - \xi_X| = \xi_X - z$  en el último exponente de esta ecuación. A partir de la transformada de Fourier de la relación que resulta de aquí, se encuentra que  $\psi^k_K$  satisface

$$\int d^2 X_b \exp [i(K-Q)X_b - i\gamma_Q \xi_{X_b}] \psi^k_K(\xi_{X_b}) = 2i\gamma_Q \psi^0_Q (2\pi)^2 \delta(K-Q) \quad (2.4)$$

Esta ecuación integral será resuelta mediante una expansión en series de potencias de  $\xi$  (Shen y Maradudin, 1980). Escribamos, entonces,

$$\psi^k_K(\xi_X) = \psi^{(0)}_K + \psi^{(1)}_{K,X} + \psi^{(2)}_{K,X} + \dots \quad (2.5)$$

en donde  $\psi^{(n)}_{K,X}$  es de orden  $(\xi_X)^n$ . Así, la ecuación (2.4) se transforma en un sistema infinito de ecuaciones acopladas. En orden cero, se tiene que

$$\psi^{(0)}_K = 2i\psi^0_Q \gamma_K \quad (2.6a)$$

y a orden  $n > 1$ , que

$$\sum_{\nu=0}^n \frac{(-1)^\nu}{\nu!} \int d^2 X e^{i(K-Q)X} \psi^{(n-\nu)}_{K,X} \gamma_Q \xi_X = 0 \quad (2.6b)$$

Estas ecuaciones se hacen más manejables si se expresan en términos de las

transformadas de Fourier de  $\psi^{(n)}$  y de  $\xi^{(n)}$ , definidas por

$$\tilde{\psi}_{K,P}^{(n)} = \int d^2 X e^{-iPX} \psi_{K,X}^{(n)} \quad (2.7a)$$

$$\tilde{\xi}_P^{(n)} = \int d^2 X e^{-iPX} \xi_X^{(n)} \quad (2.7b)$$

Se tiene entonces en lugar de (2.6b) que

$$\tilde{\psi}_{Q,K}^{(n)} = - \sum_{\nu=1}^n \frac{(-1)^\nu}{\nu!} \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} \tilde{\psi}_{Q,K}^{(n-\nu)} Y_{K+Q}^\nu \tilde{\xi}_{K-R}^{(\nu)},$$

lo que proporciona  $\tilde{\psi}^{(n)}$  en función de todos los  $\tilde{\psi}^{(\nu)}$  con  $0 < \nu < n$  y puede entonces ser explícitamente resuelto por aproximaciones sucesivas. Las primeras soluciones obtenidas así son

$$\tilde{\psi}^{(0)}_{K,Q} = \psi^{(0)}_K (2\pi)^2 \delta(Q),$$

$$\tilde{\psi}^{(1)}_{K,Q} = \int \frac{d^2 Q'}{(2\pi)^2} C^{(1)}_{K; Q, Q'} \tilde{\psi}^{(0)}_{K, Q'}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}^{(2)}_{K,Q} = & \int \frac{d^2 Q' d^2 Q''}{(2\pi)^4} C^{(1)}_{K; Q, Q'} C^{(1)}_{K; Q', Q''} \tilde{\psi}^{(0)}_{K, Q''} + \\ & + \int \frac{d^2 Q'}{(2\pi)^2} C^{(2)}_{K; Q, Q'} \tilde{\psi}^{(0)}_{K, Q'} \end{aligned}$$

$$\tilde{\psi}^{(3)}_{K,Q} =$$

$$= \int \frac{d^2 Q' d^2 Q'' d^2 Q'''}{(2\pi)^6} C^{(1)}_{K; Q, Q'} C^{(1)}_{K; Q', Q''} C^{(1)}_{K; Q'', Q'''} \tilde{\psi}^{(0)}_{K, Q'''} +$$

$$+ \int \frac{d^2 Q' d^2 Q''}{(2\pi)^4} \{ C^{(1)}_{K; Q, Q'} C^{(2)}_{K; Q', Q''} +$$

$$+ C^{(2)}_{K; Q, Q'} C^{(1)}_{K; Q', Q''} \} \tilde{\psi}^{(0)}_{K, Q''} +$$

$$+ \int \frac{d^2 Q'}{(2\pi)^2} C^{(3)} K; Q, Q' \tilde{\psi}^{(3)} K, Q' \quad , \quad (2.8)$$

etc, en donde,

$$C^{(n)} K; Q, Q' = - \frac{(-1)^n}{n!} (\gamma_{K+Q})^n \xi^{(n)} Q, Q' \quad . \quad (2.9)$$

Podemos aquí detenernos un momento y considerar las condiciones de validez de la solución (2.5) con (2.3) de la ecuación integral (2.2). Notamos primero que la ecuación (2.4) es una condición necesaria pero no suficiente para determinar  $\psi^3 K$ . (La condición necesaria y suficiente correspondiente se obtiene poniendo  $z = \xi_X$  en el segundo miembro de (2.2) --con resultados enormemente más complejos). Se sabe, por otra parte, que, como consecuencia del teorema de unicidad, si la serie (2.5) converge debe hacerlo a la solución verdadera (Beeby, 1976). Así, la validez del presente método descansa enteramente en la convergencia de la expansión perturbativa. Claramente, las mismas consideraciones se aplican a todo otro reagrupamiento de los términos de esta serie, de modo que podemos escribir

$$\begin{aligned} \tilde{\psi} K, Q &= \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{\psi}^{(n)} K, Q \\ &= \tilde{\psi}^{(0)} K, Q + \int \frac{d^2 Q'}{(2\pi)^2} C K; Q, Q' \tilde{\psi}^{(0)} K, Q' + \\ &+ \int \frac{d^2 Q' d^2 Q''}{(2\pi)^4} C K; Q, Q' C K; Q', Q'' \tilde{\psi}^{(0)} K, Q'' + \\ &+ \int \frac{d^2 Q' d^2 Q'' d^2 Q'''}{(2\pi)^6} C K; Q, Q' C K; Q', Q'' C K; Q'', Q''' \tilde{\psi}^{(0)} K, Q''' + \dots \end{aligned} \quad (2.10)$$

en lugar de (2.8), en donde

$$C K; Q, Q' = \sum_{n=1}^{\infty} C^{(n)} K; Q, Q'$$

esto es,

$$C_{K; Q, Q'} = \int d^2 Z e^{-l(Q - Q')Z} \{ 1 - \exp(-l \gamma_{Q+K} \xi Z) \} \quad (2.11)$$

por (2.9).

La serie (2.10) resuelve formalmente el problema de determinar la función  $\psi'_K$  y entonces, por (2.2), la función de onda reflejada. Además, como se verá más adelante, el cambio de parámetro de expansión desde  $\xi$  a la función  $C_{K; Q, Q}$  será determinante en la posibilidad de obtener de aquí resultados prácticos y precisos.

### 3. La condición de unitariedad

Con vista a los desarrollos de la sección siguiente, definiremos aquí las abreviaturas

$$B^{(\pm)}_{K, X} = \exp(\pm \gamma_K \xi_K) \quad (3.1)$$

$$f^{(\pm)}_{K, X} = 1 - B^{(\pm)}_{K, X} \quad (3.2)$$

Calcularemos ahora la función de onda para un electrón en el interior del metal. Para el caso  $\xi_{max} > z$  tenemos, por los resultados de la sección precedente, que

$$\psi(x) = \int \frac{d^2 K}{(2\pi)^2} \psi^0_K \{ e^{l(KX + \gamma_K z)} - \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} R_{K, Q} e^{l(QX - \gamma_Q z)} \} , \quad (3.3)$$

en donde la amplitud reflejada  $R_{K, Q}$  esta dada por



$$R_{K,Q} = (\gamma_K/\gamma_Q) \int d^2 X e^{i(K-Q)X} \exp(i\gamma_Q X) f_{K,X} ; \quad (3.4)$$

con

$$\begin{aligned} f_{K,X} = & 1 - \int \frac{d^2 P}{(2\pi)^2} \int d^2 Y e^{iP(X-Y)} f^{(-)}_{K+P,Y} + \\ & + \int \frac{d^2 P d^2 P'}{(2\pi)^4} \int d^2 Y d^2 Y' e^{iP(X-Y-Y')} e^{-iP'Y'} f^{(-)}_{K+P,Y} f^{(+)}_{K+P',Y'} - \\ & - \int \frac{d^2 P d^2 P' d^2 P''}{(2\pi)^6} \int d^2 Y d^2 Y' d^2 Y'' e^{iP(X-Y-Y')} e^{-iP'(Y'-Y'')} \\ & e^{-iP''Y''} f^{(-)}_{K+P,Y} f^{(-)}_{K+P',Y'} f^{(-)}_{K+P'',Y''} + \dots \end{aligned} \quad (3.5)$$

de acuerdo con (2.10) y (3.2).

A partir del primer y segundo término del segundo miembro de (3.3) podemos calcular las corrientes incidentes y dispersadas. El resultado es, respectivamente

$$\begin{aligned} j_z^{(i)}(x) &= (\hbar/m) \gamma_K , \\ j_z^{(s)}(x) &= \\ &= \frac{\hbar}{m} \int \frac{d^2 Q d^2 Q'}{(2\pi)^4} \exp\{i[(Q-Q')X - (\gamma_Q - \gamma_{Q'})z]\} R_{KQ} R_{KQ'}^* \gamma_{Q'} (\gamma_Q + \gamma_{Q'}) \\ &= \frac{\hbar}{m} \gamma_K \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} I_{KQ} \end{aligned} \quad (3.6)$$

para las componentes de las corrientes en la dirección perpendicular a la superficie promedio. La cantidad  $I_{KQ}$ , definida por la última ecuación (3.6), es la intensidad dispersada en la dirección determinada por  $Q$ .

En la sección siguiente consideraremos, en lugar de la reflectividad de una

superficie rugosa particular, las propiedades de dispersión promedio calculadas sobre una asamblea de realizaciones de diferentes perfiles de rugosidad. El requisito de conservación de la corriente promedio en este caso da origen a la *condición de unitariedad*

$$\int \frac{d^2 Q d^2 Q'}{(2\pi)^4} \exp(i[(Q-Q')X - (\gamma_Q - \gamma_{Q'})z]) \left[ \frac{\gamma_Q + \gamma_{Q'}}{2 \gamma_K} \right] \langle R_{KQ} R_{KQ'}^* \rangle = 1 \text{ ,}$$

obtenida igualando el promedio de las primeras dos ecuaciones (3.6), como una condición necesaria para la función  $R$ . (De aquí en adelante denotaremos por  $\langle \dots \rangle$  el resultado de promediar sobre la asamblea antes mencionada de superficies rugosas). En términos de la intensidad dispersada  $I_{KQ}$ , la condición de unitariedad puede ser escrita más simplemente como

$$\int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \langle I_{KQ} \rangle = 1 \text{ .} \quad (3.7)$$

#### 4. La amplitud de reflexión promedio

Es claro que el perfil de rugosidad de las superficies de una muestra dada será conocido siempre de un modo solo aproximado. Así, no tiene interés calcular la resistividad de una película delgada o un alambre fino con una rugosidad dada, que será por necesidad siempre arbitraria. Por el contrario, las propiedades de interés son promedios tomados sobre una asamblea de muestras con características superficiales especificadas estadísticamente. Es usual suponer que la desviación de la superficie real a partir de su valor ideal puede ser descrita como un proceso gaussiano con promedio nulo y desviación típica (i.e. su amplitud RMS)  $\delta$ . Explícitamente,

$$\langle \xi_X \xi_Y \rangle = \delta^2 W(X - Y) \quad (4.1)$$

en donde la función de correlación  $W$  se supone dada por

$$W(X) = \exp(-X^2/a^2) \quad (4.2)$$

y  $a$  es la *longitud de correlación lateral*. La evidencia experimental reciente

(Rasigni *et al.*, 1984) muestra que estas hipótesis simples proporcionan, sin embargo, una descripción ajustada de la realidad. Este hecho es particularmente afortunado, porque probablemente con ninguna otra distribución de probabilidades hubiera sido posible calcular explícitamente los promedios que necesitamos aquí. Tenemos, por ejemplo, para el promedio de productos de funciones  $g$  definidas en (3.1) que --en una notación evidente

$$\begin{aligned} \langle g_1 \rangle &= \bar{g}_1 \quad , \quad \langle g_1 g_2 \rangle = \bar{g}_1 \bar{g}_2 G_{12} \quad , \\ \langle g_1 g_2 g_3 \rangle &= \bar{g}_1 \bar{g}_2 \bar{g}_3 G_{12} G_{13} G_{23} \quad , \end{aligned} \quad (4.3)$$

etc. (El significado de los símbolos  $\bar{g}$  y  $G$  será aclarado en un momento). A partir de aquí y de (3.2) es posible calcular el promedio de productos de funciones  $f$ .

$$\begin{aligned} \langle f_1 \rangle &= F_1 \quad , \quad \langle f_1 f_2 \rangle = F_1 F_2 - \bar{g}_1 \bar{g}_2 F_{12} \quad , \\ \langle f_1 f_2 f_3 \rangle &= F_1 F_2 F_3 - \bar{g}_1 \bar{g}_2 F_{12} F_3 - \bar{g}_1 \bar{g}_2 F_{13} F_2 - \bar{g}_1 \bar{g}_2 F_{23} F_1 + O(F^2) \quad , \end{aligned} \quad (4.4)$$

etc, como también de productos de funciones  $f$  y  $g$ . Hemos empleado aquí la notación

$$F_a = \bar{g}_a - 1 = \exp(-\sigma^2 \gamma_a^2 / 2) - 1 \quad (4.5)$$

$$F_{ab}^{(\pm)} = 1 - G_{ab}^{(\pm)} = 1 - \exp(\mp \sigma^2 \gamma_a \gamma_b W_{ab}) \quad . \quad (4.6)$$

A partir de estos resultados es posible calcular el promedio de la amplitud definida en (3.4). Se tiene, en el hecho, resultados simples y útiles, aunque aproximados, en la medida en que se restrinja el cálculo a términos exactos solo hasta primer orden en  $F$ . Si, por el contrario, se intenta conservar términos conteniendo potencias de  $F$  de orden superior, se obtiene fórmulas tan complicadas y poco manejables que su utilidad es probablemente nula. Se procede, entonces, de este modo, se encuentra que

$$\langle R_{KQ} \rangle =$$

$$\begin{aligned}
&= \bar{E}_Q [ 1 - \bar{r}_K + (\bar{r}_K)^2 - \dots + \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \bar{E}_{K+P} \bar{F}_{-Q, K+P}^{<-1} - \\
&- \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \bar{E}_{K+P} (\bar{r}_K + \bar{r}_{K+P}) \bar{F}_{Q, K+P}^{<-1} + \dots \\
&- \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \bar{E}_K \bar{E}_{K+P} \bar{F}_{Q, K+P}^{<+1} + \dots ] + O(F^2)
\end{aligned}$$

en donde  $\tilde{F}$  denota la transformada de Fourier de la cantidad correspondiente  $F$ ,

$$\tilde{F}_{ab}(P) = \int d^2 X e^{-iPX} F_{ab}(X) \quad (4.7)$$

En primer orden en  $F$  las series infinitas que aparecen en la fórmula precedente para  $\langle R \rangle$  son todas geométricas y pueden ser sumadas fácilmente. El resultado es

$$\langle R_{KQ} \rangle = (\bar{E}_Q / \bar{E}_K) ( 1 - M_{KQ} ) + O(F^2) \quad (4.8)$$

con

$$M_{KQ} = \int \frac{d^2 P}{(2\pi)^2} [ \bar{F}_{K, K+P}^{<+1} - \bar{F}_{Q, K+P}^{<-1} ] + O(F^2) \quad (4.9)$$

Notamos que, a orden mas bajo en la amplitud RMS del perfil de rugosidades, se tiene que

$$M_{KQ} = \delta^2 [ \gamma_K + \gamma_Q ] \int \frac{d^2 P}{(2\pi)^2} \gamma_{K+P} \tilde{W}(P) + O(\delta^4) \quad (4.10)$$

de acuerdo con el resultado de Shen y Maradudin (1980, ec. (55)). En (4.10),  $\tilde{W}$  es la transformada de Fourier de  $W$ , calculada de acuerdo a la fórmula (4.7)

$$\tilde{W}(P) = \pi \alpha^2 \exp(-\alpha^2 P^2/4) \quad (4.11)$$

por (4.2).

Notamos que el cambio a  $F$  como nuevo parámetro de expansión es equivalente a una segunda resumación de la serie perturbativa, además de la llevada a cabo al pasar de (2.5) a (2.10). El mérito posible de estas aproximaciones sera discutido, por medio de la condición de unitariedad (3.7), al final de la sección siguiente.

### 5. La intensidad reflejada promedio

En la sección anterior calculamos la amplitud reflejada promedio y, por (3.3), la función de onda promedio. La cantidad que aparece en el cálculo de la resistividad eléctrica es, sin embargo, la intensidad de la onda reflejada. Por (3.6) esta esta dada por

$$\langle I_{KQ} \rangle = \int \frac{d^2 Q'}{(2\pi)^2} \exp\{i[(Q-Q')X - (\gamma_Q - \gamma_{Q'})z]\} \left[ \frac{\gamma_Q + \gamma_{Q'}}{2 \gamma_K} \right] \langle R_{KQ} R_{KQ'}^* \rangle ; \quad (5.1)$$

en donde

$$\begin{aligned} \langle R_{KQ} R_{KQ'}^* \rangle &= \\ &= (\gamma_K^2 / \gamma_Q \gamma_{Q'}) \int d^2 X d^2 X' \exp\{i[(K-Q)X - (K-Q')X']\} \\ &\quad \langle g^{(+)}_{Q,X} f_{K,X} g^{(-)}_{Q',X'} f_{K,X'}^* \rangle , \quad (5.2) \end{aligned}$$

por (3.4).

A partir de consideraciones generales es claro que el promedio en el segundo miembro de (5.2) debe necesariamente tener una cierta estructura. Notamos, primero, que se puede escribir obviamente

$$\langle A_{Q;X,K} A_{Q';X',K}^* \rangle = \langle A_{Q;X,K} \rangle \langle A_{Q';X',K}^* \rangle + \langle A'_{Q;X,K} A'^*_{Q';X',K} \rangle \quad (5.3)$$



en donde denotamos por  $A'$  la fluctuación de  $A$

$$A' = A - \langle A \rangle ,$$

Aplicaremos esto al caso

$$A_{Q;X,K} = \bar{E}^{(1)}_{Q,X} f_{K,X} \quad (5.4)$$

El primer término en (5.3) no depende ni de  $X$  ni de  $X'$ . El segundo, depende solo de la diferencia  $X-X'$ . Así, podemos escribir

$$\begin{aligned} \langle A_{Q;X,K} A_{Q;X',K}^* \rangle &= (\bar{E}_Q \bar{E}_{Q'} / \bar{E}_K^2) [1 - M_{KQ} - M_{KQ'}^*] + \\ &+ H_{Q,Q',K}(X-X') + O(F^2) , \end{aligned}$$

por (4.8); el valor de la función  $H$  introducida aquí será encontrada —también incluyendo términos hasta orden  $F^2$ — en (5.9). Introduciendo este resultado en (5.2) tenemos que

$$\begin{aligned} \langle R_{KQ} R_{KQ'} \rangle &= (2\pi)^2 \delta(Q-Q') \{ (2\pi)^2 \delta(K-Q) [1 - 2 \operatorname{Re} M_{KK}] + \\ &+ (\gamma_K / \gamma_Q)^2 \tilde{H}_{Q,Q,K}(Q-K) \} + O(F^2) ; \end{aligned}$$

en donde  $\tilde{H}$  es la transformada de Fourier de  $H$ , calculada de nuevo de acuerdo a la prescripción (4.7). Por (5.1)

$$\langle I_{KQ} \rangle = (\gamma_K / \gamma_Q) \int d^2 X e^{-i(Q-K)X} \{ 1 - 2 \operatorname{Re} M_{KQ} + H_{Q,Q,K}(X) \} .$$

Shen y Maradudin (1980) mostraron, también a partir de consideraciones generales, que es posible representar el integrando de esta última expresión como la exponencial de una función analítica. Así

$$\langle I_{KQ} \rangle = (\gamma_K / \gamma_Q) \exp(-2 \operatorname{Re} M_{KQ}) \int d^2 X e^{-i(Q-K)X} \exp C_{Q,Q,K}(X)$$

(5.5)

en donde

$$C_{Q,Q';K}(X) = H_{Q,Q';K}(X) / \langle A_{Q;X,K} \rangle \langle A_{Q';X',K}^* \rangle + O(F^2)$$

La ecuación (5.5) es la ecuación (46) de Shen y Maradudin. Se puede separar adicionalmente la intensidad dispersada en una contribución especular y otra difusa

$$\langle I_{KQ} \rangle_s = (2\pi)^2 \delta(K-Q) \exp[-2\text{Re} M_{KK}] , \quad (5.7)$$

$$\langle I_{KQ} \rangle_d = (\gamma_K / \gamma_Q) \exp[-2M_{KQ}] \int d^2 X e^{i(K-Q)X} [C_{Q,Q';K}(X) - 1] , \quad (5.8)$$

respectivamente. La condición de unitariedad (3.7) puede también ser separada en dos reglas de suma

$$\int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \langle I_{KQ} \rangle_s = \exp[-2\text{Re} M_{KK}] ,$$

$$\int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \langle I_{KQ} \rangle_d = 1 - \exp[-2\text{Re} M_{KK}] .$$

El valor de la función  $H_{Q,Q';K}$  (y entonces, por (5.6) y (5.8), el de la función  $C_{Q,Q';K}$  y de la contribución difusa  $\langle I_{KQ} \rangle_d$ ) puede ser calculada del mismo modo como se determinó  $M_{KQ}$  en (4.9). Escribiremos aquí solamente el resultado:

$$H_{Q,Q';K} = (\bar{g}_Q \bar{g}_{Q'} / \bar{g}_K^2) \{ -F^{(-)}_{Q,Q'}(Y) + \int \frac{d^2 P}{(2\pi)^2} e^{iPY} [ \tilde{F}^{(+)}_{Q,K+P}(P) + \tilde{F}^{(+)}_{Q',K+P}(P) - \tilde{F}^{(-)}_{K+P,K+P}(P) ] \} + O(F^2) \quad (5.9)$$

en donde las funciones  $\bar{g}$ ,  $F$  y  $\tilde{F}$  están dadas explícitamente en (4.5), (4.6) y (4.7). Al orden más bajo en  $\delta$ , se tiene que

$$C_{Q,Q';K}(Y) = \sigma^2 \int \frac{d^2 P}{(2\pi)^2} e^{iP \cdot X} [ \gamma_Q + \gamma_{K+P} ]^2 \tilde{W}(P) + O(\delta^4) ,$$

de acuerdo con el resultado correspondiente de Shen y Maradudin (1980, ec. (56)).

