

00382



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO
FACULTAD DE CIENCIAS

13
2ej

PROPIEDADES OPTICAS DE SUPERFICIES,
INTERFACES Y SUPERREDES.

TESIS
QUE PARA OBTENER EL GRADO DE DOCTOR EN
CIENCIAS (FISICA)

PRESENTA

GREGORIO HERNANDEZ COCOLETZI

AGOSTO DE 1991. MEXICO D.F.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Indice

RESUMEN	2
1 INTRODUCCION	3
2 ELECTRODINAMICA DE MEDIOS INFINITOS Y SEMI-INFINITOS	12
2.1 Ecuaciones de Maxwell	12
2.2 Modelo de la función dieléctrica para excitones	15
2.3 Función dieléctrica hidrodinámica	17
2.4 Condiciones a la frontera	20
2.5 Condiciones adicionales a la frontera CAF's	21
2.5.1 Para semiconductores excitónicos	21
2.5.2 Para metales en la presencia de ondas de plasma	27
3 REFLECTANCIA	32
3.1 Impedancia de superficie	32
3.2 R_p de un sistema emparedado. Caso local	33
3.3 R_p para una superficie semiconductor excitónica	35
3.4 R_p para el sistema emparedado. Caso no local	37
4 ONDAS DE SUPERFICIE	40
4.1 Sistema de emparedado	40
4.2 Modos de una sola superficie	41
4.3 Modos de una película simétrica	41
4.4 Reflexión total atenuada	42
5 SUPERREDES. LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA	44
5.1 Superredes locales	44

5.2	R_p para una película en términos de la matriz de transferencia	47
5.3	Superred en la presencia de ondas excitónicas. Sin capa muerta	48
5.4	Superred excitónica con capa muerta	52
5.5	Reflectancia de una película excitónica delgada.	53
6	DISPERSION DE ELECTRONES	59
6.1	Película-substrato. Caso local	59
6.2	Superred metálica en la presencia de ondas de plasma	63
7	RESULTADOS	66
7.1	Reflexión total atenuada	66
7.1.1	Interface entre dos metales	67
7.1.2	Interface entre dos dieléctricos polares locales	68
7.1.3	Interface dieléctrico-metal	71
7.1.4	Sistema emparejado	71
7.2	Reflectancia	72
7.2.1	Superficie semiconductoras sin capa muerta	72
7.2.2	Superficies semiconductoras en presencia de la capa muerta	74
7.2.3	RTA para semiconductores excitónicos	75
7.3	Propiedades ópticas de superredes	76
7.3.1	Superredes locales. Caso de dos metales	76
7.3.2	Superred no local. Caso de semiconductor excitónico. Sin y con capa muerta	77
7.3.3	Reflectancia para película semiconductoras delgada	81
7.4	Dispersion de electrones	81
7.4.1	Película-substrato. Caso local	81
7.4.2	Superred metálica en la presencia de ondas de plasma	82
8	CONCLUSIONES	84
	BIBLIOGRAFIA	92
	PIE DE FIGURAS	96

ABSTRACT

We present a study of wave propagation at surfaces, interfaces and heterostructures. We study the propagation of polaritons by the attenuated total reflectivity (ATR) at the conductor-conductor, dielectric-dielectric and dielectric-conductor interfaces in the local theory, and at excitonic semiconductor surfaces in the presence of spatial dispersion. We also study surface waves in the sandwich geometry. For the dielectric-conductor interface we also study the scattering of low energy electrons. We study the optical properties of local metallic and non-local excitonic semiconductor superlattices by the interaction with light, and of non-local metallic superlattices by the scattering of electrons. The ATR minima indicate that light couples to the surface modes at the Al/Mg , $GaAs/GaP$, CdF_2/CaF_2 , CuF_2/GaP and Al/CdS interfaces. For the excitonic semiconductor surface we have studied the problem of the additional boundary conditions (ABC) by comparing the calculated reflectance with the experimental results. We use the generalized form of the ABC's to obtain the normal incidence reflectance of light and compare it with the experimentally obtained by Evangelisti on a CdS sample. We consider several thicknesses l of the exciton free surface dead layer. Calculated ATR spectra for ZnO , in the absence of any dead layer, are compared with the experimental results of Fischer and Lagois. We found for CdS a dead layer thickness of $l = 100\text{\AA}$, and for both ZnO and CdS , the Pekar boundary condition are the best ABC's. The dispersion relation of the electromagnetic modes of the infinite superlattice made of alternating layers of two metals Al/Mg show two branches

due to the film surface modes coupling. The reflectance of the semiinfinite superlattice exhibits two minima caused by the polariton modes excitation on the film surfaces. The results of the insulator-excitonic semiconductor (*CdS*) superlattice show a rich structure which is interpreted as resonances of the transverse and longitudinal waves which behave like guided waves in the excitonic layers. The presence of dead layers induces a blue shift of the spectra as the thickness increases, at the same time the longitudinal waves are confined to less thick excitonic layers. The probability $P(\omega)$ of energy loss of the low energy electrons for the non-local conductor superlattice show a strong dependence on the film thickness for thin films there appear two peaks which evolve into a prominent one as the thickness increases.

The thesis contains 8 chapters. 1, 2 and 4 are chapters of review and the other contain our contributions.

RESUMEN

Presentamos un estudio de la propagación de las ondas en superficies, interfaces y heteroestructuras. Estudiamos la propagación de polaritones por medio de la reflexión total atenuada (RTA) en las interfaces metal-metal, dieléctrico-dieléctrico y dieléctrico-metal en la aproximación local, y en la superficie de semiconductores excitónicos en la presencia de dispersión espacial. Estudiamos también las ondas de superficie en el sistema emparedado. Para la interface dieléctrico-metal también estudiamos la dispersión de electrones de baja energía. Tratamos las propiedades ópticas de superredes metálicas locales y semiconductoras excitónicas con la dispersión de la luz, y de metales no locales por medio de la dispersión de electrones. Los mínimos de RTA para las interfaces Al/Mg , $GaAs/GaP$, CdF_2/CaF_2 , CaF_2/GaP y Al/CdS , indican el acoplamiento de la luz con los modos de interface. Para la superficie de semiconductor excitónico hemos estudiado las condiciones adicionales a la frontera (CAF's) haciendo la comparación con resultados experimentales. Usamos las CAF's generalizadas para obtener la reflectancia a incidencia normal y la comparamos con el espectro obtenido por Evangelisti en una muestra de CdS . Usamos varios espesores l de la capa muerta de excitones. Cálculos de RTA para ZnO sin capa muerta se comparan con los experimentales de Fischer y Lagois. Encontramos que para CdS , $l = 100 \text{ \AA}$ y en ambos casos las CAF's de Pekar dan la mejor comparación con el experimento. La relación de dispersión de los modos electromagnéticos de la superred infinita construida de dos capas metálicas Al/Mg alternadas muestran dos ramas de los plasmones de superficie de las películas. La reflectancia para el sistema semiinfinito exhibe dos mínimos por la excitación de los polaritones plasmones de superficie de las películas. Los resultados para la superred de aislante y semiconductor excitónico (CdS) muestran una gran estructura, la cual se interpreta como resonancias de las ondas transversales y longitudinales que semejan ondas guiadas en las capas excitónicas. La presencia de la capa muerta en la superred induce un corrimiento de los espectros al azul a medida que aumenta el espesor, al mismo tiempo que el confinamiento de las ondas longitudinales se hace en capas excitónicas menos gruesas. Para la superred metálica no local, la probabilidad de pérdida de un cuanto de energía $\hbar\omega(P_{NL}(\omega))$ de los electrones, muestra que para espesores pequeños existen dos picos, uno cercano a la frecuencia del plasmón de superficie mientras que el otro a frecuencias más altas y a espesores mayores aparece un solo pico.

Capítulo 1

INTRODUCCION

El punto de partida del estudio de las propiedades del estado sólido es la ecuación de Schroedinger[1]. Esta ecuación se forma por medio del operador de Hamilton el cual a su vez se constituye de la suma de los operadores de la energía cinética y potencial. Los sólidos están formados de átomos y de dos tipos de electrones: los de valencia que forman los enlaces químicos y los que están fuertemente unidos al núcleo del átomo. Por esto, la energía cinética es la suma de la energía cinética de los electrones de valencia y la de los iones, y la energía potencial está formada de la energía de interacción entre las partículas y eventualmente de la presencia de un campo externo. De esto se sigue que, resolver la ecuación Schroedinger para un sólido cristalino, es prácticamente imposible. Sin embargo se pueden hacer algunas aproximaciones que permitan resolver esta ecuación. Por ejemplo, la aproximación adiabática o de Born y Oppenheimer[1] permite estudiar por separado el movimiento de los electrones en una red estacionaria y el movimiento de los iones en una carga uniforme espacial de los electrones.

El gas de los electrones puede estudiarse considerando que estos se mueven en la presencia de un fondo positivo[1] (modelo de jalea) o en una red rígida de iones cargados positivamente. La dificultad a este método está en el término de interacción entre los electrones. En la ausencia de este término, el problema se desacoplaría en muchos problemas de un sólo cuerpo. Por otro lado la aproximación de Hartree conduce a la ecuación para un electrón que se mueve en un potencial arbitrario V y un potencial coulombiano de una distribución promedio de carga debida a los demás electrones. Pero

esta aproximación no contempla el hecho de que los electrones obedecen el principio de exclusión de Pauli, por lo que debe corregirse.

El método de Hartree-Fock[1] considera que los electrones tienen espín semientero, por lo que la función de onda del sistema se debe escribir en términos del determinante de Slater. Esta función de onda y el método de los multiplicadores de Lagrange conducen a la ecuación de un electrón que se mueve en el potencial de Hartree más un término adicional que se llama energía de intercambio. La ecuación de Hartree-Fock resultante puede reescribirse de tal forma que el resultado final indica que la ecuación de Schrodinger de muchos electrones se han transformado en una ecuación para un solo electrón.

De las propiedades de los sólidos, las ópticas son de gran importancia y en el estudio de estas propiedades son importantes los efectos de la superficie. Varias teorías y técnicas experimentales, como la espectroscopia Raman, la fotoluminiscencia, la reflectometría y otras, se han desarrollado para caracterizar a los sólidos ópticamente. Por ejemplo, Fresnel obtuvo expresiones para las amplitudes de los campos dispersados especularmente por superficies, siendo el de una sola superficie, el caso más simple.

Sin embargo, el modelo local que ignora la dispersión espacial, en el que se apoyan las ecuaciones de Fresnel, no es del todo correcto, como lo ha señalado P. Feibelman[2], debido a que predice discontinuidades y singularidades en los campos cerca de la superficie, por lo que un estudio correcto debe incluir los efectos de dispersión espacial. Estos efectos se introducen en la teoría al considerar la respuesta dieléctrica como función de la frecuencia ω y del vector de onda \vec{q} de la radiación electromagnética incidente.

El fenómeno de la propagación de ondas de superficies es muy importante en la caracterización de las superficies sólidas, por lo que su excitación ha originado se traten varios métodos experimentales, como son: la reflexión total atenuada, la dispersión de electrones de baja energía y la dispersión debida a la rugosidad superficial.

Desde el trabajo pionero de A. Otto[3] en 1968, la reflexión total atenuada (RTA), se ha usado ampliamente en el estudio de la propagación de ondas electromagnéticas de superficie. Después del estudio de Otto de la propagación de plasmones en la superficie de metales, Kretschmann[4] llevó a cabo experimentos de excitación de estos modos. En ambos trabajos se

usó un prisma de acoplamiento. En el arreglo de Otto[3], el prisma y sustrato metálico se separaron por una brecha de aire, mientras que el caso de Kretschmann[4], se creció una película metálica sobre el prisma.

Posteriormente, Marshall y Fischer[5] lograron la excitación de fonones en la superficie de *GaP*. En éste trabajo, se usó el arreglo similar al de Otto, con un prisma de silicio. Los resultados de la comparación entre teoría y experimento, de la relación de dispersión de los modos superficiales muestran concordancia. También se ha estudiado la excitación de modos la superficie de semiconductores en la vecindad de transiciones excitónicas aisladas. Por ejemplo, Fischer y Lagois[6] detectaron la propagación de los polaritones excitones en la superficie de *ZnO*. En la comparación de la teoría con el experimento, los autores tomaron en cuenta los efectos de dispersión espacial y las condiciones adicionales a la frontera (CAF'S) de Pekar[7]. Los resultados de la comparación muestra semejanza en los espectros.

En la dispersión de electrones, las partículas interactuantes ceden el momento necesario para el acoplamiento con el modo de superficie. La literatura muestra que Mills y colaboradores han discutido ampliamente esta técnica. Por ejemplo, Camley y Mills[8] han reportado resultados para superredes metálicas. En el reporte también estudian plasmones de superficie. Posteriormente, Streight y Mills[9] estudiaron la superred de metal y semiconductor altamente impuro. En ambos trabajos de Mills, se ha calculado la probabilidad de que el electrón incidente pierda un cuanto de energía $h\omega$.

Debido a que la rugosidad superficial puede agregar momento a la luz incidente, esto favorece el acoplamiento y así la excitación de modos superficiales. Varias teorías se han desarrollado con el fin de estudiar superficies rugosas. La mayoría de las teorías tratan con superficies de medios sin dispersión espacial, aunque también existen teorías no locales como la de Agarwal[10] y de Mochán[11] y colaboradores.

Al incidir luz en la superficie de un semiconductor, es posible la creación de pares electrón-hueco, los cuales, a su vez pueden formar estados ligados. Estos estados se llaman excitones. La condición para la creación de los excitones, es que la energía de la luz incidente sea del orden de la banda prohibida del semiconductor, de tal forma que el electrón logre pasar de la banda de valencia a la banda de conducción con la formación de un hueco en la banda de valencia, y debido a la atracción coulombiana se forme el estado

ligado. Existen dos teorías[1] que estudian a los excitones, la de Frenkel y la de Wannier-Mott. En la primera, el hueco y el electrón se consideran con una distancia de separación pequeña, del orden de la distancia interatómica, mientras que en la segunda, el radio excitónico es del orden de decenas de Å.

El estudio de los efectos no locales, los excitones de Wannier-Mott, y las condiciones adicionales a la frontera (CAF's) en semiconductores se ha hecho desde los trabajos de Pekar[7], Hopfield[12], y Hopfield y Thomas[13]. Los efectos no locales o de dispersión espacial se introducen en la teoría de los semiconductores excitónicos al considerar la función dieléctrica de Hopfield y Thomas[13], la cual toma en cuenta la energía cinética del centro de masa del excitón. La inclusión de los efectos de dispersión espacial en los estudios de propiedades ópticas de semiconductores implica la generación de ondas excitónicas adicionales a la del fotón, por lo que para el cálculo de las amplitudes de los campos electromagnéticos dispersados por superficies, la continuidad de las componentes tangenciales de \vec{E} y \vec{H} no son suficientes sino que se requieren de las CAF's. En este trabajo hacemos también un estudio de las CAF's.

Las CAF's en semiconductores excitónicos se han estudiado ampliamente. Todos los modelos propuestos consideran condiciones sobre la polarización excitónica $\vec{P}(\vec{r}, t)$. Varios modelos se han reportado, aquí mencionamos algunos de ellos.

I) Las CAF's de Pekar[7] consideran que la polarización excitónica se anula en la superficie

$$\vec{P}(\vec{r}, t)|_{sup} = 0. \quad (1.1)$$

II) Las CAF's de Fuchs-Kliwer[14] dicen que la derivada normal de la componente paralela de $\vec{P}(\vec{r}, t)$ y la normal de $\vec{P}(\vec{r}, t)$ a la superficie se hacen cero en la superficie.

$$\frac{\partial}{\partial n} \vec{P}_{||}(\vec{r}, t)|_{sup} = 0, \quad (1.2)$$

$$\vec{P}_n(\vec{r}, t)|_{sup} = 0. \quad (1.3)$$

III) Las CAF's de Ting-Frankel-Birman[15] imponen que la derivada normal de la polarización se anule en la frontera

$$\frac{\partial}{\partial \bar{n}} \bar{P}(\bar{x}, t)|_{sup} = 0. \quad (1.4)$$

IV) Otro modelo de CAF's se debe a Agarwal-Pattanayak-Wolf[16], que se escribe como

$$\{i\Gamma(\omega)\bar{P}(\bar{x}, t) + \frac{\partial}{\partial \bar{n}} \bar{P}(\bar{x}, t)\}|_{sup} = 0, \quad (1.5)$$

con

$$\Gamma^2(\omega) = \frac{\omega^2 - \omega_T^2 - Dq_{||}^2 + i\omega\nu}{D}, \quad (1.6)$$

donde ω_T es la frecuencia de la transición excitónica, $q_{||}$ la componente paralela a la superficie del vector de onda. ν la frecuencia de amortiguamiento y D el parámetro no local.

V) Un modelo que contiene a los anteriores como casos particulares fue propuesto por Fuchs y Halevi[17]. La ecuación en este caso tiene la forma

$$\{\alpha_j P_j(\bar{x}, t) + \beta_j \frac{\partial}{\partial \bar{n}} P_j(\bar{x}, t)\}|_{sup} = 0, \quad (1.7)$$

donde α_j y β_j son parámetros que dependen de la frecuencia y en general son complejos. Diferentes valores de estos parámetros dan lugar a diferentes CAF's. En este trabajo usamos una forma alternativa de estas ecuaciones, la cual escribimos como

$$\{\alpha \bar{P}(\bar{x}, t) + \frac{\partial}{\partial \bar{n}} \bar{P}(\bar{x}, t)\}|_{sup} = 0. \quad (1.8)$$

Selkin[18] y colaboradores usaron el teorema de Poynting para encontrar una expresión de los CAF's. En la suposición de que no hay corrientes superficiales, los autores encuentran las condiciones de Pekar y de Ting et. al. y de manera general la ecuación similar a la de Halevi y Fuchs.

El estudio de los efectos no locales en metales es formalmente similar al de los semiconductores. Sin embargo, estos efectos están asociados con la compresibilidad electrónica, es decir, con la variación espacial de la densidad de electrones. Al igual que en semiconductores, en metales con la presencia de ondas adicionales, el cálculo de las amplitudes de los campos dispersados por

superficies requiere de las condiciones adicionales a la frontera. El problema de las CAF's en estos sistemas, también es un tema de debate. Se han propuesto modelos basados en suposiciones físicas. Una condición adicional a la frontera que se ha usado, por ejemplo por Eguiluz[19], supone que la componente normal a la superficie de la densidad de corriente se anule en la frontera

$$J_{\perp} = 0. \quad (1.9)$$

Otro modelo de CAF's que se trata en el cálculo de las amplitudes de los campos dispersados, supone que la componente perpendicular del campo eléctrico es continuo en la superficie

$$E_{\perp}^0|_{sup} = E_{\perp}^m|_{sup}. \quad (1.10)$$

Kliwer y Fuchs[14] en 1968, propusieron una forma de resolver el problema de la reflexión y transmisión de ondas electromagnéticas en superficies de metales en presencia de dispersión espacial. En la suposición, el metal se considera como si ocupara todo el espacio y los electrones sufren reflexiones especulares. Esta reflexión implica que el campo electromagnético debe satisfacer las siguientes condiciones

$$E_{\parallel}(z) = E_{\parallel}(-z), \quad (1.11)$$

$$E_{\perp}(z) = -E_{\perp}(-z), \quad (1.12)$$

$$D_{\parallel}(z) = D_{\parallel}(-z), \quad (1.13)$$

$$D_{\perp}(z) = -D_{\perp}(-z). \quad (1.14)$$

Con éstas condiciones, la ecuación de ondas se puede resolver y así obtener las amplitudes de los campos electromagnéticos para el sistema real.

Una revisión de las CAF's en metales no locales fué dada recientemente por Del Castillo y Mochán[20]. La conclusión de estos autores es que: En la interface entre un conductor local y uno no local, la densidad de carga fluctuante debe anularse, o que la densidad de corriente sea continua, y en la

interface entre un dieléctrico local y un metal no local. la densidad de carga fluctuante debe anularse o que la densidad de corriente debe anularse.

La gran utilidad de las heteroestructuras y superredes ha motivado a los investigadores a estudiar las propiedades ópticas y de transporte de estos materiales artificiales. Desde los trabajos pioneros de Tsu y Esaki[21] en superredes, una gran variedad de publicaciones se encuentra en la literatura. Es de interés particular, conocer las propiedades ópticas de las superredes. Estos sistemas pueden formarse por dos o mas capas en cada celda unitaria.

Las propiedades ópticas de superredes se han estudiado tanto en la teoría local como en la no local. En la aproximación local, por ejemplo, Yeh[22] y colaboradores reportaron la diagonalización del operador de translación de la celda unitaria de una superred de dieléctricos, para obtener la estructura de bandas de los modos electromagnéticos.

Los efectos de dispersión espacial en superredes se ha hecho en metales con la presencia de plasma y en semiconductores tomando en cuenta ondas excitónicas. Por ejemplo, Eliasson[23] y colaboradores estudiaron un sistema con efectos no locales haciendo uso de la teoría hidrodinámica. Posteriormente, Mochán y colaboradores desarrollaron un formalismo de la matriz de transferencia para calcular las relaciones de dispersión de los modos electromagnéticos colectivos y la reflectancia de la luz, para el sistema formado de películas alternadas de un aislante local y un metal no local[24]. Además, estudiaron la superred construida de dos metales no locales[25]. Agranovich y Kravtsov[26] estudiaron el caso de una superred semiconductor en la presencia de excitones por medio de la teoría de campo promedio. Estos autores pusieron énfasis en las relaciones de dispersión de las ondas de superficie en sistemas semiinfinitos. Recientemente, hemos estudiado[27] una superred excitónica, desarrollando la teoría de la matriz de transferencia y calculando las propiedades ópticas del sistema.

La caracterización óptica de superficies, interfaces y heteroestructuras es importante por la aplicación tecnológica. Por esta razón hemos considerado interesante estudiar la propagación de modos electromagnéticos en diferentes sistemas.

En este trabajo usamos nuestra experiencia de varios años de estudio de la propagación de ondas electromagnéticas en diferentes sistemas. En el caso de los dieléctricos, estudiamos la propagación de las ondas en la interface

de estos materiales, mientras que para metales, estudiamos primero sistemas elementales que sirven para explicar fenómenos de sistemas compuestos. Por ejemplo, para entender la estructura de la reflectancia de la luz en una superred cuya celda unitaria se compone de dos capas metálicas, es útil estudiar primero la película metálica. De la misma manera, para estudiar la superred de semiconductores excitónicos estudiamos primero la superficie del medio semiinfinito y la película semiconductor.

Empezamos nuestro trabajo con el estudio de la propagación de polaritones plasmones en la interface entre dos metales de Drude (Al/Mg)[41]. Posteriormente estudiamos la propagación de polaritones fonones en la interface entre dos dieléctricos[34] y recientemente estudiamos la interface entre un metal de Drude y un dieléctrico polar[39], para estudiar la interacción plasmón-fonón. Además hemos estudiado la interacción plasmón-excitón. Hemos estudiado superficies semiconductoras excitónicas tomando en cuenta los efectos de dispersión espacial y las condiciones adicionales a la frontera. El problema de las CAF's es un tema abierto que nosotros hemos estudiado no solo en superficies [35],[43] sino también en heteroestructuras[27],[38] de semiconductores excitónicos. Además hemos estudiado la dispersión de electrones por superredes metálicas.

A continuación indicamos como se encuentra organizada la tesis. Hay una parte que consta de 5 capítulos de teoría, un capítulo de resultados numéricos, y uno de conclusiones. La sección de teoría está organizada en la siguiente manera: En el capítulo 2 describimos la electrodinámica de los medios infinitos y semiinfinitos. En este capítulo, presentamos las ecuaciones de Maxwell, derivamos las funciones respuesta para metales y para semiconductores en la presencia de dispersión espacial, discutimos las condiciones a la frontera y las condiciones adicionales a la frontera. La reflectancia R_p en la configuración RTA local, una superficie semiconductora excitónica y RTA en la presencia de excitones se discute en el capítulo 3. El capítulo 4 está dedicado a describir las ondas de superficie en una sola interface, en una película y en un sistema de emparedado, así como el método de reflexión total atenuada (RTA). En el capítulo 5 describimos la teoría de la matriz de transferencia para superredes locales y no locales. En este capítulo, calculamos las relaciones de dispersión de los modos electromagnéticos colectivos de las superredes infinitas y la reflectancia de superredes semiinfinitas. Además presentamos formas analíticas de R_p para el caso de una película excitónica delgada en la aproximación de campo promedio, y discutimos la validez de

las CAF's. El capítulo 6 de teoría, trata la dispersión de electrones de baja energía en una estructura de película y sustrato en la aproximación local y una superred en la presencia de ondas de plasma.

El capítulo 7 de resultados numéricos tiene el siguiente orden: La sección 7.1 se dedica a describir la reflexión total atenuada aplicada al estudio de las interfaces *Al/Mg*, *GaAs/GaP*, *CdF₂/CaF₂*, *CaF₂/GaP* y *Al/CdS*. En la sección 7.2 analizamos la reflectancia para una superficie semiconductor de *CdS* sin y con capa muerta de excitones, y la reflexión total atenuada para una muestra de *ZnO*, en la vecindad de una transición excitónica aislada. Hacemos comparaciones con resultados experimentales. Las propiedades ópticas de superredes formadas de *Al/Mg* en la aproximación local y aislante/semiconductor excitónico en la presencia de dispersión espacial se discuten en la sección 7.3. Además presentamos los efectos de la capa muerta y la validez de las CAF's para una película delgada semiconductor. En la sección 7.4 se presentan los resultados de la dispersión de electrones en una película de *Al* crecida sobre un sustrato de *CdS*, y una superred metálica en la presencia de ondas de plasma. En esta sección calculamos la sección transversal de dispersión de EELS, es decir, la probabilidad de pérdida de energía por parte de los electrones incidentes en el sistema. En el capítulo 8 se dan las conclusiones generales.

Capítulo 2

ELECTRODINAMICA DE MEDIOS INFINITOS Y SEMIINFINITOS

Para estudiar las propiedades ópticas de sistemas se necesitan conocer las ecuaciones de Maxwell que describen el campo electromagnético (EM) y las funciones respuesta. Debido a lo anterior, en este capítulo revisamos la teoría EM de Maxwell, las funciones dieléctricas de Hopfield y Thomas[13] para excitones de Wannier y el modelo hidrodinámico para estudiar las ondas de plasma. Además revisamos las condiciones a la frontera y las condiciones adicionales a la frontera en semiconductores y metales.

2.1 Ecuaciones de Maxwell

La electrodinámica de los medios materiales se basa en las ecuaciones de Maxwell[28] macroscópicas, que se pueden escribir como

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}(\vec{r}, t)}{\partial t}, \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0, \quad (2.2)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D}(\vec{x}, t) = 4\pi\rho_l, \quad (2.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{x}, t) = \frac{4\pi}{c} \vec{J}(\vec{x}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{D}(\vec{x}, t), \quad (2.4)$$

donde ρ_l y $\vec{J}(\vec{x}, t)$ son las densidades de carga libre y corriente de conducción, respectivamente. $\vec{B}(\vec{x}, t)$ es la inducción magnética y $\vec{H}(\vec{x}, t)$ el campo magnético. $\vec{D}(\vec{x}, t)$ es el desplazamiento eléctrico y $\vec{E}(\vec{x}, t)$ el campo eléctrico.

Existe una relación funcional entre los campos $\vec{D}(\vec{x}, t)$ y $\vec{E}(\vec{x}, t)$ que tiene la forma (en el caso lineal)

$$D_i(\vec{x}, t) = \sum_j \int d^3\vec{x}' \int dt' \epsilon_{ij}(\vec{x}, \vec{x}'; t - t') E_j(\vec{x}', t'). \quad (2.5)$$

donde ϵ_{ij} es el tensor dieléctrico. La integración se realiza para todos los tiempos $t' < t$, para cuando $\epsilon_{ij} \rightarrow 0$ debido al principio de causalidad y la integración sobre \vec{x}' está restringida por el volumen que ocupa el material. Para un medio con $\epsilon_{ij} = \delta_{ij}\epsilon$, y debido a la invarianza translacional temporal se puede escribir

$$\vec{D}(\vec{x}, t) = \int d^3\vec{x}' \int dt' \epsilon(\vec{x}, \vec{x}'; t - t') \vec{E}(\vec{x}', t'). \quad (2.6)$$

La relación entre \vec{D} y \vec{E} depende de \vec{x}, \vec{x}', t y t' . Este tipo de relaciones se llama no-local y se interpreta en la siguiente forma; el valor del desplazamiento eléctrico \vec{D} en un punto \vec{x} depende de los valores de \vec{E} no solo en \vec{x} sino también en \vec{x}' (no localidad espacial), y análogamente, el valor de \vec{D} en t depende del valor de \vec{E} en los tiempos t y t' , donde $t' < t$ (dispersión temporal).

Para materiales infinitos y homogéneos, existe invarianza translacional en el espacio, entonces $\epsilon(\vec{x}, \vec{x}'; t - t') = \epsilon(\vec{x} - \vec{x}'; t - t')$. La transformada de Fourier[29] espacial y temporal de \vec{D} se expresa como

$$\vec{D}(\vec{k}, \omega) = \epsilon(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega). \quad (2.7)$$

donde

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) = \int dt \int d\vec{x} \epsilon(\vec{x}, t) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}, \quad (2.8)$$

y

$$\vec{E}(\vec{k}, \omega) = \int dt \int d\vec{x} \vec{E}(\vec{x}, t) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}. \quad (2.9)$$

En general, la inducción magnética \vec{B} y el campo magnético \vec{H} están relacionados a través del tensor de permitividad magnética μ_{jk} . Sin embargo, para materiales isotrópicos y no magnéticos, éste tensor es un escalar igual a la unidad, i.e. $\mu = 1$, y por consiguiente $\vec{B} = \vec{H}$.

A partir de las ecuaciones de Maxwell, en ausencia de cargas externas, $\rho_l = 0$ y $\vec{J} = 0$ se obtiene la ecuación de onda, la cual tiene la forma

$$\vec{\nabla} \times [\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{x}, t)] + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{D}(\vec{x}, t)}{\partial t^2} = 0, \quad (2.10)$$

cuya solución tiene la forma de ondas planas $e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}$.

Escribamos al tensor dieléctrico en términos de las partes transversal ϵ_T y longitudinal ϵ_L , i.e.

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) = \epsilon_L(\vec{k}, \omega) \hat{k} \hat{k} + \epsilon_T(1 - \hat{k} \hat{k}), \quad (2.11)$$

donde $\hat{k} = \vec{k}/k$ y $\hat{k} \hat{k}$ es el proyector longitudinal. La sustitución de la solución en la ecuación de ondas permite encontrar

$$\vec{k} \times [\vec{k} \times \vec{E}(\vec{k}, \omega)] + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) = 0. \quad (2.12)$$

Por otro lado, de la ecuación de Gauss (2.3) con $\rho = 0$, se sigue que

$$[\vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega)] \epsilon(\vec{k}, \omega) = 0. \quad (2.13)$$

Las posibles soluciones de esta ecuación son:

- i) $\epsilon \neq 0$, entonces $\vec{k} \cdot \vec{E} = 0$.
- o ii) $\vec{k} \cdot \vec{E} \neq 0$, entonces $\epsilon = 0$.

Haciendo uso de i) en la ecuación (2.12) se obtiene

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_T(\vec{k}, \omega), \quad (2.14)$$

que es la relación de dispersión de los modos transversales. De (ii) tenemos que

$$\epsilon_L(\vec{k}, \omega) = 0, \quad (2.15)$$

es la relación de dispersión de los modos longitudinales.

