



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

“Relaciones de Kramers-Krönig para el
Modelo de Drude-Smith.”

TESIS

que para obtener el título de:

Físico,

presenta:

Pablo Mateo Aranda Morán.

Director de tesis: Dr. Raúl Patricio Esquivel Sirvent.



Marzo 2010



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

“Relaciones de Kramers-Krönig para el
Modelo de Drude-Smith.”

TESIS

que para obtener el título de:

Físico,

presenta:

Pablo Mateo Aranda Morán.

Director de tesis: Dr. Raúl Patricio Esquivel Sirvent.



Marzo 2010

Hoja de Datos del Jurado

1. Datos del alumno

Aranda
Morán
Pablo Mateo
46223425
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
402068710

2. Datos del tutor

Dr
Raúl Patricio
Esquivel
Sirvent

3. Datos del sinodal 1

Dr
José Luis
Jiménez
Ramírez

4. Datos del sinodal 2

M en C
Mirna
Villavicencio
Torres

5. Datos del sinodal 3

Dr
Manuel
Torres
Labansat

6. Datos del sinodal 4

Dr
Julio Javier
Martinell
Benito

7. Datos del trabajo escrito.

Relaciones de Kramers-Kronig para el modelo de Drude-Smith
68 p
2010

ÍNDICE.

Índice.....	I
Resumen.....	II

CAPÍTULOS.

1.Ondas electromagnéticas en materia y propiedades ópticas de medios disipativos.....	1
2.Relaciones de Kramers – Kronig.....	7
3.Modelos para $\epsilon(\omega)$.....	15
3.1. Modelo para un plasma.....	15
3.2. Modelo de Lorentz.....	18
3.3 Modelo de Drude.....	20
3.3.1. Conductividad eléctrica de Drude.....	24
4.Relaciones de Kramers – Kronig para el modelo de Drude.....	27
4.1. Cálculo de la parte real de la función dieléctrica a partir de la parte imaginaria.....	27
4.2. Cálculo de la parte imaginaria de la función dieléctrica a partir de la parte real.....	30
5.Modelo de Drude – Smith.....	33
5.1. Respuesta Impulso.....	35
5.2. Estadística de Poisson.....	36
5.3. Experimentos que comprobaron el modelo de Drude-Smith, considerando sólo hasta el término $C1$	38
6.Relaciones de Kramers – Kronig para el modelo de Drude – Smith.....	41
6.1. Cálculo de la parte real de la función dieléctrica a partir de la parte imaginaria.....	42
6.2. Cálculo de la parte imaginaria de la función dieléctrica a partir de la parte real.....	46
6.3 Relaciones de Kramers-Krönig para $n=2$	52
6.3.1. Cálculo de la parte real de la función dieléctrica a partir de la parte imaginaria.....	52
6.3.2. Cálculo de la parte imaginaria de la función dieléctrica a partir de la parte real.....	54
7.Explorando una posible demostración de las relaciones de Kramers – Krönig para la serie completa del modelo de Drude – Smith, el caso n.....	53
Conclusiones.....	57
Apéndice A.....	59
Bibliografía.....	61

Resumen.

En este trabajo se presenta el modelo de Drude-Smith para la función dieléctrica de películas metálicas. A diferencia del modelo de Drude usual, el de Drude-Smith considera un nuevo parámetro, C_n , el cual es una medida de la persistencia en la conservación de la velocidad de los electrones, a partir de que inicia la interacción con la radiación y comienzan a chocar entre sí dentro del metal. El índice n representa el número de choques y C_n la fracción de electrones que mantendrán su velocidad original después de su n -ésimo choque. Se acostumbra truncar la serie y considerar un solo choque ($n=1$), ya que basta este primer término para explicar los experimentos actuales y evadir la inflexibilidad de la fórmula de Drude usual.

En el primer capítulo se presentan las ecuaciones de Maxwell para medios materiales, así como las relaciones utilizadas en electrodinámica para describir los procesos de polarización, conducción y desplazamiento eléctrico, relaciones constitutivas de ésta área. Con la finalidad de introducirnos en los medios conductores, se estudiarán los medios disipativos. Se obtendrán las expresiones generales para las propiedades ópticas de los medios disipativos, es decir las relaciones entre las funciones complejas k , ω y n , el vector de onda, la frecuencia y el índice de refracción complejo, respectivamente.

En el capítulo dos se explicará lo que se conoce como funciones de respuesta (en el caso de óptica lineal), funciones complejas que modelan la forma en que el medio reacciona ante el estímulo de radiación incidente. Dejando a muchos fenómenos de la naturaleza afuera del modelo, se considerarán funciones de respuesta lineales, causales y estacionarias. Representando éstas condiciones matemáticamente y considerando los resultados de Cauchy para funciones holomorfas en el plano complejo, se deducirán las relaciones de Kramers-Krönig, que sirven para garantizar que la función de respuesta modelada describa fenómenos causales y para relacionar matemáticamente sus partes real e imaginaria. Esto las hace muy importantes dentro de la óptica de sólidos.

Posteriormente se presentarán tres modelos para la función dieléctrica: el modelo para un plasma, el de Lorentz y el de Drude. Se aplicarán las relaciones de Kramers-Krönig al modelo de Drude, de forma ilustrativa para lo que se realizará más adelante en el trabajo, aplicarlas al modelo de Drude-Smith.

Enseguida se presentará el modelo de Drude-Smith (2005), obteniendo su respectiva función dieléctrica y la conductividad eléctrica. A partir de este punto se desarrollará el problema principal de este trabajo, que consistió en probar las relaciones de Kramers-Krönig para el modelo de Drude-Smith.

CAPÍTULO 1

ONDAS ELECTROMAGNÉTICAS EN MATERIA Y PROPIEDADES ÓPTICAS DE MEDIOS DISIPATIVOS.

Cuando las ondas electromagnéticas se propagan entre partículas cargadas, como ocurre dentro de un metal ó dentro de un cristal, suceden diferentes escenarios, dependiendo de la densidad de carga del medio, de si es conductor ó aislante (i.e. de su conformación ó naturaleza) ; y de la frecuencia de la radiación que incide. La forma del cuerpo material por donde se propaga la radiación, también puede determinar otro escenario, como se observa en películas delgadas de oro, en las que partir de cierto ancho en la película, la conductividad se comporta de manera diferente a como lo hace en el oro en bulto.

En general, el medio reaccionará con corrientes eléctricas y polarización de sus partículas constitutivas, produciéndose un campo electromagnético que interferirá con la onda de campo incidente. La onda incidente sufrirá dispersión ya que su velocidad de propagación en el medio variará con respecto a la frecuencia, y sufrirá disipación ya que mientras viaje será atenuada.

Como base de la electrodinámica, y como punto de partida para investigar la relación entre la radiación electromagnética y la materia, tenemos a las ecuaciones de Maxwell para materia (en medios continuos):

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_{libre}, \quad (1.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0,$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t},$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_{libre} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}.$$

Aparte de las ecuaciones de Maxwell para medios materiales y las relaciones de continuidad, es necesario un complemento que describa el comportamiento de cierto material interactuando con un campo electromagnético, éstas ecuaciones son conocidas como relaciones

constitutivas, y en general son series, pero restringiendo este trabajo a los materiales que responden de manera lineal, utilizaremos sólo el primer término. También supondremos isotropía en el medio, es decir, las funciones de respuesta no cambian con la dirección:

$$\mathbf{j}(\omega) = \epsilon_0 \hat{\sigma}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega), \quad (1.2)$$

$$\mathbf{D}(\omega) = \epsilon_0 \hat{\epsilon}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega),$$

$$\mathbf{P}(\omega) = \epsilon_0 \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega),$$

$$\mathbf{B}(\omega) = \epsilon_0 \hat{\mu}(\omega) \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega).$$

Podemos analizar ésta relaciones, a través de un simil, como ligando tres elementos: una causa que sería el campo electromagnético incidente, una manera de reaccionar ó reacción que sería la conductividad, y un efecto, la corriente eléctrica, por ejemplo. Si los campos electromagnéticos incidentes son muy intensos, como puede ocurrir con un laser enfocado, la parte derecha de las ecuaciones constitutivas (1.2), tendría que ser completada con términos de los campos en potencias mayores a uno. El considerar sólo el primer término de la serie nos coloca dentro de la óptica lineal.