Procederemos ahora a usar la condición de unitariedad (3.7) para estimar la validez de las aproximaciones cometidas en este capítulo. Notamos, primero, que la ecuación (3.7) se puede escribir

$$\int \frac{d^2 P}{(2\pi)^2} [ \tilde{F}_{K,K+P}^{(+)}(P) - \tilde{F}_{K,K+P}^{(-)}(P) ] = \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \left| \frac{\gamma_K}{\gamma_Q} \right| [ \tilde{F}_{Q,Q}^{(+)}(P) - \tilde{F}_{Q,Q}^{(-)}(P) ] + O(F^2) , \quad (5.10)$$

incluyendo términos hasta de primer orden en las funciones  $F$ . Para valores pequeños de la amplitud RMS de la rugosidad  $\delta$ , se tiene que

$$\tilde{F}_{Q,Q}^{(\pm)}(P) = \pm \sigma^2 \gamma_Q \gamma_{Q'} \tilde{W}(P) + O(\delta^4) \quad (5.11)$$

y, entonces, (5.10) queda satisfecho con esta misma precisión para todos los valores de la correlación lateral  $\alpha$ . Inversamente, cuando  $\alpha$  es grande tenemos que

$$\tilde{F}_{Q,Q}^{(\pm)}(P) = (2\pi)^2 \delta(P) [ 1 - \exp [ \pm \sigma^2 \gamma_Q \gamma_{Q'} ] ] + O(\alpha^{-2}) , \quad (5.12)$$

y entonces la condición de unitariedad aproximada (5.10) es también satisfecha hasta orden cero en  $\alpha^{-2}$  para todo valor de  $\delta$ .

Vemos que las fórmulas (4.9) y (5.9) son exactas para valores extremos de los parámetros  $\delta$  y  $\alpha$  (correspondientes a las teorías de Shen y Maradudin (1980) y Soffer (1963), respectivamente); y tienen el carácter de fórmulas de interpolación para valores intermedios de ellos. Una comparación cuantitativa entre estas aproximaciones (en el contexto que interesa aquí) será mostrada en la sección siguiente.



## 6. La resistividad de películas y alambres

Consideraremos aquí la aplicación del resultado (5.5) al cálculo de efectos de tamaño en la resistividad eléctrica de películas delgadas y alambres finos. Después de pasar brevemente revista a este fenómeno, examinaremos la cordura de dos aproximaciones adicionales, realizadas con la intención de extraer de los cálculos precedentes un parámetro de especularidad en el espíritu de las condiciones de frontera de Fuchs. Por último, generalizaremos una observación de Sables y Preist (1982); mostrando que existen dos regímenes diferentes en estos efectos de tamaño --uno dependiente de la forma del espécimen, y el otro dependiente solamente de su *aspecto* (esto es, del cociente volumen/area)-- sin importar cual sea la forma funcional del parámetro de especularidad, siempre que este dependa solamente del ángulo de incidencia.

Como se sabe, la teoría semiclassical de la resistividad eléctrica de muestras pequeñas parte desde una solución de la ecuación de transporte de Boltzmann linealizada en la aproximación del tiempo de relajación

$$f_k(x) = f_k^0 + g_k(x) \quad ,$$

en donde  $f_k^0$  es la distribución de Fermi-Dirac. La distribución de electrones fuera de equilibrio, que es el objeto que interesa aquí, está dado por (Ziman 1960, Chambers 1969)

$$g_k(x) = e\tau (E \cdot v_k) \left\{ -\partial f_k^0 / \partial E \right\} \left\{ 1 - \Phi(v_k) \exp[-t_k^S(x)/\tau] \right\} \quad , \quad (6.1)$$

en donde  $E$  es el campo eléctrico aplicado (supuesto constante en el tiempo),  $v_k$  es la velocidad de un electrón moviéndose con un vector de onda  $k$ ,  $\tau$  es el tiempo de relajación (que puede depender también de  $k$ ),  $t_k^S(x)$  es el tiempo que le toma al mismo electrón viajar desde un punto  $x_S$  en la superficie de la muestra al punto de interés  $x$ .

$$x = x_S + v_k t_k^S(x) \quad ,$$

y  $\Phi$  es una función a ser determinada mediante la imposición de condiciones de frontera. La conductividad eléctrica de una muestra está, entonces, dada por

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= A^{-1} \int \sigma_{ij}(x) d^2 A = \\ &= (e^2/4\pi^3 \hbar A) \int_{FS} d^2 S_F n_i n_j v_F \tau \{ 1 - \Phi(v_k) \exp(-t^S_k(x)/\tau) \}, \quad (6.2) \end{aligned}$$

en donde  $i, j = x, y, z$ ,  $A$  es el área de la sección transversal, la integración más interna es realizada en  $k$  sobre la superficie de Fermi en equilibrio, y  $n_i = v_i/v_F$ , en donde  $v_F$  es la velocidad de Fermi.

De acuerdo con Fuchs (1933), se puede tomar como condición de frontera

$$g_{k_R}^{(+)}(x_S) = p(\Theta) g_k^{(-)}(x_S), \quad (6.3)$$

en donde los superíndices  $+ o -$  denotan las ramas de la función  $g_k$  aplicables a electrones que viajan desde y hacia la superficie, respectivamente;  $k_R$  es el vector de onda correspondiente a un electrón que ha sido reflejado especularmente desde  $k$ ; y  $p$  (dependiendo eventualmente del ángulo de incidencia  $\Theta$ ) es el parámetro de especularidad. Así, la conductividad eléctrica de una película delgada de espesor  $d$  está dada por (Fuchs 1938)

$$\frac{\sigma}{\sigma_\infty} = 1 - \frac{3}{4\kappa} \int_0^1 du (u - u^3) \frac{[1 - p(u)][1 - \exp(-\kappa/u)]}{1 - p(u) \exp(-\kappa/u)}, \quad (6.4)$$

en donde  $\sigma_\infty$  es la conductividad del grueso y  $\kappa = d/l$ ;  $l = v_F \tau$  es el libre camino medio. La conductividad de un alambre fino de sección circular está dada en forma semejante por

\*

$$\begin{aligned} \frac{\sigma}{\sigma_\infty} &= 1 - \frac{6}{\pi \kappa} \int_0^{\pi/2} d\theta \cos^2 \theta \sin^2 \theta \int_0^{\pi/2} d\psi \sin \psi \cdot \\ &\cdot \frac{[1 - p(\cos \Theta)][1 - \exp(-\kappa \sin \psi / \sin \theta)]}{1 - p(\cos \Theta) \exp(-\kappa \sin \psi / \sin \theta)} \quad (6.5) \end{aligned}$$

(Dingle 1950), en donde ahora  $\kappa = a/l$  y  $a$  es el radio del alambre; y

$$\cos \Theta = \sin \theta \sin \psi. \quad (6.7)$$

De acuerdo con los resultados de la sección precedente, sin embargo, se tiene en cambio que

$$E^{(+)} K_R(x_S) = \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \langle I_{KQ} \rangle E^{(-)} K(x_S) \quad (6.8)$$

en lugar de (6.3). Notamos, primero, que la condición de unitariedad (3.7) aplicada aquí da

$$\int \frac{d^2 K}{(2\pi)^2} E^{(+)} K_R(x_S) = \int \frac{d^2 K}{(2\pi)^2} E^{(-)} K(x_S) \quad ; \quad (6.9)$$

esto es, igualdad entre el número de partículas incidentes y dispersados en cada punto  $x_S$  de la superficie. Las aproximaciones que serán discutidas en un momento --y, en el hecho, las ideas tras las condiciones de frontera de Fuchs (6.3)-- violan esta igualdad. Notamos además que (6.7) implica que la función  $\Phi$  obedece una ecuación integral que depende de la forma del espécimen. Para una película delgada, por ejemplo, se tiene que

$$\Phi^{(+)} K = 1 - \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \langle I_{KQ} \rangle \frac{q_x}{k_x} [ 1 - \Phi^{(+)} Q \exp(-d/l_Q) ] , \quad (6.9)$$

en donde

$$l_Q = (\hbar/m) \tau \gamma_Q \quad ; \quad (6.10)$$

y los superíndices +, - tienen aquí el mismo significado que en la ecuación (6.3).

Es claro que la ecuación Integral (6.9) (o sus contrapartidas para otras formas) junto con la ecuación (6.2) resuelven formalmente el problema de la conductividad eléctrica de películas delgadas y alambres finos. Aunque es probable que se obtenga así resultados muy exactos, una tal tarea debe ser, probablemente, realizada enteramente en forma numérica. Si, por otro lado, se prefiere tener fórmulas cerradas comparables a (6.4) y (6.5), es necesario obtener primero soluciones de (6.10) que sean inteligibles, aunque

quizás solo aproximadas. Discutiremos ahora dos de estas soluciones.

La primera de ellas se obtiene despreciando la contribución difusa (5.8) a la intensidad dispersada. Así, (6.7) coincide en forma con (6.3) y obtenemos como solución explícita de (6.9)

$$\bar{\Phi}^{(s)}_K = (1 - p_K) / [1 - p_K \exp(-d/l_K)] \quad , \quad (6.11)$$

con

$$p_K = \exp(-2\text{Re } M_{KK}) \quad , \quad (6.12)$$

por (5.7).

Es fácil ver que en esta última fórmula el parámetro de especularidad  $p$  depende de  $K$  solamente a través del coseno del ángulo de incidencia. Por lo tanto, insertando (6.12) en las ecuaciones (6.4) y (6.5) se obtiene fórmulas explícitas para la conductividad eléctrica de películas y alambres dependiendo, por una lado, del tamaño a través del valor del parámetro  $\kappa$ ; y, por otra parte, de las propiedades estadísticas de las superficies de la muestra por la ecuación (4.9). Cuando los resultados numéricos de estas fórmulas se comparan con datos experimentales, se encuentra que estas nuevas expresiones se ajustan mucho mejor a la realidad que las usadas en el pasado. Dos de estas aplicaciones se muestran en el capítulo III de esta tesis.

En este capítulo haremos solamente comparaciones teóricas. En las figuras 1 a 3 se dibujan los valores del parámetro de especularidad, obtenido de (6.12), en función del ángulo de incidencia para valores diferentes de la amplitud RMS de la rugosidad superficial  $\delta$ , y de la longitud de correlación lateral  $\alpha$ . En cada figura se muestra también los valores correspondientes de la aproximación de Soffer (1967)

$$M_{KK} = 2 \delta^2 |\gamma_K|^2 \quad , \quad (6.13)$$

(en la notación empleada aquí); y la de Shen y Maradudin (1980)

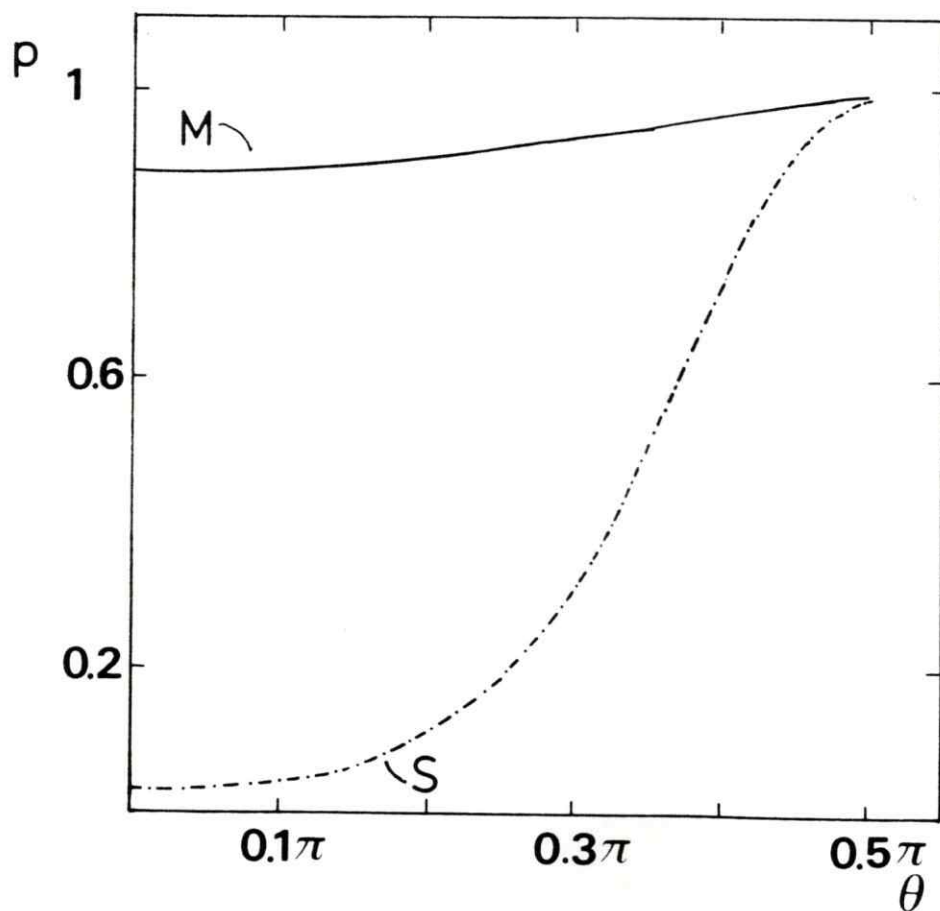


Figura 1. La curva continua es la reflectividad  $p$  como función del ángulo de incidencia  $\theta$  (ecuación (6.12) del texto) cuando  $a = 0.5 \text{ au}$  y  $\delta = 1 \text{ au}$  ( $\text{au} =$  unidad atómica). En este caso esta función casi coincide con la aproximación de Maradudin (curva M). La curva marcada con S es la aproximación correspondiente de Soffer.

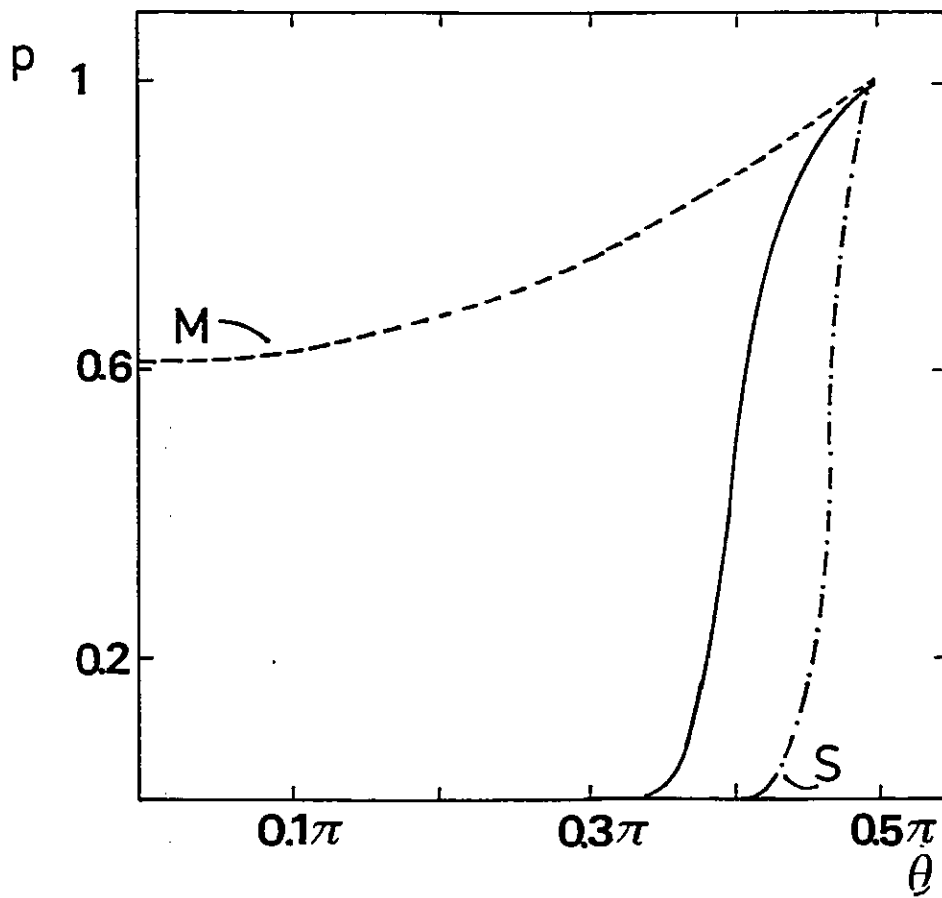


Figura 2. Lo mismo que en la figura 1, excepto que aquí  $a = 0.2 \text{ au}$  y  $\delta = 5 \text{ au}$ . Las curvas marcadas M y S denotan la aproximación de Maradudin y Soffer, respectivamente.

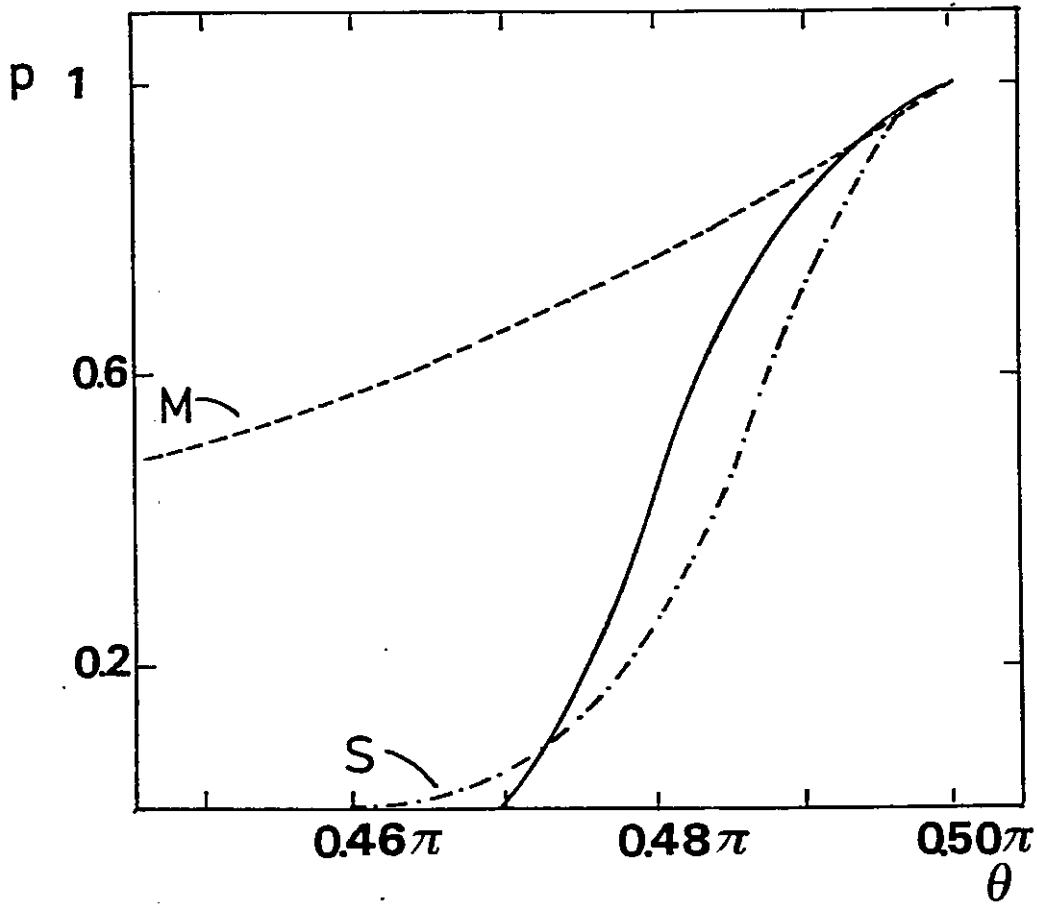


Figura 3. Lo mismo que en la figura 2. Ahora  $a = 0.3 \text{ au}$  y  $\delta = 10 \text{ au}$ . Note que la escala angular ha sido ampliada aquí.

$$M_{KK} = 2 \delta^2 \int \frac{d^2 P}{(2\pi)^2} \gamma_{K+P} \tilde{W}(P) \quad , \quad (6.14)$$

--un caso especial de (4.10).

Las figuras muestran la conducta de la función (6.12) para valores pequeños, intermedios y altos de  $\delta$ , respectivamente; y valores pequeños de  $\alpha$ . Es claro que en todos los casos la teoría de Soffer subestima el valor del parámetro de especularidad. Para superficies muy rugosas (caso de la figura 3) la diferencia entre la teoría de Soffer y la expuesta aquí es posiblemente inimportante -- aunque la forma funcional es diferente, ambas teorías asignan a  $p$  un valor prácticamente nulo excepto para incidencias rasantes. Para superficies lisas (caso de la figura 1) por el contrario, la teoría nueva afirma que la conducta de  $p$  es bien diferente de la que resulta de la teoría de Soffer. En realidad, en este caso  $p$  se ajusta mejor a la fórmula de Shen y Maradudin, y es por lo tanto casi especular para todos los ángulos de incidencia. Por otro lado, estas comparaciones son posiblemente injustas porque la teoría de Soffer (1967) en su forma usual (i.e. como en la ecuación (6.13)) se supone se aplica solo al caso  $\alpha=0$ . Volveremos sobre este punto más adelante.

Cuando la longitud de correlación lateral  $\alpha$  no es pequeña, la aproximación (6.12) no es ya muy buena. Se puede ver que, en este límite, la contribución difusa a la intensidad dispersada (5.8) es también casi especular. En el hecho, tenemos por (5.12) que

$$M_{KK} = 2 \sinh(\delta^2 |\gamma_K|^2) + O(\alpha^{-2}) \quad (6.15)$$

(del cual el resultado de Soffer (6.13) es claramente una aproximación de primer orden en  $\delta^2$ ); pero en este caso (6.12) subestima considerablemente la reflectividad de la superficie, que está dada en realidad por

$$\langle I_{KQ} \rangle = (2\pi)^2 \delta(K - Q) \quad . \quad (6.16)$$

Para tener una aproximación razonable, válida también en este caso, podemos proceder así:

Si, primero, escribimos separadamente las contribuciones especular y



difusa en la ecuación (6.9), tenemos que

$$\Phi^{(n)}_K = \frac{1 - P_K}{1 - P_K e^{(-)}}_K - \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \langle I_{KQ} \rangle d \frac{q_x}{k_x} \frac{1 - \Phi^{(n-1)}_K e^{(-)}}_K Q \quad (6.17)$$

en donde hemos puesto

$$e^{(-)}_K = \exp(-d/l_K),$$

y usado (6.12). Partiendo con (6.11), esta ecuación integral puede ser resuelta mediante el metodo de aproximaciones sucesivas con la precision deseada. No escribiremos aqui la serie que resulta de este proceso; aunque debe tenerse en mente que --como la forma de la ecuación integral depende de la forma de la muestra-- la serie que se obtiene de aqui sera tambien dependiente en algun monto de esta forma. Por otra parte, notamos que en el límite en que  $a$  es grande, el factor  $\langle I_{KQ} \rangle$  en la integral del segundo miembro de (6.9) está casi enteramente concentrado en las vecindades del punto  $Q = K$ , mientras que el resto del integrando varia en forma mucho mas suave. Así, es justificable escribir en este caso

$$\Phi^{(n)}_K = 1 - [1 - \Phi^{(n-1)}_K e^{(-)}_K] \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \langle I_{KQ} \rangle (q_x/k_x);$$

esto es,

$$\Phi^{(n)}_K = (1 - P_K) / (1 - P_K \exp(-d/l)) \quad , \quad (6.18)$$

con

$$\begin{aligned} P_K &= \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \langle I_{KQ} \rangle (q_x/k_x) \\ &= P_K + \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \langle I_{KQ} \rangle d (q_x/k_x) \end{aligned} \quad (6.19)$$

En el límite opuesto, en que  $a$  es pequeño, la contribución de la componente

difusa es también pequeña. Pero entonces también la ecuación (6.18) es una solución bien exacta de la ecuación integral porque --si se le expande en serie de potencias en  $\langle I_{KQ} \rangle_d$  -- reproduce exactamente los dos primeros términos de la serie a la cual no referimos inmediatamente a continuación de la ecuación (6.17).