2.2 Modelo de la función dieléctrica para excitones

Para entender el modelo de Hopfield y Thomas de la función dieléctrica para los excitones de Wannier-Mott, hemos desarrollado un modelo simple de osciladores armónicos acoplados. Para ello consideramos el sistema en la presencia de un campo eléctrico aplicado \vec{E} . La energía cinética es

$$T = \frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{x}_i^2, \quad (2.16)$$

y energía potencial

$$V = \frac{1}{2} \alpha \sum_i x_i^2 + \frac{1}{2} \beta \sum_i (x_i - x_{i-1})^2 + V_{ext}. \quad (2.17)$$

donde $V_{ext} = e \sum_i x_i E_i(t)$ y β los parámetros de acoplamiento, que suponemos iguales. La función de Lagrange[30] se define como

$$L = T - V. \quad (2.18)$$

de donde

$$L = \frac{1}{2} m \sum_i \dot{x}_i^2 - \frac{1}{2} \alpha \sum_i x_i^2 - \frac{1}{2} \beta \sum_i (x_i - x_{i-1})^2 - e \sum_i x_i E_i(t). \quad (2.19)$$

La ecuación de movimiento se obtiene de las ecuaciones de Euler-Lagrange[30] que tienen la forma

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad (2.20)$$

donde q_i y \dot{q}_i son las coordenadas y velocidades generalizadas. Haciendo uso de (2.19) en (2.20) se obtiene la ecuación de movimiento

$$m\ddot{x}_n + (\alpha + 2\beta)x_n - \beta x_{n-1} - \beta x_{n+1} = -\epsilon E_n. \quad (2.21)$$

Supongamos que $E_n(t) = E_0 e^{i(kna - \omega t)}$, entonces $x_n(t) = x_0 e^{i(kna - \omega t)}$. Sustituyendo ésta solución se obtiene

$$-\omega^2 m x_0 + \alpha x_0 + 4\beta \left(\sin^2 \frac{ka}{2} \right) x_0 = -\epsilon E_0. \quad (2.22)$$

Para $ka \ll 1$, $\sin \frac{ka}{2}$, entonces la ecuación anterior se escribe como

$$-\omega^2 m x_0 + \alpha x_0 + 4\beta \left(\frac{ka}{2} \right)^2 x_0 = -\epsilon E_0,$$

de donde se obtiene

$$x_0 = \frac{-\epsilon E_0 / m}{\omega_0^2 - \omega^2 + \beta a^2 k^2 / m}. \quad (2.23)$$

La polarización es $\vec{P} = -n\epsilon\vec{F}$, por lo tanto

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \frac{\frac{n\epsilon^2}{m} \vec{E}(\vec{r}, t)}{\omega_0^2 - \omega^2 + \beta a^2 k^2 / m}. \quad (2.24)$$

A partir de ésta expresión de la polarización se puede obtener la expresión de la función dieléctrica la cual tiene la forma

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + Dk^2}, \quad (2.25)$$

donde $\omega_p^2 = 4\pi n\epsilon^2 / m$ y $D = \beta a^2 / m$.

La expresión de la función dieléctrica contiene un término en k^2 , el cual se debe al acoplamiento entre los osciladores armónicos, lo que da la dispersión espacial. Las interacciones dan origen a la propagación de ondas que no son EM. Tomando en cuenta la expresión anterior de $\epsilon(\vec{x}, \omega)$ uno puede escribir[13]

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) = \epsilon_0 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + Dk^2 + i\nu\omega} \quad (2.26)$$

donde ϵ_0 es la constante dieléctrica del trasfondo y ν el parámetro de amortiguamiento. La dependencia en el vector de onda del denominador de $\epsilon(\vec{k}, \omega)$ tiene una interpretación física. De acuerdo con Hopfield y Thomas, el modo normal del cristal al cual se acopla la luz tiene la relación de dispersión

$$\omega_0^2 = \omega_T^2 + Dk^2 \quad \text{o} \quad \hbar\omega_0 \simeq \hbar\omega_T + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

La función dieléctrica tiene una resonancia en la vecindad de ω_T , la cual se atribuye a la transición excitónica. En ésta última ecuación \vec{k} es el momento del centro de masa del excitón y m su masa efectiva. Este modelo de la función dieléctrica describe los excitones de Wannier-Mott, en cuyo caso $D = \hbar\omega_T/(m_h + m_e)$, donde m_h y m_e son las masas del hueco y del electrón, respectivamente. Hacemos notar que aunque el modelo que hemos presentado es clásico, permite estudiar las transiciones excitónicas que formalmente deben tratarse con la teoría cuántica.

2.3 Función dieléctrica hidrodinámica

Los materiales conductores, en los que los efectos no locales son importantes, pueden describirse de manera simple por medio del modelo hidrodinámico. Aunque el modelo no toma en cuenta la excitación de los pares electrón-hueco, sí describe la excitación de ondas longitudinales y las ondas de plasma. En esta sección describimos este modelo[31].

La función dieléctrica puede deducirse de manera simple para un gas de electrones. Sea \vec{J} la corriente total promedio del gas de electrones

$$\vec{J} = \frac{\partial \vec{p}}{\partial t} = ne\vec{v} \quad (2.27)$$

donde n es la densidad de número de electrones, e es la carga del electrón y \vec{v} su velocidad promedio. La ecuación de movimiento del electrón de masa m en el campo eléctrico \vec{E} es

$$m \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \frac{m}{ne} \frac{\partial \vec{J}}{\partial t} = e\vec{E}. \quad (2.28)$$

Esta ecuación no toma en cuenta las colisiones de los electrones. Si tomamos en cuenta éste fenómeno y se hace uso de la aproximación de tiempo de relajación uno puede escribir

$$\frac{m}{ne} \frac{\partial \vec{J}}{\partial t} + \frac{m}{\tau ne} \vec{J} = e\vec{E}, \quad (2.29)$$

donde τ es el tiempo de relajación. La ecuación puede reescribirse como

$$\frac{\partial^2 \vec{p}}{\partial t^2} + \frac{1}{\tau} \frac{\partial \vec{p}}{\partial t} = f\vec{E}, \quad (2.30)$$

con $f = ne^2/m$.

Debido a la variación de la densidad electrónica, el sistema sufre compresiones y rarefacciones por lo que hay que añadir a la fuerza un término que relacione la presión del gas con la variación espacial de \vec{p} . Esta fuerza es débil comparada con las otras de la ec. (2.30) por lo que solo los primeros términos en el desarrollo de las derivadas de \vec{p} se tomarán en cuenta.

Las derivadas de \vec{p} a primero y segundo orden son

$$\vec{\nabla} \times \vec{p}, \quad \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{p}), \quad \vec{\nabla}^2 \vec{p}, \quad \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{p}), \dots$$

El primer término, en un medio isotrópico no contribuye. Con esto la ecuación (2.30) toma la forma

$$\frac{\partial^2 \vec{p}}{\partial t^2} = f\vec{E} - \frac{1}{\tau} \frac{\partial \vec{p}}{\partial t} + \alpha \vec{\nabla} \times (\nabla \vec{p}) + \beta^2 \vec{\nabla}(\nabla \cdot \vec{p}). \quad (2.31)$$

α y β son los parámetros de dispersión espacial. β está relacionado con la compresibilidad del sistema y α con los esfuerzos de corte.

Por medio de la transformada de Fourier, se puede escribir

$$-\omega^2 \vec{p} = f \vec{E}(\vec{k}, \omega) + \frac{1}{\tau} i \omega \vec{p} - \alpha k^2 \vec{p} - \beta^2 k^2 \vec{p}^L, \quad (2.32)$$

donde \vec{p} y \vec{p}^L son las polarizaciones total y longitudinal respectivamente. Como \vec{p} es la suma de las partes transversal y longitudinal

$$\vec{p} = \vec{p}^T + \vec{p}^L,$$

entonces de (2.32)

$$\vec{p}^T = \frac{\vec{E}_T}{\alpha k^2 - i\frac{\omega}{\tau} - \omega^2} \quad \text{y} \quad \vec{p}^L = \frac{f \vec{E}_L}{(\alpha + \beta^2)k^2 - \omega^2 - i\frac{\omega}{\tau}},$$

de donde despejando se obtiene

$$\chi_T(\vec{k}, \omega) = \frac{f}{\alpha k^2 - \omega^2 - i\frac{\omega}{\tau}}, \quad (2.33)$$

$$\chi_L(\vec{k}, \omega) = \frac{f}{(\alpha + \beta^2)k^2 - \omega^2 - i\frac{\omega}{\tau}}. \quad (2.34)$$

Las dos fuerzas adicionales en la ecuación de movimiento de \vec{p} son restitutas, sin embargo, la fuerza de corte de un gas de electrones es menor que la fuerza de compresión y en una buena aproximación se puede ignorar. Si utilizamos que $f = \omega_p^2/4\pi$ es fácil mostrar que las funciones dieléctricas son

$$\epsilon_T(\vec{k}, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau}, \quad (2.35)$$

$$\epsilon_L(\vec{k}, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau - \beta^2 k^2}. \quad (2.36)$$

donde ω_p es la frecuencia de plasma. Estas dos fórmulas se pueden obtener por medio de la teoría microscópica de aproximación de fase aleatoria[32]

(RPA) en el límite de vectores de onda pequeños. En ésta teoría $\beta^2 = \frac{2}{3}v_F^2$ y v_F es la velocidad de Fermi. En el límite local cuando $\vec{k} \rightarrow 0$

$$\epsilon_t(0, \omega) = \epsilon_L(0, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau}. \quad (2.37)$$

Esto indica que en este límite no hay distinción entre las funciones dieléctricas longitudinal y transversal, y que no es posible excitar ondas longitudinales en la ausencia de dispersión espacial. En un medio no local, es posible excitar ondas adicionales a la del fotón. Las ondas excitónicas en semiconductores y las ondas de plasma en conductores o semiconductores altamente impuros. La presencia de estos modos en medios finitos requiere de las condiciones adicionales a la frontera para poder determinar las amplitudes de los campos dispersados.

2.4 Condiciones a la frontera

Las ecuaciones de Maxwell imponen condiciones a la frontera[28] de los campos electromagnéticos. Estas condiciones se encuentran discutidas en los libros de texto de teoría electromagnética, aquí solo las señalamos. De las ecuaciones (2.1)-(2.4) se pueden obtener las siguientes ecuaciones:

i).- La componente tangencial del campo eléctrico es continua

$$E_t^{(1)}|_{sup} = E_t^{(2)}|_{sup}.$$

ii).- La componente normal de la inducción magnética es continua

$$B_n^{(1)}|_{sup} = B_n^{(2)}|_{sup}.$$

iii).- La componente normal del desplazamiento eléctrico (en la ausencia de cargas superficiales) es continua

$$D_n^{(1)}|_{sup} = D_n^{(2)}|_{sup}.$$

iv).- La componente tangencial del campo magnético es continua

$$H_t^{(1)}|_{sup} = H_t^{(2)}|_{sup}.$$

En general, la dirección del vector \vec{E} es arbitraria. Sin embargo, es posible encontrar una componente de este vector en el plano de incidencia (onda de polarización p) y otra perpendicular al plano de incidencia (onda de polarización s). Este plano está definido por el vector de onda \vec{q} y de la normal a la superficie de discontinuidad. Los dos tipos de polarización se pueden tratar de manera independiente, por lo que de las condiciones (i-iv) solo tres son diferentes de cero; y de éstas tres solo dos independientes. Por ejemplo para ondas de polarización p la componente normal de \vec{E} es cero, de donde solo i, iii y iv son útiles. De éstas tres ecuaciones, se puede mostrar fácilmente que solo dos son independientes.

2.5 Condiciones adicionales a la frontera CAF's

2.5.1 Para semiconductores excitónicos

Modelo de las CAF's de Fuchs y Halevi

Consideremos el modelo de Hopfield y Thomas[13] (2.26) de la función dieléctrica de los excitones de Wannier en las relaciones de dispersión de los modos electromagnéticos. Para el caso de modos transversales encontramos que existen dos soluciones diferentes de \vec{k} que corresponden a dos modos, y para los modos longitudinales tenemos una solución de \vec{k} que corresponde a un modo, es decir, en el semiconductor existen dos ondas adicionales a la del fotón, éstas son las ondas excitónicas.

Supongamos que hacemos incidir luz en la superficie libre de un semiconductor excitónico, entonces en el volumen del material se generaran tres modos. Para determinar la amplitud de reflexión de la onda reflejada debemos conocer también las amplitudes de las ondas transmitidas. De las ecuaciones de Maxwell se obtienen dos ecuaciones que provienen de las dos condiciones de frontera, a saber, la continuidad de los componentes tangenciales de \vec{E}

y \vec{H} . Sin embargo, existen cuatro amplitudes desconocidas, por lo que se necesitan dos condiciones a la frontera adicionales.

El problema de las condiciones adicionales a la frontera (CAF's) ha sido un problema que ha motivado muchas investigaciones tanto teóricas como experimentales. El primero en considerar este problema fue Pekar en 1958. Posterior a Pekar ha habido varios autores, de los más recientes encontramos a Fuchs y Halevi quienes propusieron un modelo de los CAF's generalizadas basados en un modelo del comportamiento de los excitones cerca de la superficie semiconductor.

El modelo de Fuchs y Halevi se basa en la relación que existe entre el desplazamiento eléctrico y el campo eléctrico

$$D_j(\vec{x}, t) = D_j(x, z, t) = \int D_j(k, \omega | z) e^{i(kx - \omega t)} dk d\omega,$$

con

$$D_j(z) = \int_0^\infty \epsilon(z-z') E_j(z') dz' + U_j \int_0^\infty \epsilon(z+z') E_j(z') dz', \quad j = x, z, \quad (2.38)$$

con $D_j(k, \omega | z) = D_j(z)$. En estas ecuaciones $\epsilon(z-z')$ representa la respuesta directa no local en z debida a una excitación en z' y $\epsilon(z+z')$ representa la respuesta no-local debido a una excitación la cual ha sido dispersada por la superficie. Esta situación se representa esquemáticamente en la Fig. 1.1. Los parámetros U_j que representan la fracción de la excitación que se dispersa debido a la superficie, deben satisfacer la conservación de la energía y por lo tanto sus valores cumplen con la condición $|U_j| \leq 1$.

Mediante la sustitución de la fórmula (2.38) en la ecuación (2.10) se puede demostrar que la polarización excitónica satisface la ecuación

$$(1 + U_j) \frac{dP_j(0)}{dz} + i\Gamma(1 - U_j)P_j(0) = 0, \quad j = x, z. \quad (2.39)$$

Para obtener esta fórmula se hace uso de

$$\vec{P} = \sum_{n=1}^3 \vec{P}_n e^{iq_n z} e^{ikx} = \sum_{n=1}^3 X_n(\vec{q}_n, \omega) \vec{E}_n e^{i(\vec{q}_n \cdot \vec{x} - \omega t)}, \quad (2.40)$$

$$\Gamma^2 = \frac{(\omega^2 - \omega_T^2 - Dk^2 + i\omega\nu)}{D}, \quad X_n(\bar{q}_n, \omega) = \frac{1}{q_n^2 - \Gamma^2(\omega)}.$$

Los casos particulares de (2.39) son varios, por ejemplo, si $U_x = U_z = -1$ se obtiene la condición de Pekar, la cual se escribe como

$$\bar{P}|_{sup} = 0.$$

Si $U_x = U_z = 1$ se obtiene la condición de Ting-Frankel-Birman

$$\frac{\partial P}{\partial \bar{n}}|_{sup} = 0.$$

Si $U_x = -U_z = 1$ se obtiene la condición de Fuchs-Kliwewer. Una forma alternativa de escribir a las CAF's es

$$[\alpha \bar{P} + \frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{n}}]|_{sup} = 0. \quad (2.41)$$

La cual fué usada por Maradudin y Mills[47]. En esta ecuación α en general, son parámetros función de la frecuencia, complejos y diferentes y $\frac{\partial}{\partial \bar{n}}$ es la derivada normal hacia afuera del semiconductor. En este trabajo tomamos esta fórmula.

Modelo de las CAF's de Sel'kin

Las condiciones adicionales a la frontera también se han estudiado por A. Sel'kin[18] y colaboradores. Estos autores encontraron una forma de las CAF's a través del teorema de Poynting y la conservación de la energía. El tratamiento es diferente por ejemplo, el desarrollado por Halevi y Fuchs. En esta sección presentamos la expresión de la energía cerca de la resonancia excitónica.

El punto de partida es la ecuación de movimiento para la polarización excitónica $\bar{P}(\bar{x}, t)$, la cual se vale en la vecindad de la resonancia excitónica.

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \omega_0^2 + \Gamma \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar \omega_0}{m} \nabla^2 \right] \vec{P}(\vec{x}, t) = \omega_0^2 \beta_0 \vec{E}(\vec{x}, t), \quad (2.42)$$

donde ω_0 es la frecuencia de la resonancia que corresponde al fondo de la banda excitónica, β_0 es la polarizabilidad estática, la cual es proporcional a la intensidad del oscilador de la transición excitónica, Γ es la constante de amortiguamiento. El vector $\vec{P}(\vec{x}, t)$ está relacionado con el desplazamiento eléctrico $\vec{D}(\vec{x}, t)$ y el campo eléctrico $\vec{E}(\vec{x}, t)$ a través de

$$\vec{D}(\vec{x}, t) = \epsilon_0 \vec{E}(\vec{x}, t) + 4\pi \vec{P}(\vec{x}, t), \quad (2.43)$$

donde ϵ_0 es la constante dieléctrica del trasfondo del medio. En este tratamiento, la dispersión espacial se introduce por medio de la masa m finita del excitón.

Del teorema de Poynting y de la ecuación (2.42) se puede obtener

$$\begin{aligned} & \frac{c}{4\pi} \nabla \cdot [\vec{E} \times \vec{B}] = \\ & - \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\vec{B}^2 + \epsilon_0 \vec{E}^2}{8\pi} + \frac{\vec{P}^2}{2\beta_0 \omega_0^2} + \frac{\vec{P}^2}{2\beta_0} \right] \\ & - \frac{\Gamma \vec{P}^2}{\omega_0^2 \beta_0} + \frac{\hbar}{\beta_0 \omega_0} \vec{P} \cdot \nabla^2 \vec{P}, \end{aligned} \quad (2.44)$$

con \vec{B} la inducción magnética.

A continuación reescribimos la ecuación (2.44) haciendo uso de la identidad

$$\dot{P}_i \nabla^2 P_i = \nabla \cdot [\dot{P}_i \nabla P_i] - \nabla \dot{P}_i \cdot \nabla P_i \quad i = x, y, z. \quad (2.45)$$

El resultado es

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{S} - Q, \quad (2.46)$$

donde

$$W = \frac{\vec{B}^2 + \epsilon_0 \vec{E}^2}{8\pi} + \frac{\vec{P}^2 + \omega_0^2 \vec{P}^2}{2\beta_0 \omega_0^2} + \frac{\hbar}{2M\omega_0\beta_0} \sum_{i=1}^3 (\vec{\nabla} P_i)^2, \quad (2.47)$$

\vec{S} el vector de Poynting

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} \vec{E} \times \vec{B} - \frac{\hbar}{\omega_0\beta_0 M} \sum_{i=1}^3 \dot{P}_i \vec{\nabla} P_i, \quad (2.48)$$

y

$$Q = \frac{\Gamma}{\omega_0^2 \beta_0} \vec{P}^2. \quad (2.49)$$

La ecuación (2.46) es el teorema de Poynting modificado puesto que se ha incluido un término de la polarización excitónica. El término $\vec{E} \times \vec{B}$ representa el flujo del campo electromagnético, mientras que el término $\dot{P}_i \vec{\nabla} P_i$ es el flujo de la polarización excitónica. Q es siempre positivo y da la disipación, en contraste con $\int \vec{J} \cdot \vec{E}$ el cual no es positivo definido y tampoco da la disipación. Si los campos vectoriales se consideran reales, esta ecuación representa una conservación de energía. En éste caso W es la densidad de energía, \vec{S} es la densidad de flujo de energía, y Q es la potencia de disipación de energía. Se nota que la existencia de dispersión espacial en las ecuaciones (2.47) y (2.48), introduce términos adicionales en las expresiones de la energía y la densidad de flujo, donde aparece explícitamente la dependencia en la masa excitónica.

Si consideramos que los campos sean monocromáticos de frecuencia ω real, podemos escribir

$$\vec{F}(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} [\vec{F}(\omega, \vec{x}) e^{-i\omega t} + \vec{F}^*(\omega, \vec{x}) e^{i\omega t}], \quad (2.50)$$

donde \vec{F} , representa los campos \vec{E} , \vec{B} o \vec{P} .

Si se substituyen los campos con la forma (2.50) en las ecuaciones para W y \vec{S} , y se toma el promedio temporal, se obtiene el promedio temporal de la densidad de energía y del flujo a la frecuencia ω . El resultado es

$$W = \frac{|\vec{B}|^2 + \epsilon_0 |\vec{E}|^2}{16\pi} + \frac{\omega^2 + \omega_0^2}{4\beta_0 \omega_0^2} |\vec{P}|^2 + \frac{\hbar}{4M\omega_0\beta_0} \sum_{i=1}^3 |\vec{\nabla} P_i|^2, \quad (2.51)$$

$$\vec{S}(\omega, \vec{x}) = \frac{c}{16\pi} \vec{E}(\omega, \vec{x}) \times \vec{B}^*(\omega, \vec{x}) + \frac{i\hbar\omega}{4M\beta_0\omega_0} \sum_{i=1}^3 P_i(\omega, \vec{x}) \vec{\nabla} P_i^*(\omega, \vec{x}) + c \cdot c \cdot \cdot \quad (2.52)$$

Cuando no hay fuentes de campos en el medio, el campo total se puede escribir como la superposición

$$\vec{E}(\omega, \vec{x}) = \sum_{\alpha} \vec{E}_{\alpha} e^{i\vec{k}_{\alpha} \cdot \vec{x}}, \quad (2.53)$$

con $\vec{E}_{\alpha} = \vec{E}_{\alpha}(\omega, \vec{k}_{\alpha})$ y \vec{k}_{α} es el vector de onda, en general complejo, del modo α . El análisis de la distribución de energía entre los diferentes modos se puede llevar a cabo con las ecuaciones (2.51) y (2.52).

Consideremos las componentes z de \vec{S} cerca de la superficie (plano xy) libre del semiconductor infinito, $S_z(\omega, 0^-)$ y $S_z(\omega, 0^+)$ fuera y dentro del material, respectivamente. Para conectar estas cantidades se usan las condiciones a la frontera para los campos $\vec{E}(\omega, \vec{x})$ y $\vec{B}(\omega, \vec{x})$:

$$\hat{e}_z \times [\vec{E}(\omega, 0^+) - \vec{E}(\omega, 0^-)] = 0, \quad (2.54)$$

$$\hat{e}_z \times [\vec{B}(\omega, 0^+) - \vec{B}(\omega, 0^-)] = -\frac{i\omega}{c} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\delta}^{\delta} \vec{D}(\omega, \vec{x}) dz \equiv \frac{4\pi}{c} \vec{J}_F(\omega; x, y), \quad (2.55)$$

donde \vec{J}_F es la densidad de corriente superficial. Si se usan (2.54) y (2.55) en (2.52) se obtiene la ecuación

$$S_z(\omega, 0^+) = S_z(\omega, 0^-) + \left[-\frac{\vec{E}(\omega, 0^+) \cdot \vec{J}_F}{4} + \frac{i\pi\mu c^2}{\omega} \vec{P}(\omega, 0^+) \cdot \frac{\partial}{\partial z} \vec{P}^*(\omega, 0^+) + c \cdot c \cdot \right], \quad (2.56)$$

La ecuación (2.56) muestra que la componente z de \vec{S} que es perpendicular a la superficie tiene una discontinuidad en $z = 0$. Esta discontinuidad está asociada con la existencia de una corriente superficial, así como con el comportamiento de la polarización cerca de la superficie. La primera razón de la discontinuidad del flujo de energía se encuentra en medios con o sin dispersión espacial y la segunda, está asociada con la dispersión espacial, y con las CAF's impuestas en $\vec{P}(\vec{x}, t)$.

En particular, en la ausencia de corrientes superficiales $\vec{J}_F = 0$ y las CAF's dadas en la forma $\vec{P}(\omega, 0^+) = 0$ o $\frac{\partial \vec{P}(\omega, 0^+)}{\partial z} = 0$, el flujo de energía no tiene discontinuidad en la superficie. de manera general se puede escribir

$$[\vec{P}(\omega, \vec{x}) + \gamma(\omega) \frac{\partial \vec{P}(\omega, \vec{x})}{\partial z}]_{z=0^+} = 0, \quad (2.57)$$

donde $\gamma(\omega)$ es un parámetro, complejo en general, la condición para la continuidad del flujo de energía es $Im\gamma(\omega) = 0$. Si $Im\gamma(\omega) > 0$ la frontera genera energía, para $Im\gamma(\omega) < 0$ la superficie disipa energía.

2.5.2 Para metales en la presencia de ondas de plasma

La continuidad de la componente normal de \vec{E}

Un modelo de condición adicional a la frontera para el gas de electrones, es la continuidad[31] de la componente perpendicular a la superficie del metal del campo \vec{E} . Esta suposición se puede hacer debido a que en un sistema real la densidad de carga superficial no es singular. En éste caso simple, todos los campos son continuos.

Existen situaciones en las que no se puede suponer que todos los campos son continuos en la superficie. Por ejemplo, en el caso local la componente de \vec{E} normal a la superficie es discontinua. Para metales no locales, en la vecindad de transiciones interbanda, existe una contribución adicional ϵ_b a la función dieléctrica la cual da un término $\epsilon_b \vec{E}$ al desplazamiento eléctrico. Este es continuo en la superficie lo que da una singularidad de la carga de polarización, con un perfil suave para la densidad de cargas de conducción.

Modelo semiclásico de barrera infinita SCIB

Kliwer y Fuchs[14] estudiaron las propiedades ópticas de metales en la presencia de ondas de plasma. Debido a las ondas adicionales se necesitan las condiciones adicionales a la frontera para resolver el problema de la reflexión de las ondas electromagnéticas en la superficie metálica. El estudio se llevó a cabo mediante, lo que se conoce como modelo semiclásico de barrera infinita (SCIB).

Supongamos que el metal ocupa la región $z > 0$ de un sistema de coordenadas xyz , y que la propagación de las ondas está en el plano xz (ver Fig. 1.2) y además de polarización p . La ecuación de ondas tiene la forma

$$\nabla^2 \vec{E}(\vec{r}) - \nabla \times (\nabla \times \vec{E}(\vec{r})) + \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}(\vec{r}) = -\frac{4\pi i\omega}{c^2} \vec{J}(\vec{r}), \quad (2.58)$$

donde \vec{E} es el campo eléctrico y $\vec{J}(\vec{r})$ es la densidad de corriente. La transformada de Fourier para la componente paralela a la superficie metálica permite escribir

$$\frac{d^2}{dz^2} E_x - iq_x \frac{d}{dz} E_z + \frac{q^2}{z^2} D_x = 0, \quad (2.59)$$

$$-q_x^2 E_z - iq_x \frac{d}{dz} E_x + \frac{q^2}{z^2} D_z = 0,$$

donde $\vec{D} = \vec{E} + 4\pi i\vec{J}/\omega$, $\vec{q} = q_x \hat{x} + q_z \hat{z}$. Para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales, Kliwer y Fuchs supusieron que el metal ocupaba todo el espacio, de $-\infty$ a $+\infty$, es decir, imaginaron un sistema ficticio. Además supusieron que los electrones se reflejaban especularmente en la superficie. Esta última suposición lleva a suponer que las componentes de los campos EM cumplen con las siguientes condiciones de simetría

$$\begin{aligned} E_x(z) &= E_x(-z), \\ E_z(z) &= -E_z(-z), \\ D_x(z) &= D_x(-z), \\ D_z(z) &= -D_z(-z). \end{aligned} \quad (2.60)$$

Estas condiciones son equivalentes a hacer que el tensor de conductividad tome la forma

$$\sigma_s(\vec{x}, \vec{x}') = \begin{cases} \sigma_v(x, y, z; x', y', z') + \sigma_v(x, y, z; x', y', -z') \cdot \alpha & z \text{ y } z' \geq 0, \\ 0 & z \text{ o } z' < 0, \end{cases}$$

donde α representa el hecho de que los electrones se reflejan especularmente

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.61)$$

σ_s y σ_v son las conductividades superficial y volumétrica respectivamente. La densidad de corriente está dada por

$$\vec{J}(\vec{x}) = \int_{z' > 0} \sigma(\vec{x}, \vec{x}') \cdot \vec{E}(\vec{x}') d^3 \vec{x}'. \quad (2.62)$$

Sustituyendo el valor de σ en (2.62) y cambiando $z' \rightarrow -z'$ en el segundo término, se puede escribir

$$\vec{J}(\vec{x}) = \int \sigma_v(\vec{x}, \vec{x}') \cdot \vec{E}(\vec{x}') d^3 \vec{x}', \quad (2.63)$$

donde

$$\vec{E}(x, y, z) = \begin{cases} \vec{E}(x, y, z) & z > 0, \\ \alpha \cdot \vec{E}(x, y, z) & z < 0. \end{cases}$$

donde $\alpha \cdot \vec{E}(x, y, z) = [E_x(x, y, -z), E_y(x, y, -z), -E_z(x, y, -z)]$. Con esto, al metal se representa como si ocupara todo el espacio.

La transformada de Fourier es

$$E(q_z) = \int_{-\infty}^{\infty} E(z) e^{-iq_z z} dz. \quad (2.64)$$

y la transformada inversa es

$$E(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dq_z E(q_z) e^{iq_z z}. \quad (2.65)$$

De las condiciones de simetría para el campo EM, uno puede obtener que

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{d^2}{dz^2} E_x e^{-iq_z z} = -q_z^2 E_x - 2 \frac{dE_x(0^+)}{dz}, \quad (2.66)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{dE_z}{dz} e^{-iq_z z} = -2E_z(0^+) + iq_z E_z(q_z). \quad (2.67)$$

Mediante el uso de la ley de Faraday y las ecs. (2.66) y (2.67), la primera de las ecuaciones (2.59) toma la forma

$$-q_z^2 E_x(q_z) + q_x q_z E_z(q_z) + \frac{\omega^2}{c^2} D_x(q_z) = \frac{2i\omega}{c} H_y(o^+), \quad (2.68)$$

y de manera similar, la segunda ecuación (2.59) se transforma en

$$-q_x^2 E_z(q_z) + q_z q_x E_x(q_z) + \frac{\omega^2}{c^2} D_z(q_z) = 0. \quad (2.69)$$

La relación entre D y E es

$$D_i = \sum_j \epsilon_{ij} E_j, \quad (2.70)$$

donde ϵ_{ij} es el tensor dieléctrico. En un sistema de coordenadas en el que el tensor dieléctrico es diagonal se puede escribir

$$\epsilon' = \begin{pmatrix} \epsilon_t & 0 \\ 0 & \epsilon_l \end{pmatrix}. \quad (2.71)$$

con ϵ_t y ϵ_l las componentes transversal y longitudinal.