$\sigma(\omega)$, $\epsilon(\omega)$, $\mu(\omega)$ y $\chi(\omega)$, son las llamadas funciones de respuesta, funciones complejas que describen la manera en que el medio reacciona, se construyen ó modelan a partir de la naturaleza del medio y de la forma en que sus partículas constitutivas se encuentran ligadas y ordenadas. Las funciones de respuesta se relacionan entre sí por medio de las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{i \hat{\sigma}(\omega)}{\omega \epsilon_0}, \quad (1.3)$$

$$\hat{\sigma}(\omega) \equiv \sigma_1 - i\sigma_2.$$

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{\hat{\chi}_P(\omega)}{\epsilon_0}, \quad (1.4)$$

$$= 1 + \left(\frac{\chi_{P1}}{\epsilon_0} - i \frac{\chi_{P2}}{\epsilon_0} \right),$$

$$\equiv \frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} - i \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0}.$$

Al estudiar a las ondas electromagnéticas en la materia, es clave es el modelo que se usa para describir al medio y a su respuesta, ya que determinará la forma en que ocurra la propagación de la radiación, la forma y magnitud de las corrientes internas y la polarización. En ésta tesis se trabajará con modelos para las funciones de respuesta desarrollados alrededor de 1900, cuando no se tenía aún, la noción clara de como eran los átomos, y de como se ligaban dentro de un metal ó dentro de un dieléctrico.

Para esa época se contaba con el modelo de Thomson, en el que se compara un átomo con un panque con pasas, la masa del panque es la carga eléctrica positiva distribuida uniformemente y las pasas son los electrones. Cuando la radiación entra a este átomo de Thomson, desplaza a las cargas de sus posiciones de equilibrio, generándose momentos dipolares que oscilan en magnitud y corrientes internas. Los electrones, por estar inmersos dentro de una distribución de carga positiva, después del primer desplazamiento provocado por el campo incidente se mantienen oscilando disipativamente.

Fue por esto que en éstas teorías clásicas se representó a los electrones del medio material como osciladores armónicos amortiguados y forzados (Lorentz para el caso de dieléctricos), como osciladores libres que presentan disipación (Drude para conductores), ó como osciladores libres (modelo para un plasma).

Éstas teorías clásicas fueron desarrolladas principalmente por Lorentz y Drude y siguen utilizándose hasta nuestros días, ya que comparadas con un análisis cuántico, son mucho más sencillas de operar y arrojan resultados precisos.

Al considerar ondas electromagnéticas viajando en medios materiales en los que ocurre disipación y dispersión, se deben tomar en cuenta nuevas contribuciones a las ecuaciones de Maxwell: por parte la densidad de carga libre y ligada, así como por parte de las densidades de corriente libre, ligada y de polarización. Esto se sintetiza en las ecuaciones de Maxwell para la materia y genera algunas modificaciones con respecto a cuando no se considera la disipación, como el cambio en el vector de onda. Para advertir estos cambios obtengamos la ecuación de Helmholtz homogénea:

$$\nabla^2 \hat{E} + \hat{k}^2 \hat{E} = 0, \quad (1.5)$$

$$\nabla^2 \hat{H} + \hat{k}^2 \hat{H} = 0.$$

En donde el vector de onda al cuadrado \hat{k}^2 satisface (para medios disipativos):

$$\begin{aligned} \hat{k}^2(\omega) &= \omega^2 \hat{\mu} \hat{\epsilon} - i\omega \hat{\mu} \hat{\sigma}, \\ &= [\omega^2(\epsilon_1 \mu_1 - \epsilon_2 \mu_2) - \omega(\sigma_1 \mu_2 + \sigma_2 \mu_1)] \\ &\quad - i[\omega^2(\epsilon_1 \mu_2 + \epsilon_2 \mu_1) + \omega(\sigma_1 \mu_1 - \sigma_2 \mu_2)]. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Resolviendo esta ecuación para k obtenemos:

$$\hat{k}(\omega) = \pm(k_1 - ik_2), \quad (1.7)$$

donde k_1 y k_2 están dadas por:

$$k_1 = \omega \left[\frac{\epsilon_1 \mu_1}{2} (\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} + \alpha) \right]^{1/2}, \quad (1.8)$$

$$k_2 = \omega \left[\frac{\epsilon_1 \mu_1}{2} (\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} - \alpha) \right]^{1/2}, \quad (1.9)$$

en donde:

$$\alpha = \left(1 - \frac{\epsilon_2 \mu_2}{\epsilon_1 \mu_1} \right) - \left(\frac{\sigma_1 \mu_2}{\omega \epsilon_1 \mu_1} + \frac{\sigma_2}{\epsilon_1 \omega} \right), \quad (1.10)$$

$$\beta = \left(\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} - \frac{\mu_2}{\mu_1} \right) + \left(\frac{\sigma_1}{\omega \epsilon_1} - \frac{\sigma_2 \mu_2}{\epsilon_1 \mu_1 \omega} \right). \quad (1.11)$$

La propagación de las ondas electromagnéticas está descrita por la parte real y la imaginaria de las funciones ópticas complejas \hat{n} y \hat{k} , el índice de refracción y el vector de onda, respectivamente. El índice de refracción complejo se define como el cociente entre la velocidad de la luz en el vacío, c_0 , y la velocidad de fase compleja en el medio, esto es:

$$\hat{n}(\omega) = \frac{c_0}{\omega} \hat{k}(\omega), \quad (1.12)$$

$$\equiv n_1 - in_2.$$

Como es bien sabido, la velocidad de la luz en el vacío está dada por, $c_0 = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$, por lo que, obtenemos expresiones para los índices de refracción y de absorción, pueden expresarse como:

$$n_1 = k_1/\omega\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}, \quad (1.13)$$

$$n_2 = k_2/\omega\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}, \quad (1.14)$$

en donde k_1 y k_2 están dados por las ecuaciones (1.8) y (1.9); finalmente observamos que:

$$\frac{\hat{k}^2}{\epsilon_0 \mu_0 \omega^2} = (n_1^2 - n_2^2) - i(2n_1 n_2). \quad (1.15)$$

Ésta ecuación representa una constante óptica para un medio disipativo, en donde los efectos de corrientes de conducción y polarización aparecen por separado y de una manera general. Con esto tenemos las mínimas bases para abordar el viaje de la radiación a través de la materia.

CAPÍTULO 2

RELACIONES DE KRAMERS-KRÖNIG.

Consideremos un sistema general, con cualquier número de grados de libertad, que inicialmente se encuentra en un estado estacionario α_0 , en el que todas las cantidades físicas son independientes del tiempo. Imaginemos ahora que este sistema es sometido a una perturbación homogénea dependiente del tiempo $F(t)$, bajo las siguientes condiciones:

$$\text{Estado } (t = -\infty) = \alpha_0, \quad (2.1)$$

$$F(t = -\infty) = 0.$$

Al querer estudiar alguna observable A , en dicho sistema general perturbado, debemos de determinar la manera de responder del sistema ante la perturbación, es decir, la relación entre $A(t)$ y $F(t')$. Esta observable A , que podría ser la polarización, por ejemplo, siempre estará afectada por la perturbación, por lo que es conveniente estudiar el desfase con respecto a su valor en equilibrio $A(\alpha_0)$, y podemos considerar, perdiendo generalidad, que $A(\alpha_0) = 0$. La respuesta del sistema debe obedecer los principios más simples en física, y es por esto que posee propiedades comunes con numerosas situaciones encontradas en la naturaleza. Éstas propiedades simples son:

- **Linealidad:** La relación entre la observable $A(t)$ y $F(t')$ es considerada lineal, es decir, las interacciones a ordenes mayores son muy débiles ó despreciables, de manera que si la observable A fuera una serie infinita de potencias de F , sólo trabajaríamos con el primer término, esto es:

$$A(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' K_0(t, t') F(t'), \quad (2.2)$$

donde $K_0(t, t')$ representa la respuesta del sistema.

- **Causalidad:** La respuesta del sistema a un instante dado t , sólo dependerá de la perturbación aplicada en tiempos anteriores t' :

$$K_0(t, t') = 0 \text{ para } t < t', \quad (2.3)$$

esto implica que:

$$A(t) = \int_{-\infty}^t dt' K_0(t, t') F(t'). \quad (2.4)$$

- **Estacionariedad:** Siendo α_0 estacionario, entonces K_0 es invariante ante traslaciones del tiempo, i.e. :

$$K_0(t, t') = K_0(t - t'). \quad (2.5)$$

La dependencia de K_0 en la diferencia $t - t'$ garantiza la invarianza de K_0 cuando t y t' fueran simultáneamente desplazados un intervalo de tiempo Δt . Este desplazamiento Δt en la perturbación $F(t)$ provocará el mismo desplazamiento en la observable $A(t)$. En particular la respuesta del sistema ante una perturbación $F_2(t) = F_1(t - \Delta t)$ estará dada por:

$$A_2(t) = \int_{-\infty}^t dt' K_0(t, t') F_2(t') = \int_{-\infty}^t dt' K_0(t, t') F_1(t' - \Delta t). \quad (2.6)$$

Si $K_0(t, t') = K_0(t - t')$, un simple cambio de variable en la integral anterior pone de manifiesto que $A_2(t) = A_1(t - \Delta t)$.