Existe un mérito adicional en la aproximación (6.19). Como se mostrará en un momento, cuando los términos que contienen  $\exp(-d/l_Q)$  se hacen despreciables, la conductividad eléctrica de un espécimen depende del tamaño pero no de su forma. En este caso, la ecuación (6.9) -- y sus contrapartes para alambres finos de variadas secciones-- es

$$\Phi^{(+)K} = 1 - \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \langle I_{KQ} \rangle (q_x/k_x) \quad ,$$

que coincide con el límite, que en este caso es también universal

$$\Phi^{(+)K} = 1 - P_K \quad ,$$

sólo en el caso que el parámetro de especificidad tenga la forma (6.19)

Nuestro último punto se refiere a las ecuaciones (6.4) y (6.5). Sambles y Preist (1982) notaron que hay dos regímenes distintos en el efecto de tamaño de la conductividad eléctrica de especímenes pequeños. Cuando  $\kappa$  no es grande, la conductividad depende de este parámetro de un modo contingente de la forma de la muestra (aun cuando las propiedades de reflectividad de sus superficies sean idénticas) como es claro al observar la diferencia en forma funcional entre (6.4) y (6.5). Pero cuando  $\kappa$  es tan grande que  $\exp(-\kappa)$  es despreciable, la conductividad depende sólo del tamaño como una función universal del cociente volumen/área. Sambles y Preist han mostrado que esto es cierto para el caso en que el parámetro de especificidad sea el de Soffer (6.13). Generalizaremos aquí este resultado al caso de un parámetro de especificidad que sea una función cualquiera del ángulo de incidencia. No es necesario, tampoco suponer que esta función sea analítica (Parrot 1965, Brandli y Cotty 1965).

En este último límite, la conductividad de una película delgada está dada por

$$\sigma/\sigma_{\infty} = 1 - (3/4 \kappa_a) \int_0^1 du (u-u^3) [1 - p(u)] \quad , \quad (6.20)$$

por (6.4), para todo  $p$  que sea una función par de ángulo de incidencia  $\Theta$ , y por lo tanto de  $u = \cos \Theta$ . Aquí  $\kappa_a$  es el cociente volumen/área del espécimen, medido en unidades del libre camino medio de los electrones de conducción. Del mismo modo, tenemos a partir de (6.5) para el caso de un alambre fino de sección circular, que

$$\sigma/\sigma_{\infty} = 1 - (6/\pi \kappa) \int_0^{\pi/2} d\theta \cos^2 \theta \sin^2 \theta \int_0^{\pi/2} d\psi \sin \psi [1 - p(\cos \Theta)] .$$

Mostraremos que esta fórmula es la misma que (6.20). Cambiemos aquí las variables de integración por

$$u = \cos \Theta = \sin \theta \sin \psi \quad , \quad v = \cos \theta .$$

Entonces el Jacobiano de la transformación es

$$\frac{\partial(u, v)}{\partial(\theta, \psi)} = \sin^2 \theta \cos \psi \quad ,$$

y las integrales en la fórmula precedente son

$$\int_0^1 du \int_0^{\sqrt{1-u^2}} dv uv^2 [1 - (u^2 + v^2)]^{-1/2} [1 - p(u)] .$$

Pero es fácil ver que

$$\begin{aligned} \int_0^{\sqrt{1-u^2}} dv v^2 [1 - (u^2 + v^2)]^{-1/2} &= -(v/2) [1 - (u^2 + v^2)]^{-1/2} + \\ &+ \frac{1}{2} (1 - u^2) \arcsin [v (1 - u^2)^{-1/2}] \Big|_{v=0}^{v=\sqrt{1-u^2}} \\ &= (\pi/4) (1 - u^2) . \end{aligned}$$

de donde se sigue inmediatamente el resultado anunciado.

## 7. Conclusiones

En este capítulo hemos calculado la reflectividad cuántica de una superficie con rugosidades aleatorias por medio de un método perturbativo que incluye todos los ordenes en  $\delta$  ( la desviación RMS de la superficie real medida a partir de la ideal). Para hacer esto, se ha usado una generalización de un procedimiento utilizado antes por Shen y Maradudin (1980), a cuyos resultados se reducen nuestras formulas en el límite de  $\delta$  pequeño. Los pasos intermedios en el cálculo implican un número de sumas de series perturbativas complicadas; las formulas resultantes aparecen como expresiones cerradas y tienen una estructura de una simplicidad quizás sorprendente.

Usando este cálculo como punto de partida, se ha calculado aquí la resistividad eléctrica de películas delgadas y alambres finos, mediante el procedimiento semiclassical usual que parte de la ecuación de transporte de Boltzmann. Es claro que esto no puede ser hecho sin cierta ambigüedad, porque la componente difusa de la intensidad reflejada tiene una estructura que es muy diferente de la función de distribución para los electrones de conducción en equilibrio termodinámico. (Por ejemplo, cuando la longitud de correlación lateral  $a$  tiende a infinito, la componente difusa se hace progresivamente mas especular). Hemos obtenido aquí dos aproximaciones para el parámetro de especularidad que aparece en la formulacion usual; la primera dependiente solo del ángulo de incidencia, mientras que la segunda tiene una forma menos transparente. Las conclusiones que siguen se refieren solamente a la primera función de reflectividad, porque es la única que hasta el momento ha sido estudiada en detalle.

Cuando se comparan las expresiones obtenidas aquí con las teorías primitivas en las cuales el parámetro de especularidad es independiente del ángulo (Fuchs 1938, Dingle 1950), se obtiene como resultado conclusiones que no son cualitativamente distintas de las obtenidas al comparar estas con las teorías de tipo de la de Soffer ( Sambles y Elsom 1980). Así, para obtener

estimaciones cuantitativas de la exactitud de los resultados encontrados aquí, es necesario compararlos con los de Soffer que parecen ser los mejores disponibles hasta el presente. Cuando se hace esto, es claro, en primer lugar, que la teoría de Soffer subestima —a veces en forma considerable— la reflectividad de las rugosidades superficiales. Por ejemplo, cuando  $\delta$  es pequeño, la función de specularidad esta mejor representada por la aproximación de Shen y Maradudin que la de Soffer; y es por lo tanto cercana a uno para todos los valores del ángulo de incidencia. Además, se obtiene que la teoría de Soffer es deducible de una teoría cuántica en el límite en que  $\alpha$  tiende a infinito — un límite en el cual la contribución de la parte difusa no puede ser ignorada, y la aproximación misma es entonces sospechosa. Así, se puede concluir que hay buenas razones para esperar que la presente teoría proveerá una mejor representación de los hechos experimentales que las empleadas previamente.

Por cierto, el único criterio de validez es el acuerdo con los datos experimentales. Como se sabe, una evaluación crítica del acuerdo de los resultados teóricos con los experimentales ha sido dificultada en el pasado por una desafortunada escasez de datos de precisión alta obtenidos en muestras muy puras con cocientes favorables de espesores sobre libre caminos medio. Recientemente, sin embargo, se ha obtenido cierta cantidad de datos con la precisión requerida, y es ahora posible intentar comparaciones significativas. Ejemplo de esto son los dos ajustes mostrados en el capítulo III de esta tesis.

## II. EFECTOS TERMOELÉCTRICOS EN PELÍCULAS DELGADAS Y ALAMBRES FINOS

**Resumen:** La nueva función de especularidad dependiente del ángulo descrita en el capítulo precedente es aplicada aquí al cálculo de los efectos termoeléctricos en películas delgadas y alambres finos de sección circular; y el resultado es comparado con los resultados obtenidos utilizando teorías más antiguas. En el cálculo del coeficiente Peltier y el poder termoeléctrico se encuentra que aparece una contribución adicional a las usuales, que tiene su origen en el hecho que el parámetro de especularidad depende de la energía de Fermi. Este término produce un efecto de tamaño que es del mismo orden de magnitud que el proveniente de otros términos, es, además, siempre negativo y presenta un mínimo para valores intermedios del espesor sobre el libre camino medio. Para metales simples, el efecto combinado de estos términos es pequeño; pero en ocasiones estos pueden conspirar para producir un mínimo en el poder termoeléctrico a temperaturas intermedias.

### 8. Introducción

En la presencia de un campo eléctrico aplicado  $E$  y un gradiente de temperatura  $\nabla T$ , la corriente eléctrica  $J$  y el flujo de calor  $U$  están dados por (Ziman 1964)

$$J = e^2 K_0 E + e K_1 (-\nabla T/T) , \quad (8.1a)$$

$$U = e K_1 E + K_2 (-\nabla T/T) ; \quad (8.1b)$$

en donde  $e$  es la carga de un electrón, y los coeficientes de transporte  $K_n$  están definidas por ciertas integrales sobre la distribución de electrones fuera de equilibrio. Bajo condiciones de validez bien generales, se puede demostrar que todas éstas están determinadas por  $K_0$  como función de la energía  $E$ . Así,

$$K_0 = K_0(\zeta) , \quad K_2 = (\pi^2/3) (k_B T)^2 K_0(\zeta) \quad (8.2a)$$

pero

$$K_1 = (\pi^2/3) (k_B T)^2 \left[ \partial K_0(E)/\partial E \right]_{E=\zeta} ; \quad (8.2b)$$

en donde  $\zeta$  es el potencial químico de los electrones, y  $k_B$  es la constante de

Boltzmann.

Estos coeficientes de transporte determinan otros. En particular, la conductividad eléctrica  $\sigma$ , la conductividad térmica  $\kappa$ , el poder termoeléctrico absoluto  $S$  y el coeficiente de Peltier  $\Pi$  están dados por

$$e^2 K_0, \quad K_2/T, \quad K_0^{-1} K_1/eT, \quad \text{y} \quad K_0^{-1} K_1/e$$

respectivamente. Así --en la medida en que sea válida la aproximación del tiempo de relajación-- las mediciones de  $\sigma$  y de  $\kappa$  por un lado, o de  $S$  y de  $\Pi$  por otro, proporcionan esencialmente la misma información; pero la información obtenida de un par es complementaria de la obtenida del otro. Por ejemplo, la conductividad eléctrica de un metal puro es, dentro de la misma aproximación, proporcional tanto al libre camino medio  $\bar{l}$  como al área  $A$  de la superficie de Fermi. En las mismas circunstancias, su poder termoeléctrico absoluto está dado por (Huebner 1964)

$$S_b = (eL/T/\zeta)(U+V) \quad (8.3)$$

si se desprecia los efectos del arrastre de fonones. Aquí  $L = (\pi k_B)^2/3 e^2$  es el valor de Sommerfeld del número de Lorenz, y

$$U = (\partial \ln N / \ln E)_{E=\zeta} \quad (8.4a)$$

$$V = (\partial \ln A / \ln E)_{E=\zeta} \quad (8.4b)$$

Como se sabe, para los metales nobles  $S_b$  es positivo; lo que implica que (debido a que la carga  $e$  tiene signo negativo) ya sea  $U$  o  $V$  (o ambos) son negativos. Pero para un metal de electrones casi libres, es claro que  $V = 1$  y  $U$  debe variar desde 0 a 2 a medida que la temperatura aumenta. Se supone que esta discrepancia evidente tiene su origen en el hecho que, en el caso de los metales nobles, la superficie de Fermi toca los bordes de zona, lo que causa que el área de Fermi disminuya cuando aumenta la energía.

Los efectos de  $U$  y  $V$  pueden ser separados experimentalmente haciendo

mediciones en películas delgadas y alambres finos. En este caso, las ecuaciones (8.1) y (8.2) continúan siendo válidas, pero el valor de  $K_0$  es menor que el del grueso  $K_0^{(b)}$  por un factor  $I_1$  ( $0 < I_1 < 1$ ) que toma en cuenta la dispersión de los electrones de conducción por las superficies del espécimen (Fuchs 1938)

$$K_0 = I_1 K_0^{(b)} \quad (8.5)$$

Si  $I_1$  no depende de la energía  $E$  sino a través del libre camino medio  $l$ , es fácil ver que el poder termoeléctrico de una espécimen delgado difiere de su valor del grueso (8.3) por (Huebner 1964; Leonard y Lin 1970; Thompson 1977; Tellier, Pichard y Tossier 1977)

$$S = S_b + \frac{eL}{\xi} U \left( \frac{\alpha}{\alpha_b} - 1 \right) \quad (8.6)$$

en donde  $\alpha$  y  $\alpha_b$  son el coeficiente de resistencia con la temperatura del espécimen y el grueso

$$\alpha = - (1/\sigma) d\sigma/dT \quad (8.7)$$

respectivamente. ( El efecto posible de dispersión por los bordes de grano (Tellier, Pichard y Tossier 1977; Thomson 1978; Warkusz 1978) está incluido en (8.7); pero no la piezoresistencia que tiene su origen en la expansión térmica (Warkusz 1978; Jain y Srivastava 1980) . En la ecuación (8.6) todas las cantidades excepto  $U$  son directamente medibles. Así, a partir de una determinación experimental de  $U$ , la ecuación (8.3) permite determinar separadamente  $V$ .

Este procedimiento ha sido empleado en el análisis de mediciones del poder termoeléctrico de metales nobles con resultados que han sido a menudo contradictorios. Por ejemplo, se ha encontrado para el oro valores de  $U$  que varían entre  $-0.61$  y  $+1.76$  (Worobey, Lindenfeld y Serin 1966; Hubin y Gouault 1974); para el cobre, valores en el intervalo  $-18.7$  hasta  $+2.3$



(Chopra, Bahl y Randlett 1968; Angus y Dalglish 1970); y en plata, valores que varían entre +0.86 y +2.7 (Moreland y Bourassa 1975; Angus y Dalglish 1970). Se ha intentado varias explicaciones para esta conducta tan contradictoria. Por ejemplo, se ha afirmado que el grado de especularidad de las superficies de un espécimen delgado de oro depende tanto de la temperatura como del grado de recocido (Sugawara, Nagano y Kinbara 1974). Es difícil imaginar, sin embargo, un mecanismo físico concreto capaz de producir este último resultado. Las consideraciones contenidas en el presente capítulo hacen improbable estas explicaciones, aun si están respaldadas —como en el caso del trabajo de Sugawara *et al*— por una cuidadosa investigación experimental. Lo que aquí se afirma es que la ecuación (8.6) es errónea, porque en ella se despreja un término que es del mismo orden de magnitud que los que se retienen.

La efectividad de las superficies de una muestra en la dispersión de los electrones de conducción depende de la escala física de sus irregularidades medidas en unidades de la longitud de onda de los electrones (Ziman 1960). Así, si se aumenta la energía de los electrones, la dispersión por la misma superficie tiende a ser más difusa. En general, el factor  $I_1$  que aparece en (8.5) es un funcional del grado de especularidad de la superficie, que es caracterizado aquí como antes por la función  $p$ . Por lo tanto,  $I_1$  depende de  $E$  no solamente a través de  $l$ , sino también a través de la función de especularidad  $p$ ; y la derivada  $\partial I_1 / \partial E$ , que contribuye a  $S$  por (8.2b), contiene un término adicional que es un funcional lineal de  $\partial p / \partial E$ . Claramente, este término se combina negativamente con aquellos que aparecen en (8.6).

La necesidad de incluir un tal término ha sido deducida a partir de resultados experimentales por Weddler y Alshorachi (1980). La primera evaluación teórica de él se debe a Sambles y Preist (1984).

En el resto de este capítulo aplicaremos los resultados del capítulo precedente para obtener estimaciones teóricas de los diferentes términos que contribuyen al poder termoeléctrico y al coeficiente Peltier de especímenes pequeños. Hay cierta distancia, sin embargo, entre los resultados presentados

aquí y los que se necesita para intentar un cálculo confiable de las propiedades termoeléctricas de metales reales. Así, no se hará aquí una comparación detallada entre los experimentos y la teoría. La nueva formulación será comparada solamente con las ecuaciones que resultan de aproximaciones más antiguas (Soffer 1967; Shen y Maradudin 1980).

### 9. Efectos de tamaño en los coeficientes de transporte

A partir de (6.4) y (6.5) se tiene que

$$I_1 = 1 - \frac{3}{2\kappa} \int_0^1 du (u-u^3) \frac{[1-p(u)][1-\exp(-\kappa/u)]}{1-p(u)\exp(-\kappa/u)} \quad (9.1)$$

para el caso de películas delgadas de espesor  $d$ , en donde  $k = d/l$  y  $l$  es el libre camino medio (Fuchs 1938); mientras que para un alambre fino de sección circular,  $I_1$  está dado por

$$I_1 = 1 - \frac{6}{\pi\kappa} \int_0^{\pi/2} d\theta \cos^2 \theta \sin \theta \int_0^{\pi/2} d\psi \sin \psi \cdot \frac{[1-p(u)][1-\exp(-\kappa \sin \psi / \sin \theta)]}{1-p(u)\exp(-\kappa \sin \psi / \sin \theta)} \quad (9.2)$$

en donde ahora  $\kappa = a/l$ ,  $a$  es el radio del alambre y  $u$  denota el coseno del ángulo de incidencia  $u = \sin \theta \cos \psi$ . El hecho que la función de especularidad (6.12) depende solamente de  $u$  puede ser comprobado por una evaluación explícita (ver apéndice a este capítulo).

Sea  $K_i$  ( $i=0,1,2$ ) el valor de un coeficiente de transporte para una película delgada o un alambre fino; y  $K_i^{(b)}$  el valor del grueso correspondiente. Entonces, por (8.2) y (8.5), tenemos que

$$K_0/K_0^{(b)} = I_1, \quad K_2/K_2^{(b)} \quad (9.3a)$$

pero

$$\frac{\kappa_1}{\kappa_1^{(b)}} = I_1 + \frac{\pi (k_B T)^2}{3 e \Pi} \left[ \frac{\partial I_1}{\partial E} \right]_{E=\zeta} ; \quad (9.3b)$$

en donde  $I_1$  esta dado por (9.1) o (9.2) y  $\Pi$  es el coeficiente de Peltier del grueso. Explícitamente, encontramos que

$$(\partial I_1 / \partial E)_{E=\zeta} = I_2 \kappa' + I_3 , \quad (9.4)$$

en donde

$$I_2 = \frac{3}{2 \kappa} \int_0^1 du (u-u^3) \frac{(1-p)}{1-\epsilon p} \left\{ \frac{u}{\kappa} (1-\epsilon) - \frac{\epsilon(1-p)}{1-\epsilon p} \right\} \quad (9.5a)$$

$$I_3 = \frac{3}{2 \kappa} \int_0^1 du (u-u^3) \left[ \frac{1-\epsilon}{1-\epsilon p} \right]^2 p^2 \quad (9.5b)$$

para el caso de películas delgadas; y

$$I_2 = \frac{6}{\pi \kappa} \int_0^{\pi/2} d\theta \cos^2 \theta \int_0^{\pi/2} d\psi \sin \psi \frac{(1-p)}{(1-\epsilon p)} \cdot \left\{ \frac{\sin \theta}{\kappa} (1-\epsilon) - \sin \psi \frac{\epsilon(1-p)}{1-\epsilon p} \right\} \quad (9.6a)$$

$$I_3 = \frac{6}{\pi \kappa} \int_0^{\pi/2} d\theta \cos^2 \theta \sin \theta \int_0^{\pi/2} d\psi \sin \psi \left[ \frac{1-\epsilon}{1-\epsilon p} \right]^2 p^2 \quad (9.6b)$$

para el caso de un alambre fino de sección circular. En estas fórmulas hemos denotado por  $\kappa'$  y por  $p'$  las derivadas de  $\kappa$  y  $p$  con respecto a la energía, evaluadas en la energía de Fermi; y hemos puesto

$$\epsilon = \exp(-\kappa/u) . \quad (9.7)$$

★

Estas fórmulas han sido encontradas por primera vez por Sambles y Pretst (1984).

En las figuras 4-6 hemos dibujado  $p'$  como función del ángulo de incidencia (junto con los correspondientes valores de  $p$ ) para valores típicos de la amplitud RMS de la rugosidad  $\delta$  y la correlación lateral  $a$ ; junto con los valores obtenidos de la aproximación de Soffer (1967) y Shen y Maradudin (1980) [ecuación (6.12) con (6.13) y (6.14), respectivamente]. Hay tres conclusiones evidentes de esta comparación: En primer lugar, es claro que —si bien los valores del parámetro de especularidad están contenidos naturalmente en el intervalo  $0 \leq p \leq 1$ — no existe ninguna limitación semejante sobre los valores de la derivada  $p'$ ; de modo tal que en este caso (vease, por ejemplo, la figura 5) la posibilidad de discrepancias se ve considerablemente aumentada. En segundo lugar, es evidente que, de acuerdo a lo esperable, la aproximación de Maradudin es una mejor representación del parámetro de especularidad que la de Soffer para valores pequeños de  $\delta$  (figura 4); es quizás sorprendente que la misma observación es aplicable al caso en que  $a$  y  $\delta$  toman valores bastante mayores (figura 6; se sabe por los resultados del capítulo anterior que (6.12) con (4.2) se toman inexactas para el caso en que  $a$  tiende a infinito). Se vé, por último (figura 5) que para valores intermedios de estas cantidades, ni la aproximación de Soffer ni la de Maradudin son precisas, si se les compara con la empleada aquí.

Las mismas observaciones se aplican esencialmente a  $I_1, I_2$ , y  $I_3$  como función de  $\kappa$  para el caso de películas delgadas (ecs. (9.1), (9.5a) y (9.5b)), según se muestra en las figuras 7 a la 9. Es, además, claro que —aunque tanto  $I_1$  como  $I_2$  son funciones monótonas de  $\kappa - I_3$ , que es siempre negativa por las razones discutidas antes, tiene un mínimo a espesores intermedios que puede ser a veces bien pronunciado. Así, en circunstancias favorables, estos términos pueden conspirar para producir un mínimo en  $S$  o  $\Pi$  a temperaturas suficientemente bajas.