Ahora encontremos las relaciones entre ϵ_t y ϵ_l con las componentes ϵ_{ij} . Para lograr esto recordemos la definición del tensor ϵ dado en 2.11. De donde se sigue que

$$\epsilon_{xx} = \frac{1}{q^2} [\epsilon_t q_z^2 + \epsilon_l q_x^2], \quad (2.72)$$

$$\epsilon_{zz} = \frac{1}{q^2} [\epsilon_l q_x^2 + \epsilon_l q_z^2], \quad (2.73)$$

$$\epsilon_{zx} = \epsilon_{xz} = \frac{1}{q^2} [\epsilon_l - \epsilon_l] q_x q_z, \quad (2.74)$$

donde $q^2 = q_x^2 + q_z^2$. Haciendo uso de (2.70) se resuelven las ecuaciones (2.68) y (2.69) para obtener

$$\frac{E_x(q_z)}{H_y(0^+)} = \frac{2i\omega}{c} \left[\frac{T_{zx}}{T_{xx}T_{zz} - T_{zx}T_{zx}} \right], \quad (2.75)$$

donde

$$T_{ij} = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{ij} - q^2 \delta_{ij} + q_i q_j. \quad (2.76)$$

Sustituyendo valores en (2.75) se obtiene

$$\frac{E_x}{H_y(0^+)} = \frac{2i\omega}{cq^2} \left[\frac{q_x^2}{\omega^2 \epsilon_l} + \frac{q_z^2}{\omega^2 \epsilon_l - q^2} \right]. \quad (2.77)$$

La transformada de Fourier inversa de (2.77) da el cociente de los campos EM para el sistema real

$$Z_p \equiv \frac{E_x(0^+)}{H_y(0^+)} = \frac{2i\Omega}{\pi} \int_0^\infty \frac{dQ_z}{Q^2} \left[\frac{Q_x^2}{\Omega^2 \epsilon_l} + \frac{Q_z^2}{\Omega^2 \epsilon_l - Q^2} \right]. \quad (2.78)$$

En la ecuación (2.78) $Z_p(0)$ es la impedancia de superficie, y las cantidades adimensionales son: $\Omega (= \omega/\omega_p)$ la frecuencia, $Q (= qc/\omega_p)$ la magnitud del vector de onda, Q_x y Q_z las componentes del vector de onda. Después de obtener Z_p , se pueden obtener las propiedades ópticas. El caso de ondas de polarización s se estudia de manera similar pero más simple el álgebra.

En este capítulo hemos presentado una revisión de las CAF's tanto para semiconductores como para metales. La teoría que hemos revisado la usaremos en capítulos posteriores para estudiar las propiedades ópticas de medios con dispersión espacial.

Capítulo 3

REFLECTANCIA

En este capítulo estudiamos las formulas de la reflectancia de la luz para diferentes sistemas físicos. Para este fin, usamos el método de la impedancia de superficie, el cual describimos en la primera sección. Después calculamos la reflectancia para el sistema de emparedado en la teoría local, para una superficie excitónica en la presencia de efectos no locales y por último estudiamos el sistema emparedado en la presencia de dispersión espacial.

3.1 Impedancia de superficie

El cálculo de la reflectancia se hace mediante la impedancia de superficie. Este método se ha usado ampliamente y consiste en expresar la reflectancia R en terminos de la impedancia de superficie Z . Para el caso de luz de polarización p estas cantidades las denotaremos por R_p y Z_p , respectivamente. La definición[35] de Z_p es

$$Z_p(0) = \frac{E_p(0)}{H_y(0)}. \quad (3.1)$$

Para obtener la fórmula deseada para R_p , consideremos una interface entre dos medios semiinfinitos arbitrarios. Estos medios pueden estar compuestos de un número diferente de capas. Existe sin embargo una restricción para el medio de la izquierda, a saber, en la vecindad inmediata de la interface, este debe estar caracterizado por una función dieléctrica ϵ local. Esto

implica que, a la izquierda de la interface los campos se forman de una onda incidente y una reflejada. Las condiciones a la frontera las satisfacen las componentes tangenciales de \vec{E} y \vec{H} . Las componentes para el medio de la izquierda son

$$E_x(z) = E_x^+ e^{iqz} - E_x^- e^{-iqz},$$

$$H_y(z) = Y_l [E_x^+ e^{iqz} + E_x^- e^{-iqz}], \quad (3.2)$$

donde E_x^+ y E_x^- son las amplitudes de las ondas incidentes y reflejada respectivamente y Y_l la admitancia superficial, con $Y_l = 1/Z_l$

$$Y_l = \frac{iq}{\epsilon_p}, \quad \text{y} \quad q^2 + Q^2 = \frac{Q^2}{\epsilon_p}.$$

La sustitución de (3.2) en (3.1) permite escribir

$$Z_p(0) = \frac{E_x^+ - E_x^-}{Y_l [E_x^+ + E_x^-]}, \quad (3.3)$$

De esta ecuación se obtiene la amplitud reflejada

$$\frac{E_x^-}{E_x^+} = \frac{Z_p - Z_l}{Z_p + Z_l}, \quad (3.4)$$

de donde la reflectancia [14] es

$$R_p = |r_p|^2 = \left| \frac{Z_p - \frac{\cos \theta}{n_p}}{Z_p + \frac{\cos \theta}{n_p}} \right|^2, \quad (3.5)$$

En esta fórmula Z_p es para cualquier sistema que se localice a la derecha de la interface

3.2 R_p de un sistema emparedado. Caso local

Consideremos la geometría prisma-película-substrato. Para usar la fórmula de R_p , ecuación (3.5), suponemos que el sistema bajo estudio es la película crecida sobre el substrato. La película tiene constante $\epsilon_1(\omega)$ y espesor d_1 y

el sustrato una constante $\epsilon_2(\omega)$. En esta sección sólo consideramos el caso local. Ahora procedemos a calcular Z_p .

En la película los campos tienen la misma forma de (3.2), con Y_1 en lugar de Y_l , q_1 en lugar de q y las amplitudes E_1^\pm . En el sustrato solo hay una onda saliente

$$\begin{aligned} E_x^{(2)}(z) &= E_2^+ e^{iq_2 z}, \\ H_y^{(2)}(z) &= Y_2 E_2^+ e^{iq_2 z}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Se puede mostrar que para $z = 0^+$

$$Z_p(0^+) = \frac{E_1^+ - E_1^-}{Y_1 [E_1^+ + E_1^-]}, \quad (3.7)$$

y en $z = d$

$$Z_p(d) = \frac{E_1^+ e^{iq_1 d} - E_1^- e^{-iq_1 d}}{Y_1 [E_1^+ e^{iq_1 d} + E_1^- e^{-iq_1 d}]}. \quad (3.8)$$

De la ecuación (3.8) se obtiene $\frac{E_1^-}{E_1^+}$ y si el resultado se usa en (3.7) uno obtiene

$$Z_p(0) = \frac{Z_p(d) Y_1 \cos(q_1 d) - i \sin(q_1 d)}{Y_1 [-Z_p(d) Y_1 i \sin(q_1 d) + \cos(q_1 d)]}. \quad (3.9)$$

Por último, de (3.6) se tiene

$$Z_p(d) = \frac{1}{Y_2} = \frac{c q}{\epsilon_2 \omega}. \quad (3.10)$$

Si la ecuación (3.10) se usa en (3.9) y este último en (3.5) se tiene la reflectancia.

3.3 R_p para una superficie semiconductor excitónica

Consideramos la superficie libre de un semiconductor sobre la que incide luz. Calculemos la reflectancia haciendo uso de la definición de Z_p [17]. Las componentes de los campos refractados en el semiconductor semiinfinito para ondas de polarización p se pueden escribir como

$$E_x(z) = \sum_{j=1}^3 E_j e^{iq_j z}, \quad (3.11)$$

$$H_y(z) = \sum_{j=1}^3 Y_j E_j e^{iq_j z}, \quad (3.12)$$

$$Z_j = \frac{q_j c}{\epsilon_j \omega}, \quad \epsilon_j = \epsilon_j(q_j, Q, \omega) \quad (3.13)$$

donde j denota el número de modo, q_1 y q_2 denotan la componente z del vector de onda de los modos transversales y q_3 el modo longitudinal $Y_j = \frac{1}{Z_j}$. Los campos de la polarización excitónica se escriben como

$$\vec{P}(z) = \frac{\omega_p^2}{4\pi D} \sum_{j=1}^3 X_j(Q, q_j, \omega) \vec{E}_j e^{iq_j z}, \quad (3.14)$$

cuyas componentes son

$$P_x(z) = \frac{\omega_p^2}{4\pi D} \sum_{j=1}^3 X_j(Q, q_j, \omega) E_j e^{iq_j z}, \quad (3.15)$$

$$P_z(z) = \frac{-\omega_p^2}{4\pi D} \sum_{j=1}^3 D_j X_j(Q, q_j, \omega) E_j e^{iq_j z}, \quad (3.16)$$

con

$$D_j = +\frac{Q}{q_j}, \quad j = 1, 2, \quad D_3 = -\frac{q_3}{Q}. \quad (3.17)$$

En términos de las amplitudes del campo eléctrico, las CAF's $\alpha \vec{P} + \frac{\partial}{\partial \pi} \vec{P} = 0$ pueden escribirse como: Para la componente x de \vec{P}

$$\sum_{j=1}^3 \beta_j E_j = 0, \quad (3.18)$$

y para la componente z de \vec{P}

$$\sum_{j=1}^3 D_j \gamma_j E_j = 0 \quad (3.19)$$

donde hemos escogido $\alpha_{ij} = \alpha \delta_{ij}$,

$$\beta_j = \frac{\alpha - iq_j}{q_j^2 - \Gamma^2}, \quad \gamma_j = -\frac{\alpha - iq_j}{q_j^2 - \Gamma^2}.$$

Tomando en cuenta (3.11) y (3.12), la impedancia de superficie se puede escribir como

$$Z_p(0^+) = \frac{E_1 + E_2 + E_3}{Y_1 E_1 + Y_2 E_2}.$$

Si hacemos uso de la fórmula de los CAF's obtenemos

$$Z_p(0^+) = \frac{c}{\omega} \frac{(1,2) + (2,3) + (3,1)}{\frac{1}{q_1^2}(2,3) + \frac{1}{q_2^2}(3,1)} \quad (3.20)$$

donde se ha definido

$$(i,j) = \beta_i \gamma_j' - \beta_j \gamma_i', \quad \gamma_j' = \gamma_j D_j.$$

Ahora trataremos el caso de luz incidente de polarización s . En este caso, la componente del campo \vec{E} que es diferente de cero es E_y , y no tenemos onda longitudinal. Para la impedancia de superficie escribimos

$$Z_s = -\frac{E_y(0)}{H_x(0)} = \frac{E_1 + E_2}{\frac{2\alpha}{k_0} E_1 + \frac{2\alpha}{k_0} E_2}, \quad k_0 = \frac{\omega}{c}, \quad (3.21)$$

la condición adicional a la frontera[17] es

$$[\alpha P_y + \frac{\partial}{\partial \hat{n}} P_y]|_{sup} = 0. \quad (3.22)$$

Por medio de esta ecuación obtenemos

$$\frac{E_1}{E_2} = -\frac{\alpha_2}{\alpha_1},$$

donde

$$\alpha_j = \frac{\alpha - iq_j}{q_j^2 - \Gamma^2}.$$

De esto se sigue que

$$Z_s(0^+) = \frac{\alpha_1 - \alpha_2}{\frac{2\alpha}{k_0} \alpha_1 - \frac{2\alpha}{k_0} \alpha_2}. \quad (3.23)$$

Esta fórmula permite encontrar la reflexión para ondas de polarización s , la cual tiene la forma[17]

$$R_s = \left| \frac{1 - Z_s \cos \theta}{1 + Z_s \cos \theta} \right|^2 \quad (3.24)$$

3.4 R_p para el sistema emparedado. Caso no local

Esta sección se dedica al cálculo de R_p para el sistema prisma-vacio-semiconductor excitónico. En el semiconductor se supone la existencia de una capa superficial libre de excitones, la capa muerta y en el volumen los

efectos no-locales. La capa muerta de excitones se debe al potencial superficial el cual impide a los excitones alcanzar la superficie, es decir las partículas se reflejan o recombinan cerca de la superficie. Esta geometría permite estudiar la simulación del experimento de excitación y detección de los excitones de superficie.

En el vacío, de nuevo las componentes de los campos \vec{E} y \vec{H} tienen la forma de (3.2)

$$q_v^2 + Q^2 = \frac{\omega^2}{c^2}, \quad Z_p = \frac{q_v c}{\omega}, \quad Y_v = \frac{1}{Z_v}$$

y las amplitudes E_v^\pm . La impedancia de superficie en $z = 0$ es

$$Z_p(0) = \frac{E_x^v(0)}{H_y^v(0)} = \frac{1 - (E_v^-/E_v^+)}{Y_v[1 + (E_v^-/E_v^+)]} \quad (3.25)$$

en $z = d$,

$$Z_p(d) = \frac{E_v^+ e^{iq_v d} - E_v^- e^{-iq_v d}}{Y_v[E_v^+ e^{iq_v d} + E_v^- e^{-iq_v d}]} \quad (3.26)$$

Sustituyendo este resultado en (3.25) obtenemos

$$Z_p(0) = \frac{Y_v Z_p(d) \cos(q_v d) - i \sin(q_v d)}{Y_v[-i Y_v Z_p(d) \sin(q_v d) + \cos(q_v d)]} \quad (3.27)$$

En esta ecuación se desconoce $Z_p(d)$. En la capa muerta los campos tienen la forma de (3.2), por lo que un procedimiento igual al que se sigue para obtener (3.27), permite escribir

$$Z_p(d) = \frac{Y_0 Z_p(D) \cos(q_0 d_0) - i \sin(q_0 d_0)}{Y_0[-i Y_0 Z_p(D) \sin(q_0 d_0) + \cos(q_0 d_0)]} \quad (3.28)$$

donde $Y_0 = \frac{1}{Z_0}$, $Z_0 = q_0 c / (\epsilon_0 \omega)$, $D = d_0 + d$, $q_0^2 + Q^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_0$. En la ecuación (3.28) se desconoce $Z_p(D)$. Finalmente, la fórmula para $Z_p(D)$ se obtiene de la misma forma en que se obtiene la ecuación (3.20) para $Z_p(0)$ y cuyo valor es

$$Z_p(D) = \frac{c(1.2) + (2.3) + (3.1)}{\omega \frac{\epsilon_1}{q_1}(2.3) + \frac{\epsilon_2}{q_2}(3.1)}.$$

En este capítulo hemos presentado las formulas de reflectancia de la luz para diferentes geometrias. Hemos calculado primero la fórmula general de R_p en términos de la impedancia de superficie Z_p . Posteriormente hemos obtenido las formulas de Z_p para: el sistema emparedado en el caso local, una superficie semiconductor excitónica, un emparedado con dispersión espacial y por último la reflectancia para ondas de polarización s .

Capítulo 4

ONDAS DE SUPERFICIE

Presentamos la revisión de las relaciones de dispersión de las ondas de superficie. Consideramos primero el caso de un sistema emparedado, después una superficie y para terminar estudiamos los modos simétrico y antisimétrico de una película simétrica. En este capítulo estudiamos solo el caso local. El tratamiento de los efectos no locales lo hicimos en términos de los espectros de reflectancia, en el capítulo anterior.

4.1 Sistema de emparedado

Consideremos el sistema de emparedado que consiste de una placa de ancho d y función dieléctrica $\epsilon_2(\omega)$ limitada por dos medios semiinfinitos de función dieléctrica $\epsilon_1(\omega)$ y $\epsilon_3(\omega)$ respectivamente. Supongamos que el origen del sistema de coordenadas está en la mitad de la placa y que el medio 1 está en $z < -a$ y el medio 3 en $z > a$, donde $d = 2a$. Para obtener la relación de dispersión de los modos de superficie se supone solución de onda saliente para la ecuación de ondas. El vector de onda es $\vec{q} = (Q, 0, \pm q)$. Debido a que la dependencia en x y t tienen la forma $e^{i(Qx - \omega t)}$, esta dependencia se omitirá en el resto de la tesis. En el medio 1 tenemos

$$\begin{aligned} E_x(z) &= E_1^- e^{-iq_1 z}, \\ H_y(z) &= Y_1 E_1^- e^{-iq_1 z}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

con $Y_1 = 1/Z_1$ y $Z_1 = cq/\epsilon_1\omega$. En el medio 2

$$\begin{aligned} E_x(z) &= E_2^+ e^{iq_2 z} - E_2^- e^{-iq_2 z}, \\ H_y(z) &= Y_2[E_2^+ e^{iq_2 z} + E_2^- e^{-iq_2 z}], \end{aligned} \quad (4.2)$$

y en el medio 3

$$\begin{aligned} E_x(z) &= E_3^+ e^{iq_3 z}, \\ H_y(z) &= Y_3 E_3^+ e^{iq_3 z}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Usando las condiciones a la frontera en $z = -a$ y a , y después de un álgebra sencilla se puede escribir[33]

$$\left[1 + \frac{q_1 \epsilon_2}{q_2 \epsilon_1}\right] \left[1 + \frac{q_2 \epsilon_3}{q_3 \epsilon_2}\right] + e^{i2q_2 d} \left[1 - \frac{q_1 \epsilon_2}{q_2 \epsilon_1}\right] \left[1 - \frac{q_2 \epsilon_3}{q_3 \epsilon_2}\right] = 0, \quad (4.4)$$

con $q_i = [\epsilon_i(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} - Q^2]^{\frac{1}{2}}$, $i = 1, 2, 3$.

4.2 Modos de una sola superficie

En el límite de espesores grandes de la película, la ecuación (4.4) se reduce[34]

$$\frac{c^2 Q^d}{\omega^2} = \frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}, \quad \frac{c^2 q_1^2}{\omega^2} = \frac{\epsilon_1^2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}, \quad i=1,2, \quad (4.5)$$

$$\frac{c^2 Q^d}{\omega^2} = \frac{\epsilon_2 \epsilon_3}{\epsilon_2 + \epsilon_3}, \quad \frac{c^2 q_1^2}{\omega^2} = \frac{\epsilon_2^2}{\epsilon_2 + \epsilon_3}, \quad i=2,3. \quad (4.6)$$

Estas son las relaciones de dispersión de los modos electromagnéticos en las interfaces entre la placa y los dos medios semiinfinitos.

4.3 Modos de una película simétrica

En el caso de una placa simétrica $\epsilon_1(\omega) = \epsilon_3(\omega)$, se tiene que éstas expresiones se simplifican quedando en la forma[33] (con $d = 2a$)

$$\begin{aligned}\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_1(\omega)} &= i \frac{q_2}{q_1} \tan(q_2 a), \\ \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_1(\omega)} &= -i \frac{q_2}{q_1} \cot(q_2 a).\end{aligned}\tag{4.7}$$

Estas son las relaciones de dispersión para los modos simétrico y antisimétrico respectivamente.

La condición para que existan modos en la interface entre dos medios semiinfinitos puede obtenerse de las relaciones de dispersión (5) o (6). La forma para la función de onda debe ser tal que su amplitud alcanza su máximo cerca de la superficie y decae exponencialmente a medida que se aleja de ella. es decir

$$e^{ik \cdot r} = e^{iQx} e^{\pm \kappa z}$$

donde x es paralela a la superficie y z es perpendicular a ella. Para que se satisfaga esta ecuación se necesita que, en las relaciones de dispersión se cumpla que $\epsilon_1 + \epsilon_2$ sea negativa y que ϵ_1 o ϵ_2 sea positiva. i.e., $\epsilon_1 > 0$ y $\epsilon_2 < -\epsilon_1$ o $\epsilon_2 > 0$ y $\epsilon_1 < -\epsilon_2$. De esta forma

$$Q^2 > 0 \text{ y } q_1^2 < 0.$$

y los límites de las ventanas de propagación estan definidas por

$\epsilon_1(\omega_s) + \epsilon_2(\omega_s) = 0$ de donde se sigue que una constante dieléctrica debe ser positiva y la otra negativa, pero en valor absoluto, la negativa mayor que la positiva. Por ejemplo, si

$$\epsilon_1(\omega) > 0 \text{ y } \epsilon_2(\omega) < 0$$

entonces, se debe satisfacer

$$\epsilon_1(\omega) < |\epsilon_2(\omega)|.$$

Para que la película tenga modos de superficie se requiere que su constante dieléctrica sea negativa.

4.4 Reflexión total atenuada

Uno de los fenómenos interesantes en la propagación de las ondas electromagnéticas en medios finitos es la reflexión total interna. Este fenómeno sucede cuando una onda pasa de un medio de índice de refracción (n) mayor a otro medio de índice de refracción (n') menor; es decir, $n > n'$, y cuando el ángulo de incidencia θ es mayor que el ángulo crítico el cual está definido por

$$\sin \theta_c = \frac{n'}{n}$$

Si $\theta > \theta_c$ entonces se puede mostrar que para el ángulo de refracción θ_r se

satisface la ecuación

$$\cos \theta_r = i \left\{ \left(\frac{\sin \theta}{\sin \theta_c} \right)^2 - 1 \right\}^{1/2}$$

El factor de propagación de la onda refractada toma la forma

$$e^{i k_x z} = e^{-k' \left\{ \left(\frac{\sin \theta}{\sin \theta_c} \right)^2 - 1 \right\}^{1/2} z} e^{i k' \left(\frac{\sin \theta}{\sin \theta_c} \right) x}$$

de donde se concluye que la propagación de la onda refractada es paralela a la interface y decae en la dirección perpendicular a ella.

En el caso en el que el medio semiinfinito con n' se sustituye por una película delgada de espesor del orden de la distancia de decaimiento de la onda y que la película o el sustrato tengan función dieléctrica negativa, mientras que el sustrato o la película tengan su función positiva. Entonces la reflexión total interna se frustra y sucede lo que se conoce como reflexión total atenuada[3.4] (RTA). En esta situación el espectro de reflectancia presenta un mínimo cuando se excitan los modos de superficie.

La reflexión total atenuada se ha usado para estudiar la excitación y detección de modos de superficie e interface. Esta técnica fué ideado por Otto en 1968[3] para estudiar a los plasmones en superficies metálicas. Posteriormente esta técnica se ha usado para estudiar fonones y excitones de superficie. En la actualidad, se conocen dos geometrías de RTA, una de Otto y otra de Kretschmann. En la primera se considera una película de constante dieléctrica $\epsilon > 0$ se empareda por un prisma de constante dieléctrica $\epsilon_p > \epsilon$ y un sustrato de constante dieléctrica ϵ_s . En la segunda, la película y el sustrato se intercambian.

La dispersión de electrones de baja energía, del orden de 100eV , puede usarse para la excitación de plasmones de superficie. En este método, las partículas interactuantes ceden el momento lineal necesario a los modos superficiales para la excitación. La teoría para explicar esta técnica de excitación se ha estudiado para diferentes geometrías. Por ejemplo, Mills y colaboradores estudiaron modos colectivos en superredes metálicas[8] y semiconductoras[9] altamente impuros.

Capítulo 5

SUPERREDES. LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA

Las superredes han recibido considerable atención en los años recientes. Para estudiar estos sistemas se ha desarrollado la teoría de la matriz de transferencia. En este capítulo primero, revisamos la matriz de transferencia de dimensión 2×2 . Después desarrollamos la teoría para el caso de una superred construida de capas alternadas de un aislante y un semiconductor excitónico. En este segundo caso, la matriz es de dimensión 6×6 , por lo que se deben usar las CAF's para reducir la dimensión a 2×2 . Presentamos las formulas de la relación de dispersión de los modos EM colectivos y la reflectancia para ondas de polarización p . Tomamos en cuenta la existencia de la capa muerta de excitones. Estudiamos también una película delgada en la teoría de campo promedio.

5.1 Superredes locales

Consideremos una superred local en la que la película 1 tiene función dieléctrica $\epsilon_1(\omega)$ y espesor d_1 , y la película 2 tiene función dieléctrica $\epsilon_2(\omega)$ y espesor d_2 . Supongamos ondas de polarización p propagando en el sistema. Las ondas tienen frecuencia ω y vector de onda $\vec{q} = Q\hat{x} + q\hat{z}$. Las componentes tangenciales de los campos electromagnéticos en una película tienen la forma

$$\begin{aligned} E_x(z) &= E^+ e^{iq_1 z} - E^- e^{-iq_1 z}, \\ H_y(z) &= Y_1 [E^+ e^{iq_1 z} + E^- e^{-iq_1 z}], \end{aligned} \quad (5.1)$$

dónde E^+ y E^- son las amplitudes de las ondas viajando a la derecha e izquierda respectivamente. q_1 es la solución a la relación de dispersión de los modos transversales Z_1 es la impedancia y Y_1 la admitancia de superficie. Las ecuaciones (5.1) se pueden escribir como

$$\begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}_z = A_1 \begin{pmatrix} E^+ \\ E^- \end{pmatrix}_z, \quad (5.2)$$

donde

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ Y_1 & Y_1 \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

Las amplitudes de los campos en dos puntos z y z' de la capa, se relacionan por medio

$$\begin{pmatrix} E^+ \\ E^- \end{pmatrix}_z = T(z - z') \begin{pmatrix} E^+ \\ E^- \end{pmatrix}_{z'}, \quad (5.4)$$

donde

$$T(z) = \begin{pmatrix} e^{iq_1 z} & 0 \\ 0 & e^{-iq_1 z} \end{pmatrix}.$$

Haciendo uso de las ecuaciones (5.2) y (5.4) uno puede escribir

$$\begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}_{z^D} = M_1 \begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}_{z^I}, \quad (5.5)$$

donde z^D y z^I , son las superficies derecha e izquierda de cada capa, y M_1 es la matriz de transferencia la cual tiene la forma[24,25]

$$M_1 = \begin{pmatrix} \cos(q_1 d_1) & iZ_1 \sin(q_1 d_1) \\ iY_1 \sin(q_1 d_1) & \cos(q_1 d_1) \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

De manera similar se obtiene la matriz para la película 2, por lo que escribimos

$$\begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}_{z_2^p} = M_2 \begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}_{z_2^i} \quad (5.7)$$

Por medio de la continuidad de E_x y H_y tenemos que

$$\begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}_{z_1^p} = \begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}_{z_1^i} \quad (5.8)$$

De aquí se puede obtener

$$\begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}_{z_1^i+d} = M \begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}_{z_1^i} \quad (5.9)$$

donde $d = d_1 + d_2$ es el período de la superred y $M = M_2 M_1$ es la matriz de transferencia para un período, cuyas componentes son[24,36]

$$\begin{aligned} M_{11} &= \cos(q_2 d_2) \cos(q_1 d_1) - Y_2 Z_1 \sin(q_2 d_2) \sin(q_1 d_1), \\ M_{12} &= i[Z_1 \cos(q_2 d_2) \sin(q_1 d_1) + Z_2 \sin(q_2 d_2) \cos(q_1 d_1)], \\ M_{21} &= i[Y_2 \sin(q_2 d_2) \cos(q_1 d_1) + Y_1 \cos(q_2 d_2) \sin(q_1 d_1)], \\ M_{22} &= \cos(q_2 d_2) \cos(q_1 d_1) - Y_2 Z_1 \sin(q_2 d_2) \sin(q_1 d_1). \end{aligned} \quad (5.10)$$

Debido a la periodicidad del sistema, el teorema de Bloch[37] se puede usar para escribir

$$\begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}_{z+d} = e^{ipd} \begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}_z \quad (5.11)$$

dónde p es el vector de onda unidimensional de Bloch. Al hacer uso de las ecuaciones (5.9) y (5.11) se puede escribir

$$(M - e^{ipd}) \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}_z = 0. \quad (5.12)$$

De la ecuación (5.12) se obtiene p que satisface[24]

$$e^{i p d} = \frac{1}{2} \text{Tr}(M) \pm \left[\left(\frac{\text{Tr}(M)}{2} \right)^2 - 1 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (5.13)$$

donde hemos usado el hecho de que $\det M = 1$ además de la ecuación anterior y $\text{Tr}(M) = M_{11} + M_{22}$. La impedancia de superficie para la superred semiinfinita es

$$Z_p = -\frac{M_{12}}{M_{11} - e^{i p d}} = -\frac{M_{22} - e^{i p d}}{M_{21}} \quad (5.14)$$

5.2 R_p para una película en términos de la matriz de transferencia

Para calcular la reflectancia de una película de espesor d y constante dieléctrica $\epsilon(\omega)$ se puede usar el resultado (5.5) de la sección anterior. Supongamos que una superficie libre, está en $z = 0$ y la otra en $z = d$, entonces la ecuación (5.5) toma la forma

$$\begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}_d = M \begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}_0, \quad (5.15)$$

de donde

$$\begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}_0 = M^{-1} \begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}_d. \quad (5.16)$$

A partir de esta ecuación matricial, tomando en cuenta que $M_{JJ}^{-1} = M_{JJ}$ y $M_{kj}^{-1} = -M_{kj}$ se puede escribir

$$\frac{E_x(0)}{H_y(0)} = \frac{M_{11} E_x(d) - M_{12} H_y(d)}{-M_{21} E_x(d) + M_{22} H_y(d)}. \quad (5.17)$$

En $z = d$ fácilmente se puede ver que

$$\frac{E_x(d)}{H_y(d)} = \frac{1}{Y_v}. \quad (5.18)$$

dónde Y_v , Z_v , ϵ_v y q_v se refieren al vacío. Con esto obtenemos que

$$\frac{E_x(0)}{H_y(0)} = \frac{M_{11} - M_{12}Y_v}{-M_{21} + M_{22}Y_v}. \quad (5.19)$$

5.3 Superred en la presencia de ondas excitónicas. Sin capa muerta

Consideremos aquí la superred mostrada en la Fig. III.2.1. Esta se forma de capas alternadas del aislante A de constante dieléctrica ϵ_a y espesor d_a , y el semiconductor excitónico S de función dieléctrica $\epsilon_s(\vec{q}, \omega)$ y espesor d_s . Tomamos en cuenta solo ondas de polarización p y ondas longitudinales. Estas ondas no se acoplan a aquellas de polarización S , las cuales se tratan de manera similar y más simple.

A continuación desarrollamos el formalismo para construir la matriz de transferencia del semiconductor excitónico. Enfocamos nuestra atención en ondas que tienen frecuencias ω y vector de onda con proyección en el plano xy , $\vec{Q} = (Q, 0, 0)$. Para valores dados de ω y Q , existen cuatro modos de polarización p cuyos vectores de onda son $(Q, 0, \pm q_j)$; $j = 1, 2$, donde $\pm q_j$ son las soluciones de la relación de dispersión de ondas transversales. Además, existen dos modos longitudinales cuyos vectores de onda son $(Q, 0, \pm q_3)$, y que obedecen a la relación de dispersión longitudinal. El campo electromagnético es la superposición de las seis ondas independientes, por lo que existen seis amplitudes independientes en cualquier punto dentro de la capa excitónica. (En esta sección no incluimos la capa muerta de excitones, ésta se introduce posteriormente). Para escribir la matriz de transferencia escogemos trabajar con las componentes tangenciales de los campos eléctrico E_x y el campo magnético H_y , la polarización excitónica \vec{P} y su derivada normal $\partial_z \vec{P}$. Estos campos pueden escribirse en términos de las amplitudes E_n^\pm de las ondas que viajan a la derecha (+) y a la izquierda (-), de las cuales, dos son transversales ($n = 1, 2$) y una longitudinal ($n = 3$). Tomando en cuenta lo anterior, escribimos

$$E_x(z) = \sum_{n=1}^3 [E_n^+ e^{i q_n z} + a_n E_n^- e^{-i q_n z}], \quad (5.20)$$

$$H_y(z) = \sum_{n=1}^2 Y_n [E_n^+ e^{iq_n z} + E_n^- e^{-iq_n z}], \quad (5.21)$$

$$P_x(z) = \frac{\omega_p^2}{4\pi D} \sum_{n=1}^3 X_n [E_n^+ e^{iq_n z} + a_n E_n^- e^{-iq_n z}], \quad (5.22)$$

$$P_z(z) = \frac{\omega_p^2}{4\pi D} \sum_{n=1}^3 X_n D_n [-E_n^+ e^{iq_n z} + a_n E_n^- e^{-iq_n z}]. \quad (5.23)$$

Para escribir $H_y(z)$ y $P_z(z)$ hemos usado las ecuaciones de Maxwell. En estas ecuaciones $a_1 = a_2 = a_3 = -a_3 = -1$.