En virtud de éstas propiedades expuestas, la respuesta del sistema se puede reescribir como:

$$A(t) = \int_{-\infty}^t dt' K_0(t - t') F(t'), \quad (2.7)$$

ó:

$$A(t) = \int_0^{+\infty} d\tau K_0(\tau) F(t - \tau). \quad (2.8)$$

$K_0(\tau)$ juega el rol de la función de respuesta con memoria ya que controla la contribución de la perturbación en el instante $t - \tau$, con el valor de la cantidad A (observable), para un instante posterior t . Con el fin de precisar el significado de K_0 , consideremos el caso cuando la perturbación es un pulso, i. e. $F(t) = F_0 \delta(t - t_0)$, que es una distribución de Dirac con centro en t_0 . La respuesta a este tipo de perturbación es:

$$A_{pulso}(t) = F_0 K_0(t - t_0), \text{ para } t > t_0. \quad (2.9)$$

La evolución de la observable será directamente proporcional a la función $K_0(\tau)$. Esto confirma que K_0 , la función de respuesta, es una característica de la observable a considerar.

Las funciones de respuesta, como la susceptibilidad $\chi(\omega)$ ecuación (1.2), deben de cumplir con la relaciones de Kramers-Krönig para cumplir con dichos principios físicos básicos. La deducción de las relaciones de Kramers-Krönig se desarrolla a continuación.

Supongamos que la susceptibilidad $\chi(\omega)$ es una función holomorfa en el semi-plano complejo superior \mathbb{C}^+ y en el eje real \mathbb{R} , lo cual corresponde al caso de un sistema con disipación y un proceso causal en electrodinámica.

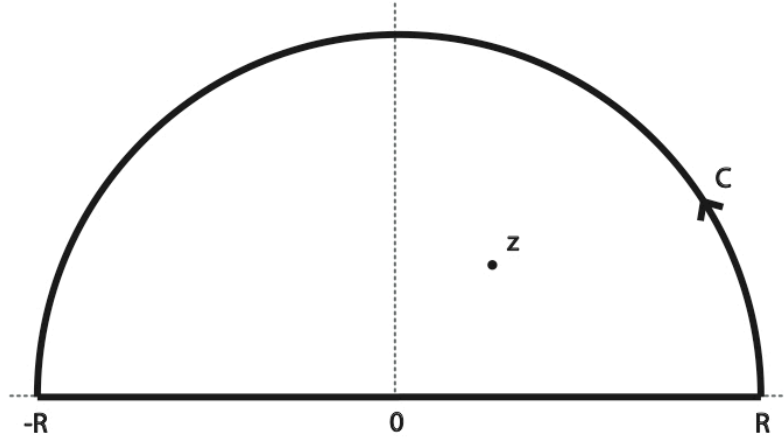


Figura 2.1: Contorno C, dentro del cual la función es holomorfa, considerando que es una región infinita ya que $\mathbf{R} \rightarrow \infty$.

Para $z \in \mathbb{C}^+$, es claro que la función $f(z')$, definida de la siguiente manera:

$$f(z') = \frac{\chi(z')}{(z' - z)}, \quad (2.10)$$

es holomorfa sobre todo el semi-plano superior complejo, excepto en $z' = z$ en donde se presenta un polo simple de residuo $\chi(z)$. La aplicación del Teorema de Cauchy establece que:

$$\chi(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz' \frac{\chi(z')}{(z' - z)}. \quad (2.11)$$

Como $\chi(z)$ tiende a 0 cuando $z \rightarrow \infty$ con $\text{Im } z > 0$, la integral sobre el semi-círculo tiende a 0 cuando $R \rightarrow \infty$ en virtud del lema de Jordan, esto es:

$$\chi(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - z)}. \quad (2.12)$$

Tomemos ahora el límite $\epsilon = \text{Im } z \rightarrow 0^+$ en la ecuación (2.12) con $\omega = \text{Re } z$. En el miembro izquierdo obtenemos $\chi(\omega)$, por la continuidad de $\chi(\omega)$ en $z = \omega$. Para obtener el límite sobre el miembro derecho se procederá igual, inicialmente fijemos ϵ , y como por hipótesis χ es una función holomorfa en el eje real, existe $\alpha \in \mathbb{R}$ suficientemente pequeña tal que χ es holomorfa

en el disco con centro en ω y radio α . Se puede deformar el contorno de integración en la integral (2.12) en los segmentos 1, 2 y 3, en donde 2 es un semi-círculo sobre el semi-plano complejo inferior. La trayectoria 2 es un semi-círculo con centro en ω y de radio α , como se ve en la Figura 2.2. Ya que $f(z')$ es holomorfa en la región comprendida entre \mathbb{R} y $(1 \cup 2 \cup 3)$, podemos aplicar el Teorema de Cauchy, obteniendo:

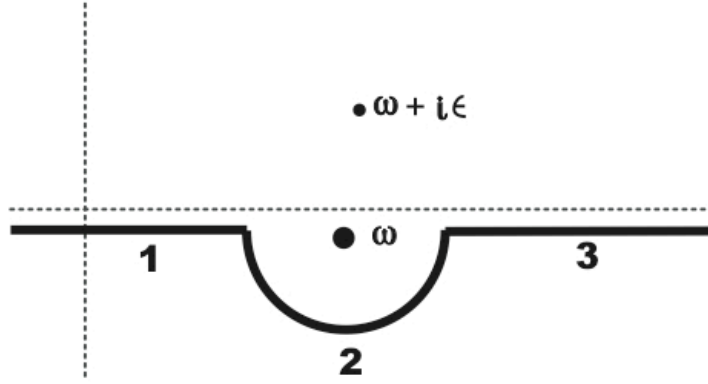


Figura 2.2: Contorno infinito utilizado para rodear las indeterminaciones, el radio del semi-círculo puede ser tan pequeño como se requiera, gracias a un proceso de límite.

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - z)} = \int_{-\infty}^{\omega - \alpha} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - z)} + \int_{\omega + \alpha}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - z)} + \int_{C_\alpha} dz' \frac{\chi(z')}{(z' - z)}. \quad (2.13)$$

Ahora podemos calcular fácilmente el límite cuando $\epsilon \rightarrow 0^+$, para el miembro derecho de (2.12), esto es:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - z)} = \int_{-\infty}^{\omega - \alpha} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega)} + \int_{\omega + \alpha}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega)} + \int_2 dz' \frac{\chi(z')}{(z' - \omega)}. \quad (2.14)$$

La igualdad anterior (2.14), es válida para toda α suficientemente pequeña. El miembro derecho puede calcularse tomando el límite $\alpha \rightarrow 0^+$. Para la integral sobre el segmento 2, como $\chi(z')$ es holomorfa en $z' = \omega$, es legítimo de remplazar $\chi(z')$ por su desarrollo de Taylor alrededor de $z' = \omega$,

$$\chi(z') = \chi(\omega) + \frac{d\chi}{d\omega}(\omega)(z' - \omega) + \dots \quad (2.15)$$

Se parametriza a z' sobre el segmento 2, para que $z' = \omega + \alpha e^{i\theta}$ con $\theta \in [-\pi, 0]$, nos permite afirmar:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \int_2 dz' \frac{\chi(z')}{(z' - \omega)} = i\pi\chi(\omega). \quad (2.16)$$

Para la integral sobre los segmentos 1 y 3, observamos que el límite $\alpha \rightarrow 0^+$ define la parte principal, P , esto es:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \left[\int_{-\infty}^{\omega - \alpha} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega)} + \int_{\omega + \alpha}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega)} \right] = P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega)}. \quad (2.17)$$

Utilizando lo obtenido en las ecuaciones (2.14), (2.16) y (2.17), encontramos:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega - \epsilon i)} = P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega)} + i\pi\chi(\omega). \quad (2.18)$$

Remarcando que en ambas integrales en el miembro izquierdo de la igualdad (2.17), la parte principal diverge si $\chi(\omega) \neq 0$. Sin embargo, éstas divergencias, en $\pm\chi(\omega) \ln \alpha$, se compensan exactamente y la suma de las dos integrales permanece bien definida cuando $\alpha \rightarrow 0^+$. Tengamos en cuenta también que el resultado (2.18), en realidad, es una consecuencia de la identidad bien conocida:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x - i\epsilon} = P \frac{1}{x} + i\pi\delta(x). \quad (2.19)$$

Trabajando con la ecuación (2.12), y tomando el límite $\epsilon \rightarrow 0^+$ en los dos miembros como se hizo para la ecuación (2.18), se obtiene:

$$\chi(\omega) = \frac{1}{2\pi i} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega)} + \frac{1}{2}\chi(\omega). \quad (2.20)$$