Este último hecho puede ser ilustrado por un ejemplo que no es quizás muy irreal. En la figura 10 se muestra el efecto de tamaño en  $K_1$  (ecuación (9.3b))

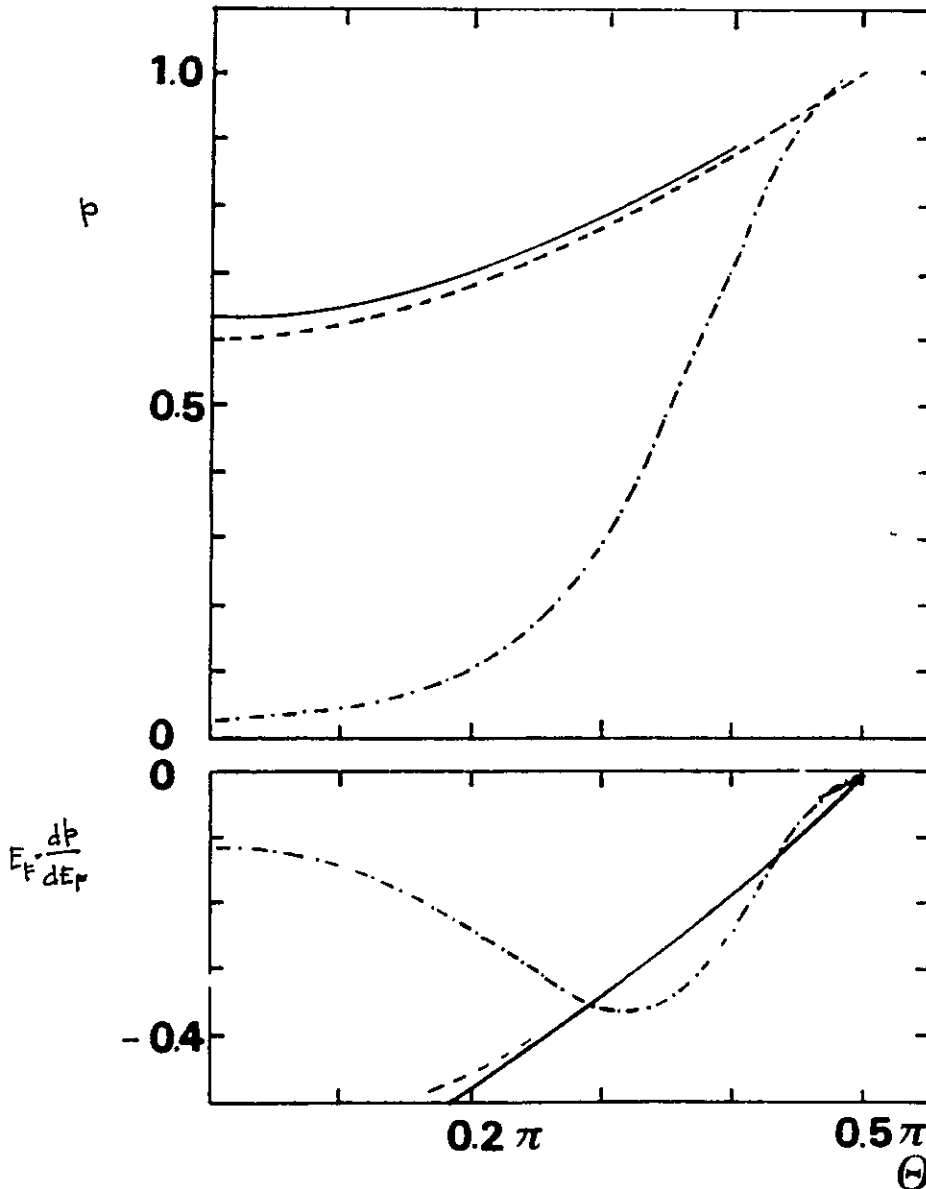


Figura 4. La función de especificidad  $p$  y  $dp/dE_F$  vs el ángulo de incidencia  $\Theta$  para el caso  $\delta=1$  au y  $a = 1$  au (au = unidad atómica). La línea continua es un dibujo de la nueva teoría; - - - es la aproximación de Maradudin (que en el caso de  $dp/dE_F$  coincide prácticamente con la nueva teoría); y - · - · - es la aproximación de Soffer.

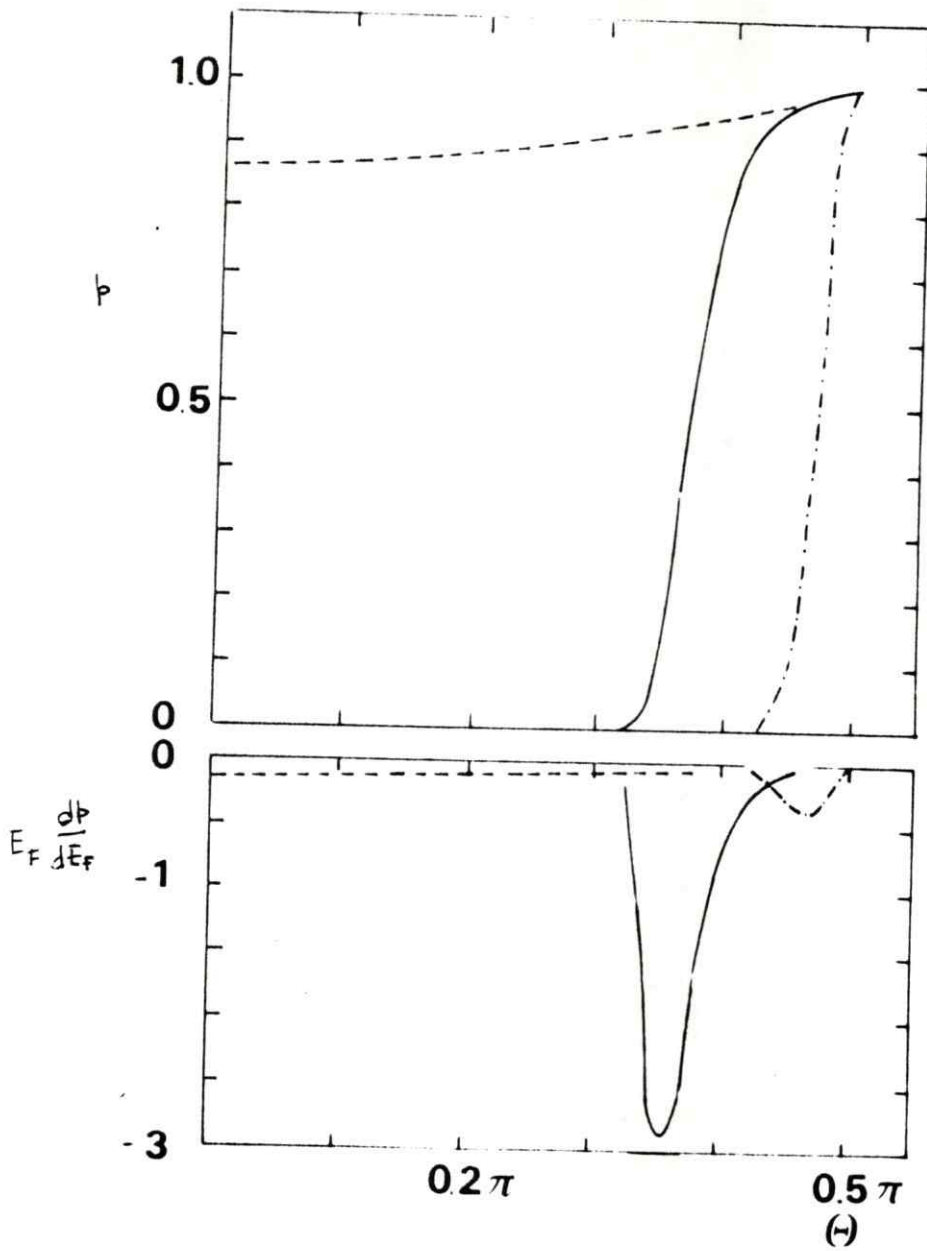


Figura 5. Grafico de  $p$  y  $dp/dE_F$  contra  $\Theta$  para  $\delta = 5$  au y  $a = 0.1$  au.

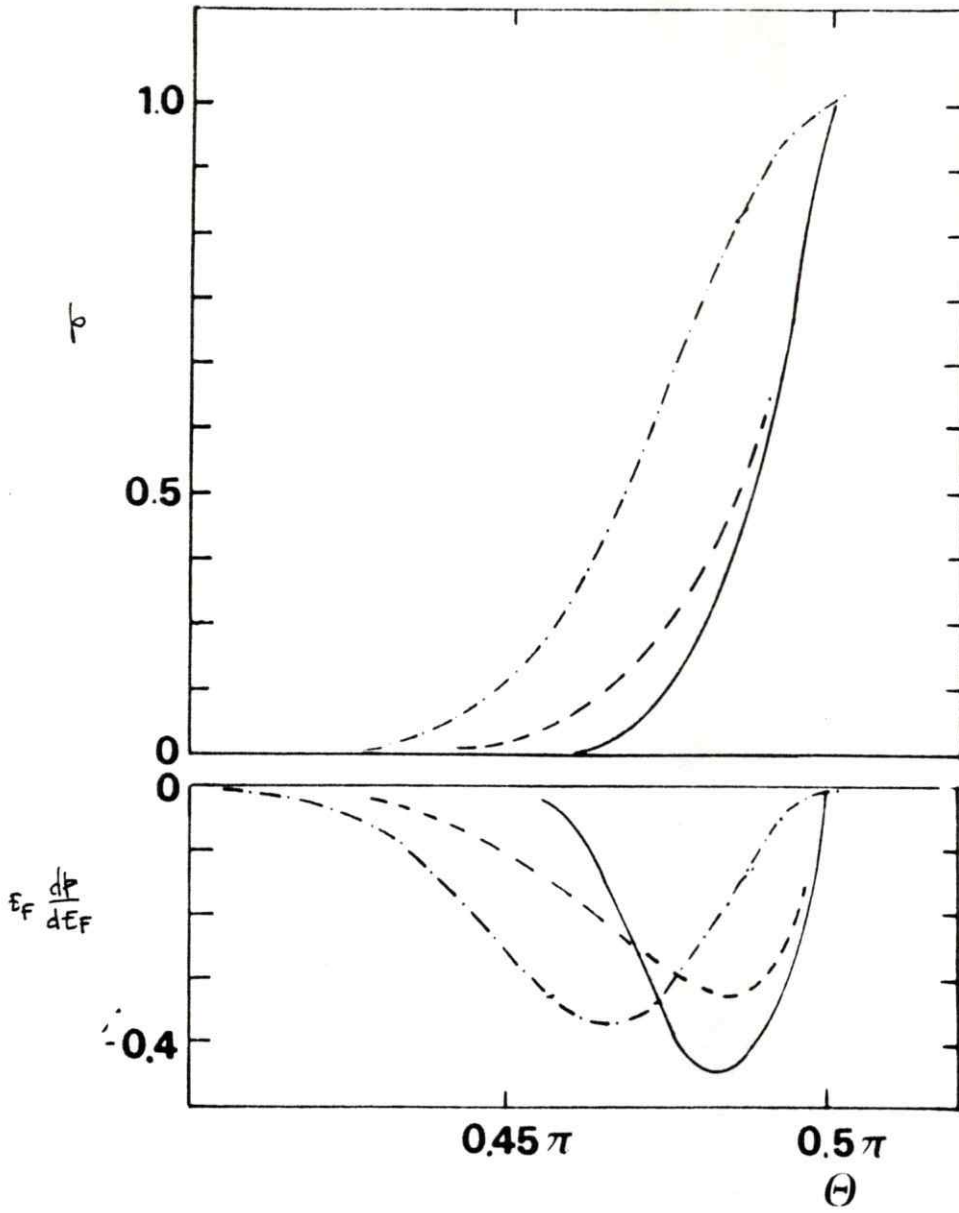


Figura 6. Grafico de  $p$  y de  $dp/dE_F$  contra  $\Theta$  para  $\delta = 5 \text{ au}$  y  $a = 5 \text{ au}$ .

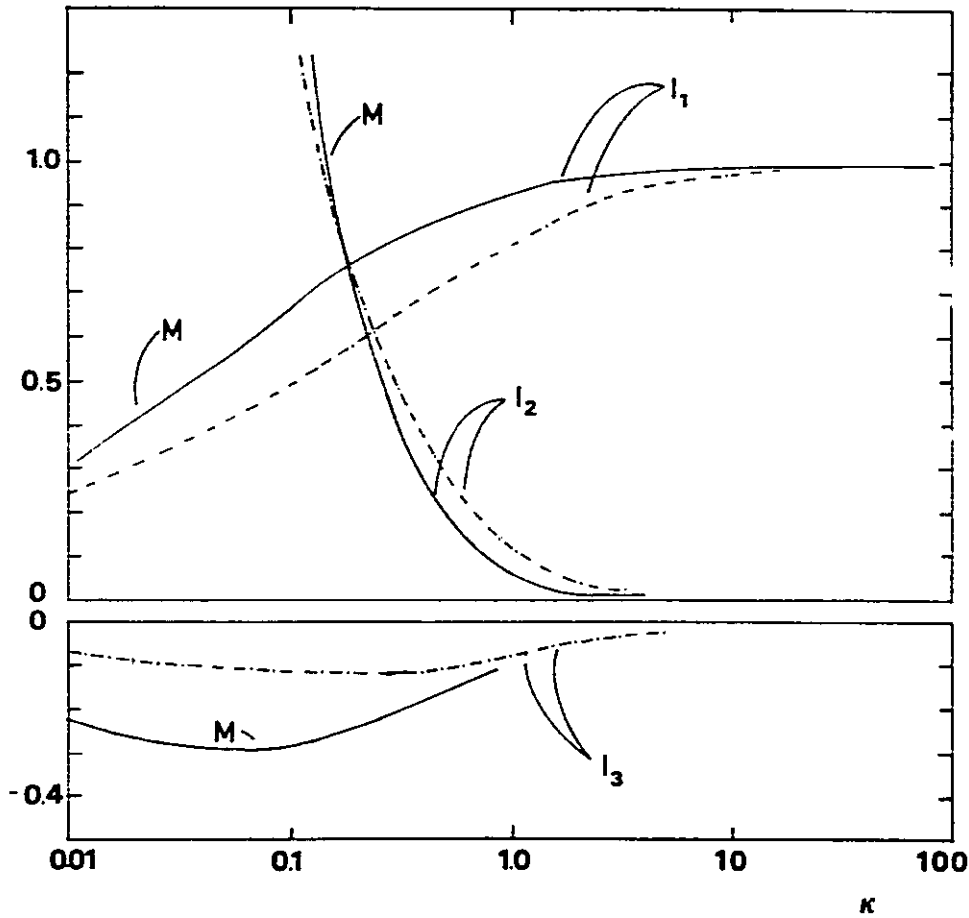


Figura 7. Las tres integrales  $I_1$ ,  $I_2$ ,  $I_3$  que contribuyen a la función  $K_1$  para una película delgada (vease el texto) como función de  $\kappa = \text{espesor/libre camino medio}$  para el caso  $\delta = 1 \text{ au}$ ,  $a = 1 \text{ au}$ : — es la aproximación nueva (que prácticamente coincide en este caso con la de Maradudin); - - - es la aproximación de Maradudin; y - · - · - es la de Soffer.



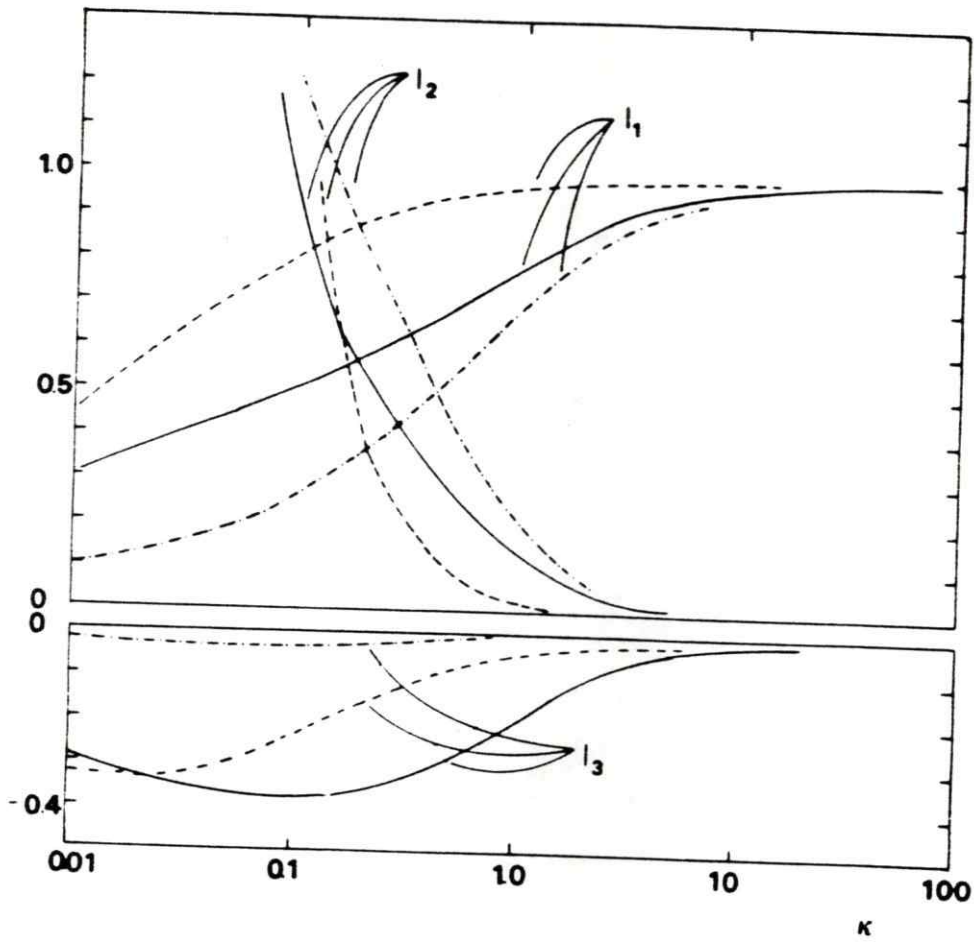


Figura 8. Grafico de  $l_1, l_2, l_3$  contra  $\kappa$  para el caso  $\delta = 5.0 \text{ au}$  y  $a = 0.1 \text{ au}$ .

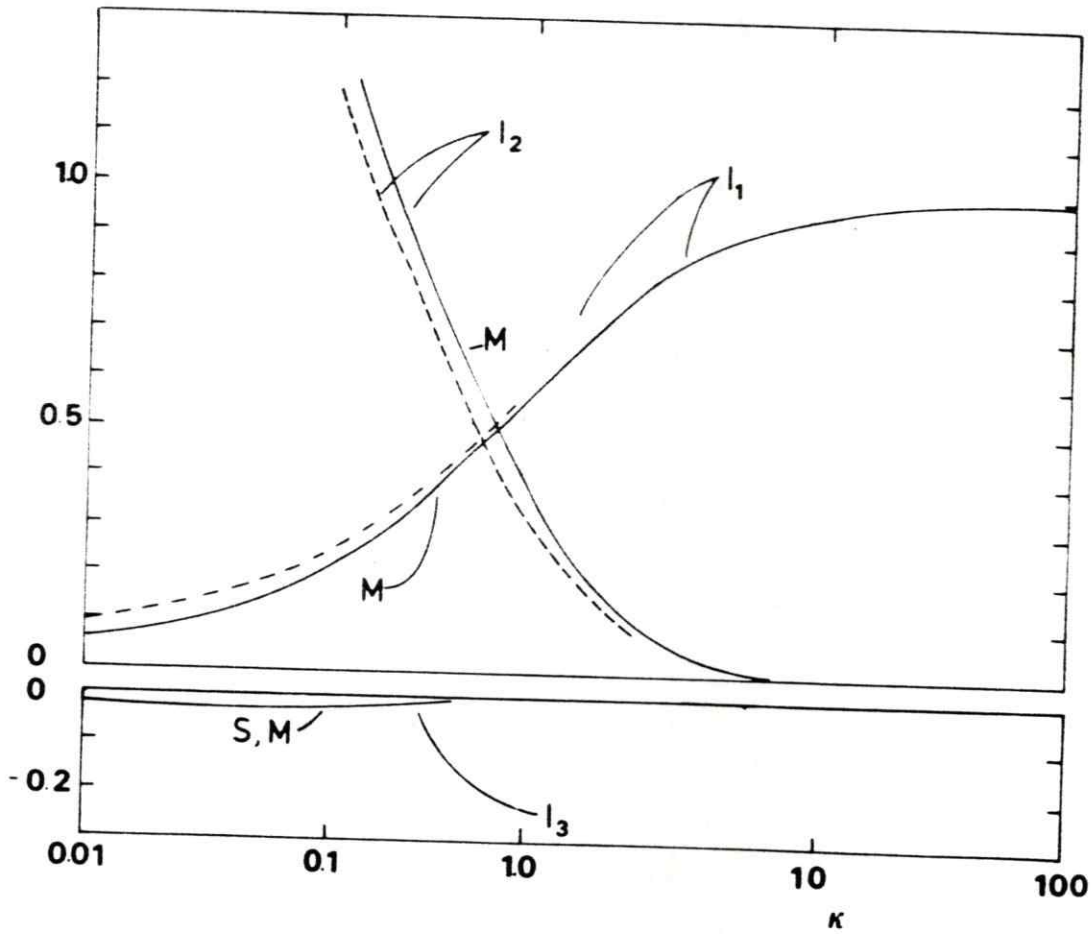


Figura 9. Grafico de  $I_1, I_2, I_3$  para el caso  $\delta = 5 \text{ au}$  y  $a = 5 \text{ au}$ . En el caso de las dos últimas integrales, la aproximación de Soffer coincide prácticamente con la nueva.

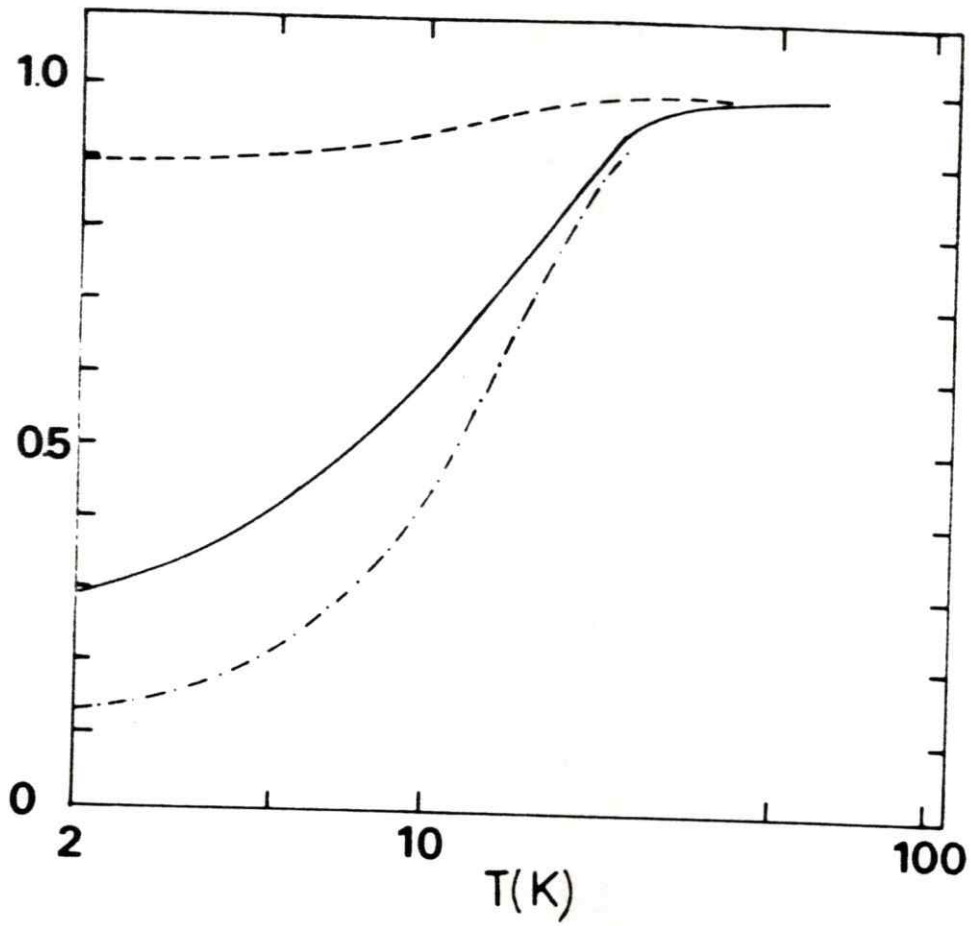


Figura 10. Efecto de tamaño hipotético en el coeficiente  $K_1$  para una lamina delgada de aluminio en función de la temperatura para el caso  $\delta = 5 \text{ au}$  y  $a = 0.1 \text{ au}$ : — aproximación nueva; - - - - aproximación de Maradudin; y - · - ·, aproximación de Soffer.