Las ecuaciones anteriores se pueden escribir en bloques

$$\begin{pmatrix} \vec{F} \\ \vec{P} \\ \partial_z \vec{P} \end{pmatrix}_z = G \begin{pmatrix} \vec{A}_1 \\ \vec{A}_2 \\ \vec{A}_3 \end{pmatrix}, \quad (5.24)$$

donde

$$\vec{F} = \begin{pmatrix} E_x \\ H_y \end{pmatrix}, \quad \vec{P} = \begin{pmatrix} P_x \\ P_z \end{pmatrix}, \quad \vec{A}_n = \begin{pmatrix} E_n^+ e^{iq_n z} \\ E_n^- e^{-iq_n z} \end{pmatrix},$$

$$G = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ Y_1 & Y_1 & Y_2 & Y_2 & 0 & 0 \\ X_1 & -X_1 & X_2 & -X_2 & X_3 & X_3 \\ -D X_1 & -D_1 X_1 & -D_2 X_2 & -D_2 X_2 & D_3 X_3 & -D_3 X_3 \\ iq_1 X_1 & iq_1 X_1 & iq_2 X_2 & iq_2 X_2 & iq_3 X_3 & iq_3 X_3 \\ -iq_1 D_1 X_1 & iq_1 D_1 X_1 & -iq_2 D_2 X_2 & iq_2 D_2 X_2 & iq_3 D_3 X_3 & iq_3 D_3 X_3 \end{pmatrix}. \quad (5.25)$$

Puesto que

$$\begin{pmatrix} \vec{A}_1 \\ \vec{A}_2 \\ \vec{A}_3 \end{pmatrix}_z = T(z - z') \begin{pmatrix} \vec{A}_1 \\ \vec{A}_2 \\ \vec{A}_3 \end{pmatrix}_{z'}, \quad (5.26)$$

donde

$$T(z) = \begin{pmatrix} e^{iq_1 z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-iq_1 z} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{iq_2 z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-iq_2 z} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{iq_3 z} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-iq_3 z} \end{pmatrix}. \quad (5.27)$$

Los campos en la superficie de la izquierda de la capa excitónica están relacionados con los campos de la derecha por la ecuación[27]

$$\begin{pmatrix} \vec{F} \\ \vec{P} \\ \partial_z \vec{P} \end{pmatrix}_{z=P} = N_s \begin{pmatrix} \vec{F} \\ \vec{P} \\ \partial_z \vec{P} \end{pmatrix}_{z=L}, \quad (5.28)$$

dónde se ha introducido la matriz de transferencia de 6x6 del semiconductor N_s dado por

$$N_s = GT(d_s)G^{-1}. \quad (5.29)$$

Las componentes de los campos E_x , H_y , P_x , P_z , $\partial_z P_x$, y $\partial_z P_z$ constituyen un conjunto de seis componentes de los campos que son independientes en el semiconductor infinito. Sin embargo, estos campos en las superficies de la capa excitónica están relacionadas a través de las condiciones adicionales a la frontera. Se pueden emplear las CAF's para reducir la dimensión de la matriz N_s de 6x6 a una de 2x2 como la que existe en el caso local, pero esta matriz aun contiene información de los modos de la capa excitónica. Para proceder, escribimos

$$N_z = \begin{pmatrix} N_{11} & N_{12} & N_{13} \\ N_{21} & N_{22} & N_{23} \\ N_{31} & N_{32} & N_{33} \end{pmatrix}. \quad (5.30)$$

donde N_{nm} son matrices de 2x2. Si hacemos uso de las CAF's $\alpha \vec{P} + \partial_n \vec{P} = 0$ en la ecuación (5.28), podemos escribir

$$\begin{aligned}\vec{P}(z_s^D) &= N_{21}\vec{F}(z_s^I) + N_{22}\vec{P}(z_s^I) + N_{23}\alpha\vec{P}(z_s^I), \\ -\alpha\vec{P}(z_s^D) &= N_{31}\vec{F}(z_s^I) + N_{32}\vec{P}(z_s^I) + N_{33}\alpha\vec{P}(z_s^I).\end{aligned}\quad (5.31)$$

En estas ecuaciones, al igual que antes, z_s^D y z_s^I son las superficies de la derecha e izquierda de la película, en este caso, de semiconductor. Si multiplicamos por α la primera de estas dos ecuaciones y la sumamos a la segunda obtenemos

$$0 = (\alpha N_{21} + N_{31})\vec{F}(z_s^I) + [\alpha N_{22} + \alpha N_{23}\alpha + N_{32} + N_{33}\alpha]\vec{P}(z_s^I),$$

de donde

$$\vec{P}(z_s^I) = -S^{-1}[\alpha N_{21} + N_{31}]\vec{F}(z_s^I), \quad (5.32)$$

con $S = \alpha N_{22} + \alpha N_{23}\alpha + N_{32} + N_{33}\alpha$.

Además

$$\vec{F}(z_s^D) = N_{11}\vec{F}(z_s^I) + N_{12}\vec{P}(z_s^I) + N_{13}\alpha\vec{P}(z_s^I). \quad (5.33)$$

Sustituyendo (5.32) en (5.33) obtenemos

$$\vec{F}(z_s^D) = N_s\vec{F}(z_s^I), \quad (5.34)$$

donde $z_s^D = z_s^I + d_s$, y

$$M_s = N_{11} - (N_{12} + N_{13}\alpha)S^{-1}(\alpha N_{21} + N_{31}). \quad (5.35)$$

Notamos que ahora la matriz M_s es una matriz de dimensión 2×2 , por lo que podemos usar las condiciones a la frontera, la continuidad de los componentes tangenciales de los campos \vec{E} y \vec{H} , para obtener la matriz de transferencia de un período de la superred.

La matriz de transferencia del aislante tiene la forma

$$M_a = \begin{pmatrix} \cos(q_a d_a) & iZ_a \sin(q_a d_a) \\ iY_a \sin(q_a d_a) & \cos(q_a d_a) \end{pmatrix}, \quad (5.36)$$

la cual satisface la ecuación[27]

$$\vec{F}(z_a^D) = M_a \vec{F}(z_a^I), \quad (5.37)$$

donde z_a^D y z_a^I representan las superficies de la derecha e izquierda de la capa aislante $z_a^D = z_a^I + d_a$, $q_a^2 + Q^2 = \frac{\epsilon_a^2}{\epsilon^2} \epsilon_a$.

De las condiciones de frontera en la interface semiconductor-aislante se puede obtener, como se hizo en la sección (5.2), que

$$\vec{F}(z_a^D) = \vec{F}(z_a^I). \quad (5.38)$$

Pero de las ecuaciones (5.34) y (5.37)

$$\vec{F}(z_a^D) = M_a \vec{F}(z_a^I)$$

y

$$\vec{F}(z_a^I) = M_a^{-1} \vec{F}(z_a^D),$$

de donde se obtiene

$$\vec{F}(z_a^I + d) = M_a M_a \vec{F}(z_a^I) = M \vec{F}(z_a^I), \quad (5.39)$$

donde $d = d_a + d_s$, es el período de la superred. Ahora usamos el teorema de Bloch para escribir

$$\vec{F}(z + d) = e^{ipd} \vec{F}(z), \quad (5.40)$$

dónde p es el vector de onda unidimensional de Bloch. Mediante las ecuaciones (5.39) y (5.40), obtenemos

$$(M - e^{ipd}) \vec{F}(z) = 0. \quad (5.41)$$

y de esta ecuación se obtiene p por medio de la fórmula (5.13).

5.4 Superred excitónica con capa muerta

Esta sección está dedicada al estudio de los efectos de la capa muerta de excitones en las propiedades ópticas no locales de superredes excitónicas.

En este apartado, consideramos de nuevo la superred de la Fig. III.2.1, e incluimos en las películas semiconductoras, en cada superficie una capa muerta, la cual tiene una constante dieléctrica ϵ_0 y un espesor d_0 . La teoría local se usa para construir las matrices de transferencia de estas capas, las cuales tienen la forma

$$M_0 = \begin{pmatrix} \cos(q_0 d_0) & i Z_0 \sin(q_0 d_0) \\ i Y_0 \sin(q_0 d_0) & \cos(q_0 d_0) \end{pmatrix}, \quad (5.42)$$

con $q_0^2 + Q^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_0$, $Z_0 = \frac{\omega_0 c}{\epsilon_0 \omega}$, $Y_0 = \frac{1}{Z_0}$.

Siguiendo el procedimiento para obtener la ecuación (5.41) se encuentra que el vector unidimensional de Bloch esta dado por la ecuación (5.33)

$$e^{i p d} = \frac{Tr(M)}{2} \pm \left[\left(\frac{Tr(M)}{2} \right)^2 - 1 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (5.43)$$

pero en este caso el período es $d = 2d_0 + d_a + d_s$, y

$$M = M_a M_s'; \quad M_s' = M_0 M_s M_0. \quad (5.44)$$

El cálculo de la reflectancia para una sola película semiconductoras con o sin un sustrato puede lograrse mediante la fórmula de la impedancia de superficie calculada en la sección (4.2) poniendo M_s' en lugar de M .

5.5 Reflectancia de una película excitónica delgada.

En esta sección consideramos que la superficie libre de la película está en $z = d$ mientras que la otra está en $z = 0$ y el metal ocupa la región $z < 0$. El desarrollo matemático que presentamos aquí es parte del trabajo realizado con el profesor A. A. Maradudin. Presentamos las expresiones analíticas para la impedancia de superficie del sistema película delgada semiconductoras en la presencia de dispersión espacial. Estudiamos el caso limite en el que la película tiene espesor tal que $d \ll \frac{c}{\omega n_1(\omega)}$. Aunque la aplicabilidad de

esta aproximación es muy limitada, puede ayudar a la interpretación de los resultados numéricos para el caso exacto. Se obtendrán los efectos de la película por medio de la condición a la frontera en $z = 0$ la cual es correcta a primer orden en d . Para los propósitos de esta sección, se ignora la capa muerta de excitones.

Los campos electromagnéticos tienen una variación pequeña a través de la película delgada. Entonces, usando las ecuaciones de Maxwell, podemos obtener la variación de los campos a través de la película

$$E_x^{(1)}(x, d) = E_x^{(1)}(x, 0) + d \left[\frac{\partial}{\partial x} E_z^{(1)} + \frac{i\omega}{c} H_y^{(1)} \right] \Big|_{z=0}, \quad (5.45)$$

$$H_y^{(1)}(x, d) = H_y^{(1)}(x, 0) + \frac{i\omega}{c} d D_x^{(1)}(x, 0), \quad (5.46)$$

a primer orden en d . Las relaciones (5.45) y (5.46), junto con las ecuaciones de continuidad en la superficie $z = d$

$$E_x^{(v)}(x, d) = E_x^{(1)}(x, d),$$

$$H_y^{(v)}(x, d) = H_y^{(1)}(x, d),$$

permite escribir los campos en el vacío en términos de los campos dentro de la película en la superficie $z = 0$.

Con correcciones a primer orden en d , los campos pueden expresarse formalmente como

$$\begin{aligned} E_x^{(v)}(x, d) &= E_x^{(v)}(x, 0) + d \frac{\partial}{\partial x} E_z^{(v)}, \\ H_y^{(v)}(x, d) &= H_y^{(v)}(x, 0) + d \frac{\partial}{\partial x} H_y^{(v)}. \end{aligned} \quad (5.47)$$

Si expresamos las derivadas con respecto a z en términos de derivadas con respecto a x , con la ayuda de las ecuaciones de Maxwell y tomado en cuenta las condiciones a la frontera

$$E_z^{(v)}(x, d) = D_z^{(1)}(x, d),$$

$$H_y^{(v)}(x, d) = H_y^{(1)}(x, d),$$

$$E_x^{(v)}(x, d) = E_x^{(1)}(x, d),$$

podemos escribir en $z = d$

$$\frac{\partial}{\partial z} E_x^{(v)} = \frac{\partial}{\partial x} E_z^{(v)} + i \frac{\omega}{c} H_y^{(v)} = \frac{\partial}{\partial x} D_z^{(1)} + i \frac{\omega}{c} H_y^{(1)}, \quad (5.48)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} H_y^{(v)} = \frac{i\omega}{c} E_x^{(v)} = \frac{i\omega}{c} E_x^{(1)}. \quad (5.49)$$

Usando las ecuaciones (5.45)-(5.49) obtenemos las ecuaciones

$$E_x^{(v)}(x, 0) = E_x^{(1)}(x, 0) + d \frac{\partial}{\partial x} [E_z^{(1)} - D_z^{(1)}]_{z=0}, \quad (5.50)$$

$$H_y^{(v)}(x, 0) = H_y^{(1)}(x, 0) + \frac{i\omega}{c} d [D_x^{(1)} - E_x^{(1)}]_{z=0} \quad (5.51)$$

La diferencia $\bar{E}^{(1)} - \bar{D}^{(1)}$ se puede expresar en términos de la polarización excitónica

$$E_z^{(1)} - D_z^{(1)} = D_z^{(1)} \left[\frac{1}{\epsilon_\infty} - 1 \right] - \frac{4\pi}{\epsilon_\infty} P_z, \quad (5.52)$$

$$D_x^{(1)} - E_x^{(1)} = (\epsilon_\infty - 1) E_x^{(1)} + 4\pi P_x. \quad (5.53)$$

Haciendo uso de las aproximaciones empleadas en (5.48) y (5.49) y eliminando $E_x^{(1)}(x, 0)$ y $H_y^{(1)}(x, 0)$ con la ayuda de (5.45), a partir de (5.50)-(5.52) obtenemos

$$\begin{aligned} \left[1 + \frac{i\omega}{c} d (\epsilon_\infty - 1) \dot{Z}_0 \right] E_x^{(v)}(x, 0) &= \dot{Z}_0 H_y^{(v)}(x, 0) + \\ \frac{i\omega}{c} d \left[\frac{1}{\epsilon_\infty} - 1 \right] \frac{\partial^2}{\partial x^2} H_y^{(v)}(x, 0) &- \frac{4\pi}{\epsilon_\infty} d \frac{\partial}{\partial x} P_z - \frac{4\pi i\omega}{c} d \dot{Z}_0 P_x. \end{aligned} \quad (5.54)$$

Este resultado determina \dot{Z}_0 si se conocen las relaciones funcionales de P_z y $D_z^{(1)} \approx E_z^{(v)}$ y P_x con $E_x^{(1)} \approx E_x^{(v)}$.

Para continuar con nuestro estudio, suponemos que el radio excitónico es más pequeño que el espesor de la película, por lo que usaremos la ecuación de movimiento de la polarización, suponiendo que las condiciones adicionales a la frontera se satisface en $z = 0$ y $z = d$.

En la aproximación de masa efectiva para un medio isotrópico tenemos

$$(\omega^2 - \omega_{\parallel}^2)P_z + \frac{\hbar\omega_{\perp}}{m^*} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_z + \frac{\partial^2}{\partial z^2} P_z \right\} = -\frac{\omega_{\parallel}^2 - \omega_{\perp}^2}{4\pi} D_z^{(1)}, \quad (5.55)$$

$$(\omega^2 - \omega_{\perp}^2)P_x + \frac{\hbar\omega_{\perp}}{m^*} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} P_x + \frac{\partial^2}{\partial z^2} P_x \right\} = -\frac{\omega_{\parallel}^2 - \omega_{\perp}^2}{4\pi} \epsilon_{\infty} E_x^{(1)}, \quad (5.56)$$

donde m^* es la masa efectiva del excitón, ω_{\parallel} y ω_{\perp} son las frecuencias longitudinal y transversal del excitón en $\vec{k} = 0$.

Notamos que aunque la polarización \vec{P} varía lentamente dentro de la película, los términos $\frac{\partial^2}{\partial z^2} \vec{P}$ en las ecuaciones (5.55) no pueden ignorarse. En efecto, si integramos de 0 a d , estos términos hacen un cambio en la derivada $\frac{\partial}{\partial z} \vec{P}$, el cual puede escribirse como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \vec{P}|_{z=d} - \frac{\partial}{\partial z} \vec{P}|_{z=0} &= -\alpha_1 \vec{P}(x, d) - \alpha_2 \vec{P}(x, 0) \\ &\approx -(\alpha_1 + \alpha_2) \vec{P}(x, 0) - \alpha_1 \alpha_2 d \vec{P}(x, 0), \end{aligned} \quad (5.57)$$

donde los parámetros α_k que aparecen en esta ecuación son los de las CAF's introducidas en la sec. (2.5). Aquí hay dos parámetros debido a que en principio hay una α para cada superficie de la película, sin embargo, eventualmente consideraremos $\alpha_1 = \alpha_2$.

Tomando en cuenta que a orden cero con respecto a d , podemos escribir

$$D_z^{(1)} \simeq E_z^{(v)} = \frac{ie}{\omega} H_y^{(v)},$$

$$E_x^{(1)} \simeq E_x^{(v)},$$

y después de integrar (5.55) con respecto a z con la ayuda de (5.57) tenemos

$$\hat{L}_{\parallel} P_z(x) = \frac{cq_{\perp}^2}{4\pi i \omega} \frac{\partial}{\partial x} H_y^{(v)}(x, 0), \quad (5.58)$$

$$\hat{L}_{\perp} P_x(x) = -\frac{\epsilon_{\infty} q_{\perp}^2}{4\pi} E_x^{(v)}(x, 0), \quad (5.59)$$

donde

$$\hat{L}_{\parallel(\perp)} = \frac{d^2}{dx^2} - \lambda_{\parallel(\perp)}^2, \quad (5.60)$$

$$\lambda_{\parallel(\perp)}^2 = \frac{m^*}{\hbar\omega_{\perp}} \{\tilde{\omega}_{\parallel(\perp)}^2 - \omega^2\}, \quad (5.61)$$

$$\tilde{\omega}_{\parallel(\perp)}^2 = \omega_{\parallel(\perp)}^2 + \frac{\hbar\omega_{\perp}}{m^*} [\alpha_1\alpha_2 + \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{d}], \quad (5.62)$$

$$q_{\perp}^2 = \frac{m^*}{\hbar\omega_{\perp}} (\omega_{\parallel}^2 - \omega_{\perp}^2). \quad (5.63)$$

Tomando las transformadas de Fourier de (5.54) y (5.58), se puede mostrar que

$$\hat{Z}(k, \omega) = \frac{E_z^{(v)}(k)}{H_y^{(v)}(k)} = \frac{\hat{Z}_0 + i \left(\frac{vd}{\omega}\right) k^2 \{1 - \tilde{\epsilon}^{-1}(\omega, k)\}}{1 + i \left(\frac{vd}{c}\right) \hat{Z}_0 \{\tilde{\epsilon}(\omega, k) - 1\}}, \quad (5.64)$$

donde

$$\tilde{\epsilon}(\omega, k) = \epsilon_{\infty} \frac{\omega^2 - \tilde{\omega}_{\parallel}^2 - k^2 \frac{\hbar\omega_{\perp}}{m^*}}{\omega^2 - \tilde{\omega}_{\perp}^2 - k^2 \frac{\hbar\omega_{\perp}}{m^*}}, \quad (5.65)$$

es la permitividad dieléctrica de la película.

Notamos, primero, que cuando $\alpha_1 \rightarrow \infty$ y $\alpha_2 \rightarrow \infty$ (lo que corresponde a los CAF's de Pekar), $\tilde{\epsilon}(\omega, \vec{k}) \rightarrow \epsilon_{\infty}$, la impedancia de superficie toma la forma

$$\hat{Z}(\omega, k) = \frac{\hat{Z}_0 + i \left(\frac{vd}{\omega}\right) k^2 (1 - \epsilon_{\infty}^{-1})}{1 + i \frac{vd}{c} \hat{Z}_0 (\epsilon_{\infty} - 1)}. \quad (5.66)$$

Esta fórmula de la impedancia de superficie no contiene la contribución de la polarización excitónica ya que en la película suficientemente delgada la condición de frontera $\vec{P} = 0$ da una polarización excitónica nula en cada punto dentro de la película. Esto indica que para los CAF's de Pekar la aproximación no da resultados interesantes, lo que implica una severa restricción de la aproximación.

Por otro lado, si tomamos la condición $\frac{\partial}{\partial n} \vec{P} = 0$, es decir, $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$, entonces

$$\hat{Z}(\omega, k) = \frac{\hat{Z}_0 + i\left(\frac{\omega d}{c}\right)k^2[1 - \epsilon^{-1}(\omega, k)]}{1 + i\frac{\omega d}{c}\hat{Z}_0[\epsilon(\omega, k) - 1]} \quad (5.67)$$

Notamos que este caso si contiene las resonancias excitónicas a primer orden en d .

El caso de las condiciones adicionales a la frontera que involucran tanto \vec{P} como su derivada normal $\frac{\partial}{\partial n} \vec{P}$, se puede ver que para $P_z = 0$, $\frac{\partial}{\partial z} P_x = 0$, solo las resonancias en la frecuencia ω_{\perp} permanecen en la impedancia, mientras que para $P_x = 0$ y $\frac{\partial}{\partial z} P_z = 0$ solo las resonancias ω_{\parallel} se manifiestan.

Para entender el mecanismo por el cual la forma de que las CAF's influyen en la impedancia superficial de la película semiconductor, regresemos a la ec. (5.64). De la ecuación (5.65) para la constante dieléctrica $\tilde{\epsilon}(\omega, \vec{k})$ que entra en (5.64), se sigue que éste corresponde a la constante dieléctrica del volumen $\epsilon(\omega, \vec{k})$, pero con las resonancias en la frecuencias desplazadas.

$$\omega_{\parallel}^2 = \omega_{\parallel}^2 + \frac{h\omega_{\perp}}{m^*} [\alpha_1 \alpha_2 + \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{d}] \quad (5.68)$$

$$\omega_{\perp}^2 = \omega_{\perp}^2 + \frac{h\omega_{\perp}}{m^*} [\alpha_1 \alpha_2 + \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{d}] \quad (5.69)$$

Para valores grandes de α_i , como se puede ver de las ecuaciones anteriores, el desplazamiento en las frecuencias de resonancia se hacen grandes.

Los resultados presentados en esta sección se usaran para los calculos numéricos los cuales se compararán con los exactos. Hay que hacer notar que esta teoría aproximada solo se vale para las CAF's de Ting *et al.* Tomar un valor finito de α corresponde a considerar combinaciones lineales de \vec{P} y su derivada en la ecuación de las CAF's.

Capítulo 6

DISPERSION DE ELECTRONES

En capítulos anteriores hemos estudiado las propiedades ópticas de diferentes sistemas por medio de la interacción de la luz con dichos sistemas. También es interesante tratar estas propiedades por medio de la interacción de partículas como son los electrones. En particular, es interesante estudiar la dispersión de electrones de baja energía (del orden de 200eV). Esto se debe a que no se requiere equipo de alta resolución para la realización experimental. Por esta razón en este capítulo estudiamos la sección transversal de dispersión de los electrones que interactúan con superficies metálicas. Empezamos con el estudio de una película crecida sobre un sustrato en la teoría local. Después estudiamos una superred incluyendo efectos de dispersión espacial. El cálculo de la sección transversal lo hacemos basados en la teoría desarrollada por Mills[8] y el cálculo de la matriz de transferencia lo hacemos de acuerdo con Mochán.

6.1 Película-sustrato. Caso local

Consideremos el sistema película-sustrato[39]. La superficie libre de la película está en $z = 0$, tiene espesor d y una constante dieléctrica $\epsilon_1(\omega)$ (modelo de Drude) y el sustrato tiene una constante $\epsilon_2(\omega)$ (de oscilador armónico). Supongamos que los electrones incidentes sobre la película tiene una trayectoria descrita por

$$\vec{x}(t) = \vec{x}_{||}(t) + \hat{z}z(t). \quad (6.1)$$

Para la región $z < 0$, la ecuación de Laplace[22] es

$$\nabla^2 \Phi(\vec{x}, t) = -4\pi e \delta(\vec{x}_{||} - \vec{x}_{||}(t)) \delta(z - z(t)). \quad (6.2)$$

En este trabajo ignoramos el hecho de que los electrones penetren dentro del sustrato. La componente de la trayectoria electrónica paralela a la superficie es $\vec{x}_{||}(t) = \vec{V}_{||}t$ para $-\infty < t < \infty$ donde $\vec{V}_{||}$ es la componente de la velocidad en la misma dirección de $\vec{x}_{||}$. La transformada de Fourier bidimensional del potencial es

$$\Phi(\vec{x}_{||}, z; t) = \int \frac{d^2 Q_{||}}{(2\pi)^2} \Phi(\vec{Q}_{||}, z; t) e^{i\vec{Q}_{||} \cdot \vec{x}_{||}}. \quad (6.3)$$

La ec.(6.3) permite escribir la ec.(6.2) en la forma

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - Q_{||}^2 \right] \Phi(\vec{Q}_{||}, z; t) = -4\pi e \delta(z - z(t)) e^{i\vec{Q}_{||} \cdot \vec{V}_{||}t}. \quad (6.4)$$

Si el electrón incide sobre la superficie en $z = 0$ y su interacción es instantánea, entonces

$$z(t) = \begin{cases} V_{\perp}t & t < 0, \\ -V_{\perp}t & t > 0. \end{cases} \quad (6.5)$$

Si escribimos

$$\Phi(\vec{Q}_{||}, z; t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \phi(\vec{Q}_{||}, z; \omega) e^{-i\omega t}, \quad (6.6)$$

entonces uno puede encontrar que $\phi(\vec{Q}_{||}, z; \omega)$ obedece

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - Q_{||}^2 \right] \phi(\vec{Q}_{||}, z; \omega) = -\frac{8\pi e}{V_{\perp}} \cos\left\{ (\omega - \vec{V}_{||} \cdot \vec{Q}_{||}) \frac{z}{V_{\perp}} \right\}, \quad (6.7)$$

en la región homogénea $z < 0$.

Una solución particular de (6.7) es

$$\phi_p(\vec{Q}_{\parallel}, z; \omega) = A(\vec{Q}_{\parallel}, \omega) \cos[(\omega - \vec{v}_{\parallel} \cdot \vec{Q}_{\parallel}) \frac{z}{V_{\perp}}], \quad (6.8)$$

donde $A(\vec{Q}_{\parallel}, \omega) = \frac{8\pi e V_{\perp}}{(\omega - \vec{Q}_{\parallel} \cdot \vec{v}_{\parallel})^2 + Q_{\perp}^2 V_{\perp}^2}$. Entonces en la región $z < 0$, la solución general es la suma de la solución particular, ecuación anterior, más la de la homogénea

$$\phi(z) = A(\vec{Q}_{\parallel}, \omega) \cos[(\omega - \vec{Q}_{\parallel} \cdot \vec{v}_{\parallel}) \frac{z}{V_{\perp}}] + C_+ e^{Q_{\parallel} z}. \quad (6.9)$$

El término $C_+ e^{Q_{\parallel} z}$ representa el campo inducido por la película y el substrato y obedece la ecuación de Poisson. El desplazamiento eléctrico es $\vec{D}(\vec{x}) = \epsilon \vec{E}(\vec{x})$ y

$$\vec{E}(\vec{x}) = -\nabla \Phi(\vec{x}). \quad (6.10)$$

El trabajo que el campo inducido hace sobre el electrón se calcula por medio de[8]

$$W = \int \vec{F} \cdot d\vec{x} = -e \int [\vec{E}_{\parallel} \cdot d\vec{x}_{\parallel} + E_z dz]. \quad (6.11)$$

Esta integral se puede evaluar[8] para obtener

$$W = \frac{2e^2 V_{\perp}^2}{\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 Q_{\parallel} \omega Q_{\parallel} d\omega \text{Im}[R(Q_{\parallel}, \omega)]}{[(Q_{\parallel} V_{\perp})^2 + (\omega - \vec{v}_{\parallel} \cdot \vec{Q}_{\parallel})^2]^2} \quad (6.12)$$

Sin embargo para determinar el trabajo se necesita conocer $C_+ = R A$.

Para obtener la probabilidad de pérdida de energía de los electrones al interaccionar con la superficie usamos la fórmula derivada por Camley y Mills[8], la cual se define a través de

$$W = \int_0^{\infty} h\omega P(\omega) d\omega, \quad (6.13)$$

de donde se tiene que

$$P(\omega) = \frac{e^2 V_{\perp}^2}{\pi h \omega^4 \cos^2 \theta_I} \int \frac{dQ_{\parallel} Q_{\parallel}^2 \text{Im}[R(Q_{\parallel}, \omega)] \text{Re}[F_1 F_2]}{\xi^3 [(\xi^2 - 1)^2 + 4\xi^2 \cos^2 \theta_I]^{\frac{1}{2}}} \quad (6.14)$$

donde

$$F_1 = [\xi^2 - 1 + 2i\xi \cos \theta_I]^{\frac{1}{2}}, \quad (6.15)$$

$$F_2 = \{(1 + 2\xi^2 \cos \theta_I + i\xi \cos \theta_I)(1 + \xi^2 \cos^2 \theta_I) + \xi^2 \sin^2 \theta_I(3\xi^2 \cos^2 \theta_I - 2 - i\xi \cos \theta_I) + \xi^4 \sin^4 \theta_I\}. \quad (6.16)$$

$$V_{\parallel} = V_0 \sin \theta_I, \quad (6.17)$$

$$V_{\perp} = V_0 \cos \theta_I, \quad (6.18)$$

$$\xi = V_0 Q_{\parallel} / \omega, \quad (6.19)$$

V_0 es la velocidad del electrón incidente.

Ahora supongamos que la superficie libre del sistema está en $z = 0$. Las condiciones a la frontera que usamos son la continuidad del potencial y la componente z del desplazamiento eléctrico. De las ecuaciones (6.9) y (6.10) se tiene

$$\frac{\phi(0)}{D_z(0)} = \frac{A + C_+}{-C_+ Q_{\parallel}}, \quad (6.20)$$

donde el cociente $\phi(0)/D_z(0)$ juega el papel de la impedancia de superficie. De aquí se sigue que

$$C_+ = RA = -\frac{A}{Q_{\parallel} \left\{ \frac{\phi(0)}{D_z(0)} \right\}}. \quad (6.21)$$

El cociente $\phi(0)/D_z(0)$ está aún sin determinar. Este cociente lo determinaremos para diferentes geometrías. Primero lo hacemos para una película en contacto con un sustrato.

Para la película, la ecuación (6.2) es homogénea con solución

$$\phi(\vec{Q}_{\parallel}, z; \omega) = A_+ e^{Q_{\parallel} z} + A_- e^{-Q_{\parallel} z}. \quad (6.22)$$

El desplazamiento eléctrico en la dirección z es

$$D_z(\vec{Q}_{\parallel}, z; \omega) = -\epsilon_1 Q_{\parallel} [A_+ e^{Q_{\parallel} z} - A_- e^{-Q_{\parallel} z}], \quad (6.23)$$

y en el sustrato

$$\phi(\bar{Q}_{\parallel}, z; \omega) = d_- e^{-Q_{\parallel} z}, \quad (6.24)$$

$$D_z(\bar{Q}_{\parallel}, z; \omega) = \epsilon_2 Q_{\parallel} e^{-Q_{\parallel} z} d_-. \quad (6.25)$$

De (6.22) y (6.23) se obtiene, para $z = d$

$$\frac{\phi(d)}{D_z(d)} = \frac{A_+ e^{Q_{\parallel} d} + A_- e^{-Q_{\parallel} d}}{-\epsilon_1 Q_{\parallel} [A_+ e^{Q_{\parallel} d} - A_- e^{-Q_{\parallel} d}]} = \frac{1}{\epsilon_2 Q_{\parallel}}, \quad (6.26)$$

de donde

$$\frac{A_+}{A_-} = \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} e^{-2Q_{\parallel} d}. \quad (6.27)$$

Para $z = 0^+$, y mediante el uso de (6.27) se tiene

$$\frac{\phi(0^+)}{D_z(0^+)} = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2 + (\epsilon_1 - \epsilon_2) e^{-2Q_{\parallel} d}}{\epsilon_1 Q_{\parallel} [\epsilon_1 + \epsilon_2 - (\epsilon_1 - \epsilon_2) e^{-2Q_{\parallel} d}]}. \quad (6.28)$$

El uso de esta fórmula en C_+ permite determinar el campo inducido.