Ahora simplemente se expresa $\chi(\omega)$, en términos de sus partes real e imaginaria,

$$\chi(\omega) = \chi_1(\omega) + i\chi_2(\omega). \quad (2.21)$$

Para, así finalmente, obtener las relaciones de Kramers-Krönig:

$$\chi_1(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi_2(\omega')}{(\omega' - \omega)}. \quad (2.22)$$

$$\chi_2(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi_1(\omega')}{(\omega' - \omega)}. \quad (2.23)$$

Para obtener éstas mismas relaciones, para el caso de la función dieléctrica, simplemente tenemos que recordar la relación entre $\hat{\chi}(\omega)$ y $\hat{\epsilon}(\omega)$, como vimos en el capítulo anterior: $\hat{\chi}(\omega) = \frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} - 1$. Separando ésta relación en partes real e imaginaria:

$$\chi_1(\omega) = \frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} - 1, \quad (2.24)$$

y

$$\chi_2(\omega) = \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0}. \quad (2.25)$$

Ahora simplemente se sustituye esto en las relaciones de Kramers-Krönig, y obtenemos:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\epsilon_2(\omega')}{\epsilon_0}}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (2.26)$$

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\epsilon_1(\omega')}{\epsilon_0} - 1}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (2.27)$$

Como se verá en los capítulos siguientes, cuando apliquemos éstas relaciones a los modelos de Drude y de Drude-Smith, será necesario agregar un término extra en la segunda relación de Kramers-Krönig, se agregará un término correspondiente a la conductividad de corriente directa, es decir, la conductividad cuando $\omega \rightarrow 0$. Esto se debe a que en los metales la conductividad no llega a ser cero cuando $\omega \rightarrow 0$ y se presenta un polo en $\omega = 0$ que debe ser tomado en cuenta.

Éstas relaciones son una condición de mucha importancia, y a la vez, también son una herramienta poderosa para llegar de los resultados experimentales a los teóricos, y viceversa. Funcionan como condición, las relaciones de Kramers-Krönig, ya que garantizan la causalidad esperada en el fenómeno. De acuerdo con ideas fundamentales sobre causalidad en fenómenos físicos, el efecto es consecuencia de una acción previa ó causa, y desde la óptica se podría decir que ninguna información podrá viajar más rápido que la luz. También son una consecuencia de la disipación de la luz. Y son una herramienta poderosa, por permitirnos encontrar la parte real de la respuesta de cierto sistema, a partir de la parte imaginaria de la respuesta a todas las frecuencias, y viceversa. Esto pone a éstas relaciones en el centro del análisis de experimentos ópticos en sólidos.

Regresando a nuestra función de respuesta general, si suponemos que $K_0(\tau)$ cumple con la hipótesis enunciada en (2.9), estaríamos garantizando el comportamiento asintótico de $\chi_1(\omega)$ y de $\chi_2(\omega)$ cuando $\omega \rightarrow \infty$. Además, suponemos que $K_0(\tau)$ decae suficientemente rápido de manera que $\chi(\omega)$ sea holomorfa sobre el eje real, para el caso de $\chi_2(\omega)$ tendríamos:

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \omega \chi_2(\omega) = K_0(0). \quad (2.28)$$

Si ahora utilizamos la segunda relación de Kramers-Krönig, obtenemos:

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \omega \chi_2(\omega) = \lim_{\omega \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\omega \chi_1(\omega')}{(\omega - \omega')}. \quad (2.29)$$

Combinando estos dos últimos resultados, se puede obtener que:

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \chi_1(\omega) = K_0(0). \quad (2.30)$$

Esta identidad es una regla de suma, en la que se expresa al término de orden cero de $\chi_1(\omega)$ en términos de una cantidad más accesible.

Las reglas de suma son constricciones universales que determinan el resultado de integrar sobre un espectro infinito alguna función de cierta propiedad óptica de algún medio dado. Éstas reglas de suma nos permiten junto con las relaciones de Kramers-Krönig, resolver integrales sobre espectros infinitos y garantizar la causalidad y veracidad tanto de modelos como de los datos que arrojan.

CAPÍTULO 3

MODELOS PARA $\epsilon(\omega)$.

En este capítulo se revisarán los principales modelos que existen para construir la función dieléctrica. Éstas teorías describen matemáticamente la manera en que los medios reaccionan al interactuar con la radiación electromagnética.

Para la época que se desarrollaron estos modelos (alrededor de 1900), todavía no existía una noción clara de como eran los átomos y de como se unían para formar un cuerpo macroscópico, aunque se contaba con las ecuaciones de Maxwell, se sabía que había materiales conductores y no conductores de electricidad y que la electricidad era una corriente de electrones, ya que el electrón había sido descubierto por J. Thomson en 1897. También se contaba, entonces, con la teorías cinética de los gases y Drude genialmente las aplicó a un metal, considerando un gas de electrones.

Se sabía que los metales eran neutros, por lo que Drude, con otra idea genial, consideró que esa carga positiva faltante se debía a partículas más pesadas, inmóviles dentro del metal, rodeadas por el gas de electrones.

En estos días sabemos que la radiación electromagnética produce polarización en la materia, y formación de corrientes eléctricas, todo esto dependiendo de la naturaleza del material y del tipo de onda electromagnética incidente. Para los modelos presentados a continuación, en el caso más simple, se han considerado medios homogéneos, isótropos. Para la respuesta del medio, sólo se considerará la interacción lineal (de primer orden). Y también se considerará que el campo incidente tiene polarización lineal.

3.1. MODELO PARA UN PLASMA.

En el modelo de plasma, el más sencillo de todos, se considera a los electrones desligados dentro del material, como en un gas. Cuando sobre estos incide un campo de la forma $E_0 e^{i\omega t}$, es decir, un campo eléctrico que oscila en el tiempo, estos reaccionarán produciendo corrientes de conducción y momento dipolar en el medio. Este fenómeno fue representado considerando a los electrones osciladores armónicos.

Será de utilidad para calcular la polarización más adelante, definir la cantidad de electrones por unidad de volumen, n , esto es simplemente el número de electrones totales, N , dividido por el volumen deseado, como lo describe la siguiente relación:

$$n = \frac{N}{vol.} \quad (3.1)$$

Calcularemos el momento dipolar que produciría cada electrón cuando sea perturbado por el campo incidente. Mientras las ondas incidentes tengan la misma polarización, todos los electrones oscilarán en una dirección determinada. Este desplazamiento lo realizarán con respecto a su posición original en el plasma y se representará con la variable, z . *Como se trata de un medio homogéneo con simetría ante rotaciones, podemos no considerar el carácter tridimensional en los cálculos que realizaremos a continuación y los efectuaremos en una sola dimensión, teniendo en mente que pudiera tratarse de un fenómeno tridimensional en muchos casos reales, para los cuales se harían los cálculos para cada componente cartesiana*. La distancia z variará con la misma frecuencia con la que oscila el campo incidente y producirá oscilaciones del dipolo con igual frecuencia, porque no hay retardo en las interacciones (modelo no relativistas), por lo que se puede escribir:

$$p = -ez = -ez_0 e^{i\omega t}. \quad (3.2)$$

Este momento dipolar es inducido por el campo incidente debido a la fuerza de Lorentz que experimentan los electrones en movimiento dentro del plasma:

$$\vec{F} = -e \left(\vec{E} + \frac{v}{c} \times \vec{B} \right). \quad (3.3)$$

De acuerdo con la mecánica clásica, y sin considerar la parte magnética de la fuerza de Lorentz, ya que $v \ll c$, la ecuación de movimiento que describirá la Segunda Ley de Newton, para cada electrón bajo el efecto de un campo eléctrico, $E_0 e^{i\omega t}$, es:

$$m\ddot{z} = -eE_0 e^{i\omega t}, \quad (3.4)$$

en donde m es la masa del electrón y e su carga. El valor del dipolo cambiará de acuerdo como lo haga el campo incidente, con una amplitud máxima z_0 , es decir:

$$z = z_0 e^{i\omega t}. \quad (3.5)$$

de donde obtenemos z_0 :

$$z_0 = \frac{eE_0}{m\omega^2}. \quad (3.6)$$

Sustituyendo z_0 en la ecuación (3.2), obtenemos el momento dipolar:

$$p = \frac{-e^2 E_0 e^{i\omega t}}{m\omega^2}. \quad (3.7)$$

El efecto del campo incidente sobre el material será la polarización del medio, P , y se puede calcular con el momento dipolar de un sólo electrón, p , y el número de electrones por unidad de volumen, n :

$$P = np. \quad (3.8)$$

A partir de las últimas dos ecuaciones, se obtiene:

$$P = \frac{-ne^2 E_0 e^{i\omega t}}{m\omega^2}. \quad (3.9)$$

La polarización, P , es un efecto provocado por las ondas electromagnéticas incidentes y depende de cierta función de respuesta, $\hat{\chi}_P(\omega)$, que caracteriza ó modela la respuesta del material ante dichos campos. Matemáticamente esto se describe con la ecuación:

$$P = \epsilon_0 \hat{\chi}_P E_0 e^{i\omega t}. \quad (3.10)$$

Comparando las ecuaciones (3.9) y (3.10), fácilmente se deduce la forma de la susceptibilidad eléctrica, $\hat{\chi}_P(\omega)$:

$$\hat{\chi}_P(\omega) = -\frac{ne^2}{\epsilon_0 m\omega^2}. \quad (3.11)$$

Para obtener la función dieléctrica recordemos la relación entre la función de respuesta $\hat{\chi}_P(\omega)$ y $\hat{\epsilon}(\omega)$:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \hat{\chi}_P(\omega). \quad (3.12)$$