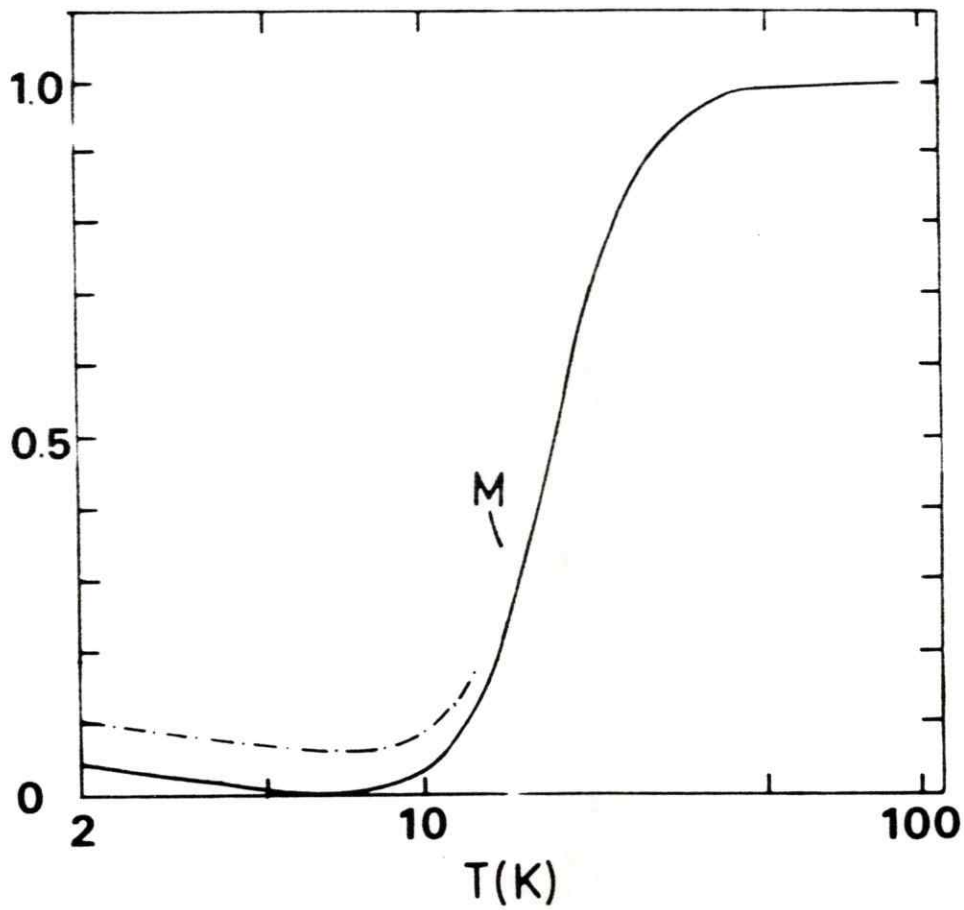


Figura 11. Lo mismo que la figura 10, excepto que el coeficiente Peltier del grueso no es estimado mediante la formula de Wilson, sino que se toma como constante igual a  $-0.12 \mu\text{V}$  (vease el texto).

como función de la temperatura para una lámina delgada de aluminio con un espesor de  $2.3 \mu\text{m}$ . Su conductividad eléctrica (junto con la correspondiente del grueso) ha sido tomada de la figura 3 del trabajo de Sambles, Elsom y Sharp-Dent (1980); su coeficiente de Peltier del grueso ha sido estimado mediante la fórmula de Interpolación de Wilson (1965)

$$\Pi = \frac{eL}{\xi} T^2 \left[ 1 + \frac{2\sigma_r}{\sigma_l} \left( 1 + \frac{1}{8\pi^2} \frac{J_7(\tau)}{J_5(\tau)} \right) \right], \quad (9.8)$$

en donde  $\sigma_r$  y  $\sigma_l$  son la conductividad residual e ideal, respectivamente, y

$$J_n(\tau) = \int_0^\tau \frac{z^n dz}{(e^z - 1)(1 - e^{-z})}, \quad (9.9)$$

el valor apropiado de  $\tau$  en (9,8) es  $\tau = \Theta_{\text{Debye}}/T$ . En la figura 7 se ha supuesto además, con propósitos ilustrativos, que  $\delta = 5 \text{ u.a.}$  y  $a = 0.1 \text{ u.a.}$ , y que las aproximaciones de Soffer, Maradudin y la aproximación nueva son aplicables por turnos. En este caso la mayor parte del efecto de tamaño —evidente solamente a temperaturas bajas— proviene de  $l_1$  y es entonces muy semejante al efecto de tamaño ordinario que afecta a  $K_0$  y a  $K_2$ . La figura 11 ha sido, por otro lado, obtenida suponiendo alternativamente que  $\delta = 5 \text{ u.a.}$  y que  $a = 5 \text{ u.a.}$ ; y que  $\Pi$  es aproximadamente constante en la región de interés (el valor  $\Pi = -0.12 \mu\text{V}$  ha sido elegido sólo con el propósito de maximizar la influencia del término adicional). La presencia de un mínimo en  $K_1/K_1^{(b)}$  es aquí evidente.

## 10. Conclusiones

Hemos presentado en este capítulo una nueva evaluación teórica de los efectos termoelectricos en películas delgadas y alambres finos, basada en un análisis detallado de la dispersión cuántica de los electrones por una superficie rugosa aleatoria. Estos resultados tienen una relevancia clara tanto para la interpretación de resultados experimentales como para la discusión de los méritos relativos de las teorías de los efectos de tamaño. En la primera de

estas direcciones, hemos visto que las expresiones teóricas para el coeficiente de Peltier y del poder termoeléctrico de un espécimen delgado incluyen un término que contiene la derivada del parámetro de especularidad con respecto a la energía. Este término ha sido usualmente despreciado en los análisis de los datos experimentales, aunque es del mismo orden de magnitud que aquellos que son incluidos. Además, la relación simple (8.6) entre estas cantidades y el coeficiente de resistencia con la temperatura es claramente errónea.

Por otra parte, las teorías de efecto de tamaño (de las cuales hay al menos cuatro: la de Fuchs (1938), Soffer (1967), Shen y Maradudin (1980), y la desarrollada en esta tesis) no pueden ser comparadas eficazmente solamente en cuanto a sus predicciones acerca de la conductividad eléctrica o térmica de muestras delgadas. Como los valores posibles del parámetro de especularidad están por necesidad acotados ( $0 < p < 1$ ); también lo están las discrepancias entre las diferentes teorías. Pero en los efectos de tamaño en el poder termoeléctrico o el coeficiente de Peltier interviene también la derivada de  $p$  con respecto a la energía; que puede exhibir, como se mostro antes (fig 2) una gran variación numérica al pasar de una teoría a otra. Por último, hemos mostrado que, aunque los efectos de tamaño ordinarios en las conductividades eléctricas y térmicas son por necesidad funciones monótonas de la temperatura y del espesor, el poder termoeléctrico y el coeficiente de Peltier pueden exhibir en ciertas circunstancias un mínimo (figura 11) --una característica ausente de las teorías basadas en la formulación de Fuchs.

Habría sido interesante aplicar estas consideraciones teóricas al análisis de resultados experimentales en metales nobles. Dos obstáculos impiden al presente la realización de este programa. En primer lugar, no existe en realidad datos en especímenes delgados tomados sobre un intervalo de temperatura suficientemente amplio, y acerca de los cuales se conozca en algún detalle las características superficiales. Además, nuestras ecuaciones (9.3), (9.5) y (9.6) han sido obtenidas suponiendo que la superficie de Fermi es esférica y que el libre camino medio es constante sobre ella --dos hipótesis que no son quizás apropiadas en el caso de los metales nobles. Ninguno de

estos obstáculos es, por cierto, de naturaleza fundamental. Se espera que investigaciones ahora en desarrollo darán nueva luz sobre este interesante tema.

### Apendice al capítulo II

Mostraremos aquí un algoritmo explícito para calcular el parámetro de especularidad  $p$  (ec. (6.12)) y su derivada con respecto a la energía  $p'$ . Comenzamos definiendo las cantidades adimensionales

$$\bar{a} = a k_F \quad , \quad \bar{\delta} = \delta k_F \quad , \quad (A.1)$$

en donde  $k_F$  es el vector de onda de Fermi. A partir de (2.6) tenemos que

$$p = \exp(-2 M_{KK}) \quad , \quad (A.2)$$

$$p' = -2 M'_{KK} p \quad . \quad (A.3)$$

La mejor manera de computar  $M_{KK}$  y  $M'_{KK}$  parece ser una expansión en series de potencias. Se encuentra, después de un cálculo sin incidentes, que

$$M^{(M)}_{KK} = (\bar{a}^2/2) S_0(\bar{a}/2) \quad (A.4)$$

$$M'^{(M)}_{KK} = (\bar{a}/2 \zeta) S'_0(\bar{a}/2) \quad (A.5)$$

para la aproximación de Maradudin (6.14), en donde

$$S_n(z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(n+1/2)!}{m! (n+m+3/2)!} z^{4m} (1-u^2)^m M(n+3/2, n+m+5/2, z^2), \quad (A.6)$$

$$S_n^s(z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(n+1/2)}{m! (n+m+3/2)!} z^{4m} (1-u^2)^m.$$

$$\begin{aligned} & \cdot \{ M(n+3/2, n+m+5/2, z^2) [2(n+m+1) - z^2(2-u^2)] + \\ & + M(n+5/2, n+m+7/2, z^2) \frac{(n+3/2)}{(n+m+5/2)} z^2 \}, \quad (A.7) \end{aligned}$$

en donde  $u$  es el coseno del ángulo de incidencia, y  $M(a, b, c)$  denota la función hipergeométrica confluyente (Abramowitz y Stegun 1965). Del mismo modo, la función completa (4.9) está dada por

$$\begin{aligned} M_{KK} &= (\bar{a}^2/2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\delta^{4n+2}}{(2n+1)! (2n+1)} u^{2n+1} \exp \left[ -\frac{\bar{a}^2 (2-u^2)}{4 (2n+1)} \right] \cdot \\ & \cdot S_n^s \left( \frac{1}{2} \bar{a} [2n+1]^{1/2} \right), \quad (A.8) \end{aligned}$$

$$M_{KK}^s = (\bar{a}^2/2) \cdot$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\delta^{4n+2}}{(2n+1)! (2n+1)} u^{2n+1} \exp \left[ -\frac{\bar{a}^2 (2-u^2)}{4 (2n+1)} \right] S_n^s \left( \frac{1}{2} \bar{a} [2n+1]^{1/2} \right). \quad (A.9)$$



### III CONDICIONES DE FRONTERA PARA LA ECUACION DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN

**Resumen:** La ecuación de Schrödinger para un electrón cerca de una interfaz metal-metal o metal-vacío aleatoria es resuelta mediante teoría de perturbación de orden infinito. Las funciones de onda y las corrientes de probabilidad son promediadas sobre todas las realizaciones de la interfaz, caracterizada por la amplitud RMS de su rugosidad y la longitud de correlación lateral, y los resultados son usados para obtener condiciones de frontera simples para la ecuación de transporte de Boltzmann. Estas tienen la forma de coeficientes de transmisión y reflexión, que son generalizaciones del parámetro de reflectividad  $p$  de Fuchs; pero están dados como funciones explícitas de propiedades observables de la interfaz. Además, estos resultados se aplican aquí al cálculo de la conductividad eléctrica de películas y láminas delgadas y a sobrecapas metálicas.

#### 1. Introducción

La mayoría de los tratamientos cuantitativos de efectos de tamaño y superficies en las propiedades de transporte en sólidos han estado en el pasado basados en métodos semiclásicos (Sondheimer 1952; Chambers 1966), en los cuales la ecuación de Boltzmann es resuelta en conjunción con condiciones de frontera de Fuchs (1938). Estas afirman que en cada superficie del espécimen, una fracción fija  $p$  ( $0 \leq p \leq 1$ ) de los electrones incidentes es reflejada especularmente, mientras que el resto es dispersado hacia la distribución de electrones en equilibrio.

En un principio, esta reflectividad  $p$  era considerado un parámetro fenomenológico que podía ser variado libremente para ajustar los resultados teóricos a los experimentales. A medida que la precisión de los datos aumentó, sin embargo, se hizo cada vez más evidente que la naturaleza física del proceso de dispersión por las superficies debía ser considerada más seriamente. Parrot (1965), por ejemplo, encontró que los efectos de tamaño en Bi podían ser explicados solamente suponiendo que  $p$  depende fuertemente del ángulo de incidencia  $\Theta$ ; de tal modo que se puede tomar  $p = 0$  para  $\Theta < \Theta_c$  y  $p = 1$  para  $\pi/2 > \Theta > \Theta_c$ , en donde  $\Theta_c$  es un cierto ángulo crítico. Brändli y Cotti (1965) usaron una reflectividad de la misma forma en el estudio de

resistencia para corrientes inducidas en películas delgadas.

Ziman (1962) calculó la dispersión cuántica de los electrones de conducción por las asperezas superficiales. Como la estructura detallada de la superficie es, por lo general, desconocida, Ziman la caracterizó mediante parámetros estadísticos, suponiendo que la elongación de la superficie real en comparación con una superficie plana y la función de autocorrelación de la superficie son gaussianas. A partir del espectro angular de la onda reflejada, Ziman extrajo una fórmula para la reflectividad  $p$  como función de estos parámetros. Soffer (1970, 1977) generalizó los cálculos de Ziman al considerar ángulos de incidencias distintos del normal y exigiendo un cumplimiento estricto de la ley de conservación de partículas. Un cálculo de alcance semejante fue realizado por Fal'kovskii (1970a, 1970b y 1983), quien resolvió aproximadamente la ecuación de Boltzmann en presencia de una superficie compuesta de secciones planas aleatorias de características promedio conocidas.

Greene (1966), por otro lado, investigó las propiedades de dispersión de superficies con rugosidades menores que la longitud de onda de los electrones, y derivó condiciones de frontera significativamente diferentes de las de Fuchs. Las condiciones de Greene están expresadas en términos de otro parámetro, diferente de la reflectividad  $p$ , llamado la *reflectividad cinética* y que es siempre menor que aquella. En el hecho, en el cálculo que hace Greene y O'Donnell (1966) de la dispersión de electrones por cargas superficiales aleatorias en semiconductores, la especularidad cinética manifiesta una dependencia angular muy fuerte, mientras que  $p$  es prácticamente una constante.

Durante mucho tiempo, las condiciones de frontera de Soffer fueron consideradas las mejores disponibles. Estas han sido aplicadas al cálculo de la conductividad eléctrica de películas delgadas (Soffer 1967), alambres finos (Sambles, Elsom y Preist 1982), efectos termoelectrónicos en películas delgadas (Sambles y Preist 1984), etc. Se ha encontrado que, al contrario de las teorías basadas en las condiciones de Fuchs, los cálculos que utilizan la

reflectividad de Soffer no requieren de suposiciones poco físicas para proporcionar un ajuste satisfactorio con los experimentos (Sambles, Elsom y Preist 1982; Sambles y Preist 1984; Sambles y Elsom 1980; Sambles y Preist 1982; Stesmans 1982; Sambles, Elsom y Jarvis 1982; Stesmans 1983; Sambles y Elsom 1985).

Recientemente se ha encontrado otra expresión explícita para la reflectividad  $p$ , dependiente del ángulo, que generaliza la fórmula de Soffer. Esta ha sido aplicada al cálculo de propiedades de transporte de películas delgadas y alambres finos de la manera explicada en los capítulos precedentes. Estos resultados serán además discutidos más adelante (en la sección 16).

Todos estas consideraciones se aplican solamente a la dispersión de electrones para una interfaz sólido-vacío; pero es claro que tiene una importancia comparable la dispersión en la interfaz entre dos sólidos. Por ejemplo, existe una considerable cantidad de investigación experimental en la influencia de sobrecapas metálicas delgadas en la resistividad eléctrica de varios metales (Lucas 1964; Chopra y Randlett 1967; Lucas 1968; Berman y Juretschke 1971). La teoría correspondiente ha sido sin embargo desarrollada al costo de postular (por falta del análogo de las condiciones de frontera de Fuchs aplicables a este caso) que no hay dispersión alguna en la frontera entre los dos metales — una suposición extremadamente improbable.

En este capítulo obtendremos condiciones de frontera para la ecuación de transporte de Boltzmann en la forma de coeficientes de transmisión y reflexión dependientes del ángulo que, en el caso de una interfaz metal-vacío y en el límite de correlación lateral infinita, se reducen al resultado de Soffer (1967, 1970). Esto se hará resolviendo la ecuación de Schrödinger para un electrón en la vecindad de una superficie rugosa aleatoria por medio de un método perturbativo de orden infinito que generaliza un procedimiento empleado antes por Shen y Maradudin (1980). El método usado aquí y los resultados obtenidos tienen un paralelo estrecho con los expuestos en el capítulo I.

El resultado central de este capítulo son los coeficientes de transmisión y reflexión que serán encontrados en la sección 15. Estos se obtienen después de dos resumaciones de series infinitas complicadas. Es, creemos, notable que las formulas finales tengan una estructura comparativamente tan simple. Así, si el lector desea llegar al punto central de este trabajo sin tener que pasar antes a través de una oscura selva matemática, le es quizás permisible proceder desde este punto a la ecuación (15.4) donde estos resultados se muestran; y a la sección 16 en donde se aplican.

## 12. La función de onda de un electrón en la vecindad de una interfaz rugosa

En esta sección se calculará, mediante teoría de perturbación de orden infinito, la función de onda de un electrón de conducción que atraviesa un sistema compuesto por dos metales unidos en una superficie irregular. Los metales, que serán llamados de aquí en adelante A y B (fig. 12), llenan los semiespacios  $z < \xi(x,y)$  y  $z > \xi(x,y)$  respectivamente, donde la función  $\xi$  especifica la elongación de la superficie real de la ideal, que se supone es el plano  $x,y$ . Supondremos, además, que los metales están caracterizados por un potencial que toma valores constantes  $V_A$  y  $V_B$  a cada lado de la superficie --y que tiene, si es necesario, partes imaginarias iguales a  $\hbar/2\tau_A$  y  $\hbar/2\tau_B$ , en donde  $\tau_A$  y  $\tau_B$  son los tiempos de relajación respectivos.

En estas circunstancias, la función de onda  $\psi$  puede ser calculada por el método de perturbación de fronteras (Morse y Feshbach 1953). Se tiene que

$$\psi(x) \delta_{x,A} = \psi_A(x) + \lambda \int d^2 X_b [ \psi(x_b) D_1 G_A(x_b, x) - G_A(x_b, x) D \psi(x_b) ] \quad (12.1a)$$

$$\psi(x) \delta_{x,B} = \psi_B(x) + \lambda \int d^2 X_b [ -\psi(x_b) D_1 G_B(x_b, x) + G_B(x_b, x) D \psi(x_b) ] \quad (12.1b)$$

en donde  $X = x e_x + y e_y$  denota la componente vectorial de  $x = X + z e_z$  en el

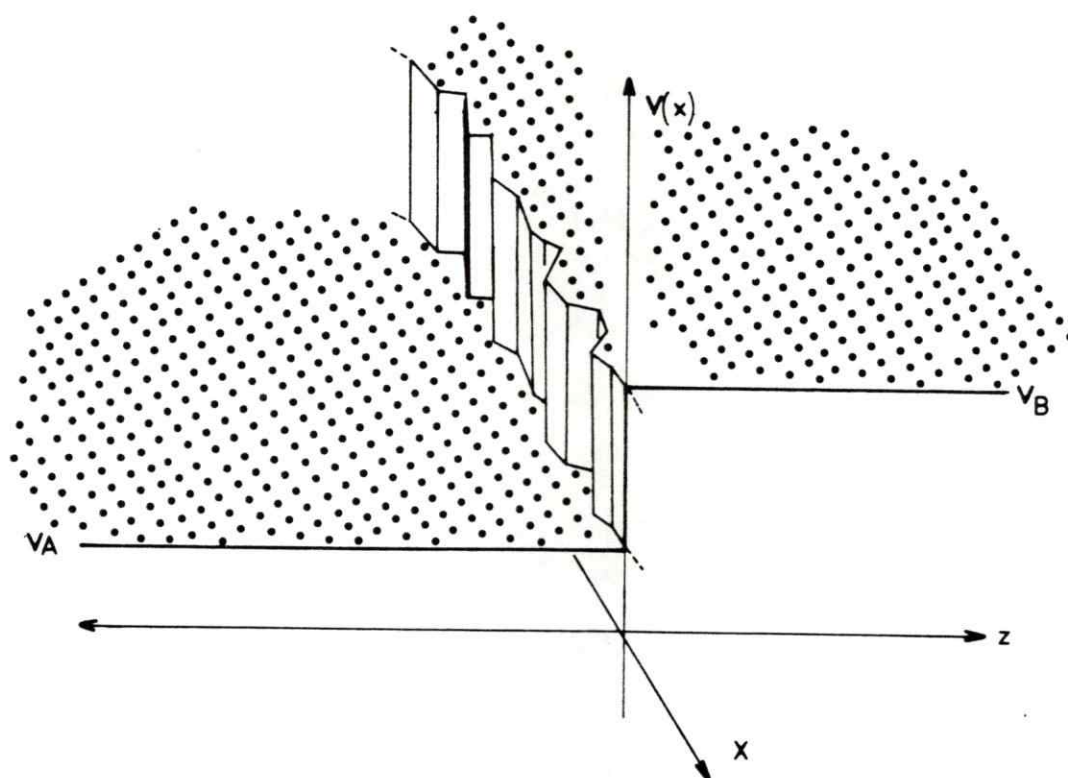


Figura 12. La interfaz entre los metales A y B es modelada por un potencial igual a  $V_A$  para  $z < \xi$ , y  $V_B$  para  $z > \xi$ , en donde  $\xi$  (la distancia de la superficie real de la ideal) es una función aleatoria de  $x, y$ .

plano de la superficie promedio;  $\lambda = \hbar^2/2m$ ; el símbolo  $\delta_{x,A}$  es igual a uno si el punto  $x$  esta en el metal A y es cero en otro caso (lo mismo vale para  $\delta_{x,B}$ );  $\psi_A$  y  $\psi_B$  son funciones fuentes dadas por

$$\psi_a(x) = \int \frac{d^2 K}{(2\pi)^2} e^{iKX} \psi_K^a(z) \quad (a = A, B) \quad (12.2)$$

$G_a$  ( $a = A, B$ ) denota la función de Green de un electrón en cada metal, que en el modelo simple adoptado aquí esta dada por

$$G_a(x, x') = \int \frac{d^2 K}{(2\pi)^2} \left[ \frac{-1}{2 \lambda \gamma_K^a} \right] \exp ( iKX - \gamma_K^a |z - z'| ), \quad (12.3)$$

y  $D\psi(x_b)$  es, excepto por factores de escala, la derivada normal de  $\psi$  evaluada en la superficie  $x_b = X + \xi(X) e_z$ , viz.

$$D \psi(x_b) = \left[ - \frac{\partial \xi(X)}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial \xi(X)}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right] \psi(x) \Big|_{x = x_b} \quad (12.4)$$

$[D_1 G(x_b, x')$  denota la misma derivada, pero aplicada al primer argumento de la función de Green]. En (12.2) y (12.3)  $K = k_x e_x + k_y e_y$  es un vector de dos dimensiones paralelo al plano  $z=0$ , y  $\gamma_K^a$  denota la función

$$\begin{aligned} \gamma_K^a &= [ K^2 + (-E_F + V_a) / \lambda ]^{1/2} \quad \text{si} \quad \lambda K^2 > E_F - V_a, \\ &= -i [ (E_F - V_a) / \lambda - K^2 ]^{1/2} \quad \text{en caso contrario.} \end{aligned} \quad (2.5)$$

en donde  $a=A, B$  y  $E_F$  es el valor de la energía de Fermi común a los dos metales en contacto.