6.2 Superred metálica en la presencia de ondas de plasma

Para obtener el cociente ϕ/D_z y la matriz de transferencia de la superred metálica en la presencia de ondas de plasma podemos usar las expresiones de $\phi(z)$ y $D_z(z)$ y hacer toda la derivación o tomar el límite $c \rightarrow \infty$ en los resultados recientes de Mochán, del Castillo-Mussot y Barrera[24] quienes obtuvieron la matriz por medio de las expresiones de los campos $E_x(z)$ y $H_y(z)$. En esta sección presentamos la forma de obtener el cociente ϕ/D_z en términos de la impedancia de superficie calculada en Ref [24] y escribimos los elementos de la matriz. El procedimiento se describe ahora.

La impedancia de superficie es

$$Z_p = \frac{E_x}{H_y}. \quad (6.29)$$

La componente z del desplazamiento eléctrico es

$$D_z(z) = -\frac{Qc}{\omega} H_V(z), \quad (6.30)$$

y la componente x del campo eléctrico es

$$E_x(z) = iQ\phi(z). \quad (6.31)$$

Haciendo uso de estas dos últimas ecuaciones tenemos que

$$\frac{\phi(0)}{D_z(0)} = \frac{c}{i\omega} Z_p(0). \quad (6.32)$$

Tomemos el valor de $Z_p(0)$ de la referencia [24] y hagamos $c \rightarrow \infty$, entonces podemos obtener el coiente $\phi(z)/D_z(z)$. Para $z = 0$ se puede obtener

$$\frac{\phi(0)}{D_z(0)} = -\frac{m_{12}}{m_{11} - e^{ipd}} = -\frac{m_{22} - e^{ipd}}{m_{21}}. \quad (6.33)$$

Haciendo uso de esta expresión en C_+ se obtiene $P(\omega)$. En esta ecuación $m = M_I M'_M$ y M_I es la matriz de la capa aislante. Los elementos de M'_M son

$$\begin{aligned} M'_{11} &= \cosh(Q_{\parallel}d) - \frac{Q_{\parallel} \sinh(Q_{\parallel}d)[\epsilon_I - \epsilon_M][\cosh(Q_{\parallel}d) - \cos q_2d]}{Q_{\parallel} \sinh(Q_{\parallel}d)[\epsilon_I - \epsilon_M] + \epsilon_I q_2 \sin q_2d}, \\ M'_{12} &= -\frac{1}{\epsilon_M Q_{\parallel} \sinh(Q_{\parallel}d)} + \frac{(\epsilon_I - \epsilon_M) \sin q_2d}{\epsilon_I \epsilon_M q_2} + \frac{\epsilon_I - \epsilon_M}{\epsilon_M} \frac{Q_{\parallel} \sinh(Q_{\parallel}d) - \cos q_2d^2}{[\cosh(Q_{\parallel}d) - \cos q_2d]}, \\ M'_{21} &= -\epsilon_M Q_{\parallel} \sinh(Q_{\parallel}d) + \epsilon_M Q_{\parallel} \sinh^2(Q_{\parallel}d) \frac{\epsilon_I - \epsilon_M}{Q_{\parallel}(\epsilon_I - \epsilon_M) \sinh(Q_{\parallel}d) + \epsilon_I q_2 \sin q_2d}, \\ M'_{22} &= \cosh(Q_{\parallel}d) - Q_{\parallel} \sinh(Q_{\parallel}d) \frac{\epsilon_I - \epsilon_M}{[\epsilon_I - \epsilon_M] Q_{\parallel} \sinh(Q_{\parallel}d) + \epsilon_I q_2 \sin q_2d}. \end{aligned} \quad (6.34)$$

El resultado para la matriz de transferencia de una capa metálica en la presencia de dispersión espacial es

$$M = \begin{pmatrix} \cos q_1 d & -\frac{\sin q_1 d}{\epsilon_M q_1} + \frac{\sin q_2 d}{\epsilon_M q_2} & -\frac{\sin q_2 d}{q_2} & \frac{4\pi(-\cos q_1 d + q \cos q_2 d)}{Q_{\parallel}^2 + q^2} \\ \epsilon_M q_1 \sin q_1 d & \cos q_1 d & 0 & \frac{-4\pi \epsilon_M q_1 \sin q_1 d}{Q_{\parallel}^2 + q^2} \\ q_1 \sin q_1 d & \frac{\cos q_1 d}{\epsilon_M} - \frac{\cos q_2 d}{\epsilon_M} & \cos q_2 d & \frac{4\pi(-q_1 \sin q_1 d + q_2 \sin q_2 d)}{Q_{\parallel}^2 + q^2} \\ 0 & \frac{(Q_{\parallel}^2 + q^2) \sin q_2 d}{4\pi q_2 \epsilon_M} & -\frac{(Q_{\parallel}^2 + q^2) \sin q_2 d}{4\pi q_2} & \cos q_2 d \end{pmatrix} \quad (6.35)$$

De esta matriz se obtiene M_M^* haciendo uso de la condición adicional a la frontera entre las películas. En el límite local [$Im(q_2) \rightarrow \infty$], las componentes de la matriz m toman la forma

$$\begin{aligned} m_{11} &= \cosh(Q_{\parallel} d_I) \cosh(Q_{\parallel} d) + \frac{\epsilon_I}{\epsilon_M} \sinh(Q_{\parallel} d_I) \sinh(Q_{\parallel} d), \\ m_{12} &= \frac{1}{\epsilon_I Q_{\parallel}} \sinh(Q_{\parallel} d_I) \cosh(Q_{\parallel} d) - \frac{1}{\epsilon_M Q_{\parallel}} \cosh(Q_{\parallel} d_I) \sinh(Q_{\parallel} d), \\ m_{21} &= -Q_{\parallel} \epsilon_M \cosh(Q_{\parallel} d_I) \sinh(Q_{\parallel} d) + \epsilon_I Q_{\parallel} \sinh(Q_{\parallel} d_I) \cosh(Q_{\parallel} d), \\ m_{22} &= \cosh(Q_{\parallel} d_I) \cosh(Q_{\parallel} d) - \frac{\epsilon_M}{\epsilon_I} \sinh(Q_{\parallel} d_I) \sinh(Q_{\parallel} d). \end{aligned} \quad (6.36)$$

Capítulo 7

RESULTADOS

7.1 Reflexión total atenuada

Los experimentos de reflexión total atenuada se hacen en dos arreglos geométricos. En el arreglo de Otto[41], en el cual la película de constante dieléctrica positiva se coloca entre el prisma de índice de refracción independiente de la frecuencia y el sustrato de función dieléctrica negativa. Y en la geometría de Kretschmann[41], donde la película y el sustrato se intercambian. Los arreglos originales de Otto y de Kretschmann tienen, en lugar del medio de constante dieléctrica positiva, aire.

Estos experimentos pueden llevarse a cabo manteniendo el ángulo de incidencia fijo y variando la frecuencia de la luz incidente (barrido de frecuencia) o con la frecuencia fija y variando el ángulo de la onda incidente (barrido de ángulo). En el primer caso, la componente paralela a la superficie o interface del vector de onda, se obtiene con la fórmula[41]

$$Q = \frac{\omega_{min}}{c} \sqrt{\epsilon_p} \sin \theta. \quad (7.1)$$

donde ϵ_p es la constante dieléctrica del prisma, o el ángulo de incidencia, c la velocidad de la luz en el vacío y ω_{min} es la frecuencia en la que R_p tiene un mínimo. En el barrido de ángulo[41]

$$Q = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_p} \sin \theta_{min}. \quad (7.2)$$

con θ_{\min} el ángulo en el que R_p tiene su mínimo. Primero consideramos la interface entre dos metales que obedecen la teoría local de Drude, es decir, usamos[28]

$$\epsilon_i(\omega) = 1 - \frac{\omega_i^2}{\omega^2 + i\nu\omega}, \quad (7.3)$$

donde ω_i es la frecuencia de plasma y ν la frecuencia de amortiguamiento.

7.1.1 Interface entre dos metales

En esta sección describimos la simulación por computadora de los experimentos de RTA para la excitación y detección de los polaritones plasmones en la interface entre dos metales[41] de Drude. La interface entre dos conductores puede propagar modos en la ventana delimitada por

$$\omega_1 \leq \omega \leq \omega_s \leq \omega_2, \quad (7.4)$$

donde

$$\omega_s^2 = \frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2}. \quad (7.5)$$

Para la interface $Mg - Al$, el magnesio es el conductor menos denso, por lo que su frecuencia de plasma es la menor. Debido a esto, el Mg es el medio 1 con $\epsilon_1(\omega) > 0$ y el Al es el medio 2 con $\epsilon_2(\omega) < 0$ en la ventana de propagación. Los valores de los parámetros son $\frac{\omega_1}{\omega_2} = 0.7$, $\frac{\nu_1}{\nu_2} = 0.04$, $\frac{\omega_s}{\omega_2} = 0.06$. $\hbar\omega_2 = 15.8 \text{ eV}$ [41].

La existencia de los modos de superficie e interface puede confirmarse con la simulación de los experimentos ópticos de RTA. Por esto calculamos la relación de dispersión de los mínimos de la reflectancia y hacemos su comparación con la curva obtenida de las ecuaciones de la sección (3.2). En la Fig. I.1.2 mostramos las curvas de la relación de dispersión obtenidas de las ecuaciones de Maxwell (curva continua) y de los mínimos (curva de rayas) de la reflectancia para barrido de ángulo. Los resultados son para la geometría de Kretschmann. El espesor de la película es de 195 \AA y el índice de refracción del prisma es $\epsilon_p = 2$. En la Fig. se indica la geometría usada.

De la comparación notamos que las curvas muestran una semejanza bastante buena. También notamos la presencia del doblamiento[41] hacia atrás de la curva óptica el cual se debe a que la frecuencia de amortiguamiento es finita. Incluimos un espectro de R_p para la frecuencia $\frac{\omega}{\omega_p} = 0.78$, donde la profundidad del mínimo del orden del 25 por ciento, lo que significa que su detección experimental es factible.

La Fig.1.1.2 exhibe los resultados para barrido de frecuencia en la geometría de Kretschmann. Las cruces corresponden a los mínimos de R_p para un espesor de la película de 390.Å y $\epsilon_p = 1$, es decir, en este caso prescindimos del prisma de acoplamiento debido a que la condición de reflexión total interna puede satisfacerse para el metal de Drude. La curva de rayas es la relación de dispersión electromagnética con $\nu = 0$. En este caso, se ha tomado la curva EM en la ausencia de amortiguamiento debido a que estos efectos son menos fuertes para barrido de frecuencias[41] que para barrido de ángulo. En la figura también se muestran algunos espectros de reflectancia donde se observa que la profundidad de los mínimos es tal que experimentalmente sería posible su detección.

También hemos[41] hecho estudios para la configuración de Otto. Sin embargo, aquí solo mencionamos que los resultados para tal geometría presentan buena semejanza con las curvas EM. Los mejores datos teóricos del acoplamiento luz-plasmón corresponden al arreglo de Kretschmann, por lo que el experimento de excitación y detección de los plasmones en la interface entre dos metales tendría mejor éxito en esta geometría.

7.1.2 Interface entre dos dieléctricos polares locales

En esta sección estudiamos la simulación de RTA para la interface entre dos dieléctricos, es decir, tratamos con la propagación de polaritones fonones de interface[34]. Los dieléctricos se describen por medio de la función dieléctrica local del oscilador armónico

$$\epsilon_i(\omega) = \epsilon_{\infty i} + \frac{\omega_{pi}^2}{\omega_{Ti}^2 - \omega^2 - i\nu\omega}, \quad i = 1, 2, \quad (7.6)$$

donde $\omega_{pi}^2 = \epsilon_{\infty i}(\omega_{Li}^2 - \omega_{Ti}^2)$ y ω_L y ω_T son las frecuencias longitudinal y transversal del fonón. ϵ_{∞} es el valor de la constante dieléctrica para altas

Table 7.1: Tabla que lista las frecuencias características de los dieléctricos polares estudiados en esta sección. Estos se expresan en cm^{-1}

caso	ω_{T1}	ω_{s1}	ω_{L1}	ω_{T2}	ω_{s2}	ω_{L2}
A	268.0	278.6	291.0	367.3	385.4	403.0
B	202.0	225.7	380.0	257.0	424.3	463.3
C	257.0	291.2	463.3	367.3	407.2	403.0

frecuencias y ν es una frecuencia de amortiguamiento fenomenológica.

Dependiendo de las magnitudes de las frecuencias ω_L y ω_T de los fonones de los dos medios, existen tres posibilidades físicas distintas para la propagación de fonones de interface. Tomando la convención de que $\omega_{T1} < \omega_{T2}$ las tres posibilidades son

A).- $\omega_{T1} < \omega_{L1} < \omega_{T2} < \omega_{L2}$,

B).- $\omega_{T1} < \omega_{T2} < \omega_{L1} < \omega_{L2}$,

C).- $\omega_{T1} < \omega_{T2} < \omega_{L2} < \omega_{L1}$.

Las situaciones físicas corresponden a:

A. - $GaAs/GaP$,

B. - CaF_2/CdF_2 ,

C. - GaP/CaF_2 .

La aplicación de las condiciones de existencia de fonones en las interfaces físicas conduce a dos ventanas de propagación para cada caso, las cuales están definidas por

A).- $\omega_{T1} < \omega < \omega_{s1}$, $\omega_{T2} < \omega < \omega_{s2}$, (A1.2)

B).- $\omega_{T1} < \omega < \omega_{s1}$, $\omega_{L1} < \omega < \omega_{s2}$, (B1.2)

C).- $\omega_{T1} < \omega < \omega_{s1}$, $\omega_{L2} < \omega < \omega_{s2}$, (C1.2)

donde los límites ω_{si} de las ventanas de propagación están definidas por las soluciones a la ecuación

$$\epsilon_1(\omega_s) + \epsilon_2(\omega_s) = 0. \quad (7.7)$$

En la tabla 7.1 presentamos los parámetros y los valores de ω_s . En esta sección, normalizamos con respecto de ω_{T1} . El espesor adimensional se denota por D y tiene el valor $D = \frac{\omega_{T1} d}{c}$, entonces por ejemplo para la Fig.

1.2.2 si $D = 0.9$, $d = 5.345\mu\text{m}$.

En la Fig. 1.2.2 mostramos las relaciones de dispersión electromagnética (curva de rayas) y óptica (curva continua). La curva óptica se obtiene de los mínimos de R_p para las geometrías de Otto y Krestschmann para barrido de frecuencia y de ángulo en el caso C1, es decir, caso C ventana 1. En a) y b) dibujamos los resultados para barrido de frecuencias, mientras que en c) y d) los casos para barrido de ángulo. La dependencia de las curvas ópticas en el espesor de la película es apreciable. Las gráficas para O_ω mostrada en a) y para O_θ mostrada en c) indican que a medida que los espesores de la capa se hacen pequeños, la curva óptica se aleja de la curva EM. Se encuentra que los espesores óptimos de la simulación son para $D = 0.9$ y $D = 0.5$, respectivamente. Los resultados numéricos para K_ω y K_θ no ofrecen curvas ópticas cercanas a la EM. Para exhibir los resultados de la ventana 2 en la Fig. 1.2.3 presentamos las relaciones de dispersión para el caso C2 en el mismo orden que la figura anterior. Los resultados mostrados en a) y b) para O_ω y K_ω respectivamente, indican al igual que en la figura anterior, que las curvas ópticas tienen una dependencia en el espesor de la capa emparedada. Los espesores óptimos son $D = 1.2$ para O_ω y $D = 0.6$ para K_ω . Las curvas para barrido de ángulo no están cercanas a la curva EM como lo están las curvas para barrido de frecuencia.

La Fig. 1.2.4 exhibe el resultado para el caso C, en la ventana 2, en la geometría de Otto para barrido de frecuencia. El espesor es $D = 0.4$, el índice de refracción del prisma es $n_p = 3.417$. En la figura se incluye un espectro de R_p a un ángulo $\theta = 17^\circ$. Notamos que la curva óptica está cercana de la EM y que el mínimo de R_p tiene una profundidad de aproximadamente 35 por ciento.

Los resultados presentados en esta sección apoyan la predicción de la existencia de los polaritones fonones en la interfase entre dos dieléctricos. La excitación puede lograrse por medio de RTA. El resultado presentado en la Fig. 1.2.4 y que fué comparado con otros espesores recomienda que el arreglo geométrico es aquel en el que $D = 0.4$ para un prisma de $n_p = 3.417$. Excitación experimental de fonones en la superficie de GaP la logró Fischer[5].

7.1.3 Interface dieléctrico-metal

En esta sección estudiamos la interface entre un dieléctrico polar y un metal local de Drude. Las ventanas de propagación en esta interface[39] se muestran en la Fig. I.3.1. La figura muestra que el metal tiene la constante diéctrica negativa en las dos ventanas.

Usamos los parámetros que corresponden a *Al* y *CdS*. Para el metal los valores están dados en la sección 6.1.1 y para el dieléctrico $\epsilon_\infty = 9.1$, $\hbar\omega_T = 2.552eV$, y $\nu_d = 4.857 \cdot 10^{-5}\omega_T$. En la Fig. I.3.2 se dibujan los espectros de RTA para el caso de barrido de frecuencia. El ángulo de incidencia $\theta = 60^\circ$, $\epsilon_p = 11.68$ y el espesor de la película es $d = 105\text{\AA}$. La curva (curva continua) para la geometría de Otto presenta dos mínimos bien definidos, uno a frecuencias menores que ω_T y otro a frecuencias mayores que ω_L . El caso de Kretschmann (curva de puntos) exhibe solo un mínimo bien definido. Estos mínimos indican que la luz incidente se acopla a los plasmones en la interface entre el conductor y el dieléctrico.

7.1.4 Sistema emparedado

A continuación exponemos los cálculos la relación de dispersión óptica (curva de puntos) para películas[36] metálicas y la comparación con la electromagnética (curva punteada) obtenidas en la sección 3 del capítulo 4. La curva óptica la obtenemos de los mínimos de RTA para barrido de frecuencia. En los cálculos suponemos un prisma y una película metálica de espesor d_2 separados por un gap de aire con ancho d_1 . Para la Fig. I.4.1, por simplicidad tomamos $d_1 = d_2 = 112\text{\AA}$ y escogemos un prisma con $\epsilon_p = 11.68$. Las curvas ópticas se encuentran próximas a las EM, lo que indica el acoplamiento de la luz incidente con los plasmones de superficie. La existencia de dos curvas significa que hay dos tipos de modos, simétricos *S* y antisimétricos *A*. Ejemplos de los mínimos de RTA se muestran en la Fig. I.4.2, donde hemos escogido $\theta = 50^\circ$, el índice de refracción es el mismo al de la figura anterior, y además $d_1 = d_2 = d$. Se nota que a medida que el espesor se hace grande, los mínimos se hacen menos profundos. Esto indica que el acoplamiento de los plasmones de superficie es fuerte para películas delgadas, pero se debilita a medida que el espesor aumenta. Debemos mencionar que, en este caso, se necesita un prisma de acoplamiento, mientras que para la interface entre dos

conductores, la excitación se logra aún sin el prisma.

En la Fig. 1.4.3, presentamos los cálculos de reflectancia para el sistema de película 1- película 2- película 1. Hemos escogido dos películas metálicas Al y Mg , un ángulo de incidencia de $\theta = 45^\circ$, $d_1 = d_2 = d$ y cuatro espesores. Una gráfica de la geometría se indica en la figura. Los espectros exhiben dos mínimos, los cuales evolucionan de tal forma que cuando aumentan los espesores, degeneran en uno solo. El comportamiento de R_p en esta geometría es similar al obtenido para una sola película, y la explicación es la misma.

7.2 Reflectancia

En ésta sección estudiamos las propiedades ópticas de superficies semiconductoras excitónicas en la presencia de efectos de dispersión espacial. Usamos las condiciones adicionales a la frontera generalizada para calcular la reflectancia de la luz de polarización p y s incidente sobre una superficie de CdS , sin y con capa muerta de excitones, en la vecindad de la transición excitónica $A_{n=1}$. Hacemos un estudio de las CAF's y comparamos los espectros de R_p calculados con los experimentales. Calculamos también la reflexión total atenuada para el prisma-brecha de aire-semiconductor excitónico. Los resultados de RTA se comparan con espectros experimentales para la transición excitónica $C_{n=1}$ del ZnO , donde la capa muerta se ignora. Además incluimos los espectros RTA para CdS donde se toma en cuenta la capa muerta. En éste capítulo usamos los parámetros U_j que entran en las ecuaciones de las CAF's.

7.2.1 Superficie semiconductoras sin capa muerta

El estudio de las condiciones adicionales a la frontera en semiconductores excitónicos tales como $ZnSe$, CdS y ZnO se ha hecho por muchos años. Sin embargo, no se ha logrado determinar de manera precisa, cuales son las CAF's adecuadas para cualquier experimento de reflectancia. En esta sección estudiamos la superficie[17] de $ZnSe$.

Para entender la estructura de R_p , presentamos primero la relación de dispersión de los modos de volumen en un semiconductor excitónico en la

figura II.1.1. Estas curvas se obtienen de las ecuaciones $Q^2 + q^2 = \epsilon(\vec{q}, \omega) \frac{\omega^2}{c^2}$ y $\epsilon(\vec{q}, \omega) = 0$ presentadas en la sección 1.1, con la función dieléctrica de los excitones de Wannier-Mott, propuesta por Hopfield y Thomas, y que nosotros hemos presentado en la sección 1.2. La figura muestra dos modos transversales y un longitudinal. Notamos que por arriba de la frecuencia longitudinal, existen tres vectores de onda para una misma frecuencia, lo que corresponde a tres modos que se excitan en el semiconductor. Además, en la región de frecuencia $\omega_T \leq \omega \leq \omega_L$, es posible la excitación de un modo transversal, el cual no existe en la ausencia de ondas excitónicas, i.e., según la teoría local, en ésta región de frecuencias, no sería posible excitar modos de volumen sino de superficie.

Los parámetros[42] usados en ésta sección corresponden a $ZnSe$ con valores $\epsilon_0 = 8.1$, $\frac{\omega_p^2}{\omega_T^2} = 5.5 \times 10^{-3}$, $\frac{\omega_L^2}{\omega_T^2} = 5 \times 10^{-5}$, $\nu = 10^{-5} \omega_T$.

A continuación presentamos los espectros de reflectancia en la presencia de ondas excitónicas. Describiremos el caso de una superficie semiconductor, en ausencia de la capa muerta, sobre la que incide luz de polarización P . La figura II.1.2 muestra resultados de R_p para un ángulo de incidencia $\theta = 85^\circ$. La figura muestra el efecto de escoger diferentes condiciones adicionales a la frontera. En la figura incluimos el caso local (curva de puntos). Se nota que los efectos no locales son más importantes para las CAF's de Pekar $U_x = -1$, $U_z = -1$ (curva continua) y poco para las CAF's de Fuchs-Kliwer $U_x = 0$, $U_z = 0$ (curva de rayas). Como caso intermedio, se encuentran las CAF's de Agarwal et. al. $U_x = 0$, $U_z = 0$ (curva de rayas y puntos). En la figura indicamos ω_B , la frecuencia de Brewster la cual se define[17] por medio de $\epsilon(\omega_B) = \tan^2 \theta$, cuyo valor es $\omega_B^2 = \omega_T^2 + \frac{\omega_p^2}{\epsilon_0 - \tan^2 \theta}$ y ω_m $\epsilon(\omega_m) = 1$ cuya definición es $\epsilon(\omega) = 1$, y cuyo valor es $\omega_m^2 = \omega_T^2 + \frac{\omega_p^2}{\epsilon_0 - 1}$.

La reflectancia para luz incidente de polarización s se dibuja en la figura II.1.3. De los tres casos de CAF's mostrados, las de Pekar ($U_y = -1$) (curva continua) manifiestan efectos no locales fuertes, mientras que las de Fuchs-Kliwer $U_y = 1$ (curva de rayas) son más débiles y como caso intermedio están las de Agarwal et. al. $U_y = 0$ (curva de rayas y puntos). La curva R_s para las CAF's de Fuchs-Kliwer es parecida a la curva local (curva punteada), con la pequeña diferencia de que cerca de ω_T , la curva local es más pronunciada.

7.2.2 Superficies semiconductoras en presencia de la capa muerta

Se mencionó anteriormente que el modelo más realista para una superficie excitónica, toma en cuenta la capa muerta[13] de excitones, la cual es de algunas decenas de \AA de espesor. En lo que sigue discutiremos casos de reflectancia en los que esta capa está presente.

La figura II.2.1 muestra la comparación de diferentes espectros calculados con el resultado experimental de R_p para ángulos de incidencia normales $\theta = 0^\circ$. Los resultados experimentales (cruces) fueron obtenidos por Evangelisti et. al.[44] para una muestra de CdS. Las curvas teóricas corresponden a diferentes CAF's donde, debido a que $\theta = 0^\circ$, existe solo un parámetro ($U_x = U_z$), el cual toma valores $-1 \leq U \leq 1$. El valor de $U = 1$, origina una curva diferente, mientras que para $U = -1$, la curva teórica es semejante a la experimental. En los cálculos hemos usado un espesor de capa muerta de 100 \AA .

Con el fin de mostrar los efectos en R de la capa muerta, en la figura II.2.2 comparamos curvas teóricas con diferentes espesores de dicha capa con el resultado experimental. Se considera el ángulo $\theta = 0^\circ$ y las CAF's de Pekar con $U = -1$. Se nota que las curvas con $l = 0\text{\AA}$ y $l = 200\text{\AA}$ son las menos parecidas a la experimental, mientras que la mejor semejanza se obtiene para $l = 100\text{\AA}$. Los resultados mostrados en esta figura y la anterior indican que las CAF's que explican los resultados experimentales, al menos para incidencia normal de la luz, son las de Pekar y que en ésta muestra de CdS, el espesor de la capa muerta es del orden de 100 \AA .

Resultados teóricos y experimentales reportados por Sel'kin et. al.[45] indican que para muestras de CdS, las CAF's dependen de la preparación de la muestra y que el espesor de la capa muerta es de 70 \AA . Estos resultados no concuerdan con los trabajos previos, lo que quiere decir que existe aún trabajo de investigación que realizar para la determinación de las condiciones a la frontera.

7.2.3 RTA para semiconductores excitónicos

La comparación[46] entre el experimento y la teoría de RTA, la presentamos en el caso de la detección y excitación de los polaritones excitones de superficie en semiconductores. Para este propósito, el arreglo que usamos es: un prisma de índice de refracción n_p y un sustrato de semiconductor separados por un gap de aire, y después usamos en lugar del gap de aire una película metálica (.Ag), con el fin estudiar también la interacción excitón-plasmón. En algunos casos tomaremos en cuenta la capa muerta de excitones. Estudiamos solo el caso de barrido de frecuencia.

La Fig. II.3.1. exhibe los espectros de RTA para la geometría de un prisma de $n_p = 3.41$, un sustrato de ZnO , un gap de aire con $d = 3600 \text{ \AA}$ y un ángulo de incidencia $\theta = 50^\circ$. El parámetro de dispersión se escribe como[17,46]

$$U_k = |U_k|e^{i\phi},$$

con $|U_k| = 1$ y $0 \leq \phi \leq 2\pi$. Los valores $U_x = -1$ y $U_z = -1$ corresponden a las CAF's de Pekar y para $U_x = 1$ y $U_z = -1$ tenemos las CAF's de Fuchs-Kliewer. Hay otras curvas en la figura con valores diferentes de U_k que corresponden a CAF's sin nombre. Para estas curvas hemos ignorado la capa muerta, debido a que se ha encontrado experimentalmente que para ZnO es pequeña, del orden de 30 \AA . También presentamos un espectro experimental en la parte central de la figura. Esta curva fue obtenida por Lagois y Fisher[6]. Notamos que la curva teórica que tiene gran parecido con la experimental, es la que se obtiene con las CAF's de Pekar.

El efecto de escoger diferentes ángulos de incidencia para los espectros de RTA se exhibe en la figura II.3.2. La geometría que usamos se indica en la misma gráfica. En la superficie del sustrato de CdS, se incluye la capa muerta de excitones, de constante dieléctrica $\epsilon_p = 9.1$. El prisma tiene índice de refracción $n_p = 3.41$ el gap de aire tiene un ancho $d = 3000 \text{ \AA}$ y usamos las CAF's de Pekar. Se ve que cuando el ángulo de incidencia $\theta (> \theta_c)$ aumenta, el mínimo de reflectancia se hace menos profundo y para ángulos mayores de 54° éste desaparece, lo cual significa que hay ángulos en los que la excitación de los excitones de superficie es más factible. El espesor de la capa muerta, en este material es del orden de 100 \AA , de acuerdo con Halevi et. al. [41], aunque en desacuerdo con Sel'kin et. al.[18] quienes afirman que el espesor es de 70 \AA para el material en cuestión. De este desacuerdo se puede

decir que el espesor de esta capa superficial se encuentra sin determinar. Por otro lado, la existencia de la capa libre de excitones no es obstáculo para el acoplamiento de la luz incidente con los modos en la superficie del semiconductor.

7.3 Propiedades ópticas de superredes

7.3.1 Superredes locales. Caso de dos metales

Las propiedades ópticas de superredes locales y no locales se discuten en las secciones que siguen. Empezamos exponiendo el caso de superred construida de capas alternadas de dos metales[36] de Drude (Mg y Al), que se muestran en la Fig. III.1.1. Las películas tienen espesor d_k . Para la superred semiinfinita consideramos un prisma de constante $\epsilon_p > 1$.

La relación de dispersión ω vs. p de los modos EM colectivos de la superred infinita se dibuja en la Fig.III.1.2. En a) está la parte real y en b) la parte imaginaria de p . También se indican ω_1 y ω_2 , y las dos ramas de los plasmones de superficie. Por entender mejor esto, recordemos que una película local puede tener modos en cada superficie. Estas ondas de superficie interaccionan a través de los campos evanescentes dependiendo del espesor de la película, para formar los modos simétricos y antisimétrico. Estos polaritones en una superred pueden acoplarse para formar una banda de volumen de la heteroestructura y de esta forma dan origen a la dos ramas de los plasmones.

La reflectancia para la luz incidente de polarización p , en una superred semiinfinita se presenta en la Fig. III.1.3. La curva continua es para el sistema con la capa 1 (Mg) como la primera del sistema y la capa 2 (Al) como la segunda; mientras que en la punteada las dos películas de la celda unitaria se intercambian. $\epsilon_p = 1.5$, la componente x del vector de onda de la luz incidente es $Q = \frac{\pi}{\lambda} \sqrt{\epsilon_p} \sin 30^\circ$ y $d_1 = d_2 = 130 \text{ \AA}$. Las dos curvas exhiben dos mínimos, los cuales se originan por la excitación de los polaritones plasmones de superficie. Estos plasmones se acoplan a la superred periódica y forman un mecanismo de transporte de energía.

La Fig. III.1.4 muestra el comportamiento de la reflectancia de la superred semiinfinita para cuando los espesores de las películas se varían. Para esta figura, consideramos tres diferentes espesores con $d_1 = d_2 = d$,

$Q = \frac{\pi}{c} \sin 30^\circ$. La primera película de la superred tiene constante dieléctrica negativa mientras que, la segunda, positiva. La curva continua exhibe dos mínimos profundos, los cuales se hacen menos profundos hasta desaparecer el de baja frecuencia para espesores de la película, lo que indica el desacoplamiento de los polaritones plasmones de superficie de la película. En otras palabras, la consecuencia de la no interacción entre los plasmones de la película activa (que puede tener ondas de superficie) se manifiesta en un solo mínimo de RTA.

7.3.2 Superred no local. Caso de semiconductor excitónico. Sin y con capa muerta

En secciones anteriores, hemos presentado los efectos de las ondas excitónicas en la reflectancia para el caso de una una superficie semiconductor. En esta sección, discutiremos el caso de la superred[27] en presencia de las ondas excitónicas y los efectos no locales.