De ésta forma, sólo tenemos que sustituir el valor recién obtenido de $\hat{\chi}_P(\omega)$, para obtener finalmente la función dieléctrica que propone el modelo para un plasma, esto es:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{ne^2}{\epsilon_0 m\omega^2}. \quad (3.13)$$

Es de utilidad hacer una definición que pone de manifiesto el comportamiento de los electrones del plasma en relación a las frecuencias del campo incidente. Ésta definición es la frecuencia de plasma, ω_p :

$$\frac{ne^2}{\epsilon_0 m} = \omega_p^2. \quad (3.14)$$

Como los electrones en el plasma se comportan como cargas en el extremo de resortes, al estar en presencia de un campo externo e interactuar, experimentan un modo de oscilación característica del material, la frecuencia de plasma, y lo hacen en la misma dirección, la misma en que oscila el campo externo ó incidente.

De acuerdo con ésta definición, podemos deducir que cuando el campo incidente oscile más rápido que la frecuencia de plasma, los electrones del material no tendrán tiempo para reaccionar y formar los dipolos que contrarresten el campo incidente y lo atenúen, de manera

que para éstas frecuencias mayores a la de plasma, el metal se volverá transparente para dicha frecuencia.

Así, la frecuencia de plasma sirve como valor crítico: para frecuencias menores a ésta el índice de refracción se vuelve complejo y la onda incidente disminuye exponencialmente a partir de la frontera, es decir, sólo penetra una corta distancia y en su mayoría es reflejada (como ocurre con la luz visible y los metales); mientras que para frecuencias más altas, cuando $\epsilon(\omega) > 0$, el índice de refracción es real, la absorción es pequeña y el material de pronto comienza a transmitir la radiación, como si fuera transparente. (En los metales esto ocurre generalmente en el ultravioleta).

Considerando a la frecuencia de plasma, ahora podemos escribir la función dieléctrica para el modelo para un plasma, de la siguiente forma:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}. \quad (3.15)$$

Para concluir con este modelo, observamos que este no cumple con la relaciones de Kramers-Krönig, ya que como se ve en la ecuación anterior, la función dieléctrica no tiene parte imaginaria, sucede que al aplicar un campo eléctrico incidente, inmediatamente después se produce una corriente infinita, de manera que no hay tiempo de respuesta, todo ocurre instantáneamente y no se puede hablar de causalidad, se tendría que mejorar este modelo, y considerar un tiempo de respuesta, para enriquecerlo y lograr que sea naturalmente causal.

3.2. MODELO DE LORENTZ.

El modelo que revisaremos a continuación es más complejo, fue desarrollado por el holandés H. A. Lorentz, en 1905, sirve para materiales dieléctricos, fue desarrollado posteriormente al modelo de Drude, pero se presenta primero en este trabajo ya que la deducción del modelo de Drude a partir del modelo de Lorentz es trivial.

En la época en que Lorentz desarrolló este modelo, aún no se contaba con una noción clara del átomo, se contaba con el conocimiento de que en los materiales dieléctricos existía una resistencia a producir corrientes eléctricas, y por supuesto, se contaba con el trabajo de Drude (la aplicación de la teoría cinética de los gases a un metal).

Lorentz, audazmente, describió a los electrones como osciladores armónicos amortiguados forzados, ya que quería describir partículas no libres (ya que se trataba de materiales que no tendían a formar corrientes eléctricas y sí se polarizaban), fue por esto que agregó a los resortes que utilizamos en modelo para un plasma, una frecuencia propia de oscilación ω_0 ; así como un factor de disipación fenomenológico, γ .

Al igual que en el modelo anterior, no se considerará la fuerza sobre electrones debida al campo magnético, ya que es despreciable. De manera que la Segunda Ley de Newton para cada electrón en el metal es:

$$m(\ddot{z} + \gamma\dot{z} + \omega_0^2 z) = -eE_0 e^{i\omega t}, \quad (3.16)$$

en donde, como en el modelo anterior, estamos considerando que el campo oscila sobre una dirección determinada (polarización lineal) y que se trata de un medio homogéneo con simetría rotacional en su respuesta. En este modelo también se considera que el dipolo cambiará conforme el campo incidente oscile, ya que interactúan de manera instantánea, por lo que se cumple que: $z = z_0 e^{-i\omega t}$, de ésta forma podemos obtener la primera y segunda derivada de z con respecto al tiempo, y sustituyendo en la ecuación (3.16), obtenemos:

$$m [-z_0 \omega^2 e^{-i\omega t} - i\gamma \omega z_0 e^{-i\omega t} + \omega_0^2 z_0 e^{-i\omega t}] = -eE_0 e^{-i\omega t}. \quad (3.17)$$

De ésta ecuación podemos despejar z_0 :

$$z_0 = \frac{-eE_0}{m(-\omega^2 - i\gamma\omega + \omega_0^2)}. \quad (3.18)$$

Tomando en cuenta que $p = -ez = -ez_0 e^{i\omega t}$, podemos calcular el momento dipolar debido a un electrón en el material:

$$p = \frac{e^2 E_0 e^{-i\omega t}}{m(-\omega^2 - i\gamma\omega + \omega_0^2)}. \quad (3.19)$$

Para calcular la polarización P , tenemos que multiplicar el momento dipolar de cada electrón por el número de ellos por unidad de volumen, como se establece en la ecuación (3.8), para así obtener:

$$P = \frac{e^2 n E_0 e^{-i\omega t}}{m(-\omega^2 - i\gamma\omega + \omega_0^2)}. \quad (3.20)$$

Considerando esto último más la ecuación (3.10) podemos deducir la forma de $\hat{\chi}_P(\omega)$:

$$\hat{\chi}_P(\omega) = \frac{e^2 n}{\epsilon_0 m(-\omega^2 - i\gamma\omega + \omega_0^2)}. \quad (3.21)$$

Sólo falta considerar la ecuación (3.12), en donde se establece la relación entre $\hat{\chi}_P(\omega)$ y $\hat{\epsilon}(\omega)$, para obtener la forma de la función dieléctrica:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{e^2 n}{\epsilon_0 m(-\omega^2 - i\gamma\omega + \omega_0^2)}. \quad (3.22)$$

Si consideramos la frecuencia de plasma, ω_p , tenemos que:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\omega_p^2}{(\omega^2 + i\gamma\omega - \omega_0^2)}. \quad (3.23)$$

Ésta última ecuación es la función dieléctrica deducida por el modelo de Lorentz, utilizada para describir materiales dieléctricos. Este modelo si cumple con las relaciones de Kramers-Krönig, una demostración se puede encontrar en el ejercicio 7.14 del Jackson, [2], con lo que se puede asegurar que este modelo describe una respuesta lineal, causal y estacionaria.

3.3. MODELO DE DRUDE.

Existe un modelo más, el del alemán Paul Karl L. Drude, el cual se obtiene de la misma forma que hicimos para el caso del modelo de Lorentz, se calcula la polarización, pero con la modificación de que no se considera a los electrones sujetos al núcleo, se les considera libres. Ahora se trabaja solamente con los electrones de conducción del sólido ó de valencia, y se les considera como un gas, el “mar de Drude”. Ésta premisa implica que en el modelo de Drude $\omega_0 = 0$, ya que ω_0 sería la frecuencia con la que oscilarían los electrones alrededor del núcleo, y es cero para describir que están libres y que pueden viajar por todo el mar de Drude. También se considera un factor disipativo fenomenológico, γ , a la cual se le atribuye cualquier otro tipo de interacción que pudieran tener los electrones dentro del metal.

Considerando lo anterior podemos sustituir $\omega_0 = 0$ directamente en la función dieléctrica que acabamos de hallar para el modelo de Lorentz, encontrando así la función dieléctrica correspondiente al modelo de Drude, sin tener que volver a hacer el álgebra, se tiene:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}. \quad (3.24)$$

Este modelo fue ideado por Drude cerca de 1900, sólo tres años después de que Thomson descubriera el electrón y como se dijo anteriormente para estos tiempos no había una noción precisa del átomo, así como tampoco se sabía de las partículas positivas “inmóviles” en los metales (los núcleos atómicos).