Las dos incógnitas en (12.1) son las funciones  $\psi(x_b)$  y  $D \psi(x_b)$ . Estas serán determinadas ahora. Pongamos, primero,

\*

$$\psi(x) = \int \frac{d^2 K}{(2\pi)^2} e^{iKX} \psi_K(z) \quad (12.6a)$$

Tenemos, entonces, por (12.4) que

$$D \psi(x) = \int \frac{d^2 K}{(2\pi)^2} e^{iKX} [ -i (\nabla_X \xi) \psi_K(z) + \psi'(z) ] \quad ; \quad (12.6b)$$

y el par de ecuaciones (12.1) puede ser escrito

$$\begin{aligned} & \int \frac{d^2 K}{(2\pi)^2} e^{iKX} [ \psi_K(z) \delta_{x,A} - \psi_K^A(z) ] = \\ & = - \int d^2 Y \int \frac{d^2 K d^2 Q}{(2\pi)^4} e^{iKX} e^{i(Q-K)Y} \exp(-\gamma_K^A |\xi_Y - z|) \frac{1}{2 \gamma_K^A} \cdot \\ & \cdot \{ \psi_{Q,Y} [ i(K+Q) \cdot \nabla \xi_Y - \gamma_K^A \operatorname{sgn}(\xi_Y - z) ] - \psi'_{Q,Y} \} \quad (12.7b) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \int \frac{d^2 K}{(2\pi)^2} e^{iKX} [ \psi_K(z) \delta_{x,B} - \psi_K^B(z) ] = \\ & = \int d^2 Y \int \frac{d^2 K d^2 Q}{(2\pi)^4} e^{iKX} e^{i(Q-K)Y} \exp(-\gamma_K^A |\xi_Y - z|) \frac{1}{2 \gamma_K^B} \cdot \\ & \cdot \{ \psi_{Q,Y} [ i(K+Q) \cdot \nabla \xi_Y - \gamma_K^B \operatorname{sgn}(\xi_Y - z) ] - \psi'_{Q,Y} \} \quad (12.7b) \end{aligned}$$

en donde hemos usado la notación  $\xi_Y = \xi(Y)$ ,  $\psi_{Q,Y} = \psi_Q(\xi(Y))$ , y  $\psi'_{Q,Y} = \psi'_Q(\xi(Y))$ .

Procederemos ahora a resolver este par de ecuaciones integrales por un método que sigue ajustadamente al tratamiento de Shen y Maradudin (1980).. Comenzemos considerando el caso  $z > \xi_{max}$ . En esta región, las ecuaciones (12.7) se reducen a

★

$$\psi_K^A(z) = \frac{1}{2\gamma_K^A} \int d^2 Y \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} e^{i(Q-K)Y} \exp[-\gamma_K^A(z - \xi Y)] \cdot$$

$$\cdot \{ \psi_{Q,Y} [i(K+Q) \cdot \nabla \xi Y + \gamma_K^A] - \psi'_{Q,Y} \} , \quad (12.8a)$$

$$\psi_K(z) - \psi_K^B(z) = \frac{1}{2\gamma_K^B} \int d^2 Y \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} e^{i(Q-K)Y} \exp[-\gamma_K^B(z - \xi Y)] \cdot$$

$$\cdot \{ \psi_{Q,Y} [i(K+Q) \cdot \nabla \xi Y + \gamma_K^B] - \psi'_{Q,Y} \} , \quad (12.8b)$$

Estas ecuaciones serán resueltas por un método de aproximaciones sucesivas. Expandamos, primero,  $\psi_{Q,Y}$  y  $\psi'_{Q,Y}$  en series de potencias de la función  $\xi$ .

$$\psi_{Q,Y} = \psi^{(0)}_{Q,Y} + \psi^{(1)}_{Q,Y} + \psi^{(2)}_{Q,Y} + \dots \quad (12.9)$$

$$\psi'_{Q,Y} = \psi'^{(0)}_{Q,Y} + \psi'^{(1)}_{Q,Y} + \psi'^{(2)}_{Q,Y} + \dots$$

en donde  $\psi^{(n)}_{Q,Y}$  y  $\psi'^{(n)}_{Q,K}$  son de orden  $(\xi Y)^n$ . A orden cero, las ecuaciones (12.8) son

$$\psi_K^A(0) = (1/2\gamma_K^A) (\gamma_K^A \psi^{(0)}_K - \psi'^{(0)}_K) ,$$

$$\psi_K^{(0)} - \psi_K^B(0) = (1/2\gamma_K^B) (\gamma_K^B \psi^{(0)}_K + \psi'^{(0)}_K) .$$

Esto significa que

$$\psi^{(0)}_K = \frac{2}{\gamma_K^A + \gamma_K^B} (\gamma_K^A \psi_K^A(0) + \gamma_K^B \psi_K^B(0)) , \quad (12.10a)$$



$$\psi^{(0)}_K = \left[ \frac{-2 \gamma_K^A \gamma_K^B}{\gamma_K^A + \gamma_K^B} \right] (\psi_{K(0)}^A - \psi_{K(0)}^B) \quad (12.10b)$$

La versión de orden  $n$  ( $n > 0$ ) de (12.8a) es

$$0 = \int d^2 Y \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} e^{i(Q-K)Y} \sum_{m=0}^n \frac{(\gamma_K^A)^m}{m!} \{ [i(K+Q) (\gamma_K^A)^{-1} \nabla (\xi Y)^m + \\ + \gamma_K^A (\xi Y)^m] \psi_{Q,K}^{(n-m)} - (\xi Y)^m \psi_{Q,Y}^{(n-m)} \} \quad (12.11)$$

Para seguir adelante, es mejor reemplazar  $\psi_{Q,Y}^{(n)}$ ,  $\psi_{Q,K}^{(n)}$  y  $\xi^m Y$  por sus transformadas de Fourier respectivas

$$\tilde{\psi}_{Q,P}^{(n)} = \int d^2 Y e^{-iPY} \psi_{Q,Y}^{(n)} \quad ,$$

$$\tilde{\psi}_{Q,P}^{(n)} = \int d^2 Y e^{-iPY} \psi_{Q,Y}^{(n)} \quad , \quad (12.12)$$

$$\tilde{\xi}_P^{(n)} = \int d^2 Y e^{-iPY} (\xi Y)^n \quad .$$

Así, (12.11) se puede escribir

$$0 = \sum_{m=0}^n \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} \frac{(\gamma_K^A)^m}{m!} \{ [R \cdot (K+Q) (\gamma_K^A)^{-1} - \gamma_K^A] \tilde{\psi}_{Q,K-Q-R}^{(n-m)} + \\ + \tilde{\psi}_{Q,K-Q-R}^{(n-m)} \} \tilde{\xi}_R^{(m)} \quad (12.13)$$

Notamos que, como resultado de la última ecuación (12.12),  $\tilde{\xi}_R^{(0)} = (2\pi)^2 \delta(R)$ ; y que la ecuación (12.13) puede ser resuelta para una combinación lineal de  $\tilde{\psi}_{Q,K}^{(n)}$  y de  $\tilde{\psi}_{Q,K}^{(n)}$ . Así,

$$\begin{aligned} \gamma_{K+Q}^A \tilde{\psi}_{Q,K}^{(n)} - \tilde{\psi}_{Q,K}^{(n)} &= \\ &= \sum_{m=1}^n \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} \frac{(\gamma_{K+Q}^A)^m}{m!} \{ [(K-R) \cdot (2Q+K) (\gamma_{K+Q}^A)^{-1} - \gamma_{K+Q}^A] \tilde{\psi}_{Q,R}^{(n-m)} + \\ &\quad + \tilde{\psi}_{Q,R}^{(n-m)} \} \tilde{\xi}_{K-R}^{(m)}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \gamma_{K+Q}^B \tilde{\psi}_{Q,K}^{(n)} - \tilde{\psi}_{Q,K}^{(n)} &= \\ &= \sum_{m=1}^n \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} \frac{(\gamma_{K+Q}^B)^m}{m!} \{ [(K-R) \cdot (2Q+K) (\gamma_{K+Q}^B)^{-1} - \gamma_{K+Q}^B] \tilde{\psi}_{Q,R}^{(n-m)} + \\ &\quad + \tilde{\psi}_{Q,R}^{(n-m)} \} \tilde{\xi}_{K-R}^{(m)}, \end{aligned}$$

al aplicar las mismas consideraciones a la ecuación (12.8b). Este par de ecuaciones puede ahora ser resuelto explícitamente para  $\tilde{\psi}^{(n)}$  y  $\tilde{\psi}^{(n)}$ . El resultado es

$$\tilde{\psi}_{Q,K}^{(n)} = \sum_{m=1}^n \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} [C_{11}^{(m)} \tilde{\psi}_{Q,R}^{(n-m)} + C_{12}^{(m)} \tilde{\psi}_{Q,R}^{(n-m)}], \quad (12.14a)$$

$$\tilde{\psi}_{Q,K}^{(n)} = \sum_{m=1}^n \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} [C_{21}^{(m)} \tilde{\psi}_{Q,R}^{(n-m)} + C_{22}^{(m)} \tilde{\psi}_{Q,R}^{(n-m)}] \quad (12.14b)$$

en donde

$$C_{11}^{(m)} = (\gamma_{K+Q}^A + \gamma_{K+Q}^B)^{-1} (\tilde{\xi}_{K-R}^{(m)} / m!).$$

$$\cdot \{ (\gamma_{K+Q}^A)^m T_A - (\gamma_{K+Q}^B)^m T_B \},$$

\*

$$C_{12}^{(m)} = (\gamma_{K+Q}^A - \gamma_{K+Q}^B)^{-1} (\xi_{K-R}^{(m)}/ml) \{ (\gamma_{K+Q}^A)^m - (\gamma_{K+Q}^B)^m \}$$

$$C_{21}^{(m)} = (\gamma_{K+Q}^A - \gamma_{K+Q}^B)^{-1} (\tilde{\xi}_{K-R}^{(m)}/ml) \cdot \{ (\gamma_{K+Q}^A)^m \gamma_{K+Q}^B - (\gamma_{K+Q}^B)^m \gamma_{K+Q}^A \}$$

$$C_{22}^{(m)} = (\gamma_{K+Q}^A - \gamma_{K+Q}^B)^{-1} (\tilde{\xi}_{K-R}^{(m)}/ml) \cdot \{ (\gamma_{K+Q}^A)^m \gamma_{K+Q}^B - (\gamma_{K+Q}^B)^m \gamma_{K+Q}^A \} \quad (12.15)$$

y

$$T_a = (K-R) \cdot (2Q+K) (\gamma_{K+Q}^a)^{-1} + \gamma_{K+Q}^a \quad (a = A, B)$$

Es claramente ventajoso en este punto introducir una notación matricial adecuada. Definimos

$$\tilde{\psi}_{Q,K}^{(n)} = \begin{bmatrix} \tilde{\psi}_{Q,K}^{(n)} \\ \tilde{\psi}_{Q,K}^{(n)} \end{bmatrix} \quad (12.16)$$

y

$$C_{Q,K,R}^{(m)} = \begin{bmatrix} C_{11}^{(m)} & C_{12}^{(m)} \\ C_{21}^{(m)} & C_{22}^{(m)} \end{bmatrix} \quad (12.17)$$

Así, las ecuaciones (12.14) se pueden escribir

★

$$\tilde{\Psi}_{Q,K}^{(n)} = \sum_{m=1}^n \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} C_{Q,K,R}^{(m)} \tilde{\Psi}_{Q,R}^{(n-m)} ;$$

y, como consecuencia de (12.9), viz.

$$\tilde{\Psi}_{Q,K} = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{\Psi}_{Q,K}^{(n)} ,$$

tenemos que

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}_{Q,K} = & \tilde{\Psi}_{Q,K}^{(0)} + \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} C_{Q,K,R} \tilde{\Psi}_{Q,R}^{(0)} + \\ & + \int \frac{d^2 R d^2 R'}{(2\pi)^4} C_{Q,K,R} C_{Q,R,R'} \tilde{\Psi}_{Q,R'}^{(0)} + \\ & + \int \frac{d^2 R d^2 R' d^2 R''}{(2\pi)^6} C_{Q,K,R} C_{Q,R,R'} C_{Q,R',R''} \tilde{\Psi}_{Q,R''}^{(0)} + \dots \end{aligned} \quad (12.18)$$

en donde

$$\tilde{\Psi}_{Q,R}^{(0)} = (2\pi)^2 \delta(R) \tilde{\Psi}_Q^{(0)} = (2\pi)^2 \delta(R) \begin{bmatrix} \psi^{(0)} \\ Q \\ \psi^{(0)} \\ Q \end{bmatrix} \quad (12.19)$$

por (12.10); y

$$C_{Q,K,R} = \sum_{m=1}^{\infty} C_{Q,K,R}^{(m)} . \quad (12.20)$$

La transformada de Fourier

★

$$\Psi_{Q,Y} = \int \frac{d^3 K}{(2\pi)^3} e^{iKY} \tilde{\Psi}_{Q,K}$$

de la serie perturbativa (12.18) determina, al menos formalmente, las dos incógnitas que aparecen en las ecuaciones (12.1). A su vez, estas determinan la función de onda de un electrón en el sistema completo. Notamos, además, que la matriz  $C_{Q,K,R}$  (en cuyas potencias se expande aquí  $\Psi_{Q,K}$ ) está dada por una fórmula explícita, porque en este caso la suma (12.20) se puede realizar exactamente. El resultado es

$$C_{Q,K,R} = a_{Q,K,R} \tilde{f}^{A^{(+)}}_{K+Q,K-R} + b_{Q,K,R} \tilde{f}^{B^{(+)}}_{K+Q,K-R} \quad , \quad (12.21)$$

por (12.15), en donde,

$$a_{Q,K,R} = (Y^A_{K+Q} - Y^B_{K+Q})^{-1} \begin{vmatrix} T_A & 1 \\ Y^B_{K+Q} T_A & Y^B_{K+Q} \end{vmatrix} \quad (12.22a)$$

$$b_{Q,K,R} = (Y^A_{K+Q} - Y^B_{K+Q})^{-1} \begin{vmatrix} -T_B & -1 \\ -Y^A_{K+Q} T_B & -Y^A_{K+Q} \end{vmatrix} \quad (12.22b)$$

y

\*

$$\begin{aligned}
 f_{K,P}^{a(\pm)} &= \int d^2 X e^{-iPX} f_{K,X}^{a(\pm)} \\
 &= \int d^2 X e^{-iPX} \{ \exp(\pm \gamma_K^a \xi_X) - 1 \} \quad (\alpha=A,B) \quad (12.23)
 \end{aligned}$$

### 13. La funcion de onda promedio

Al igual que en la seccion 4 y por las mismas razones, calcularemos aqui el promedio de la funcion de onda sobre una asamblea de realizaciones de diferentes perfiles superficiales cuyas propiedades estadisticas se suponen gaussianas [ecuaciones (4.1) y (4.2)]. Por (12.18) y la primera ecuacion (12.19) se tiene que

$$\begin{aligned}
 \langle \tilde{\Psi}_{Q,K} \rangle &= \{ (2\pi)^2 \delta(K) + \langle C_{Q,K,0} \rangle + \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} \langle C_{Q,K,R} C_{Q,R,0} \rangle + \\
 &+ \int \frac{d^2 R d^2 R'}{(2\pi)^4} \langle C_{Q,K,R} C_{Q,R,R'} C_{Q,R',R''} \rangle + \dots \} \Psi^{(0)}_Q \quad . \quad (13.1)
 \end{aligned}$$

Notamos que

$$\begin{aligned}
 \langle C_{Q,K,0} \rangle &= a_{Q,K,0} \langle \tilde{f}^{A(4)}_{K+Q,K} \rangle + b_{Q,K,0} \langle \tilde{f}^{B(4)}_{K+Q,K} \rangle \\
 &= C_{Q,0,0} (2\pi)^2 \delta(K) \quad ,
 \end{aligned}$$

por (12.21) y la primera ecuacion (4.4); en donde hemos usado la abreviatura

$$C_{Q,R,R} = a_{Q,R,R} \tilde{f}^A_{Q+R} + b_{Q,R,R} \tilde{f}^B_{Q+R} \quad (13.2)$$

Ademas,

$$\langle C_{Q,K,R} C_{Q,R,0} \rangle = a_{Q,K,R} a_{Q,R,0} \langle \tilde{f}^{A(4)}_{K+Q,K-R} \tilde{f}^{A(4)}_{R+Q,R} \rangle + \dots$$

$$= a_{Q,K,R} a_{Q,R,0} \{ (F^A_Q)^2 (2\pi)^2 \delta(K-R) \delta(R) - \\ - b_{Q,R+Q} \tilde{F}^{(+)A,A}_{Q,R+Q}(K-R) (2\pi)^2 \delta(K) \} + \dots$$

por la segunda fórmula (4.4); si retenemos términos solo hasta primer orden en  $F$ . Si introducimos todos estos términos en (13.1), encontramos que las series infinitas que resultan de aquí son todas geométricas y pueden sumarse exactamente. El resultado es

$$\langle \tilde{\Psi}_{Q,K} \rangle = \langle \Psi_Q \rangle (2\pi)^2 \delta(K) \quad (13.3)$$

con

$$\langle \Psi_Q \rangle = \left\{ 1 - \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} [ a_{Q,0,R} a_{Q,R,0} \tilde{F}^{(+)A,A}_{Q+R,Q}(R) + \right. \\ + a_{Q,0,R} b_{Q,R,0} \tilde{F}^{(+)B,A}_{Q+R,Q}(R) + b_{Q,0,R} a_{Q,R,0} \tilde{F}^{(+)A,B}_{Q+R,Q}(R) + \\ \left. + b_{Q,0,R} b_{Q,R,0} \tilde{F}^{(+)B,B}_{Q+R,Q}(R) \right] \} h_{Q,0,0} \Psi^{(0)}_Q + O(F^2) \quad (13.4)$$

en donde

$$h_{Q,R,R} = 1 + C_{Q,R,R} + (C_{Q,R,R})^2 + \dots \\ = (1 - C_{Q,R,R})^{-1},$$

esto es,

$$h_{Q,R,R} = [\tilde{e}^A_S \tilde{e}^B_S (\gamma^A_S + \gamma^B_S)]^{-1}.$$

$$\cdot \left[ \begin{array}{cc} \gamma^A_S \tilde{e}^B_S - \gamma^B_S \tilde{e}^A_S & \tilde{e}^A_S - \tilde{e}^B_S \\ -\gamma^A_S \gamma^B_S (\tilde{e}^A_S - \tilde{e}^B_S) & \gamma^A_S \tilde{e}^A_S - \gamma^B_S \tilde{e}^B_S \end{array} \right] \quad (13.5)$$

con  $S = Q + R$ , por (13.2) y (12.22).

Existen algunas relaciones interesantes entre las matrices  $h$ ,  $a$  y  $b$ .  
Notamos, primero, que

$$h_{Q,R,R} a_{Q,0,0} = (\bar{g}^A Q)^{-1} a_{Q,0,0} \quad , \quad (13.6a)$$

$$h_{Q,R,R} b_{Q,0,0} = (\bar{g}^B Q)^{-1} b_{Q,0,0} \quad , \quad (13.6b)$$

como puede comprobarse facilmente. (Estas relaciones han sido ya usadas para simplificar la formula (13.4)). En el caso especial  $R=R^*=0$  encontramos, además, que

$$a_{Q,0,0} h_{Q,0,0} = (\bar{g}^A Q)^{-1} a_{Q,0,0} \quad , \quad (13.7a)$$

$$b_{Q,0,0} h_{Q,0,0} = (\bar{g}^B Q)^{-1} b_{Q,0,0} \quad (13.7b)$$

y que

$$a_{Q,0,0} a_{Q,0,0} = - a_{Q,0,0} \quad , \quad (13.8a)$$

$$a_{Q,0,0} b_{Q,0,0} = b_{Q,0,0} a_{Q,0,0} = 0 \quad , \quad (13.8b)$$

$$b_{Q,0,0} b_{Q,0,0} = - b_{Q,0,0} \quad . \quad (13.8c)$$

Retornemos, ahora, a la ecuacion (13.4). Notamos, primero, que cada una de las funciones  $F$  varia mucho mas rapidamente con  $R$  que su factor correspondiente. En particular, como  $F_{Q+R,Q}^{A,A}(R)$  esta concentrada casi enteramente alrededor de  $R=0$  para los casos de interes, es permisible hacer la aproximacion

$$\int \frac{d^4 R}{(2\pi)^4} a_{Q,0,R} a_{Q,R,0} \tilde{F}^{(+)A,A}_{Q+R,Q}(R) =$$



$$= a_{Q,0,0} a_{Q,0,0} \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} \tilde{F}^{(+)A,A}_{Q+R,Q}(R)$$

$$= - a_{Q,0,0} \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} \tilde{F}^{(+)A,A}_{Q+R,Q}(R)$$

por (3.8a). Los cuatro términos de (13.4) pueden ser simplificados de este modo; y obtenemos la fórmula final

$$\langle \Psi_Q \rangle = \left\{ 1 + \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} \left[ a_{Q,0,0} \tilde{F}^{(+)A,A}_{Q+R,Q}(R) + \right. \right.$$

$$\left. \left. + b_{Q,0,0} \tilde{F}^{(+)B,B}_{Q+R,Q}(R) \right] \right\} h_{Q,0,0} \Psi^{(0)}_Q. \quad (13.9)$$

Calcularemos ahora la función de onda promedio para un electrón que se desplaza en el metal A. Para  $z < \xi_{\text{min}}$ , se tiene de (12.7) que

$$\psi_K(z) = \psi^A_K(z) - \frac{1}{2\gamma^A_K} \int d^2 Y \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} e^{-i(Q-K)Y} \exp[-\gamma^A_K(\xi_Y - z)]$$

$$\cdot \{ \psi_Q(\xi_Y) [ i(K+Q) \cdot \nabla \xi_Y - \gamma^A_K ] - \psi'_Q(\xi_Y) \}, \quad (13.10)$$

esto es, promediando sobre todas las representaciones del perfil de rugosidades  $\xi$ ,

$$\langle \psi_K \rangle = \psi^A_K(z) + \int d^2 Y \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} e^{i(Q-K)Y} S^A_{K,Q} \exp(\gamma^A_K z)$$

$$= \psi^A_K(z) + S^A_{K,K} \exp(\gamma^A_K z), \quad (13.11)$$

en donde

$$S^A_{K,Q} = (2\gamma^A_K)^{-1} \{ -i(K+Q) \cdot \langle \nabla \xi_Y \psi_Q, Y \rangle e^{A(-)}_{K,Y} + \gamma^A_K \langle \psi_Q, Y \rangle e^{A(-)}_{K,Y}$$

$$+ \langle \psi'_Q, Y \rangle e^{A(-)}_{K,Y} \}, \quad (13.12)$$

usando formulas semejantes a (4.3) y (4.4), pero para productos de funciones  $g$  y  $f$ . Estos promedios se pueden calcular mediante los mismos procedimientos utilizados antes. Se encuentra que

$$\begin{aligned} \langle \Psi_Q(\xi_Y) \exp(-\gamma_K^A \xi_Y) \rangle &= \langle \Psi_{Q,Y} \tilde{B}_{K,Y}^{A^{(-)}} \rangle = \\ &= \tilde{B}_K^A \{ \langle \Psi_Q \rangle - \int \frac{d^3 R}{(2\pi)^3} e^{iR(Y-Y')} [ a_{Q,R,0} \tilde{F}^{(-)A,A}_{Q+R,K(R)} + \\ &\quad + b_{Q,R,0} \tilde{F}^{(-)B,A}_{Q+R,K(R)} ] h_{Q,0,0} \Psi^{(0)}_Q \} + O(F^2), \end{aligned}$$

en términos de las cantidades definidas anteriormente. Así,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{Q,Y} \tilde{B}_{K,Y}^{A^{(-)}} \rangle &= \tilde{B}_K^A \{ \langle \Psi_Q \rangle - \int \frac{d^3 R}{(2\pi)^3} [ a_{Q,R,0} \tilde{F}^{(-)A,A}_{Q+R,K(R)} + \\ &\quad + b_{Q,R,0} \tilde{F}^{(-)B,B}_{Q+R,K(R)} ] h_{Q,0,0} \Psi^{(0)}_Q \} \\ &= \tilde{B}_K^A \{ \langle \Psi_Q \rangle - \int \frac{d^3 R}{(2\pi)^3} [ a_{Q,0,0} \tilde{F}^{(-)A,A}_{Q+R,K(R)} + \\ &\quad + b_{Q,0,0} \tilde{F}^{(-)B,A}_{Q+R,K(R)} ] h_{Q,0,0} \Psi^{(0)}_Q \} \quad (13.13) \end{aligned}$$

con las mismas aproximaciones utilizadas al pasar de (13.4) a (13.9);

$$\begin{aligned} -i(K+Q) \cdot \langle \nabla \xi_Y \Psi_{Q,Y} \tilde{B}_{K,Y}^{A^{(-)}} \rangle &= i(K+Q) \cdot (\gamma_K^A)^{-1} \langle \Psi_{Q,Y} \nabla \tilde{B}_{K,Y}^{A^{(-)}} \rangle \\ &= -(\gamma_K^A)^{-1} \tilde{B}_K^A \int \frac{d^3 R}{(2\pi)^3} [(K+Q) \cdot R] [ a_{Q,R,0} \tilde{F}^{(-)A,A}_{Q+R,K(R)} + \\ &\quad + b_{Q,R,0} \tilde{F}^{(-)B,A}_{Q+R,K(R)} ] h_{Q,0,0} \Psi^{(0)}_Q + O(F^2) \\ &= 0 \quad (13.14) \end{aligned}$$

con la misma precisión.