Consideremos ahora la superred semiconductor que se muestra en la Fig.III.2.1, y supongamos que la capa muerta no está presente. Entonces, el sistema tiene como periodo a $d = D_s + d_i$ con $d_L = 0$. D_s , d_i y d_L son los espesores de la película semiconductor con excitones, del aislante y de la capa muerta. El vector de onda paralelo a las interfaces tiene la forma $Q = \frac{\pi}{c} \sin \theta$. En la Fig. III.2.1, se muestran las capas excitónicas en las que las seis ondas viajeras tiene lugar. De las cuales, dos transversales y una longitudinal, viajan a la derecha, las mismas se reflejan y viajan a la izquierda. En la gráfica, también se indican los modos transversales de la película aislante.

Las capas semiconductoras se representan por medio de la función dieléctrica de los excitones de Wannier, cuya forma se presentó en la sección I.2 de la primera parte de la tesis. Los parámetros que se usan corresponden al excitón $A_{n=1}$ de CdS y cuyos valores se encuentran en la sección 7.2.2. En esta sección usamos las CAF's en la forma de la ecuación (2.41)

$$\alpha \vec{P} + \frac{\partial}{\partial n} \vec{P} = 0,$$

para completar las condiciones a la frontera, y así, obtener las propiedades ópticas.

Un resultado de la relación de dispersión para los modos EM colectivos de la superred infinita, se muestra en la Fig. III.2.2. Se considera [27] que las ondas que se propagan en la superred tienen polarización p , $Q = \frac{p}{c} \sin 60^\circ$, las capas tienen igual espesor $d_s = d_i = 773 \text{ \AA}$ y se consideran las condiciones adicionales a la frontera de Pekar. La Fig. III.2.2 contiene una gran estructura en la vecindad de la transición excitónica, la cual se puede interpretar fácilmente. Para este propósito, recordemos la relación de dispersión de los modos que se propagan en el volumen del cristal infinito.

Para frecuencias $\omega < \omega_T$ no existen ondas longitudinales en el semiconductor, donde hay solo un modo transversal de longitud de onda grande, como la que aparece en la óptica local. A frecuencias arriba de ω_L , la longitud de onda de esta onda decrece de tal forma que rápidamente satisface la condición de resonancia $q = \frac{n\pi}{d_s}$, donde n es un entero positivo. Las resonancias son similares a los modos transversales guiados, cuya longitud de onda es la mitad de un número entero veces el espesor de la película. Sin embargo, estos no son realmente ondas guiadas porque pueden salir del semiconductor y propagar dentro del aislante, ya que $Q < \sqrt{\epsilon_i - \epsilon_c}$. El acoplamiento entre las resonancias transversales en las capas semiconductoras adyacentes, a través de los campos inducidos en los aislantes, da origen a la estructura de las Fig. III.2.2.

Por arriba de ω_L aparece una onda longitudinal, cuyo vector de onda crece rápidamente con ω , originando las resonancias longitudinales cuando $q_3 = \frac{n\pi}{d_s}$. El campo de la onda longitudinal está confinado dentro de la capa semiconductor, ya que no existe modo longitudinal en el aislante, por lo que las resonancias para esta onda, pueden considerarse como modos longitudinales guiados. Sin embargo, estos modos se acoplan, en la superficie del semiconductor, a los modos transversales del aislante. Las resonancias longitudinales son responsables, en parte, de la estructura, como mínimos, máximos e inflexiones. Esta estructura es menos prominente que la originada por los modos transversales, debido a que el acoplamiento entre modos transversal-transversal es más fuerte que el correspondiente transversal-longitudinal.

Para frecuencias arriba de la frecuencia crítica

$$\omega_c^2 = \omega_T^2 + \frac{\omega_p^2}{\epsilon_0 - \sin^2 \theta},$$

aparece una segunda onda transversal en el semiconductor. Esta tiene una longitud de onda grande y su relación de dispersión es semejante a la que se

obtiene en la óptica local. Recordemos que la región

$$\omega_T < \omega < \omega_c,$$

está prohibida para modos de volumen, en el caso local. La segunda onda transversal contribuye de manera global a disminuir $Im(p)$, incrementar la parte $Re(p)$, y reducir la estructura debida a las resonancias de las ondas transversales y longitudinales.

En la Fig.III.2.3 se muestra la reflectancia R_p de la luz de polarización p , para una superred semiinfinita. El ángulo de incidencia es $\theta = 60^\circ$ y los parámetros son los mismos que de la Fig.III.2.2. La estructura casi está en concordancia con la que exhibe la relación de dispersión. Hay una serie de picos cerca de la frecuencia de la transición excitónica y una serie de picos menores para frecuencias mayores a ω_c . En esta misma figura, presentamos el caso de una película semiconductor. La comparación de los dos espectros indica que para frecuencias $\omega > \omega_c$, la curva que corresponde a la superred presenta una estructura más prominente, mientras que para $\omega_T < \omega < \omega_c$, las dos curvas son similares. También presentamos el espectro de reflectancia para un espesor menor (195Å) de las capas de aislante y semiconductor en la Fig.III.2.4. Se aprecia claramente, que la estructura que presenta la reflectancia es menor que para anchos grandes. Esto se debe a que a espesores pequeños hay menor número de resonancias en las capas excitónicas. En la misma figura se muestra la comparación con la curva correspondiente a una sola película semiconductor notándose que el comportamiento es similar para las dos curvas pero para la superred el espectro se magnifica.

La comparación de los espectros para diferentes CAF's, se presenta en la Fig.III.2.5. Consideramos de nuevo la superred de la Fig.III.2.5, usamos los CAF's de Pekar y las de Ting et. al. e incluimos el caso local ($D = 0$). Mientras que la curva de Pekar exhibe picos donde se satisface la condición de resonancia, el espectro de Ting et. al. presenta menos picos. Por otro lado, la estructura del espectro local se localiza en $\omega < \omega_T$. En este caso, se presenta una situación nueva, que se ve como una inflexión en la reflectancia en $\omega \approx 1.0007\omega_T$. Esta situación no se relaciona con las resonancias, y se puede interpretar como sigue.

El cálculo local tiene una región de frecuencias entre ω_T y ω_L donde no existe la propagación de modos en el semiconductor. Si Q es grande, tampoco habrá modos que propagan en el aislante. Para este caso, puede haber

ondas electromagnéticas de superficie, los cuales propagan en la interface semiconductor-aislante y decaen exponencialmente lejos de la superficie. La frecuencia de estos modos es $\omega_s = 1.00066\omega_T$. Para la superred, las ondas de superficie de las capas adyacentes, dependiendo de los espesores, pueden acoplarse para dar lugar a dos bandas de volumen, debido a que hay dos interfaces por celda unitaria de la superred. Estos modos constituyen un mecanismo de transporte de energía de una interface a otra hacia el volumen, y por consiguiente, reducen la reflectancia de la superred.

Para completar la discusión de las propiedades ópticas de superredes semiconductoras excitónicas, a continuación presentamos[38] los resultados en la presencia de la capa muerta de excitones. Los cálculos se llevan a cabo mediante el uso de las fórmulas que se presentan en la sección 5.4. En la Fig.III.2.6. se exhiben los espectros de reflectancia y las consecuencias de escoger diferentes espesores de capa muerta. El espesor del aislante es igual al del semiconductor $d_i = 2d_L + d_s = 773\text{Å}$, $Q = \frac{\pi}{\epsilon} \sin 60^\circ$ y escogemos las CAF's de Pekar. Al igual que antes, suponemos que las ondas incidentes son de polarización p . Como se espera, al incrementar la capa muerta, los excitones se confinan en una capa excitónica más angosta y, por consiguiente, aumenta el valor de las frecuencias de resonancia. Puesto que en la capa excitónica existen tres ramas de la relación de dispersión de los polaritones, y cada una de ellas satisface las condiciones de resonancia, en la misma forma que en ausencia de la capa muerta, y puesto que cada una de estas frecuencias se desplaza una cantidad diferente cuando se incrementa el espesor, los espectros presentan un aparente comportamiento complejo, el cual es sensible al espesor de la capa muerta. Se nota que la presencia de esta capa libre de excitones origina un corrimiento hacia el azul.

La Fig. III.2.7. muestra la reflectancia y los efectos de escoger diferentes condiciones a la frontera y un espesor de la capa muerta $d_L = 97\text{Å}$. También incluimos el caso local. Se ve que la curva de Pekar exhibe más estructura que la de Ting et. al., siendo la segunda muy similar al espectro local, excepto por un desplazamiento en la resonancia transversal para $\omega < \omega_T$ y dos mínimos por arriba de ω_L , los que corresponden a resonancias pronunciadas de las ondas transversales. Los picos que aparecen cerca de $\omega_L = 1.0007\omega_T$ en el caso de Ting et. al. y el caso local, y que no están presentes en la curva de Pekar, se deben a la excitación de modos de superficie acoplados.

7.3.3 Reflectancia para película semiconductor delgada

En la Fig.III.3.1 y 2, se ilustra la reflectancia de una película de $ZnSe$ de espesor 50\AA , crecida sobre un substrato de Al , calculada por medio de las fórmulas aproximadas de la sección 5.5, para dos ángulos de incidencia, $\theta = 0^\circ$ y 60° . Para comparación, presentamos la reflectancia calculada por medio de las fórmulas exactas. Suponemos $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$ y hemos usado las CAF's de Ting et. al. ($\alpha = 0$). Los resultados exactos de la reflectividad no son tan profundos como los obtenidos por la aproximación, pero su posición en la frecuencia es la misma y sus anchos están en excelente acuerdo. Cuando el espesor de la película se hace doble, el acuerdo entre las curvas se pierde.

Se nota que la teoría simple y los resultados numéricos descritos para la película delgada de semiconductor, describe bien los resultados del cálculo exacto para aquellas resonancias para las cuales el campo electromagnético varía muy lentamente dentro de la película.

7.4 Dispersión de electrones

7.4.1 Película-substrato. Caso local

Esta sección se dedica a describir el cálculo numérico de la probabilidad por unidad de frecuencia de que el electrón haya perdido la energía $\hbar\omega$ cuando interacciona con algún sistema. Esta está dada por la fórmula de $P(\omega)$ discutida en el capítulo 6. Se debe remarcar, como lo señalan Camley y Mills[8], que para que $R(Q, \omega)$, y así $P(\omega)$, sea diferente de cero, el término de amortiguamiento debe tener valor finito.

Los resultados de $P(\omega)$ para electrones incidentes en una película metálica crecida sobre el substrato dieléctrico se muestran en la Fig. IV.1.1. La energía de los electrones es de 200eV y el ángulo de incidencia de 45° . La figura a muestra los espectros de $P(\omega)$ para los electrones que se dispersan de manera casi especular. Se dibujan curvas para diferentes espesores de la película de Al y el substrato de CdS . Se observan dos picos a baja energía, en las ventanas $0 < \omega < \omega_{s1}$, y $\omega_L < \omega < \omega_{s2}$ (estas se dibujan en la Fig. I.1.1), para espesores menores que 20\AA . Estos picos debidos a los polaritones

plasmones de interface, se hacen menos pronunciados a medida que el grueso de la película crece y desaparecen para espesores grandes. Además, aparece un pico a la frecuencia del plasmón de superficie, el cual sufre un corrimiento pequeño al mismo tiempo que se hace grande conforme se incrementa el espesor.

La Fig. IV.1.2. muestra los espectros obtenidos para electrones interactuando con la película metálica. Existen cuatro curvas para diferentes gruesos de la película. Para capas delgadas, se presentan dos picos, los cuales se deben al acoplamiento de los modos de superficie de la capa metálica. Estos picos evolucionan de tal forma que degeneran en uno solo, prominente, lo que significa que los plasmones de superficie desacoplan. La energía y el ángulo de incidencia de los proyectiles son los mismos que de la figura anterior.

7.4.2 Superred metálica en la presencia de ondas de plasma

En esta sección describimos los resultados para la superred formada de capas alternadas de una capa metálica y un aislante. Consideramos que la capa metálica está descrita por la función dieléctrica hidrodinámica $\epsilon_l(\omega, \vec{q})$ para los modos longitudinales y de Drude para los modos transversales. La presencia de las ondas de plasma longitudinales en las películas metálicas implican la necesidad de las CAF's para determinar las amplitudes de los campos. En este trabajo consideramos que esta condición es la continuidad de E_z .

A continuación describimos los resultados[40] del cálculo numérico de $P(\omega)$ para la superred metálica semiinfinita en la presencia de ondas de plasma. Suponemos que la celda unitaria del sistema se forma de la capa metálica como capa 1 y la capa del aislante como la 2. Por simplicidad, ponemos al vacío en el lugar del aislante y escogemos al oro como el metal, cuyos parámetros $\omega_p \tau = 100$, $\hbar\omega_p = 9.028\text{eV}$, $\beta^2 = \frac{3}{5}V_F^2$, donde V_F es la velocidad de Fermi con $V_F = 0.01c$ para Au y c la velocidad de la luz. En este trabajo ignoramos las posibles transiciones interbandas. En la Fig. IV.2.1 dibujamos $P(\omega)$ como función de $\frac{\omega}{\omega_p}$ para electrones cuya energía es de 200eV y un ángulo de incidencia de 45° . La gráfica muestra tres curvas para $d_m = d_i = d (= 15, 25, 40\text{\AA})$ donde puede apreciarse que a espesores pequeños aparecen dos picos, los cuales a medida que aumenta el espesor se aproximan entre

ellos hasta degenerar en uno. Para interpretar esta situación, en las dos Figs. siguientes presentamos la comparación de los espectros obtenidos con y sin la presencia de las ondas de plasma. Para $d_m = d_i = d (= 20\text{\AA})$, el espectro local $P_l(\omega)$ presenta un solo pico cercano a $\omega = 0.7\omega_p$, mientras que en el caso no local $P_{nl}(\omega)$ exhibe dos picos, uno en $0.7 < \frac{\omega}{\omega_p} < 0.8$ y otro en $0.8 < \frac{\omega}{\omega_p} < 0.9$. Cuando $d_m = d_i = d (= 40\text{\AA})$ las dos curvas tienen un solo pico, pero el local se localiza a la frecuencia de plasmón de superficie mientras que el no local está desplazado a altas frecuencias. En las dos figuras, $P_l(\omega)$ es mayor que $P_{nl}(\omega)$.

Los efectos de escoger diferentes espesores de película para la superred local se muestran en la Fig. IV.2.2. Se nota que a espesores pequeños el pico de $P_l(\omega)$ es ancho y se hace prominente a medida que aumenta el espesor. Este se localiza a la frecuencia del plasmón de superficie.

Los resultados de $P_{nl}(\omega)$ a espesores pequeños indican que existen dos picos, mientras que a espesores del orden de 40\AA o mayores aparece un solo pico. Los espectros de $P_l(\omega)$ presentan un solo pico el cual se debe a los plasmones de superficie.

Capítulo 8

CONCLUSIONES

Hemos estudiado la teoría y las simulaciones de los experimentos ópticos de excitación y detección de modos electromagnéticos en superficies, interfaces y heteroestructuras. Para dieléctricos hemos estudiado solo la propagación de polaritones en la interfaz de estos medios, mientras que para metales y semiconductores hemos estudiado superficies y películas delgadas con el fin de interpretar resultados de la reflectancia y la relación de dispersión de los modos EM en superredes. Con esto hemos tratado de conectar los diferentes resultados presentados aquí.

La teoría electromagnética predice la existencia de los modos de superficie e interfaz. Estos modos se pueden propagar en ciertas regiones de frecuencia, llamadas ventanas de propagación. Hemos calculado los mínimos de reflexión total atenuada para luz de polarización p y de ahí las relaciones de dispersión de los polaritones de interfaz. Estas curvas de la relación de dispersión las llamamos ópticas y las comparamos con las obtenidas de la teoría EM. Las relaciones de dispersión óptica se han obtenido para barridos de frecuencia y de ángulo en las geometrías de Otto y Kretschmann. Los resultados numéricos muestran la factibilidad del acoplamiento de la luz incidente con los modos de superficie o interfaz. Esto indica que experimentalmente es posible detectar dichos modos.

Los resultados para la interfaz entre los metales Al y Mg indican la posibilidad de la detección experimental de los polaritones plasmones. De las comparaciones de los resultados para las geometrías de Otto y Kretschmann se concluye que los experimentos tendrán éxito en el arreglo de Kretschmann

para barrido de frecuencias o ángulo. Debido a que los metales obedecen la teoría local de Drude, es posible satisfacer las condiciones de reflexión total atenuada en la ausencia de un prisma. Esto significa que los experimentos para la excitación de los polaritones plasmones en la interface entre dos metales no requiere de un prisma de acoplamiento.

En la interface dieléctrico-dieléctrico existen tres posibilidades físicas para la propagación de polaritones fonones, y por cada situación, dos ventanas de propagación. Los resultados de la simulación indican que en cada situación física y en cada ventana es posible la propagación de polaritones fonones de interface. Además, hemos encontrado que en comparación con otros casos, la situación física C y en la ventana 2 ($\omega_{L,2} \leq \omega \leq \omega_{s,2}$) es en donde se obtienen los mejores resultados numéricos, para un prisma de *Si* en la interface *GaP/CaF₂*. Cabe recordar que la propagación de polaritones fonones en la superficie de *GaP* se ha estudiado experimentalmente por Fischer[5], por lo que pensamos que en la interface también es posible la propagación de dichos modos.

En la interface entre un dieléctrico y un metal existen dos ventanas de propagación. En ambos, la función dieléctrica del metal es negativa. Las simulaciones de RTA para barrido de frecuencia en esta interface muestran que la excitación y propagación de los polaritones plasmones es posible en ambas ventanas para la geometría de Otto, pero solo en la ventana de alta frecuencia para la geometría de Kretschmann.

Los estudios de la película y el sistema emparedado se llevaron a cabo para barrido de frecuencia. Para las dos situaciones físicas hemos considerado las películas metálicas *Al* y *Mg*. Los polaritones plasmones de superficie de la película se pueden excitar por medio de un prisma de acoplamiento, mientras que la excitación de los polaritones plasmones de la película emparedada se puede lograr sin prisma de acoplamiento. Hemos encontrado que los espectros de RTA confirmaron las predicciones de la teoría EM, es decir, que a espesores pequeños de la película, los plasmones de las superficies interactúan para formar los modos simétrico o antisimétrico, pero a espesores grandes, los modos se desacoplan. Esto se manifiesta con la presencia de dos y un mínimo en la reflectancia para espesores pequeños y grandes, respectivamente. Resultados experimentales de la excitación y detención de polaritones plasmones en películas de *Ag* fueron reportados por Quail[48] y colaboradores.

Los autores usaron el método de barrido de ángulo para medir los espectros de RTA. El resultado de la comparación con la teoría es satisfactoria, y la excitación y acoplamiento de los plasmones la lograron para películas de espesor del orden de 505Å . Estos experimentos apoyan las predicciones de excitación de polaritones plasmones en las películas metálicas por medio de barrido de frecuencia.

Las comparaciones de los espectros de reflectancia teóricos y experimentales para *CdS* indican que el espesor de la capa muerta de excitones es del orden de 100Å y que las CAF's de Pekar dan los mejores resultados para el caso de incidencia normal de la luz. Por otro lado, los espectros de RTA experimentales para la superficie de *ZnO* se comparan con los calculados sin la presencia de la capa muerta. Las CAF's de Pekar dan la mejor comparación.

Los resultados de RTA que hemos presentado apoyan que la técnica puede emplearse para estudiar experimentalmente la propagación de los polaritones plasmones en la interface *Al/Mg*, los polaritones fonones en la interface entre los dieléctricos polares, por ejemplo *GaP/CaF₂*, los polaritones en la interface entre un dieléctrico *CdS* y un metal *Al*. Además permite estudiar la propagación de polaritones excitones en superficies semiconductoras con dispersión espacial y las CAF's.

Por otro lado, los estudios de la superficie semiconductoras con la reflectancia de la luz muestra que esta técnica da buenos resultados para el estudio de las CAF's. Por esto concluimos que tanto RTA como la reflectometría permiten obtener buenos resultados en la comparación con espectros experimentales usando las condiciones a la frontera de Pekar. Hemos obtenido que el espesor de la capa muerta para *CdS* es de 100Å . Sin embargo debemos mencionar que estudios recientes de Selkin indican que el espesor de dicha capa es del orden de 70Å , por lo que se piensa que existe aun investigación pendiente. Para el caso de *ZnO* esta capa superficial es pequeña y para fines de cálculo se puede ignorar.

Las superredes metálicas y semiconductoras se han estudiado en las teorías local y no local. Las superredes con celda unitaria de dos metales se estudiarían en la aproximación local haciendo uso de la matriz de transferencia de dimensión 2×2 , para ondas de polarización *p*. Los resultados de las relaciones de dispersión de los modos EM colectivos de la superred infinita muestran dos ramas de los polaritones de superficie y la reflectancia

para la superred semiinfinita presenta dos mínimos en las regiones de frecuencia donde existen los plasmones de superficie de las películas metálicas. De acuerdo con los resultados de una sola película, los espectros de la superred se interpretan de manera fácil. Las ramas de la relación de dispersión y los mínimos de R_p se deben al acoplamiento de los polaritones plasmones de las películas. El efecto colectivo es que los plasmones de superficie se acoplan en la superred y forman un mecanismo de transporte de energía.

La superred construida de capas alternadas de aislante y semiconductor excitónico se estudió tomando en cuenta los efectos no locales y las CAF's. Hemos desarrollado la teoría de la matriz de transferencia de dimensión 6×6 y por medio de las CAF's, reducimos la dimensión a una de 2×2 , como la que aparece la óptica local. Primero ignoramos la capa muerta de excitones y calculamos las relaciones de dispersión de los modos EM colectivos del sistema infinito y la reflectancia para el sistema semiinfinito para luz de polarización p . La rica estructura que presentan los espectros en la vecindad de la transición excitónica $A_{n=1}$ del CdS se interpretan como resonancias de las ondas excitónicas transversales y longitudinales guiadas por las capas semiconductoras. La comparación con la reflectancia de una sola película, indica que el espectro de la superred es más prominente. Las reflectancias para diferentes CAF's difieren en estructura. El cálculo local exhibe menos estructura y las resonancias transversales se encuentran desplazadas. La presencia de la capa muerta de excitones induce un corrimiento del espectro hacia el azul, y las resonancias excitónicas se confinan en capas más delgadas dando lugar a que la estructura pierda picos. Al igual que sin capa muerta, la estructura de las relaciones de dispersión y reflectancia son muy sensibles a los cambios de CAF's. Esperamos que los resultados presentados de la superred excitónica estimule investigación tanto teórica como experimental con el fin estudiar la propagación de ondas electromagnéticas y las CAF's.

La reflectancia para la película semiconductor excitónica se calculó en la aproximación de espesor d delgado y se comparó con el resultado exacto para el caso de luz incidente de polarización p . Los resultados numéricos para diferentes CAF's muestran que la aproximación de película delgada es válida solo para $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$, es decir, para las CAF's de Ting et. al., pero no para valores grandes de α . Los valores de d para los cuales la aproximación deja de ser válida $d > 100\text{Å}$.

Por último, los cálculos de la probabilidad $P(\omega)$ de pérdida de energía de los electrones que inciden en la interface dieléctrico-metal se llevaron a cabo en la teoría local. Los resultados de $P(\omega)$ muestran que al igual que en RTA, la excitación de los plasmones en la interface Al/CdS puede lograrse haciendo incidir directamente los electrones de baja energía ($\approx 200\text{eV}$). Los plasmones en las dos ventanas de propagación, pueden excitarse en esta interface. Además, la excitación de los modos a la frecuencia del plasmón de superficie, puede lograrse también.

El estudio de superredes construidas de un aislante y un metal no local se llevó a cabo, también mediante la interacción de los electrones de baja energía. Hemos calculado P_{NL} para espesores pequeños de las películas. Los resultados presentan un pico adicional al que aparece en el caso local. Este se localiza a energías más altas. Además, el pico que correspondería al caso local, se encuentra desplazado a energías más altas. Pensamos que los espectros de la probabilidad de pérdida de energía de los electrones interaccionando con las heteroestructuras, presentados en este trabajo, es un apoyo al estudio experimental con esta técnica. Además de que esta técnica no requiere de equipo de alta resolución.

Bibliografía

- [1] O. Madelung, Introduction to Solid State Theory, Springer Series in Solid State Sciences Z (Springer-Verlag).
- [2] P. J. Feibelman, Prog. Surf. Sci. 12, 287(1982)
- [3] A. Otto, Z. Phys. 216, 398(1968)
- [4] E. Kretschmann and H. Raether, Z. Naturforsch. A 23, 2135(1968); E. Kretschmann Z. Phys. 241, 313(1971).
- [5] N. Marshall and B. Fischer, Phys. Rev. Lett. 28, 811(1972)
- [6] B. Fischer and J. Lagois, en Excitons, ed. por K. Cho, Topics in Currents Physics, Springer Verlag Heidelberg; Solid State Commun. 20, 1519(1976).
- [7] S. I. Pekar, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 33, 1022(1957)[Sov. Phys.-JETP 6, 785(1958).
- [8] R. E. Camley and D. L. Mills, Phys. Rev. B 29, 1695(1985)
- [9] Streight and Mills and D. L. Mills, Phys. Rev. B 38, 8526(1988).
- [10] K. V. Sobha and G. S. Agarwal, Solid State Commun. 43, 99(1982); G. S. Agarwal, Phys. Rev. B 15, 2371(1977)
- [11] Shu Wang, Rubén G. Barrera and W. Luis Mochán, Phys. Rev. B 40, 1571(1989-II).
- [12] J.J. Hopfield, Phys. Rev. B 112, 1555(1958).

- [13] J.J. Hopfield and D. G. Thomas Phys. Rev., 132, 563(1963)
- [14] K.L. Kliewer and R. Fuchs Phys. Rev. 172, 607(1968)
- [15] C.S. Ting, M.J. Frankel, and J.L. Birman, Solid State Commun. 17, 1285(1975).
- [16] G.S. Agarwal, D.N. Pattanayak and E. Wolf, Phys. Rev. Lett., 27, 1022(1971).
- [17] P. Halevi and R. Fuchs, J. Phys. 17, 3869(1984)
- [18] A. Sel'kin Phys. Stat. Sol. (b) 83, 47(1977)
- [19] A. Eguiluz and J.J. Quinn Phys. Rev. B 14, 1347(1976)
- [20] M. del Castillo-Mussot and W. L. Mochán, Solid State Commun. 62, 555(1987).
- [21] L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Dev. 14, 61(1970); R. Tsu and L. Esaki Appl. Phys. Lett. 22, 562(1973).
- [22] Pochi Yeh, A. Yariv, and Chi-Shain Hong, J. Opt. Soc. Am. 67, 423(1977)
- [23] G. Eliasson, G. F. Giuliani, J.J. Quinn, and R.F. Wallis, Phys. Rev. B 33, 1405(1986).
- [24] W. Luis Mochán, Marcelo del Castillo-Mussot and Rubén G. Barrera, Phys. Rev. B 35, 1088(1987)
- [25] W. Luis Mochán and Marcelo del Castillo-Mussot, Phys. Rev. B 37, 6763(1987)
- [26] B.M. Agranovich and V.E. Kravtsov, Solid State Commun. 55, 85(1985)
- [27] G. H. Coccoletzi and W. Luis Mochán Phys. Rev. B 39, 8403(1989)
- [28] J.D. Jackson, Classical Electrodynamics, 2nd. ed. (Wiley, New York, 1975)

- [29] Jon Mathews and R. L. Walker. *Mathematical Methods of Physics*, 2nd. ed. (Benjamin / Cummings 1970)
- [30] Herbert Goldstein. *Classical Mechanics*, 2nd. ed. (Addison Wesley, 1980)
- [31] Shu Wang. tesis de doctorado. Facultad de Ciencias UNAM (1989)
- [32] David Pines. *Elementary Excitations in Solids* (W. A. Benjamin, Inc. 1964)
- [33] S. Ushioda, in *Progress in Optics* XIX, 140(1981)
- [34] G. H. Coccoletzi, J. Olvera Hernández and G. Martínez Montes, *Solid State Commun.* 71, 459(1989)
- [35] V. M. Agranovich, V. E. Kratsov, T. A. Leskova, A. G. Mal'shukov, G. Hernández Coccoletzi, and A.A. Maradudin, *Phys. Rev. B* 29, 976(1984)
- [36] E. López Olazagasti, G. H. Coccoletzi and W. Luis Mochán, *Solid State Commun.* 78, 9(1991).
- [37] J. P. McKelvey, *Solid State and Semiconductor Physics*, (Robert E. Krieger Publishing Company, Inc.)
- [38] G. H. Coccoletzi, A. Ramírez Perucho and W. Luis Mochán, por publicarse en *Phys. Rev. B* (1991)
- [39] G. H. Coccoletzi, J. L. Carrillo and O. Leticia Fuchs, a ser publicado
- [40] G. H. Coccoletzi y W. Mochán, no publicado
- [41] P. Halevi and G. Hernández-Coccoletzi, *Phys. Rev. B* 18, 590 (1978)
- [42] G.E. Hite, D. T. F. Marple, M. Aven and B. Segall, *Phys. Rev. Lett.* 156, 858(1967)
- [43] P. Halevi and G. Hernández-Coccoletzi *Phys. Rev. Lett.* 48, 1500(1982)
- [44] F. Patella, E. Evangelisti and M. Capizzi, *Solid State Commun.* 20, 23(1976)
- [45] V. A. Kosobukin and A. V. Sel'kin *Solid State Commun.* 66, 313(1988)

- [46] P. Halevi, g. Henández-Cocoletzi and J. A. Gaspar-Armenta, Thin Solid Films **89**, 271(1982)
- [47] A. A. Maradudin and D. L. Mills, Phys. Rev. B **7**, 2787(1973)
- [48] J.C. Quail, J. G. Rako. and H. J. Simon, Optics Letters, **8**, 377(1983)

PIE DE FIGURAS

Fig. 1.1. Representación esquemática del modelo de la respuesta no-local en el volumen $\epsilon(z - z')$ y la dispersada por la superficie $\epsilon(z + z')$.

Fig. 1.2. Representación del modelo semiclásico de barrera infinita en un gas de electrones.

Fig. 1.1.1. Funciones dieléctricas hipotéticas de dos metales para el caso local. Se muestra la ventana de propagación de los polaritones plasmones, cuyos límites son ω_1 y ω_2 .

Fig. 1.1.2. Comparación de las relaciones de dispersión ópticas y EM para la geometría de Kretschmann en barrido de ángulo. El espesor de la capa de Al emparejada entre el prisma de constante dieléctrica $\epsilon_p = 2$ y el sustrato de Mg, es de 195 Å. Se muestra un mínimo de reflectancia.

Fig. 1.1.3 La misma comparación que en la Fig. anterior pero para barrido de frecuencia. En esta Fig. el espesor de la capa es 390 Å y $\epsilon_p = 1$, i.e., no hay prisma. Se muestran tres mínimos de RTA. La curva EM se obtuvo para $\nu = 0$.

Fig. 1.2.1. Funciones dieléctricas hipotéticas de dos dieléctricos polares. Se muestran las ventanas de propagación de los polaritones fonones.

Fig. 1.2.2. Presentamos la comparación de las relaciones de dispersión de los polaritones fonones de interface para el caso C ventana 1, i.e., interface GaP/CaF₂ ventana de baja frecuencia, para las geometrías Otto y Kretschmann en barrido de ángulo y frecuencia.

Fig. 1.2.3. Las mismas consideraciones que en la Fig. anterior, para la misma interface pero la ventana de alta frecuencia C2.

Fig. 1.2.4. Relación de dispersión para la geometría C2 con un prisma de índice de refracción $n_p = 3.417$. Se ilustra un caso típico de mínimo.

Fig. 1.3.1. Funciones dieléctricas hipotéticas para un dieléctrico y un metal. Se indican las regiones de la propagación de los modos de interface.

Fig. I.3.2. Mínimos de reflectancia para la configuración RTA en el caso de la interface dieléctrico-metal para las geometrías de Otto y Kretschmann.