Esquivando lo desconocido, Drude aplicó la teoría cinética de los gases a un metal, creando su propia teoría de conducción térmica y eléctrica. Desde ésta perspectiva y considerando que en esa época se sabía que un metal es electricamente neutro, los electrones fueron vistos como un gas y la carga positiva faltante para hacer de este, un metal neutro, Drude la asoció a partículas más pesadas que los electrones, inmóviles e inmersas en el gas de electrones (núcleos), como un panqué con pasas. Y éstas pasas, los electrones, fueron descritos por medio de resortes con disipación.

Sabemos que en el enlace metálico, los electrones de valencia se separan ó se encuentran desligados del núcleo y vagan libremente por el metal, mientras que los iones metálicos ó carozo (núcleo más los electrones ligados de los primeros orbitales) permanecen intactos y juegan el rol de las partículas positivas en el modelo de Drude (las pasas). Todo esto se esquematiza en la Figura 3.1, representación del metal propuesto por Drude.

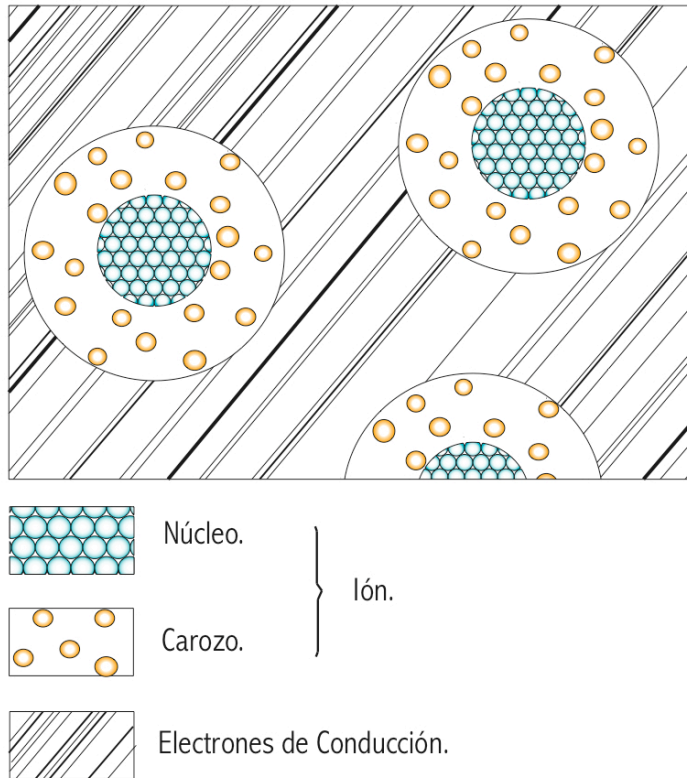


Figura 3.1: Representación de un metal en el modelo de Drude. Los electrones de conducción vagan libres por el metal y son responsables de la conducción. Los electrones en el carozo (core electrons) juegan un papel menos importante dentro de las reacciones químicas. El modelo de Drude trabaja con los electrones de conducción. Cuando sobre este metal incide una onda electromagnética, desplazará tanto a los electrones de conducción como a las iones de sus posiciones de equilibrio, lo que los hará oscilar, produciéndose polarización eléctrica y corrientes eléctricas internas. Es por ésta razón es que Drude representó a los electrones de conducción como osciladores armónicos con disipación.

A continuación se muestra, en el Cuadro 3.1, las densidades electrónicas para distintos metales:

Elemento	n ($10^{22}/\text{cm}^3$)
Li (78K)	4.70
Na (5K)	2.65
K (5K)	1.40
Rb (5K)	1.15
Cs (5K)	0.91
Cu	8.47
Ag	5.86
Au	5.90
Be	24.7
Mg	8.61
Ca	4.61
Sr	3.55
Fe	17.0
Zn	13.2
Hg (78K)	8.65
Al	18.1
Sn	14.8
Pb	13.2

Cuadro 3.1: Densidades electrónicas para distintos metales en el mar de Drude, a temperatura ambiente, 300 K, salvo las excepciones. Valores de n basados en los datos de R. W. G. Wyckoff, *Crystal Structures*, 2nd ed., Interscience, 1963.[19]

Éstas densidades son aproximadamente mil veces más grandes que las de un gas clásico a presión y temperaturas ambiente. A pesar de esto y a pesar de las fuertes interacciones electrón-electrón y electrón-ion metálico, Drude describió a éste denso gas metálico con la Teoría Cinética de un gas neutro diluido, sólo que con algunas modificaciones:

1. *Aproximación del electrón independiente*: Entre las colisiones que sufren los electrones, la interacción de uno de ellos con el resto es despreciada.

2. *Aproximación del electrón libre*: También se desprecia la interacción de los electrones con los iones inmóviles.

3. Tanto en la teoría cinética, como en el modelo de Drude las colisiones son consideradas como eventos instantáneos, que afectan abruptamente la velocidad de los electrones.

4. Se supone que un electrón experimentará una colisión con una probabilidad por unidad de tiempo de $\frac{1}{\tau}$, es decir, la probabilidad de que un electrón tenga un choque en cualquier intervalo infinitesimal de tiempo dt es simplemente $\frac{dt}{\tau}$, donde τ es el tiempo de relajación.

5. Se supone que los electrones alcanzan el equilibrio térmico con sus alrededores sólo a través de las colisiones.

El tiempo de relajación τ , es un concepto muy utilizado en las teorías de conducción metálica, y establece que para un electrón elegido al azar en un momento dado, este, en promedio, viajará un tiempo τ hasta una siguiente colisión, y también, que habrá viajado durante un tiempo τ desde su última colisión. En las aplicaciones más simples del modelo de Drude, se considera al tiempo de relajación independiente de la posición y la velocidad del electrón elegido, muy adecuado para la mayoría de los casos.

El tiempo de relajación se calcula a partir de la cantidad de electrones por unidad de volumen, n , la resistividad del material, ρ , la masa del electrón, m , y su carga, e , de acuerdo a la siguiente relación:

$$\tau = \frac{m}{\rho n e^2}. \quad (3.25)$$

En el Cuadro 3.2, a continuación, se pueden observar algunos valores del tiempo de relajación en distintos metales:

TIEMPOS DE RELAJACIÓN (10^{-14} seg.).

Elemento	77K	273K	373K
Li	7.3	0.88	0.61
Na	17	3.2	
K	18	4.1	
Rb	14	2.8	
Cs	8.6	2.1	
Cu	21	2.7	1.9
Ag	20	4.0	2.8
Au	12	3.0	2.1
Be		0.51	0.27
Mg	6.7	1.1	0.74
Ca		2.2	1.5
Sr	1.4	0.44	
Ba	0.66	0.19	
Nb	2.1	0.42	0.33
Fe	3.2	0.24	0.14
Zn	2.4	0.49	0.34
Cd	2.4	0.56	
Hg	0.71		
Al	6.5	0.80	0.55
Ga	0.84	0.17	
In	1.7	0.38	0.25
Tl	0.91	0.22	0.15
Sn	1.1	0.23	0.15
Pb	0.57	0.14	0.099
Bi	0.072	0.023	0.016
Sb	0.27	0.055	0.036

Cuadro 3.2: Tiempos de relajación para Drude, en unidades de 10^{-14} segundos, para distintas temperaturas. [19].

3.3.1. CONDUCTIVIDAD ELÉCTRICA DE DRUDE.

Para alcanzar la meta de este trabajo y para conocer acerca de las corrientes eléctricas dentro del material, es conveniente conocer, aparte de la función dieléctrica, la forma de la conductividad eléctrica, $\hat{\sigma}(\omega)$, distinta para cada modelo. Ésta será de utilidad en los próximos capítulos para obtener un término que se tendrá que agregar a una de las ecuaciones de Kramers-Krönig para llegar a la parte imaginaria de manera correcta. Para obtener ésta función se aprovecha que existen ecuaciones que relacionan a todas las funciones respuesta entre sí. Un signo del buen funcionamiento del modelo es que las funciones de respuesta obtenidas teóricamente, coincidan con los datos experimentales.