Disponemos ahora de todos los ingredientes necesarios para calcular  $S_{K,K}$ . Definamos, primero, el operador  $P_K^A$ , cuyo dominio de definición son todas las matrices de 1 por 2, de acuerdo con

$$P_K^A \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \equiv a_1 + a_2 / \gamma_K^A .$$

Así, por (13.18-20)

$$\begin{aligned} 2S_{K,K}^A &= P_K^A \langle \Psi_{K,Y} B^{A(-)}_{K,Y} \rangle \\ &= \bar{B}_K^A P_K^A \left[ 1 + \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} [a_{K,0,0} (\tilde{F}_{K+R,K}^{(+)}{}^{A,A}(R) - \tilde{F}_{K+R,K}^{(-)}{}^{A,A}(R)) + \right. \\ &\quad \left. + b_{K,0,0} (\tilde{F}_{K+R,R}^{(+)}{}^{B,B}(R) - \tilde{F}_{K+R,R}^{(-)}{}^{B,A}(R))] \right] h_{K,0,0} \Psi^{(0)}_K, \quad (13.15) \end{aligned}$$

a partir de (13.9) y (13.11). Pero

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} P_K^A h_{K,0,0} \Psi^{(0)}_K &= \frac{\gamma_K^A + \gamma_K^B}{2 \bar{B}_K^A (\gamma_K^A - \gamma_K^B)} [\Psi^{(0)}_K - (\gamma_K^A)^{-1} \psi^{(0)}_K] \\ &\quad - \frac{2 \gamma_K^B}{\bar{B}_K (\gamma_K^A - \gamma_K^B)} [\Psi^{(0)}_K - (\gamma_K^B)^{-1} \psi^{(0)}_K] , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} P_K^A a_{K,0,0} h_{K,0,0} \Psi^{(0)}_K &= \\ &= - \frac{\gamma_K^A + \gamma_K^B}{2 \bar{B}_K^A (\gamma_K^A - \gamma_K^B)} [\Psi^{(0)}_K - (\gamma_K^B)^{-1} \psi^{(0)}_K] , \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
 {}^i P^A_{K,0,0} b_{K,0,0} h_{K,0,0} \Psi^{(0)}_K &= \\
 &= \frac{\gamma^K_B}{\xi^K_B (\gamma^K_A - \gamma^K_B)} [\psi^{(0)}_K - (\gamma^K_B)^{-1} \psi^{(0)}_K],
 \end{aligned}$$

como resultado de las formulas explícitas (12.19),(12.22) y (13.5). Así, tenemos a partir de (13.14) que

$$\begin{aligned}
 S^A_{K,K} &= \frac{1}{2} \frac{\gamma^K_A + \gamma^K_B}{\gamma^K_A - \gamma^K_B} [\psi^{(0)}_K - (\gamma^K_A)^{-1} \psi^{(0)}_K] [1 - M^A_K] \\
 &- \left[ \begin{array}{c} -A \\ \xi^K_A \\ -B \\ \xi^K_B \end{array} \right] \frac{\gamma^K_B}{\gamma^K_A - \gamma^K_B} [\psi^{(0)}_K - (\gamma^K_B)^{-1} \psi^{(0)}_K] [1 - N^{A,B}_K]
 \end{aligned} \tag{13.16}$$

en donde

$$M^A_K = \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} [F^{(+)}_{K+R,K}(R) - F^{(-)}_{K+R,K}(R)] \tag{13.17}$$

$$N^{A,B}_K = \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} [F^{(+)}_{K+R,K}(R) - F^{(-)}_{K+R,K}(R)] \tag{13.18}$$

De acuerdo con (12.10),

$$\psi^{(0)}_K - (\gamma^K_A)^{-1} \psi^{(0)}_K = 2 \psi^A_{K(0)} \tag{13.19a}$$

$$\begin{aligned}
 \psi^{(0)}_K - (\gamma^K_B)^{-1} \psi^{(0)}_K &= \\
 &= (\gamma^K_A + \gamma^K_B)^{-1} [4\gamma^K_A \psi^A_{K(0)} - 2(\gamma^K_A - \gamma^K_B) \psi^B_{K(0)}],
 \end{aligned} \tag{13.19b}$$

de modo tal que el número  $S$  dado por (13.16) está determinado por los valores de las fuentes  $\psi^A$  y  $\psi^B$  en  $z = 0$ . Notamos, además, que esta ecuación ha sido obtenida aquí como una aproximación de primer orden a la expansión ordinaria del promedio de  $S^A_{K,K}$  en series de potencias de  $F$ . Pero Shen y Maradudin (1980) han mostrado que la ecuación (13.16) debe ser, por el contrario, interpretada como una aproximación de primer orden a la expansión cumulante correspondiente, de modo que debemos escribir

$$\begin{aligned}
 S^A_{K,K} &= \\
 &= \left\{ \frac{\gamma^A_K + \gamma^B_K}{\gamma^A_K - \gamma^B_K} \exp(-M^A_K) - \right. \\
 &\quad \left. - \left[ \frac{\bar{B}^A_K}{\bar{B}^B_K} \right] \frac{4 \gamma^A_K \gamma^B_K}{(\gamma^A_K)^2 - (\gamma^B_K)^2} \exp(-N^{A,B}_K) \right\} \psi^A_{K(0)} + \\
 &\quad + \left[ \frac{\bar{A}^A_K}{\bar{B}^B_K} \right] \frac{2 \gamma^B_K}{\gamma^A_K + \gamma^B_K} \exp(-N^{A,B}_K) \psi^B_{K(0)},
 \end{aligned}$$

en donde hemos incorporado los resultados (13.19). Notamos, por último, que la serie (13.1) — y, en el hecho, todas las consideraciones precedentes — son estrictamente válidas solo en el límite  $\gamma^B_K \gg \gamma^A_K$ . Así, podemos escribir

$$\begin{aligned}
 S^A_{K,K} &= \frac{\gamma^A_K - \gamma^B_K}{\gamma^A_K + \gamma^B_K} \exp(-M^A_K) \psi^A_{K(0)} + \\
 &\quad + \left[ \frac{\bar{A}^A_K}{\bar{B}^B_K} \right] \frac{2 \gamma^B_K}{\gamma^A_K + \gamma^B_K} \exp(-N^{A,B}_K) \psi^B_{K(0)}, \quad (13.20)
 \end{aligned}$$

mas un término

$$\Delta S = 4 \gamma_K^A \gamma_K^B [(\gamma_K^A)^2 - (\gamma_K^B)^2]^{-1} \cdot [\exp(-M_K^A) - (\bar{g}_K^A / \bar{g}_K^B) \exp(-N_K^{A,B})] \psi_K^A(0) .$$

De aquí en adelante despreciaremos  $\Delta S$  porque es claramente nulo en el límite mencionado antes. Así, la expresión (13.20) representa nuestra aproximación final para  $S_{K,K}^A$ . La expresión correspondiente para  $S_{K,K}^B$  -- y por lo tanto, la función de onda promedio para un electrón moviéndose en el metal B -- se obtiene a partir de las formulas precedentes intercambiando en todas partes A por B.

#### 14. La corriente promedio

En esta sección calcularemos los coeficientes de dispersión de la interfaz rugosa aleatoria. Esto se hará, al igual que en la sección 5, a partir de las corrientes incidentes, reflejadas y transmitidas. Supongamos, entonces, que las fuentes están enteramente en la región A, esto es, ponemos  $\psi^A(0) = 1$  y  $\psi^B(0) = 0$  en (12.10). Consideraremos aquí solamente el caso en que  $\gamma^A$  y  $\gamma^B$  son ambos imaginarios puros --no hay dificultad intrínseca en tratar el caso general, pero las fórmulas que se obtienen son enormemente más complicadas. Entonces, como el coeficiente de reflexión está dado por el cociente entre la corriente dispersada en A sobre la corriente incidente (Landau y Lifshitz 1958), tenemos que

$$R_K = \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} |S_{Q,K}^A|^2 \int d^2 Y e^{i(K-Q)Y} \exp\{H_{Q,Q,K}^A(Y)\} , \quad (14.1a)$$

en donde el significado aquí de la función H es el mismo que en las formulas que siguen a (5.4). Del mismo modo, el coeficiente de transmisión para una partícula que atraviesa la interfaz de A a B es

★

$$T_K = \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \left[ \frac{Y_K^B}{Y_K^A} \right] |S_{Q,K}^B|^2 \int d^2 Y e^{i(K-Q)Y} \exp\{H_{Q,Q,K}^B(Y)\} \quad (14.1b)$$

Del mismo modo que antes, definimos aquí las intensidades reflejadas y transmitidas  $I_{Q,K}^{(r)}$ ,  $I_{Q,K}^{(t)}$  por (14.1) y

$$R_K = \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} I_{Q,K}^{(r)} \quad (14.2a)$$

$$T_K = \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} I_{Q,K}^{(t)} \quad (14.2b)$$

Estas cantidades dan, respectivamente, las intensidades transmitidas y reflejadas en las direcciones especificadas por un valor  $\hbar Q$  de la componente paralela del momentum de un electron que ha llegado a la interfaz, proveniente del metal A, viajando en una direccion especificada en forma semejante por un vector  $\hbar K$ . La conservacion de particulas implica, como antes, una *condicion de unitariedad*  $R_K + T_K = 1$ , esto es

$$\int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} (I_{Q,K}^{(r)} + I_{Q,K}^{(t)}) = 1. \quad (14.3)$$

Esta relación se aplica, por supuesto, a las expresiones exactas para las intensidades, y no necesariamente a las versiones aproximadas que aparecen aquí. Inversamente, se puede utilizar la extensión con que se cumple esta identidad como un medio de calibrar los meritos (o deméritos) de las aproximaciones que hemos propuesto. Cuando se hace esto, se tienen conclusiones cualitativamente semejantes a las obtenidas en la sección 5 en una comparacion parecida. Estas no serán repetidas aquí.

Siguiendo a Shen y Maradudin (1980), separaremos aquí también la intensidad reflejada en una componente especular y otra difusa

★

$$I^{(r)}_{Q,K} = I^{(r,s)}_{Q,K} + I^{(r,d)}_{Q,K} \quad (14.4)$$

dadas por

$$I^{(r,s)}_{Q,K} = (2\pi)^2 \delta(K-R) |S^A_{K,K}|^2 \quad (14.5a)$$

$$I^{(r,d)}_{Q,K} = \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} |S^A_{Q,K}|^2 \int d^2 Y e^{i(K-Q)Y} \{ \exp(H^A_{Q,Q,K}(Y)) - 1 \} \quad (14.5b)$$

respectivamente, por (14.1). En forma correspondiente, podemos separar en la intensidad transmitida desde el metal A al B una contribución en la dirección de la trayectoria clásica, y una intensidad transmitida difusa. Si estas se denotan de nuevo por  $s$  y  $d$ , respectivamente, se tiene de (14.1b) que

$$I^{(t,s)}_{Q,K} = (2\pi)^2 \delta(K-Q) (\gamma^B_K / \gamma^A_K) |S^B_{K,K}|^2 \quad (14.6a)$$

$$I^{(t,d)}_{Q,K} = (\gamma^B_K / \gamma^A_K) |S^B_{Q,K}|^2 \int d^2 Y e^{i(K-Q)Y} \{ \exp(H^A_{Q,Q,K}(Y)) - 1 \}. \quad (14.6b)$$

La condición de unitariedad (14.3) implica que estas intensidades satisfacen dos reglas de suma

$$\int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \{ I^{(r,s)}_{Q,K} + I^{(r,d)}_{Q,K} \} = |S^A_{K,K}|^2 + (\gamma^B_K / \gamma^A_K) |S^B_{K,K}|^2,$$

$$\int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \{ I^{(r,d)}_{Q,K} + I^{(r,s)}_{Q,K} \} = 1 - |S^A_{K,K}|^2 - (\gamma^B_K / \gamma^A_K) |S^B_{K,K}|^2.$$

★



Trabajando del mismo modo que antes, se puede obtener formulas explicitas (Incluyendo terminos hasta de orden  $F^2$ ) para las funciones  $|S_{Q,K}|^2$  y  $H_{Q,Q,K}$ . Como estas formulas son bien complejas, y no seran usadas en lo que resta de este trabajo, no las escribiremos aqui.

### 15. Los coeficientes de reflexión y transmisión

Las condiciones de frontera de Fuchs (1938) para la función de distribución de Boltzmann  $f(x,v)$  en la vecindad de una superficie rugosa (figura 13a) es

$$f^{(-)}(x_b, v) = p f^{(+)}(x_b, v_R) + g \quad (15.1)$$

en donde  $x_b$  es un punto de la superficie,  $v_R$  es la velocidad de un electrón que ha sido reflejado especularmente en  $v$ ,  $g$  es la distribución de los electrones que han sido reflejados en forma completamente difusa (y es, entonces, independiente de la dirección de  $v$ ), y  $p$  es la función de reflectividad, dependiente eventualmente del ángulo de incidencia. Aquí, los índices +, - denotan las ramas de la función  $f$  correspondientes a los electrones que viajan desde o hacia la superficie, respectivamente.

La generalización inmediata de (15.1) para el caso de una interfaz rugosa entre A y B (figura 13b) es

$$f^{(-)}_A(x_b, v) = r_A f^{(+)}_A(x_b, v_R) + t_B f^{(-)}_B(x_b, v'_R) + g_A \quad (15.2a)$$

$$f^{(+)}_B(x_b, v) = t_A f^{(+)}_A(x_b, v'_R) + r_B f^{(-)}_B(x_b, v_R) + g_B \quad (15.2b)$$

en donde  $f_A, f_B$  son los valores de la función de distribución  $f$  en los metales A y B, respectivamente (la misma notación se aplica a  $g_A$  y  $g_B$ ),  $r_A$  denota la probabilidad que un electrón proveniente del metal A sea reflejado especularmente de nuevo en A, mientras que  $t_A$  denota la probabilidad análoga que un electrón atraviese la interfaz a lo largo de la trayectoria clásica -- lo

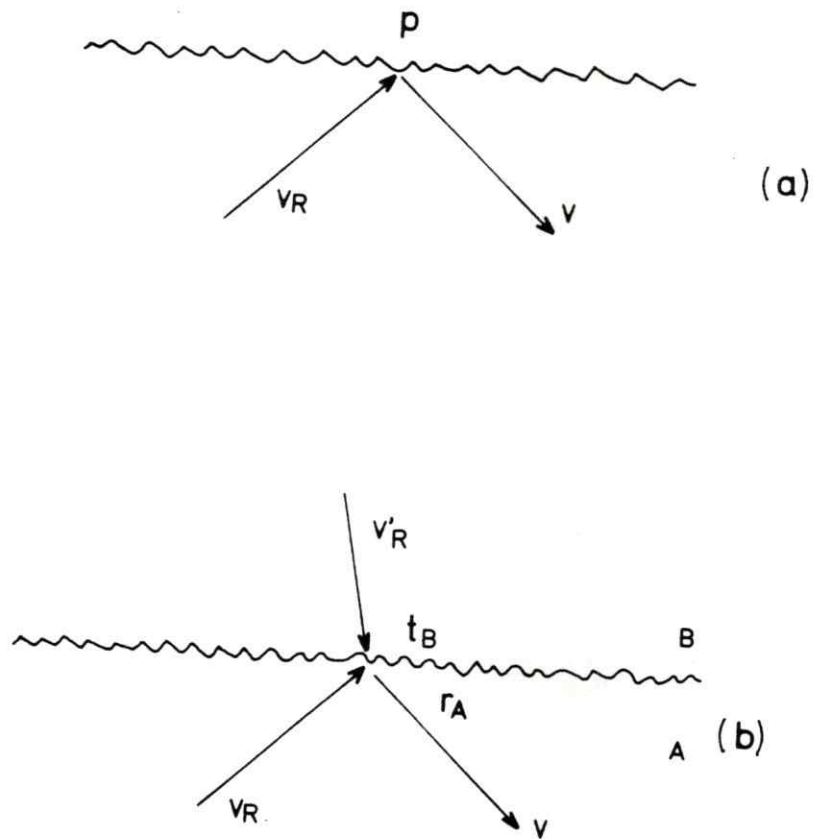


Figura 13. (a) En una interfaz metal-vacio  $p$  es la fraccion de electrones que son reflejados especularmente. (b) En una interfaz metal-metal,  $r_A$  es la fraccion de electrones provenientes del metal A que son reflejados especularmente de vuelta en A, mientras que  $t_B$  es la contribucion adicional a estos ultimos provenientes de B siguiendo la trayectoria clasica.

que implica una refracción de acuerdo a la ley de Snell, por (12.5)-- y que causa un cambio de velocidad de  $v_R$  en A a  $v$  en B, etc.

En el resto de esta sección obtendremos fórmulas explícitas para los coeficientes  $r$  y  $t$  en términos de propiedades observables de los metales A y B y de su interfaz. Notemos, primero, que tenemos aquí

$$f^{(-)}_A(x_b, v_K) = \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \{ I^{A(r)}_{K,Q} f^{(+)}_A(x_b, v_Q) + I^{B(t)}_{K,Q} f^{(-)}_B(x_b, v_Q) \}, \quad (15.3a)$$

$$f^{(+)}_B(x_b, v) = \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \{ I^{A(t)}_{K,Q} f^{(+)}_A(x_b, v_Q) + I^{B(r)}_{K,Q} f^{(-)}_A(x_b, v_Q) \}, \quad (15.3b)$$

en lugar de (15.2) --como consecuencia de los resultados de la sección anterior-- en donde  $I^{A(r)}$  e  $I^{A(t)}$  son las intensidades reflejadas y transmitidas con fuentes enteramente contenidas en el metal A, y  $I^{B(r)}$ ,  $I^{B(t)}$  son las mismas cantidades calculadas con las fuentes en B. A partir de la condición de unitariedad (14.3) encontramos que

$$\int \frac{d^2 K}{(2\pi)^2} \{ f^{(-)}_A(x_b, v_K) + f^{(+)}_B(x_b, v_K) \} = \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \{ f^{(+)}_A(x, v_Q) + f^{(-)}_B(x, v_Q) \},$$

ie, que el número de partículas se conserva después de ser estas dispersadas por la interfaz. Además, no aparece ninguna función difusa  $g$  explícitamente en este caso.

Quizás la forma más simple de obtener ecuaciones de la forma (15.2) a partir de (15.3) consiste en introducir la separación (14.5) en esta última fórmula, y de relegar todas las contribuciones difusas en la función  $g$

respectiva. Entonces, de acuerdo con (14.5) y (14.6), se tiene que

$$r_A(v_K) = R_K \exp(-2 M_K^A), \quad (15.4a)$$

$$t_A(v_K) = |\bar{g}_K^A / \bar{g}_K^B|^2 D_K \exp(-2 M_K^A) \quad (15.4b)$$

en donde  $M_K^A$  esta dado por (13.17),

$$M_K^A = 2 \int \frac{d^2 R}{(2\pi)^2} \int d^2 X e^{-iRX} \sinh[ d^2 |Y_K^A Y_K^B| W(X) ], \quad (15.5)$$

si se reemplazan los valores explicitos de  $\tilde{F}$  de acuerdo con (13.5), y  $\bar{g}_K^A, \bar{g}_K^B$  estan dados por (3.4). Ademas, por (13.20) y (12.10) se tiene que  $R_K$  y  $D_K$  son los coeficientes de transmision y reflexion cuanticos de una partícula por una pared de potencial rectangular (Landau y Lifshitz, 1958)

$$R_K = \frac{|Y_K^A - Y_K^B|^2}{|Y_K^A + Y_K^B|^2} \quad (15.6a)$$

$$D_K = \frac{4 |Y_K^A Y_K^B|}{|Y_K^A + Y_K^B|^2} \quad (15.6b)$$

Las formulas correspondientes para  $r_B$  y  $r_A$  se obtienen de (15.4) y (15.5) cambiando en todas partes A por B. Ademas, se tiene en esta aproximación que

$$\bar{g}_K^A = \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \{ I^{A(r,d)}_{K,Q} f^{(+)}(x_b, v_Q) + I^{B(r,d)}_{K,Q} f^{(-)}(x_b, v_Q) \},$$

en donde las intensidades "difusas" estan dadas por (14.5b) y (14.6b); en lugar de ser un múltiplo de la función de distribución en equilibrio termodinámico. El problema, por cierto, consiste en que esta función  $g$  no es completamente independiente de la dirección de  $K$  excepto en el límite de correlación lateral nula. Como se mostro en la sección 6 existen maneras de aliviar parcialmente este problema, al costo de complicar los resultados en forma considerable.