Fig. I.4.1. Mostramos la relación de dispersión para los modos simétrico S y antisimétrico A de una sola película calculado de la misma forma que en los casos anteriores.

Fig. I.4.2. Se dibujan tres espectros de RTA para el sistema emparedado de la Fig. anterior. Se considera que $d_1 = d_2$ y un ángulo de incidencia de $\theta = 50^\circ$.

Fig. I.4.3. Se muestran cuatro curvas de RTA para el sistema emparedado indicado en la misma Fig.

Fig. II.1.1. Relación de dispersión de los modos de volumen de un semiconductor excitónico en la presencia de dispersión espacial. Consideramos la función dieléctrica de los excitones de Wannier.

Fig. II.1.2. Presentamos un ejemplo de curvas de reflectancia de luz de polarización p para el semiconductor excitónico $ZnSe$. Consideramos tres condiciones adicionales Pekar (curva continua), Agarwal (curva de puntos y rayas) y Fuchs-Kliwewer (curva de rayas) y el caso local (curva de puntos) y un ángulo de incidencia de $\theta = 85^\circ$.

Fig. II.1.3 Espectros de reflectancia para luz de polarización s para tres CAF's Pekar (curva continua), Agarwal (curva de puntos y rayas), Fuchs-Kliwewer (curva de rayas) y el caso local (curva punteada). El ángulo de incidencia es $\theta = 85^\circ$.

Fig. II.2.1. Comparación de los espectros teóricos y experimental (cruces) de reflectancia para una muestra de CdS . La capa muerta tiene espesor de 100\AA y el ángulo de incidencia es normal.

Fig. II.2.2. Espectros R calculados para incidencia normal, las condiciones de Pekar y cinco valores del espesor de la capa muerta de excitones. Las cruces son los puntos experimentales. Se toma incidencia normal.

Fig. II.3.1. Espectros calculados de RTA para una muestra de ZnO comparados con uno experimental. $I'_j = |I''_j|e^{i\phi}$. La fase toma valores $0 \leq \phi \leq 2\pi$ y $|I''_j| = 1$. Se ignora la capa muerta.

Fig. II.3.2. Curvas de RTA como función del ángulo de incidencia de la onda. También mostramos la geometría usada para los calculos. El ancho de la capa muerta es de 100\AA para CdS .

Fig. III.1.1. Superred construida de dos materiales de constante dieléctrica $\epsilon_1(\omega)$ y $\epsilon_2(\omega)$ y espesores d_1 y d_2 respectivamente.

Fig. III.1.2. Parte real e imaginaria de la relación de dispersión de los modos colectivos electromagnéticos de una superred de dos metales de funciones dieléctricas de Drude. ω_1 y ω_2 son las frecuencias de plasma. $d_1 = d_2 = 130\text{Å}$ y $Q = (\epsilon_p)^{1/2} \sin 30^\circ$

Fig. III.1.3. Reflectancia de la luz de polarización p para una superred semiinfinita. Consideramos la superred de la Fig. III.1.1 con $\epsilon_p = 1.5$, $d_1 = d_2 = 130\text{Å}$ y $\theta = 30^\circ$. La capa 1 es Mg y la capa 2 es Al

Fig. III.1.4. Espectros de R_p para la superred semiinfinita cuya primera capa es Al mientras que la segunda Mg . Escogimos $\theta = 30^\circ$, $\epsilon_p = 1$ y $d_1 = d_2$.

Fig. III.2.1. Superred de capas alternadas de un semiconductor excitónico y un aislante. En el semiconductor se toman en cuenta las ondas excitónicas. Los espesores son d_i del aislante, d_L de la capa muerta de excitones y d_s de la capa excitónica. La capa semiconductor tiene espesor $D_s = d_L + d_s$. Las constantes dieléctricas son $\epsilon_s(\vec{q}, \omega)$ de la capa excitónica, ϵ_{psion_0} de la capa muerta y $\epsilon_i(\omega)$ del aislante.

Fig. III.2.2. Relación de dispersión de los modos colectivos electromagnéticos de la superred infinita mostrada en la Fig. III.2.1. A la izquierda se muestra la parte *real* y en la derecha la parte *imaginaria* de p . Escogimos $d_L = 0$, $d_i = d_s = 773\text{Å}$ y $Q = \omega/c \sin 60^\circ$. Se usaron las CAF's de Pekar.

Fig. III.2.3. Espectros de reflectancia calculados de la luz de polarización p para una superred (curva continua) de capas alternadas de un semiconductor excitónico y un aislante y una capa excitónica (curva continua). Las capas excitónicas de la superred tienen el mismo espesor que la película. En la Fig. se indican las resonancias de las ondas longitudinales y transversales dentro de las capas excitónicas. $d_i = d_s = 773\text{Å}$, $\theta = 60^\circ$ y escogimos las CAF's de Pekar.

Fig. III.2.4. Lo mismo que la Fig. anterior pero para espesores de $d_s = d_i = 195\text{Å}$

Fig. III.2.5. Reflectancia de una superred para luz de polarización p . En el caso no local consideramos las CAF's de Pekar (curva de rayas) y de Ting et. al. (curva de puntos y rayas). Se incluye el caso local (curva de puntos). También se indican las resonancias.

Fig. III.2.6. Se muestran los efectos de escoger diferentes espesores de la capa muerta de excitones en la reflectancia de una superred. En esta Fig. se escogió $\theta = 60^\circ$, las CAF's de Pekar y tres espesores de la capa muerta.

Fig. III.2.7. Lo mismo que la Fig. III.2.5 pero con la inclusión de la capa muerta de excitones. $d_L = 97\text{Å}$ y $d_i = D_s$.

Fig. III.3.1. Comparación de las curvas obtenidas con la teoría exacta (curva continua) y la aproximada (curva de puntos) para una película delgada de 50Å. Tomamos las CAF's de Ting e incidencia normal de la luz.

Fig. III.3.2. Lo mismo que la Fig. anterior pero para $\theta = 60^\circ$.

Fig. IV.1.1. La probabilidad $P(\omega)$ de pérdida de energía de los electrones que interactúan con la película metálica en contacto con el sustrato dieléctrico. La energía de los electrones incidentes es 200eV , el ángulo de incidencia es 45° y se consideran tres espesores de película.

Fig. IV.1.2. Igual que en la Fig. IV.1.1 pero sin el sustrato.

Fig. IV.2.1. $P(\omega)$ para una superred de capas alternadas de un aislante y un metal en la presencia de ondas de plasma. Se tomaron tres espesores de las películas 15, 25 y 40Å. Los parámetros corresponden Au y vacío. La condición adicional a la frontera es la continuidad de la componente normal del campo eléctrico.

Fig. IV.2.2. $P(\omega)$ para la superred local. Se muestran curvas para cuatro espesores de las capas. Se considera $d_1 = d_2$

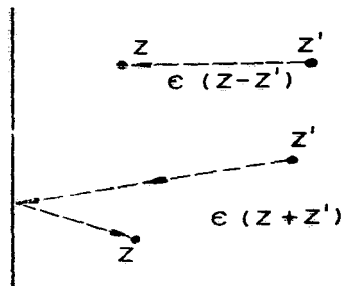


Fig. 1.1

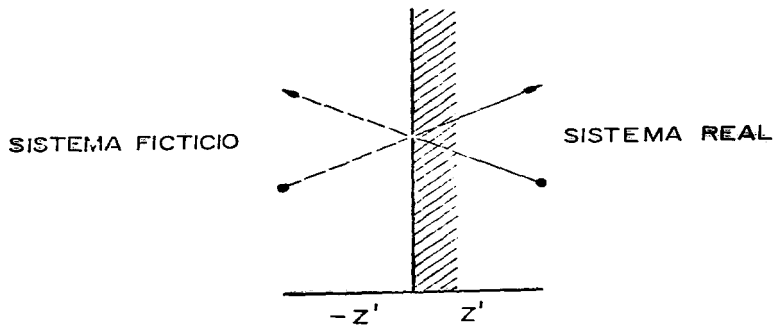


Fig. 1.2.

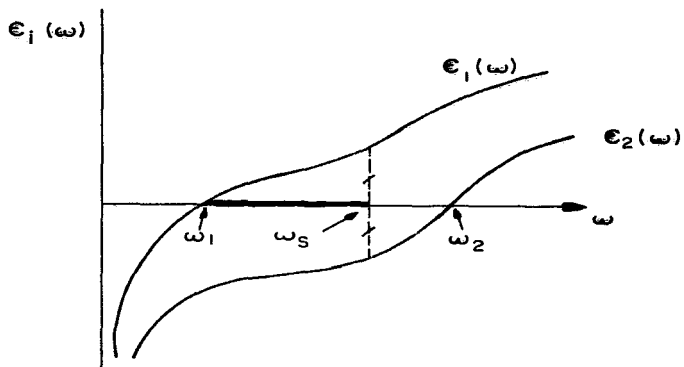


Fig. I.1.1.

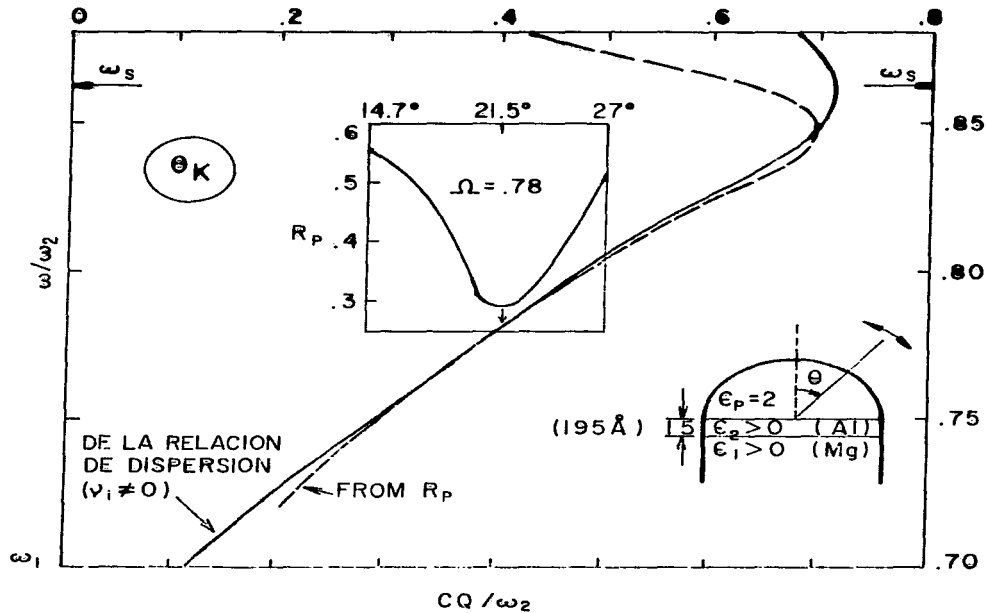


Fig. I.1.2

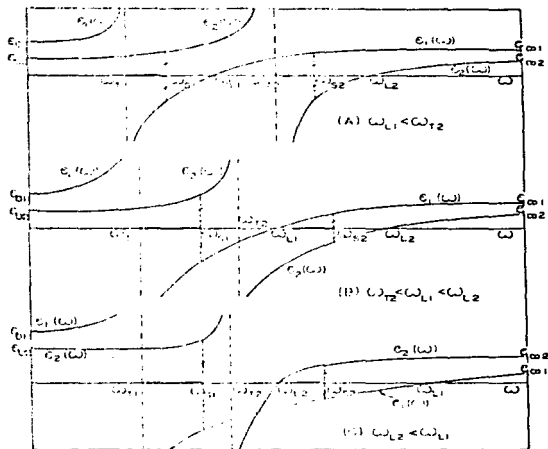


Fig. I.2.1

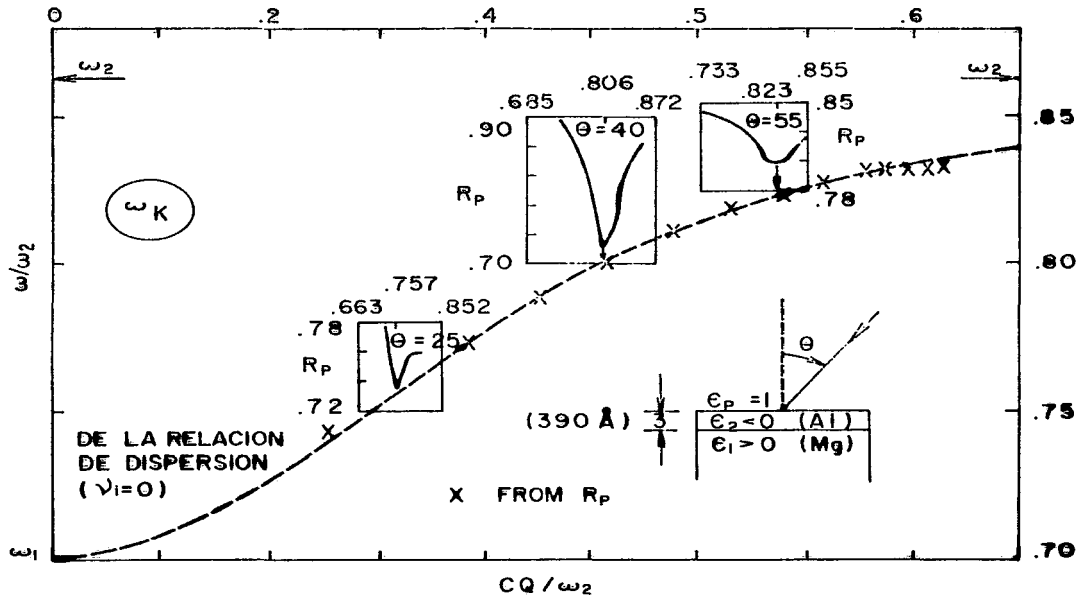


Fig. I.1.3

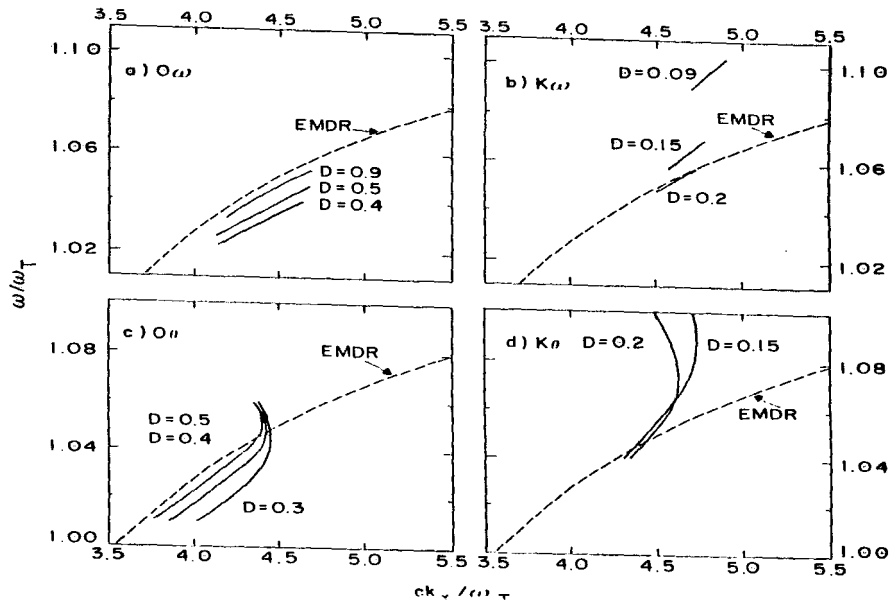


Fig. 1.2.2

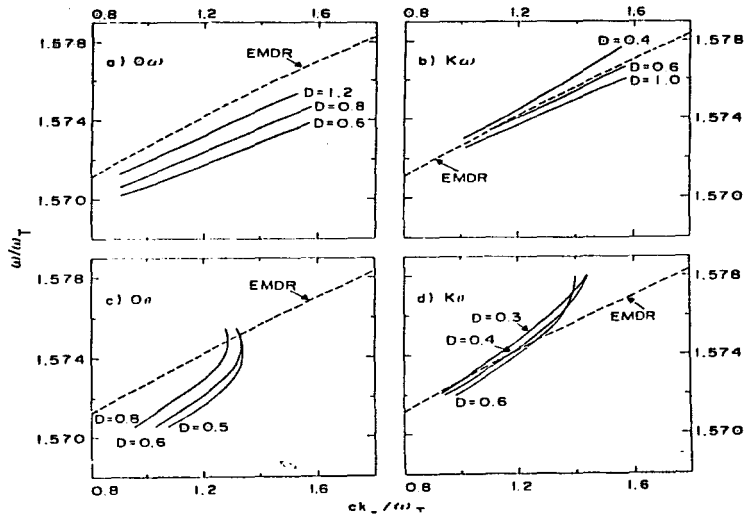


Fig. 1.2.3

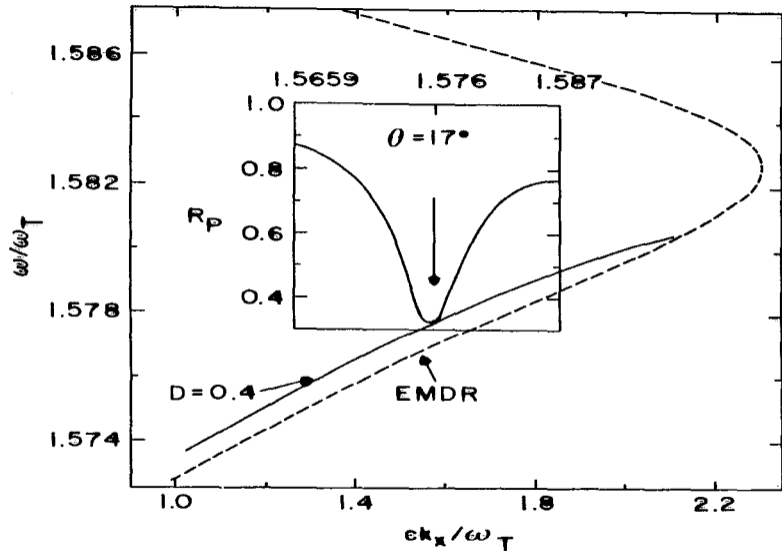


Fig. I.2.4

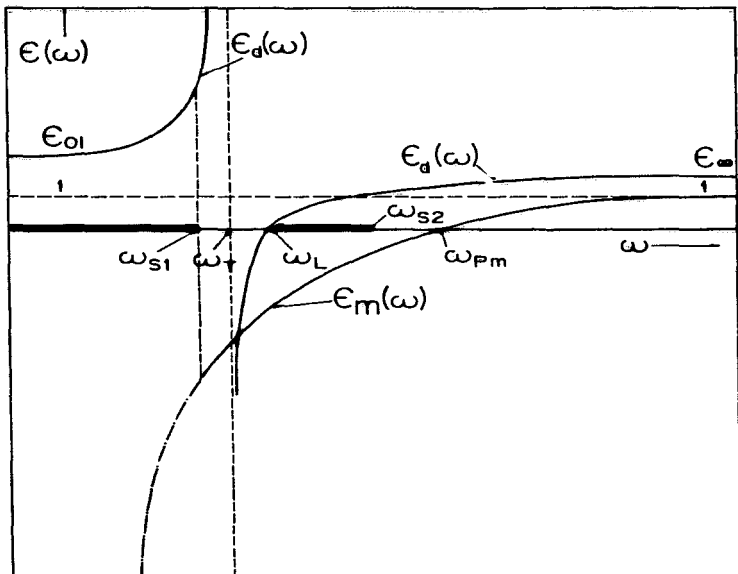


Fig. I.3.1

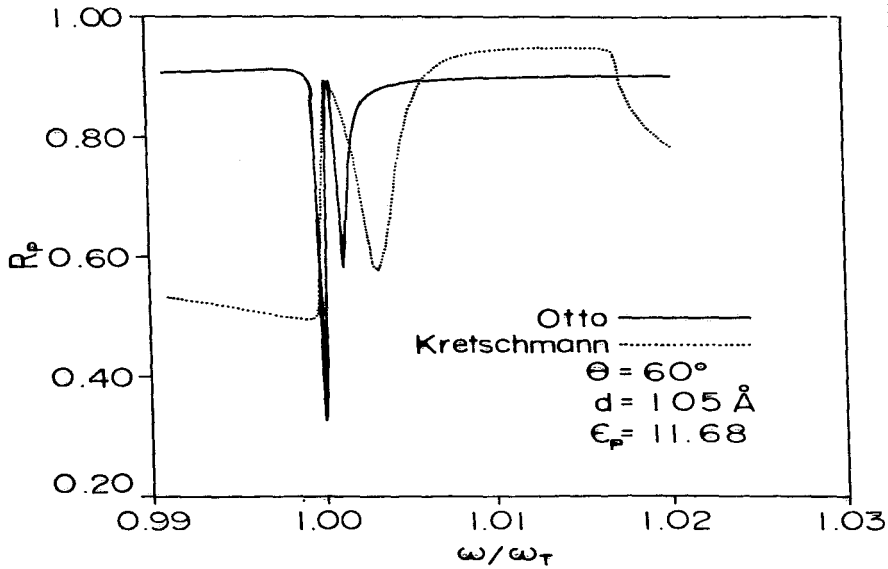


Fig. 1.3.2

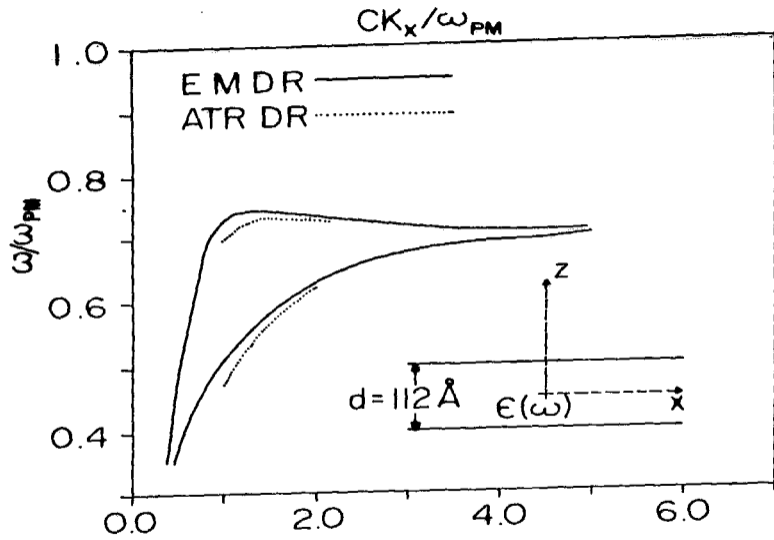


Fig. 1.4.1

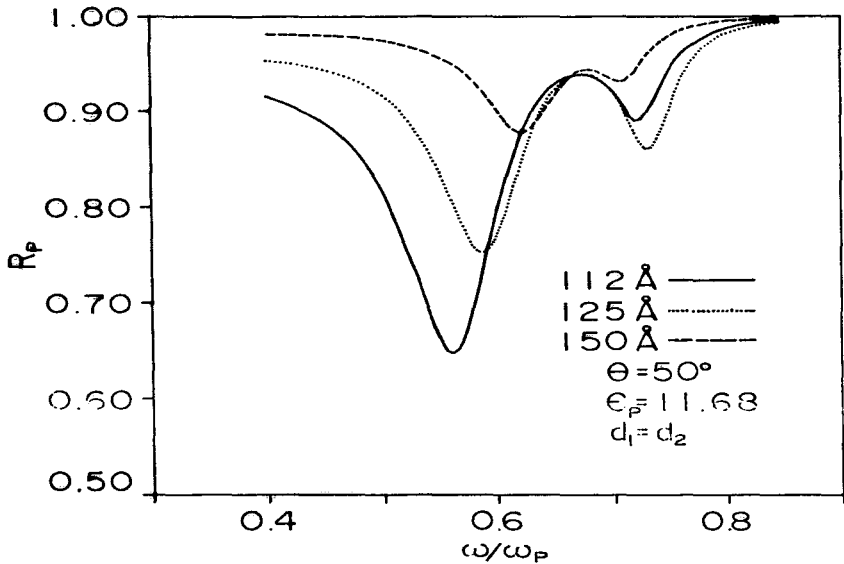


Fig. 1.4.2

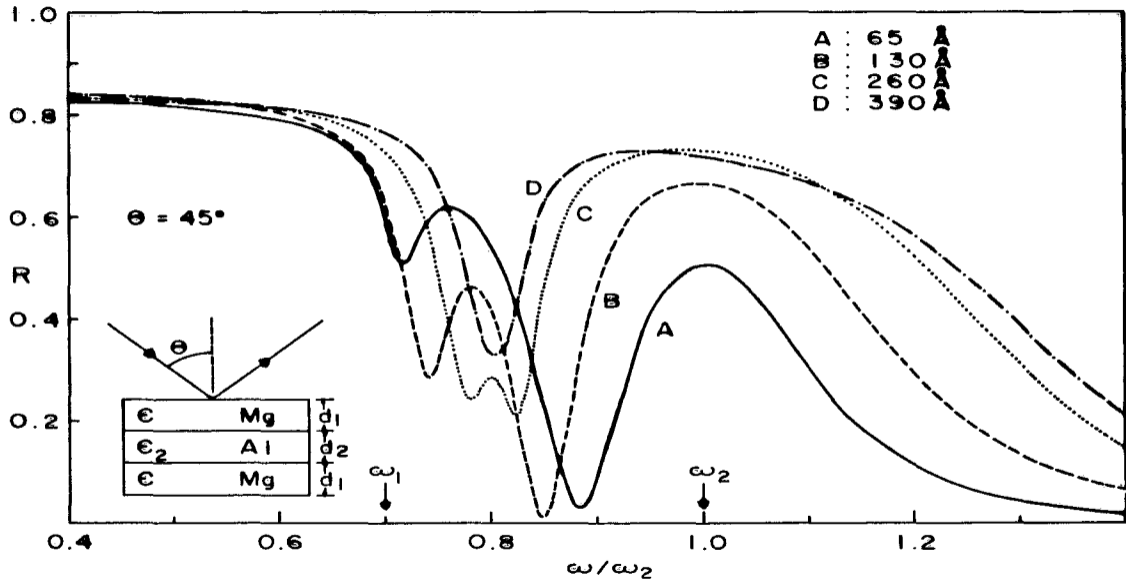


Fig. 1.4.3

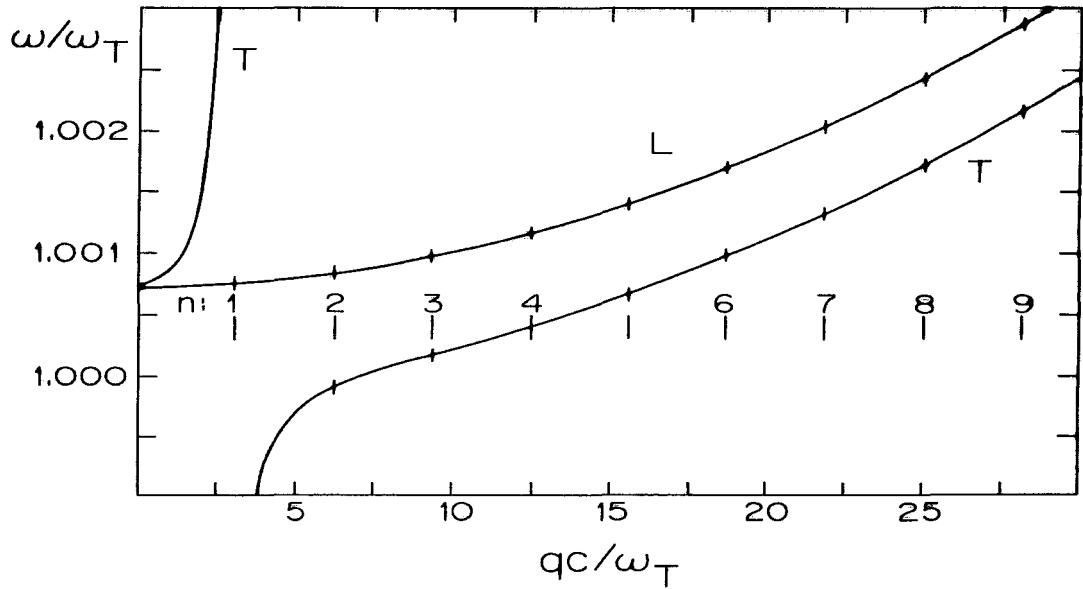


Fig. E.1.1.1.

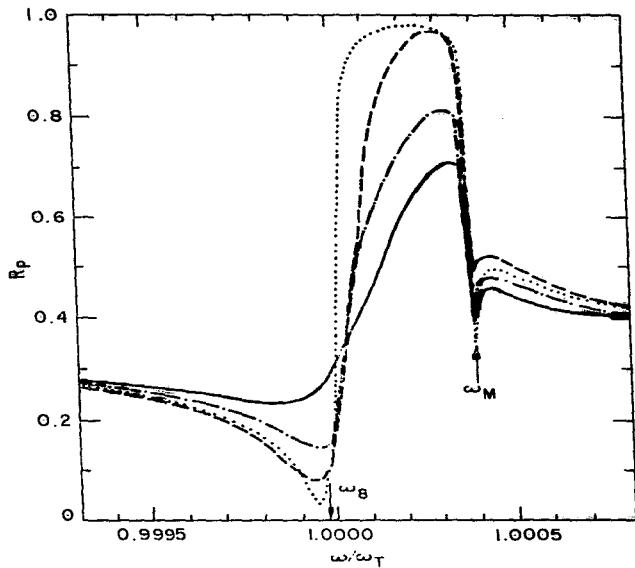


Fig. 11.1.2

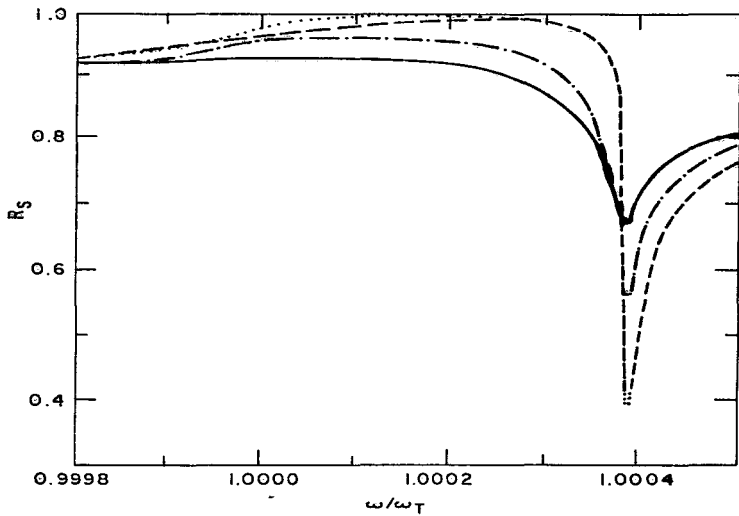


Fig. II.1.3

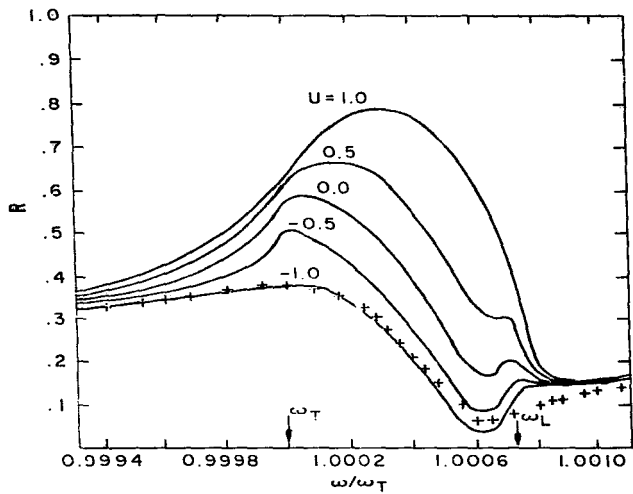


Fig. 11.2.1

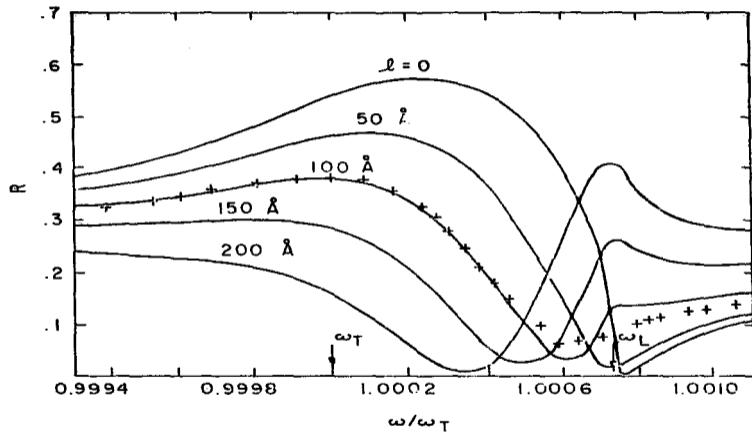


Fig. II.2.2.