Para encontrar la expresión para la conductividad, en todos los modelos se puede comenzar igual, comparando la definición de corriente eléctrica como el producto del campo eléctrico incidente por la conductividad eléctrica, con otra definición de corriente eléctrica, construida a partir del número de electrones en el material, su carga y su velocidad, es decir:

$$j = \hat{\sigma}(\omega)E = \rho v = -ne\dot{z}. \quad (3.26)$$

En donde n es el número de electrones por unidad de volumen, ρ la densidad de éstos, e su carga y v su velocidad dentro de algún metal. Esto en una dirección determinada, ya que estamos considerando sólo una dimensión, en un campo homogéneo con simetría rotacional, si el campo incidente es una onda senoidal, entonces:

$$E = E_0 e^{i\omega t} \hat{z}. \quad (3.27)$$

En la misma forma que se vio en la ecuación (3.5), la distancia en que el electrón oscila, varía al mismo ritmo del campo incidente, desde cero en la posición original hasta la amplitud máxima, z_0 , así:

$$z = z_0 e^{i\omega t}. \quad (3.28)$$

Procediendo como lo hicimos antes resulta que, si $\omega_0 = 0$

$$z_0 = \frac{-eE_0}{m(-\omega^2 + i\gamma\omega)}. \quad (3.29)$$

De manera que podemos deducir la forma de la conductividad eléctrica, de la ecuación:

$$j_z = \hat{\sigma}(\omega)E_0 e^{i\omega t} = -nei\omega \frac{-eE_0}{m(-\omega^2 + i\gamma\omega)} e^{i\omega t}. \quad (3.30)$$

De donde es fácil concluir que la conductividad de Drude $\hat{\sigma}_D(\omega)$, queda expresada como:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_D(\omega) &= \frac{i\omega e^2 n}{m(-\omega^2 + i\gamma\omega)}. \\ &= -\frac{i\omega \frac{e^2 n}{m}}{(\omega^2 - i\gamma\omega)}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Considerando la definición de la frecuencia de plasma, obtenemos:

$$\hat{\sigma}_D(\omega) = -\frac{i\omega \epsilon_0 \omega_p^2}{(\omega^2 - i\gamma\omega)}. \quad (3.32)$$

Ahora escribiremos la conductividad de Drude de una forma diferente, que nos será de utilidad posteriormente. Para esto utilizaremos la definición de la frecuencia de plasma y el

hecho de que el tiempo de relajación, τ , es el inverso de la constante de amortiguamiento γ . $\gamma = \frac{1}{\tau}$, considerando esto, la conductividad para Drude se puede reescribir de la siguiente manera[19]:

$$\hat{\sigma}_D(\omega) = -\frac{i\omega\epsilon_0\frac{ne^2}{\epsilon_0 m}}{(\omega^2 - i\frac{1}{\tau}\omega)}, \quad (3.33)$$

que también puede escribirse como:

$$\hat{\sigma}_D(\omega) = -\frac{i\tau\frac{ne^2}{m}}{\omega\tau - i}, \quad (3.34)$$

y también como:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_D(\omega) &= -\frac{i\tau\frac{ne^2}{m}}{\omega\tau - i} \frac{(\omega\tau + i)}{(\omega\tau + i)}, \quad (3.35) \\ &= \frac{-i\omega\tau^2\frac{ne^2}{m} + \tau\frac{ne^2}{m}}{\omega^2\tau^2 + 1}. \end{aligned}$$

Para continuar necesitamos definir σ_0 , el valor de la conductividad de Drude para frecuencia igual a cero, $\omega = 0$, es decir la conductividad de corriente directa. Ésta conductividad la podemos hallar a partir de la conductividad de Drude, sustituyendo $\omega = 0$, obteniendo $\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}$, [21]. Entonces la ecuación (3.35) se expresa como:

$$\hat{\sigma}_D(\omega) = \frac{\sigma_0 - i\omega\tau\sigma_0}{\omega^2\tau^2 + 1}. \quad (3.36)$$

Ahora separaremos la parte real y la parte imaginaria de $\hat{\sigma}(\omega)$:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_D(\omega) &= \frac{\sigma_0}{\omega^2\tau^2 + 1} - \frac{i\omega\tau\sigma_0}{\omega^2\tau^2 + 1}. \quad (3.37) \\ &= \sigma_{D1} + \sigma_{D2}. \end{aligned}$$

Con esto tenemos las bases para, en el siguiente capítulo, aplicar las relaciones de Kramers-Krönig a este modelo de Drude.

CAPÍTULO 4

RELACIONES DE KRAMERS-KRÖNIG PARA EL MODELO DE DRUDE.

A manera de revisión del modelo de Drude a continuación se aplicarán las relaciones de Kramers-Krönig a dicho modelo.

Comenzamos con la función dieléctrica para el modelo de Drude, ecuación (3.24), a partir de ella es directo que se puede expresar a:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \frac{(\omega - i\gamma)}{(\omega - i\gamma)}, \quad (4.1)$$

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\omega_p^2\omega - i\omega_p^2\gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)},$$

$$= \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega).$$

4.1. CÁLCULO DE LA PARTE REAL DE LA FUNCIÓN DIELECTRICA A PARTIR DE LA PARTE IMAGINARIA.

Para demostrar la primera relación de Kramers-Krönig la ecuación (2.26), seguiremos lo que en ella se establece, obtener la parte real de la función dieléctrica a partir de integrar una función racional con la parte imaginaria de la función dieléctrica en su numerador:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\epsilon_2(\omega')}{\epsilon_0}}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (4.2)$$

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{\omega_p^2}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma d\omega'}{\omega'(\omega'^2 + \gamma^2)(\omega' - \omega)},$$

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{\omega_p^2}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma d\omega'}{\omega'(\omega' + i\gamma)(\omega' - i\gamma)(\omega' - \omega)}. \quad (4.3)$$

Para efectuar ésta integral, aplicaremos los resultados del teorema de Cauchy, del teorema del residuo y del valor principal de Cauchy. Comenzaremos identificando los polos, aquellos puntos donde la función no es holomorfa, pero sí en los alrededores de ese punto. Una función es holomorfa en un punto z_0 si la derivada existe en ese punto y en una región a su alrededor.

Para llevar a cabo la integral se diseña una trayectoria que rodea los polos y se acerca a ellos tanto como se quiera, también abarca todo el eje real, desde $-\infty$ hasta ∞ . Aclarando que podemos encontrar polos en dos lugares diferentes: en el interior de la trayectoria integral ó en su contorno, como se ve en la Figura 4.1, los polos en el eje real son rodeados por un semi-círculo, mientras que los polos en el interior con un círculo completo, de manera que en el límite se convierta en una región holomorfa. Se escoge el semi-plano superior complejo ya que es lo que corresponde en electrodinámica a un fenómeno causal, es por eso que los polos en el semi-plano inferior quedan fuera de la trayectoria cerrada:

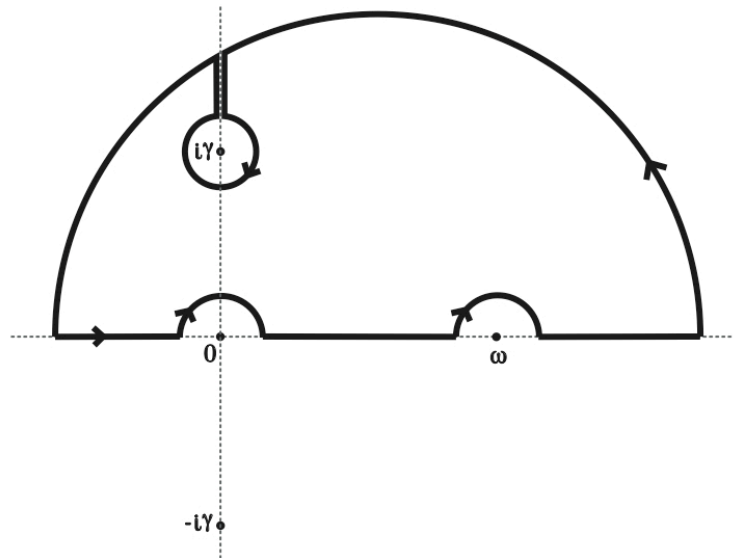


Figura 4.1: Trayectoria integral de Cauchy infinita $R \rightarrow \infty$, y polos en la función a integrar. Los residuos de polos en el eje real tendrán que multiplicarse por $i\pi$ mientras que los que se encuentran en el semi-plano superior complejo por $i2\pi$, los polos en el semi-plano inferior no contribuyen a la integral porque describen un proceso acausal en electrodinámica.

Del Teorema de Cauchy sabemos que las integrales de funciones holomorfas sobre trayectorias cerradas valen cero, pero cuando se encuentran polos en su interior ó en su contorno, la integral tomará valores diferentes de cero sobre los segmentos de trayectoria que se utilizaron para rodear los polos. [3]

Considerando esto, la integral en (4.3) es igual a la suma de los residuos de polos en el interior de la trayectoria multiplicados por $2\pi i$, más la suma de residuos de polos en el eje

real multiplicados por πi . [3]

A continuación se muestran los polos encontrados en (4.3). Todos son polos simples, por lo que para calcular sus residuos se toma el siguiente límite:[16]

$$residuo = \lim_{\omega' \rightarrow \omega'_0} (\omega' - \omega'_0) f(\omega'). \quad (4.4)$$

polos	residuos
$\omega' = 0$	$-\frac{1}{\gamma\omega}$
$\omega' = \omega$	$\frac{\gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)}$
$\omega' = i\gamma$	$\frac{i}{2\gamma(\gamma + i\omega)}$
$\omega' = -i\gamma$	no contribuye a la integral.