Hay que tener, sin embargo, claro que no existe estrictamente ninguna manera de obtener en forma rigurosa condiciones de frontera de la forma (15.2) a partir de resultados exactos tales como (15.3). Además, las aplicaciones de los resultados simples discutidos aquí a diferentes casos prácticos muestran que estos son en el hecho suficientemente exactos.

Notamos un último punto. Hemos visto que los coeficientes de transmisión y reflexión de una interfaz están determinados por fórmulas simples que dependen solo esencialmente de los valores de las energías de Fermi de los metales en contacto. Esta simplicidad es trazable al procedimiento empleado para unir matemáticamente estos metales en la ecuación (12.1). En realidad, la dispersión cuántica de una interfaz metal-metal es con certeza diferente de la de un peñaño de potencial. No parece, sin embargo, que este hecho sea importante en la práctica. Por el contrario, la interfaz entre dos semiconductores puede contener centros adicionales de dispersión localizados, de tal modo que, en este caso, la fórmula (15.6) se hace inválida. Pero aún entonces, fórmulas con la estructura de (15.4) continúan siendo válidas; aunque  $R_K$  y  $D_K$  deben ser reemplazadas por funciones apropiadas calculadas en el caso simple de una superficie perfectamente lisa.

## 16. Aplicaciones

### 16 A. Conductividad eléctrica en películas delgadas y alambres finos

En esta subsección especializaremos nuestros resultados al caso en que el sistema A-B es una interfaz metal-vacío. En este caso

$$V_A < E_F < V_B \quad ,$$

y, por (12.5)  $\gamma^A$  es imaginario puro, mientras que  $\gamma^B$  es real. Así,  $R_K = 1$  mientras que  $D_K = 0$ , y

$$p(u) \equiv r_A(v_K) = \exp(-2M^A_K) \quad (16.1)$$

por (15.4), en donde  $u$  es el coseno del ángulo de incidencia,  $M_K^A$  esta dada en (15.5), y  $t_A = 0$ . La fórmula (6.1) ha sido obtenida ya en (6.12), pero se ve ahora que su validez no depende de suponer que la superficie metal-vacío es equivalente a una barrera de potencial infinita.

La exactitud experimental de la presente teoría puede ser contrastada en este punto. Como se sabe, la conductividad eléctrica de una película delgada de caras paralelas esta dada por la fórmula (6.4), que es un funcional de la reflectividad  $p$  (Fuchs 1938). Esta conductividad ha sido sujeta a un cierto número de mediciones precisas; de las cuales quizás las mejores (en términos de la alta pureza de las muestras empleadas y el intervalo de espesores que fue explorado) son las realizadas en láminas y películas de aluminio por Sambles *et al* (1981, 1983). Hemos ajustado aquí las ecuaciones (16.1-2) a estos datos (figuras 14 y 15); suponiendo —no sin cierta arbitrariedad— que tanto la amplitud RMS de las rugosidades y su longitud de correlación lateral eran iguales a 5 unidades atómicas.

Se ve que el ajuste es bueno, aunque no perfecto. El ajuste puede con certeza ser mejorado, tomando en cuenta, por ejemplo, los efectos de la dispersión de los electrones por fonones en ángulo pequeño (Olsen 1958; Azbel' y Gurzhi 1962), que esta ausente de (6.4). Por otro lado, se ha incluido en la resistividad del grueso usada en estos cálculos un término de la forma  $AT^2$  (en donde  $A = 10.0 \text{ f}\Omega \text{ m K}^{-2}$  y  $T$  es la temperatura en  $K$ ) que proviene de los efectos de la interacción electrón-electrón. La justeza de un tal término parece ser, sin embargo, ahora debatible (Sambles y Mundy 1983) y en el caso que fuese necesario eliminarlo, la perfección del ajuste de la teoría al experimento empeoraría ciertamente.

#### *16B. La conductividad eléctrica de películas multicapas*

Para entender mejor la influencia de las superficies en la conductividad de los sólidos, se ha realizado un cierto número de medidas en películas delgadas constituidas por dos capas. Se ha encontrado experimentalmente que la

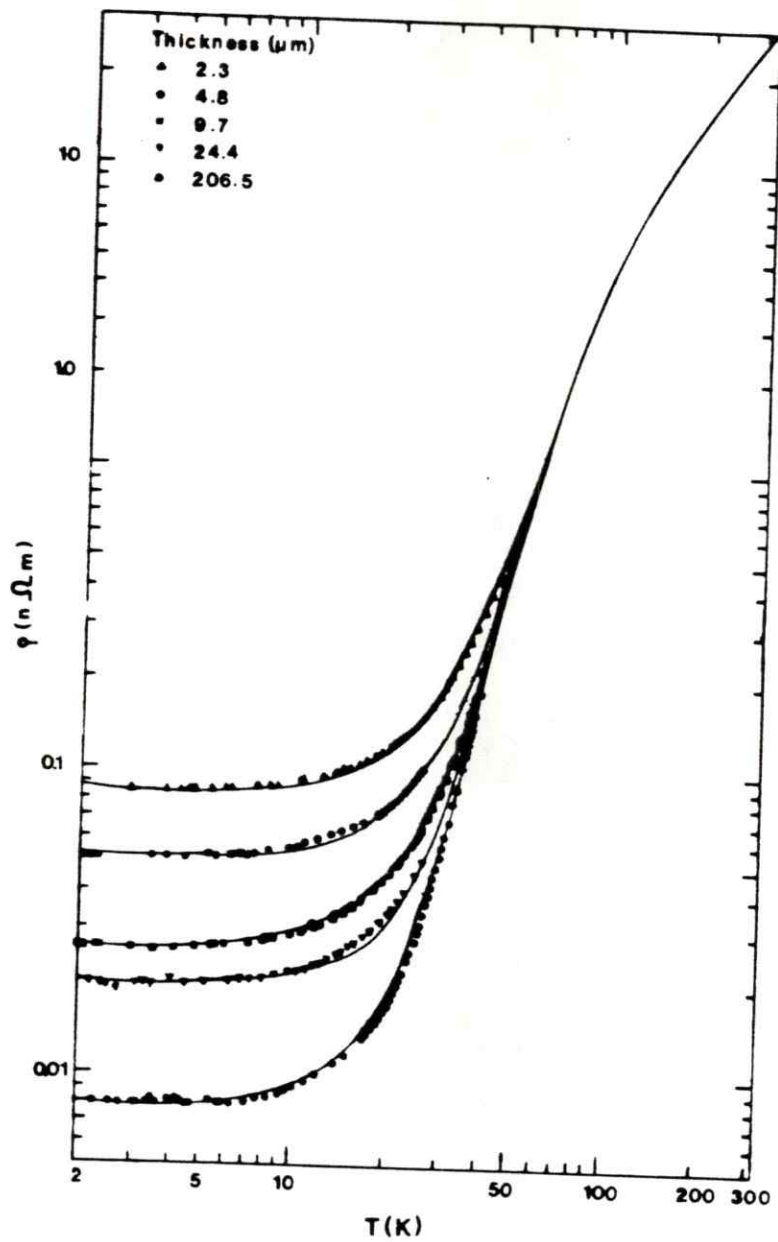


Figura 14. Ajuste de las ecuaciones (6.4) con (16.1) (líneas continuas) a los datos de la figura 3 de Sambles *et al* (1981).

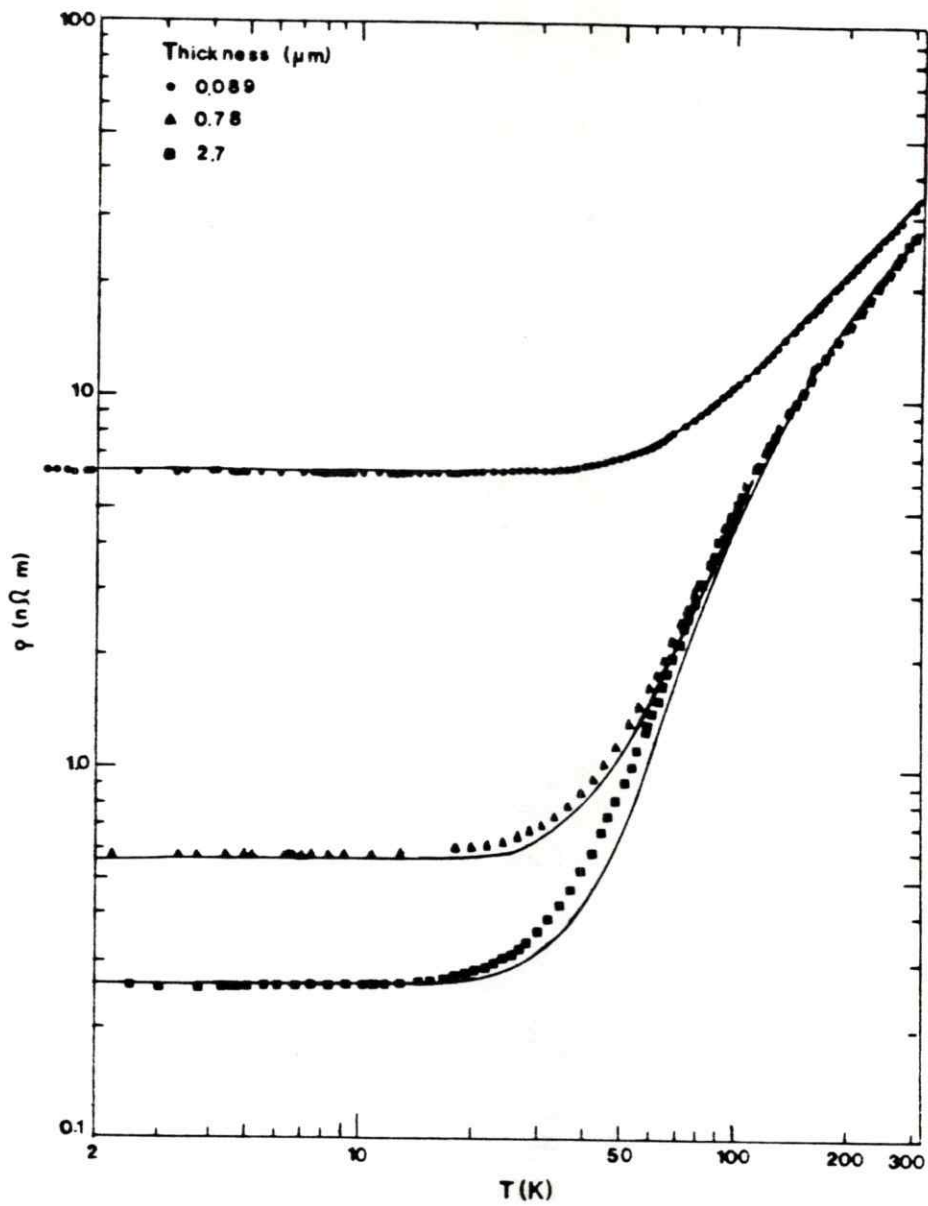


Figura 15. Igual que la figura 14, pero los datos estan tomados de la figura 4 de Sambles *et al* (1981).



resistencia de una muestra delgada puede ser aumentada significativamente por la deposición de una capa superficial de un metal distinto (o, aún, del mismo metal). Este incremento ha sido atribuido al cambio del parámetro de Fuchs de la superficie de  $p = 1$  a  $p = 0$  debido a la sobrecapa agregada (Lucas 1964, 1968, 1971; Chopra y Randlett 1967; Berman y Juretschke 1971).

Desafortunadamente, el análisis teórico de este fenómeno ha sido realizado en el pasado bajo la hipótesis que no hay dispersión adicional de los electrones en la interfaz entre las dos capas. Es, por cierto, improbable que esto sea así en la práctica. Si se emplean los resultados de la sección anterior, sin embargo, se puede obtener una nueva descripción teórica que está libre de esta limitación.

Para poder hacer esto, resolveremos la ecuación de transporte de Boltzmann para una película metálica de dos capas (figura 16) para el caso de un campo eléctrico aplicado en la dirección  $x$ . De acuerdo con (15.2) las condiciones de frontera apropiadas aplicables a las superficies rugosas  $z = 0$ ,  $z = a$  y  $z = a + b$ , respectivamente, son

$$f^{(+)}_A(0, v_z) = p_a f^{(-)}_A(0, -v_z) + g_A,$$

$$f^{(-)}_A(a, -v) = r_a f^{(+)}_A(a, v_z) + t_b f^{(-)}_B(a, -v_z) + g'_A,$$

$$f^{(+)}_B(a, v_z) = t_a f^{(+)}_A(a, v_z) + r_b f^{(-)}_B(a, -v_z) + g_B,$$

$$f^{(-)}_B(a+b, -v_z) = p_b f^{(+)}_B(a+b, v_z) + g'_B.$$

Estas condiciones son suficientes para determinar únicamente la solución de la ecuación de transporte. La conductividad eléctrica del sistema es

$$\sigma = \frac{1}{a+b} \left\{ a \sigma_A \left( 1 + \frac{3}{4} l_1 \right) + b \sigma_B \left( 1 + \frac{3}{4} l_2 \right) \right\}, \quad (16.3)$$

en donde  $\sigma_A$  y  $\sigma_B$  son las conductividades del grueso de los metales,

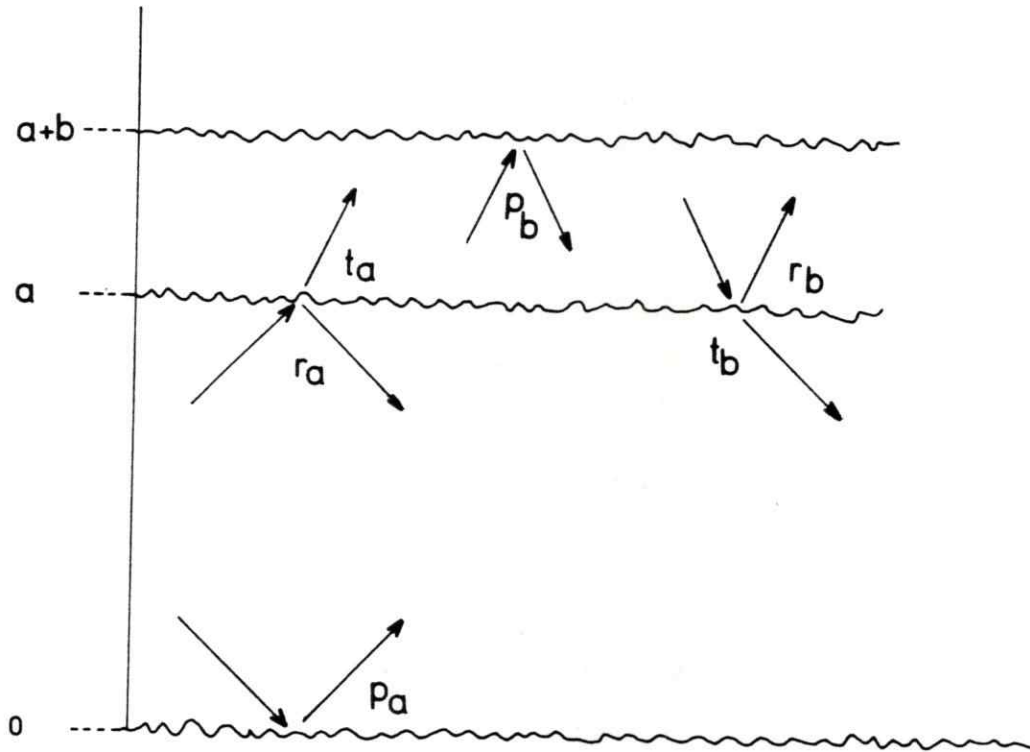


Figura 16. Película delgada  $0 < z < a$  con una sobrecapa  $a < z < a+b$ . Hay dispersión en todas las interfaces rugosas, con los coeficientes de reflexión y transmisión que se muestran.

$$I_1 = \int_0^1 \frac{(1-u^2)}{\kappa_a \Delta} [U_{ab} + V_{ab}] [1 - \exp(-\kappa_a/u)] \, ,$$

$$I_2 = \int_0^1 \frac{(1-u^2)}{\kappa_b \Delta} [U_{ba} + V_{ba}] [1 - \exp(-\kappa_b/u)] \, ,$$

y

$$\Delta = -1 + p_a r_r e^{-2\kappa_a/u} + p_b [r_b + p_a (t_a t_b - r_a r_b) e^{-2\kappa_a/u}] e^{-2\kappa_b/u} \, ,$$

$$U_{ab} = (1-p_a)(1-r_b p_b e^{-2\kappa_b/u}) + p_a [(1-r_a - t_b) + t_b (1-p_b) e^{-\kappa_b/u} + \\ + p_b [t_b (1-r_b - t_a) - r_b (1-r_a - t_b)] e^{-2\kappa_b/u}] e^{-\kappa_a/u} \, ,$$

$$V_{ab} = 1 - r_a - t_b + t_b (1-p_b) e^{-\kappa_a/u} + p_a [1 - r_a - t_b + t_b (1-p_b) e^{-\kappa_b/u} + \\ + p_b [t_b (1-r_b - t_a) - r_b (1-r_a - t_b)] e^{-2\kappa_b/u}] e^{-\kappa_a/u} \, ,$$

$U_{ba}$  y  $V_{ba}$  se obtienen de estas formulas intercambiando en todas partes  $a$  por  $b$ ; y  $\kappa_a, \kappa_b$  son los espesores de las películas expresadas en unidades de los respectivos libres caminos medios

$$\kappa_a = a/l_a \quad , \quad \kappa_b = b/l_b \quad .$$

Una comparación de la ecuación (16.3) con resultados experimentales de películas de doble capa cuyas características superficiales hayan sido determinadas independientemente arrojará, probablemente, resultados interesantes. Así, se podría averiguar si son adecuadas las condiciones de frontera completas (15.2); y no solamente su versión especializada (16.1) como hicimos en la sección precedente. Se encuentra que, aun en ausencia de datos experimentales nuevos, un análisis de los resultados de esta subsección puede arrojar luz adicional sobre el cálculo de la conductividad de películas extremadamente delgadas mediante métodos semiclásicos. Pero esta es una

larga historia, cuyo examen detallado sera quizas mejor reemprendido en otra parte.

## REFERENCIAS

- Abramowitz M. y Stegun I.A. (eds.) 1955 *Handbook of Mathematical Functions* (New York: Dover Publications) pp 503-535
- Andrew E.R. 1949 *Proc. Phys.Soc.* 62 77
- Angus R.K. y Dalgliesh J.D. 1970 *Phys. Letters* 31A 280
- Azbel' M. Ya y Gurzhi R.N. 1962 *Sov Phys JETP* 15 1133
- Beeby J.L. 1976 *Proc.Phys.Soc.* 62 77
- Berman A. y Juretschke 1971 *Appl. Phys. Letters* 18 451
- Brändli G. y Cott P. 1965 *Helv.Phys.Acta* 38 801
- Chambers R.G. 1969 en *Physics of Metals 1.Electrons* ( Ziman J.M. ed. London: Oxford University Press) pp 175-241
- Chopra K.L., Bahl S.K. y Randlett R.M. 1968 *J.Appl.Phys.* 39 1525
- Chopra K.L. y Randlett M.R. 1967 *J.Appl.Phys.* 38 3144
- Dingle R.B. 1950 *Proc.Roy.Soc.A* 201 545
- Fal'kovskii 1970a *Sov.Phys.JETP* 31 981
- 1970b *Sov.Phys.JETP* 32 138
- 1983 *Adv.Phys.* 32 753
- Greene R.F. 1966 *Phys. Rev.* 141 687
- 1966 *Phys.Rev* 141 690
- Greene R.F. y O'Donnell R.W. 1966 *Phys.Rev.* 147 599
- Hubin M. y Gouault J. 1974 *Thin Solid Films* 24 311
- Huebner R.P. 1964 *Phys.Rev.* 136 A 1740
- Jain N. y Srivastava 1980 *Thin Solid Films* 67 L 21
- Landau L.D. y Lifshitz E.M. 1958 *Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory* (Oxford: Pergamon Press) pp 75-80
- Leonard W.F. y Lin S.F. 1970 *J.Appl.Phys.* 41 1868
- Lovell A.C.B. 1936 *Proc.Roy.Soc.A* 157 311
- Lucas M.S.P. 1964 *Appl.Phys.Letters* 4 73
- 1968 *Thin Solid Films* 2 337
- 1971 *thin Solid Films* 7 435
- Mac Donald D.K.C. y Sarginson K. 1950 *Proc.Roy.Soc.A* 203 223
- Masel R.I., Merril R.P. y Miller W.H. 1975 *Phis.Rev.B* 12 5545

- Moreland R.F. y Bourassa R.R. 1975 *Phys.Rev.B* 12 3991
- Morse P.M. y Feshbach 1953 *Methods of Theoretical Physics* (New York: McGraw-Hill Book Company) pp 1038-1063
- Olsen J.L. 1956 *Helv.Phys.Acta* 31 713
- Parrott J.E. 1965 *Proc.Phys.Soc.* 85 1143
- Rastigni G., Varnier F., Rastigni M. y Lebaria A. 1984 *Phys.Rev.B* 29 5931
- Sambles J.R. y Elsom K.C. 1980 *J.Phys.F* 10 1487
- 1985 *J.Phys.F* 15 161
- Sambles J.R., Elsom K.C. y Jarvis D.J. 1982 *Phil.Trans.R.Soc. Lond* A304
- Sambles J.R., Elsom K.C. y Preist T.W. 1982 *J.Phys.F* 12 1169
- Sambles K.R., Elsom K.C. y Sharp-Dent G. 1981 *J.Phys.F* 11 1075
- Sambles J.R. y Mundy J.N. 1983 *J.Phys.F* 13 2281
- Sambles J.R. y Preist T.W. 1984 *J.Phys.F* 14 1693
- 1982 *J.Phys.F* 12 1971
- Shen J. y Maradudin A.A. 1980 *Phys.Rev.B* 22 4234
- Soffer S.B. 1967 *J.Appl.Phys.* 38 1710
- 1970 *Phys.Rev.B* 2 3894
- Sondheimer E.H. 1952 *Adv.Phys.* 1 1
- Stesmans A. 1982 *J.Phys.F* 12 1989
- 1983 *Phys.Rev.B* 27 1384
- Stone I. 1898 *Phys.Rev* 6 1
- Sugawara H., Nagano T. y Kinbara A. 1974 *Thin Solid Films* 21 33
- Tellier C.R., Pichard C. y Tosser A.J. 1977 *Thin Solid Films* 42 L 31
- Thomson J.J. 1901 *Proc.Camb.Phil.Soc.* 11 119
- Thompson J.B. 1977 *Thin Solid Films* 18 77
- 1978 *Thin Solid Films* 48 L 25
- Wedler G. y Alshorachi G. 1980 *Thin Solid Films* 74 1
- Wilson A.W. *The Theory of Metals* 1965 (Cambridge: Cambridge University Press) p 286
- Worobey W., Lindenfeld P. y Serin B. 1966 en *Basic Problems in Thin Film Physics* (Niedermeyer R. y Mayer H. eds., Göttingen: Vandenhoeck und Ruprecht) p 601
- Ziman J. *Electrons and Phonons* 1960 (London: Oxford University Press) pp

452-460

--- *Principles of the Theory of Solids* 1964 (Cambridge: Cambridge University Press) p 230