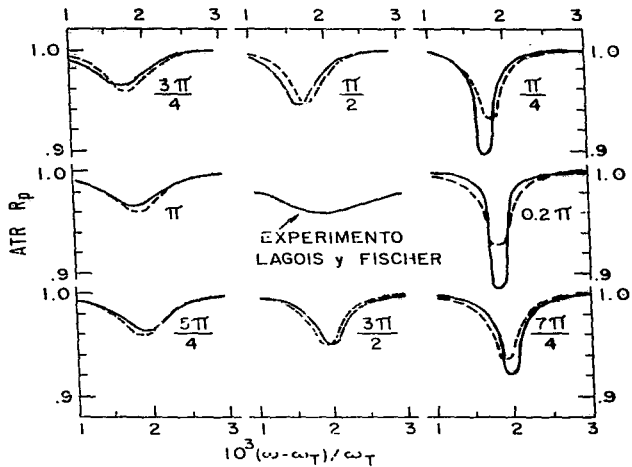


Fig. II.3.1.

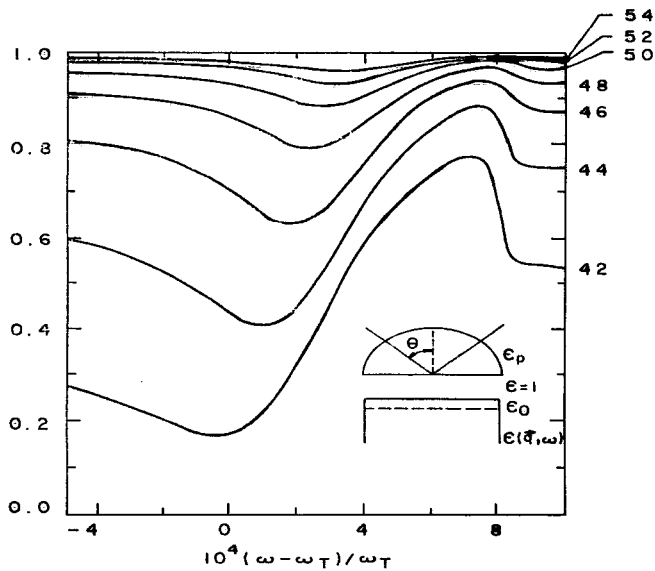


Fig. II.3.2.

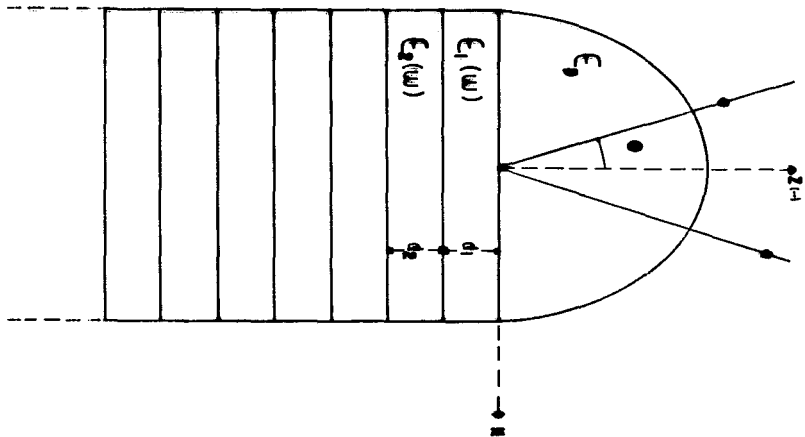


Fig. EEI.1.1.1.

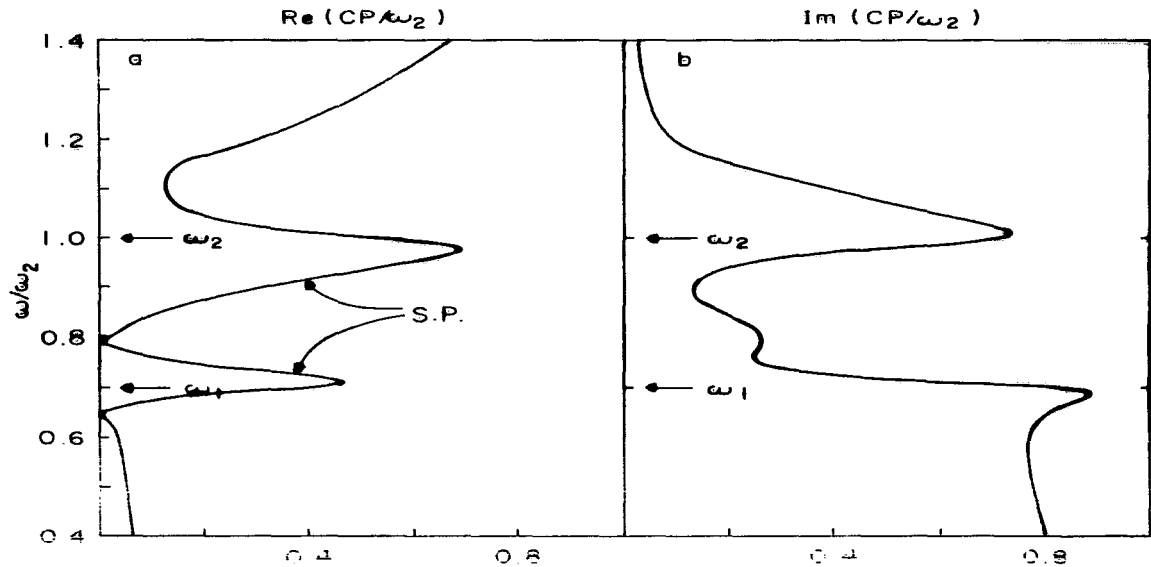


Fig. III.1.2.

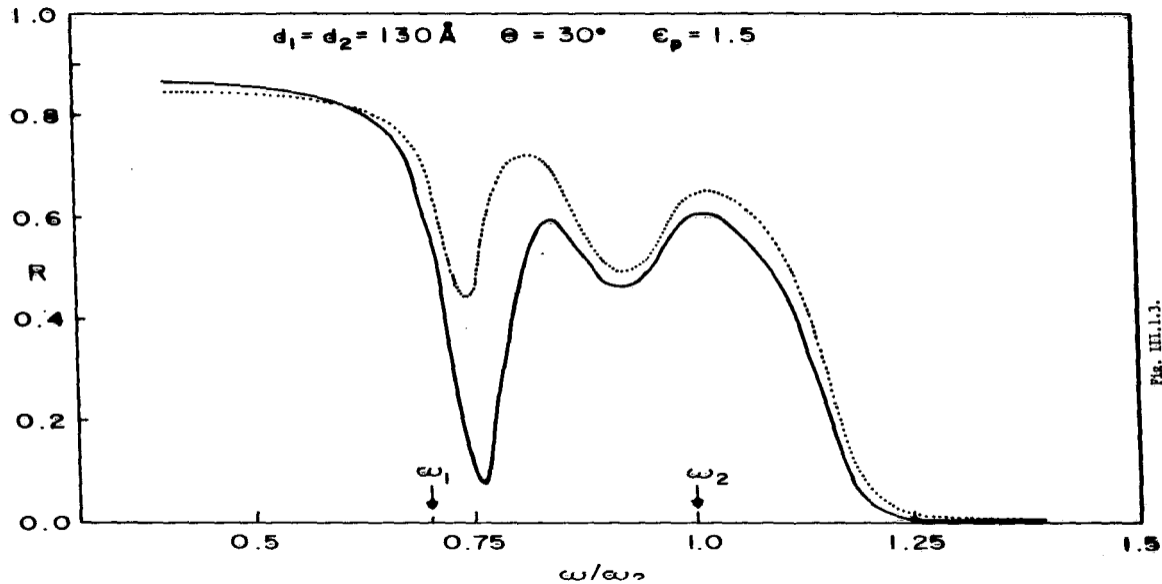


Fig. III.1.3.

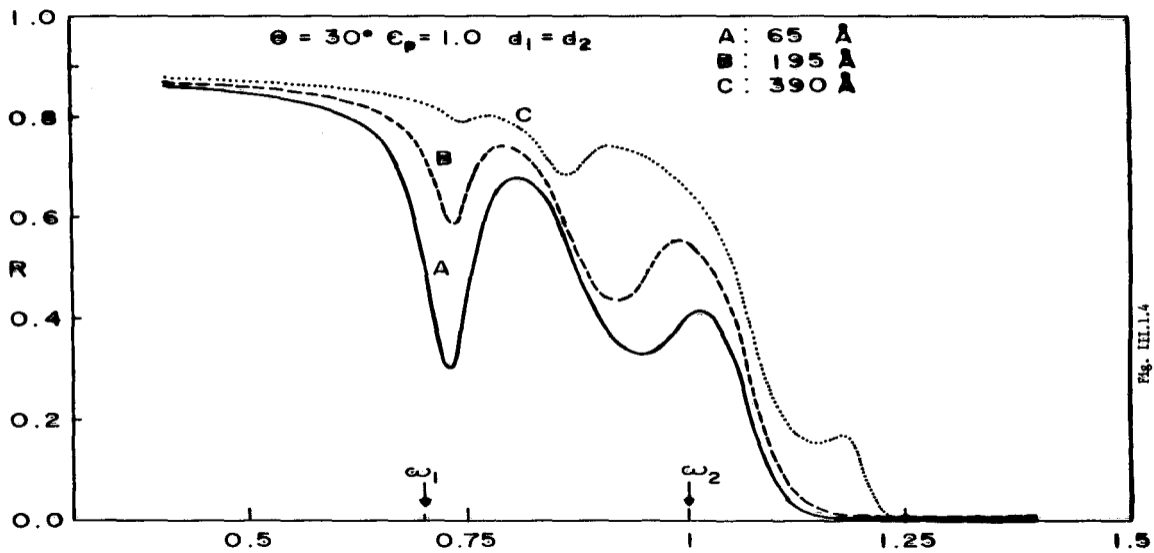


Fig. III.1.4

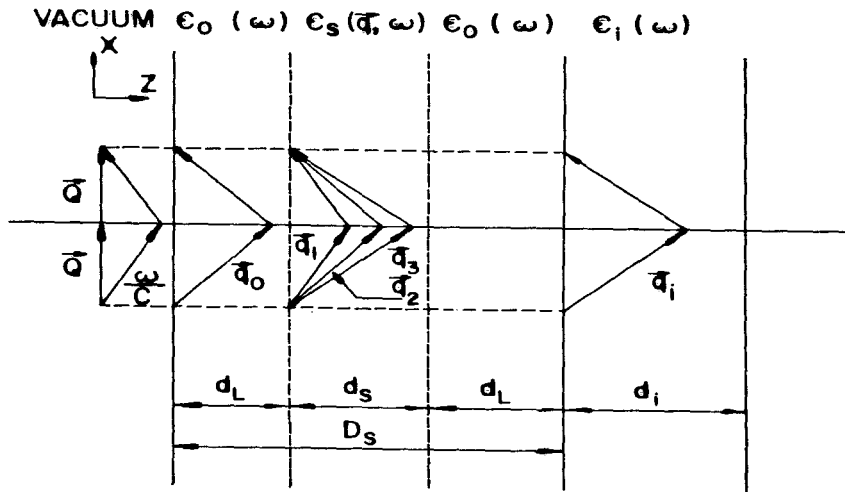


Fig. III.2.1.

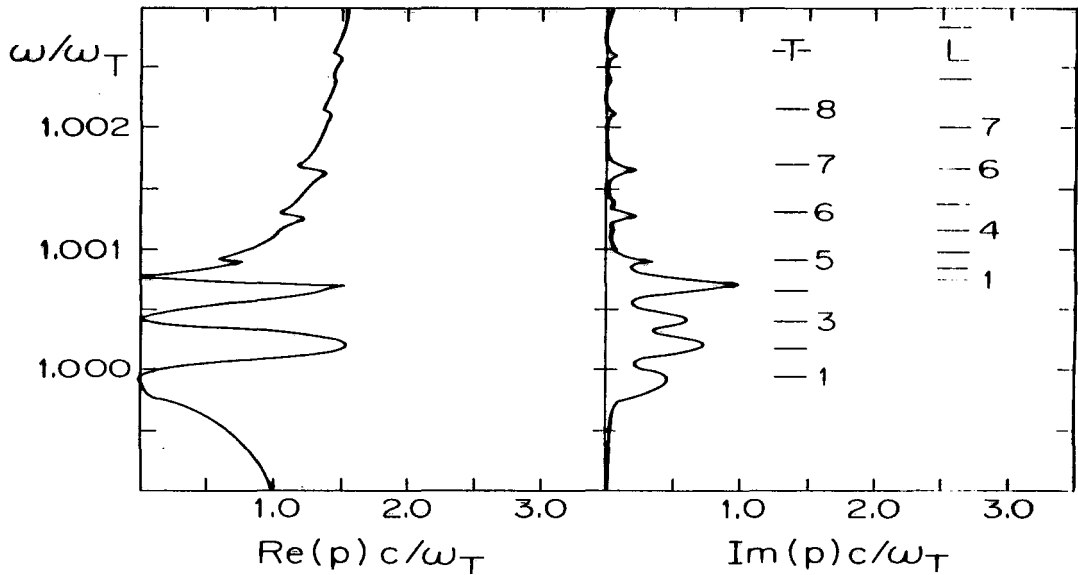


Fig. III.2.2

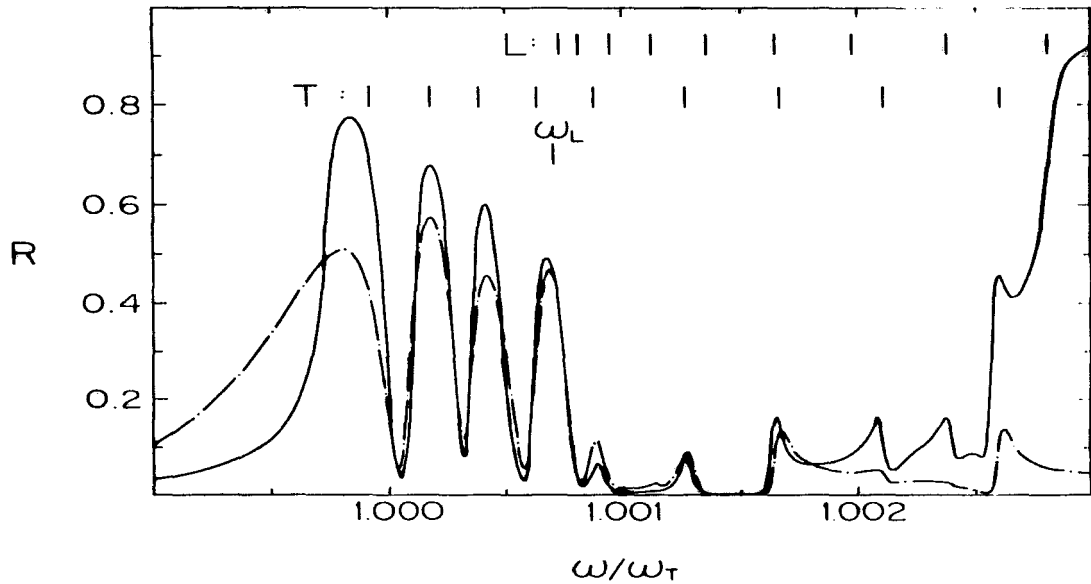


Fig. III.2.3

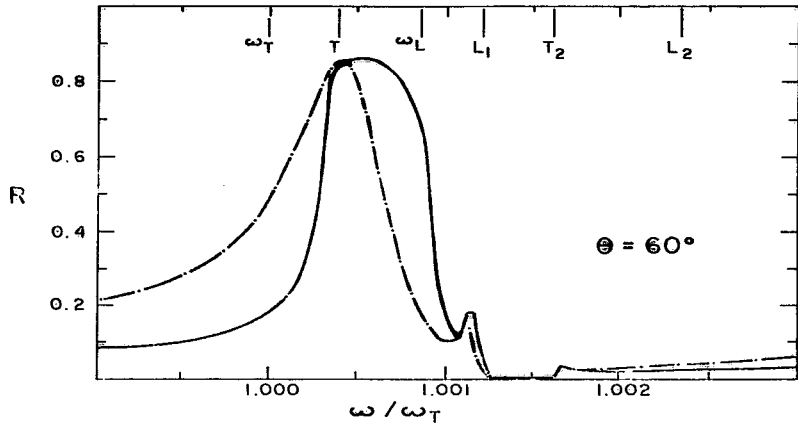


Fig. III.2.4

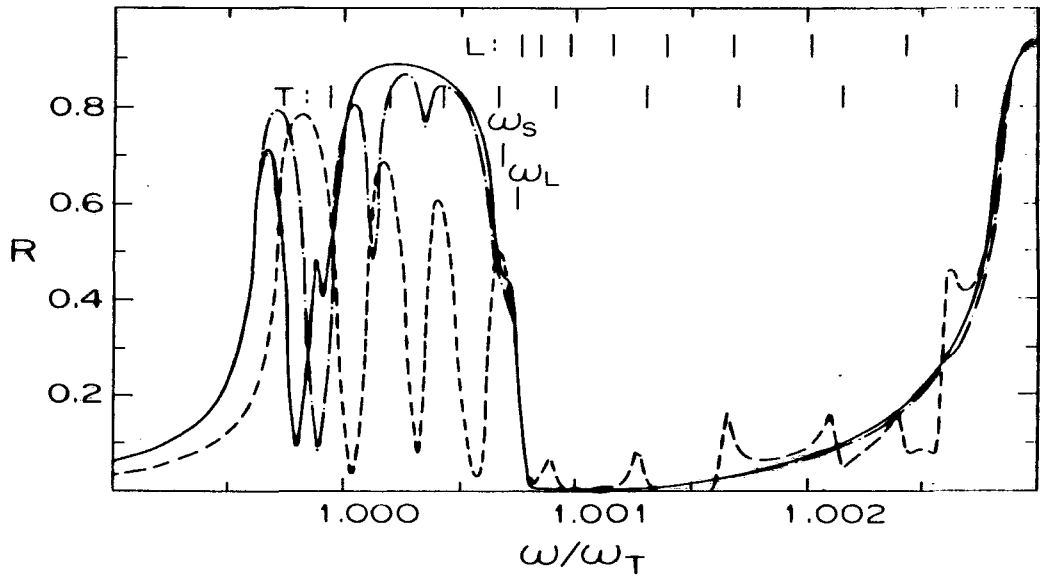


Fig. III.2.5

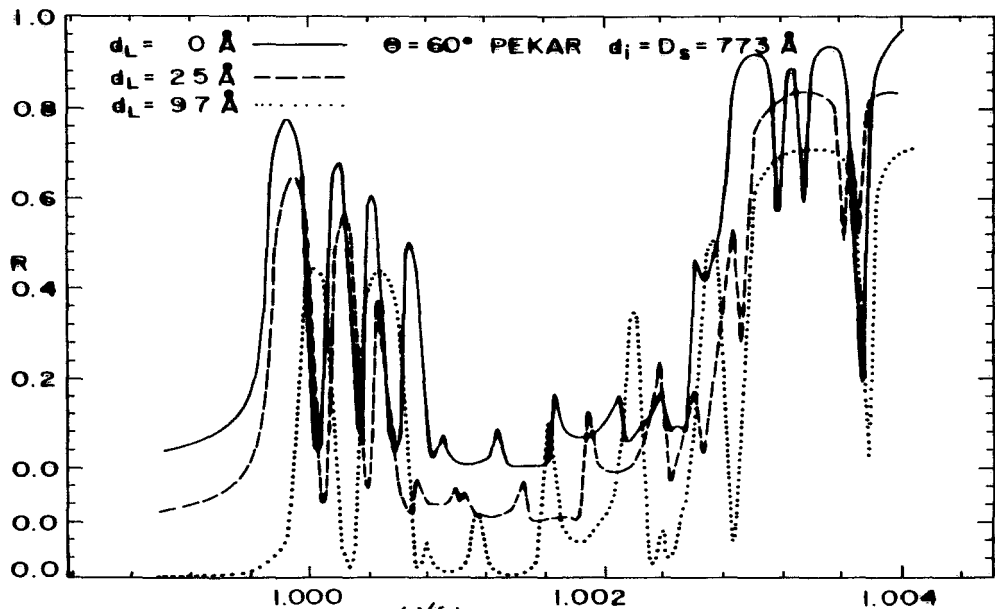


Fig. III.2.6

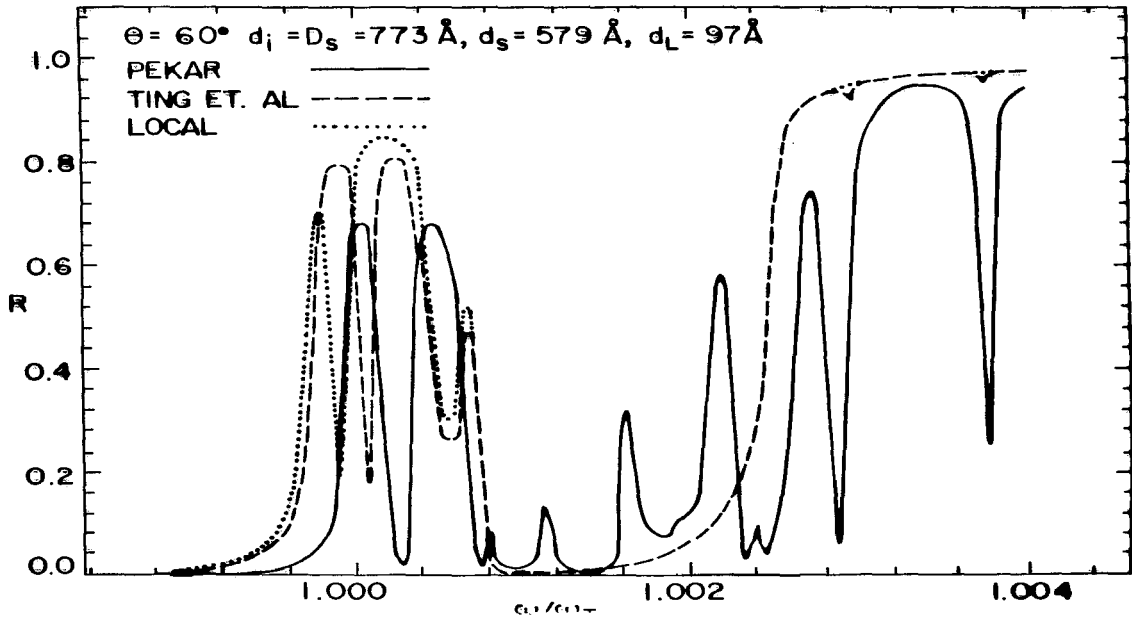


Fig. III.2.7

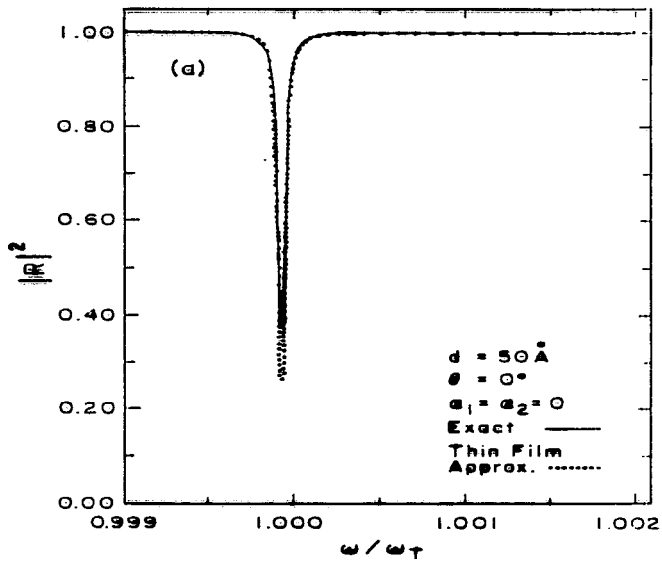


Fig. III.3.1

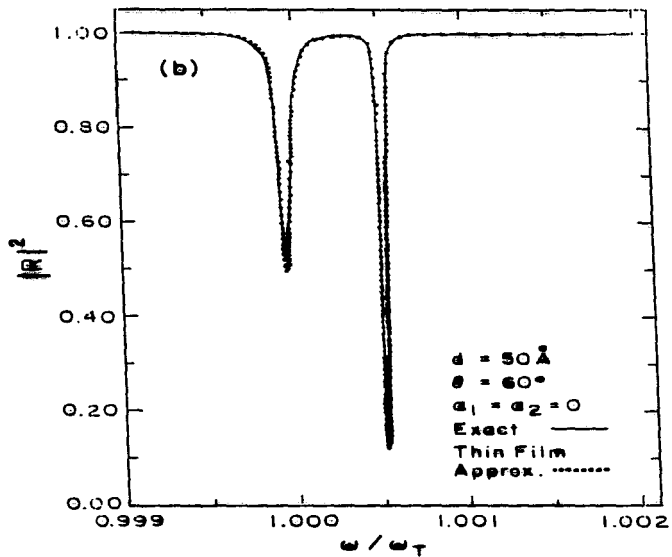


Fig. III.3.2

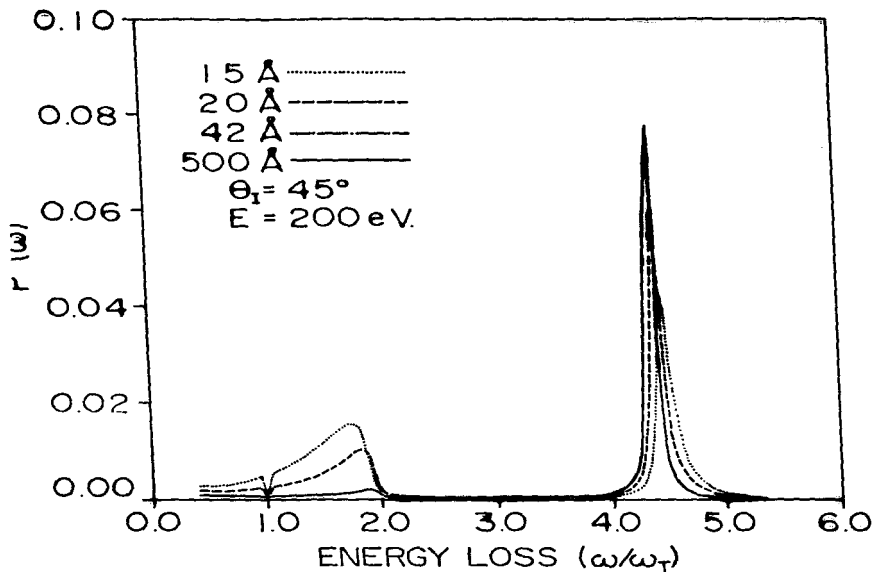


Fig. IV.1.1

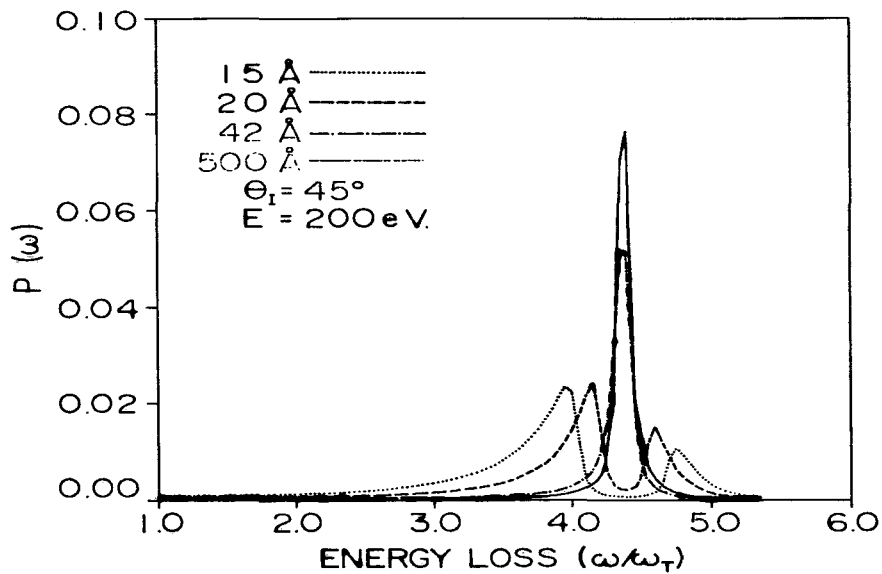


Fig. IV.1.2

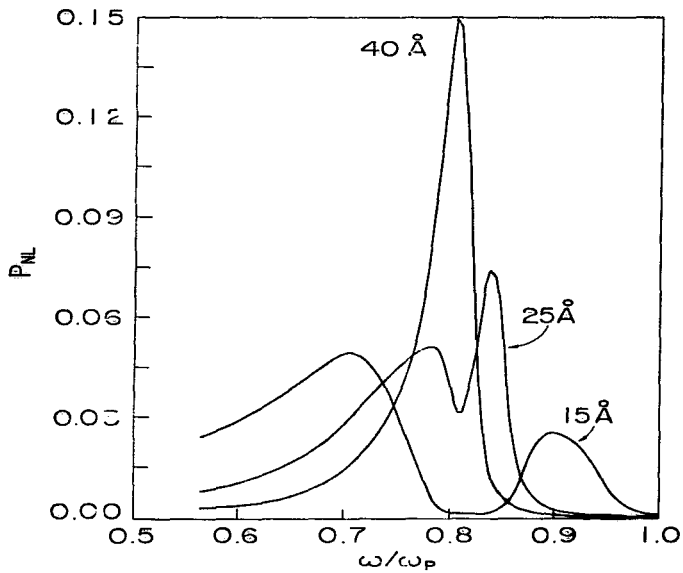


Fig. IV.2.1

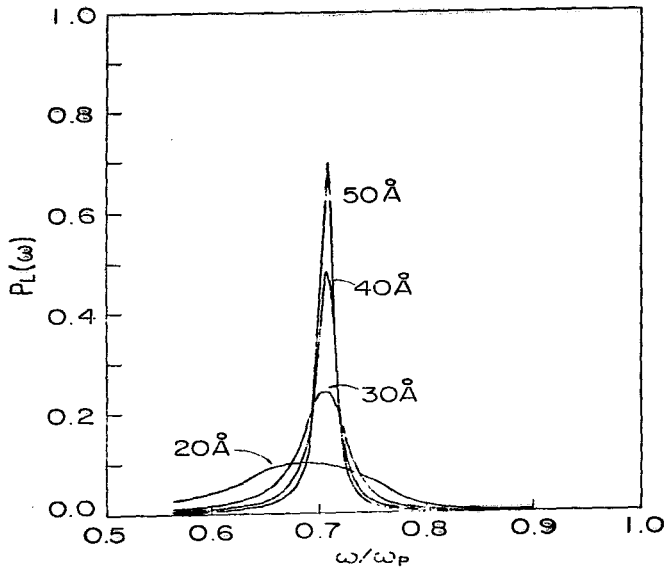


Fig. IV.2.2