A continuación se presenta la serie de residuos que forman la solución de la integral, y luego con un poco de álgebra se llega a la expresión para $\epsilon_1(\omega)$:

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} &= 1 + \frac{\omega_p^2}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma d\omega'}{\omega'(\omega' + i\gamma)(\omega' - i\gamma)(\omega' - \omega)}, \quad (4.5) \\ &= 1 + \frac{\omega_p^2}{\pi} \left[-\frac{i\pi}{\gamma\omega} + \frac{i\pi\gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)} - \frac{\pi}{\gamma(\gamma - i\omega)} \right], \\ &= 1 + \omega_p^2 \left[-\frac{i}{\gamma\omega} + \frac{i\gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)} - \frac{1}{\gamma(\gamma - i\omega)} \right], \\ &= 1 + \omega_p^2 \left[-\frac{i\omega}{\gamma(\omega^2 + \gamma^2)} - \frac{1}{\gamma(\gamma + i\omega)} \right], \\ &= 1 + \omega_p^2 \left[-\frac{1}{\gamma^2 + \omega^2} \right]. \end{aligned}$$

Por lo tanto, la parte real es:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad (4.6)$$

que coincide con lo obtenido en la ecuación (4.1).

4.2. CÁLCULO DE LA PARTE IMAGINARIA DE LA FUNCIÓN DIELÉCTRICA A PARTIR DE LA PARTE REAL.

Para terminar de aplicar las relaciones Kramers-Krönig al modelo de Drude, ahora, partiremos de la parte real de la función dieléctrica, que acabamos de obtener, y buscamos obtener la parte imaginaria, de manera inversa al procedimiento anterior.

Iniciamos escribiendo la parte real de la función dieléctrica, así como la relación de Kramers-Krönig, como para el de Drude-Smith posteriormente, en ésta se agregará un término extra para poder volver a la parte imaginaria de la función dieléctrica de manera correcta, esto es necesario ya que en los metales, como en este caso, la conductividad no se hace cero cuando $\omega \rightarrow 0$ y es más, presenta un polo en $\omega = 0$. Este término extra proviene de evaluar la conductividad de Drude en $\omega = 0$, se le conoce como conductividad de corriente directa ó de campo constante, σ_{CD-D} , esto es:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\omega_p^2}{(\omega^2 + \gamma^2)}. \quad (4.7)$$

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_{CD-D}}{\omega} - \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\epsilon_1(\omega')}{\epsilon_0} - 1}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (4.8)$$

Como primer paso se tiene que sustituir la ecuación (4.7) en la (4.8), con lo que obtenemos:

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_{CD-D}(0)}{\omega} - \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-\frac{\omega_p^2}{(\omega'^2 + \gamma^2)}}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (4.9)$$

A continuación se puede sustituir el valor de la conductividad para campo constante ó de corriente directa (conductividad para cuando $\omega = 0$), σ_{CD-D} , definida en el capítulo de la Conductividad de Drude, en el párrafo anterior a la ecuación (3.36):

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\omega_p^2}{\omega\gamma} - \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-\frac{\omega_p^2}{(\omega'^2 + \gamma^2)}}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (4.10)$$

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\omega_p^2}{\omega\gamma} + \frac{\omega_p^2}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{(\omega'^2 + \gamma^2)(\omega' - \omega)},$$

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\omega_p^2}{\omega\gamma} + \frac{\omega_p^2}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{(\omega' + i\gamma)(\omega' - i\gamma)(\omega' - \omega)}.$$

Para resolver ésta última integral podemos utilizar los resultados de los teoremas de Cauchy, del residuo y del valor principal como en la sección pasada, y debemos, empezar por localizar los polos en la función, así como calcular sus respectivos residuos:

polos	residuos
$\omega' = \omega$	$\frac{1}{(\omega^2 + \gamma^2)}$
$\omega' = i\gamma$	$\frac{1}{2i\gamma(i\gamma - \omega)}$
$\omega' = -i\gamma$	no contribuye a la integral.

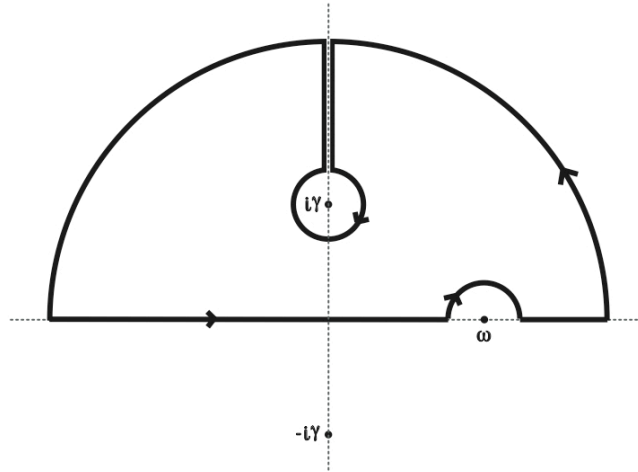


Figura 4.2: Trayectoria integral de Cauchy infinita $R \rightarrow \infty$. El polo $-i\gamma$ no contribuye al valor de la integral total.

Sumando todos los residuos y considerando el Teorema del Valor Principal de Cauchy:

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} &= \frac{\omega_P^2}{\omega\gamma} + \frac{\omega_P^2}{\pi} \left[\frac{2\pi i}{2i\gamma(i\gamma - \omega)} + \frac{\pi i}{(\omega^2 + \gamma^2)} \right], \\ &= \frac{\omega_P^2}{\omega\gamma} + \omega_P^2 \left[\frac{-(\omega + i\gamma) + i\gamma}{\gamma(\omega - i\gamma)(\omega + i\gamma)} \right], \\ &= \frac{\omega_P^2}{\omega\gamma} - \frac{\omega_P^2\omega}{\gamma(\omega^2 + \gamma^2)}. \end{aligned} \tag{4.11}$$

Así, mediante un poco más de álgebra, obtenemos la parte imaginaria de la función dieléctrica, hay que recordar que tuvimos que agregar un término extra en la relación de Kramers-Kronig correspondiente, es decir:

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\omega_P^2\gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)}, \tag{4.12}$$

que nuevamente coincide con lo obtenido en la ecuación (4).

CAPÍTULO 5

MODELO DE DRUDE-SMITH.

Una vez creado el modelo de Drude, en las siguientes décadas se descubrieron de manera experimental varios fenómenos que no podían predecirse, motivando la búsqueda de una explicación teórica. Muchos de estos hechos experimentales fueron descubiertos en mercurio líquido, en películas delgadas de nanocristales de silicio y de oro, a partir de 1950.

En un experimento en 1978, H. Ikezi midió la reflectividad óptica del mercurio líquido expandido dentro de un cilindro con ventanas de zafiro, se observó una disminución en la conductividad eléctrica a bajas frecuencias, fuera de la curva propuesta por Drude. Esto ocurría cuando se daba la transición metal semiconductor, a una presión de 9 g/cm^3 . Abajo de 5.5 g/cm^3 de presión, el mercurio presentó una brecha óptica, lo cual no coincidía con la densidad a la que ocurre la transición semiconductor metal. En esa época, estos hechos se presentaron como algo sin una explicación teórica. [22]

Tres años después (1981), T. Inagaki y su grupo de investigación descubrieron diferencias en las propiedades ópticas medidas en mercurio líquido por reflectividad y por elipsometría (otro método para obtener las propiedades ópticas ó las funciones de respuesta, basado en la polarización de la luz), éstas diferencias, al principio, se pensaron debidas a inhomogeneidades y/o anisotropías en la superficie del mercurio líquido. Se analizó dicha superficie y no se encontraron evidencias de inhomogeneidades, por lo que se descartó ésta explicación. La diferencia se debía a que no se habían considerado las incertidumbre muy grandes asociadas a las propiedades ópticas en el modelo de Drude. También se confirmó que la caída en la conductividad en el mercurio líquido, para frecuencias entre el infrarrojo y el ultravioleta, era una característica propia de dicho material y debía ser explicada con un nuevo modelo.[23]

El artículo de Neville V. Smith [21], publicado en 2001, quien en vida fue director del Advanced Light Source, en Lawrence Berkeley National Laboratory, generaliza la fórmula de Drude basándose en la estadística de Poisson y la aproximación de la respuesta impulso. En éste nuevo modelo se utiliza un nuevo parámetro, C , el cual es una medida de la persistencia en la velocidad de los electrones en el metal, con respecto a su velocidad original.

5.1. RESPUESTA IMPULSO.

N. V. Smith, aplicó la aproximación de la respuesta impulso a la conductividad, $\hat{\sigma}(\omega)$. El proceso empieza considerando un pulso unitario de campo eléctrico, aplicado sobre el sistema de electrones, en el metal al tiempo $t = 0$, para posteriormente, examinar la corriente de respuesta a un tiempo posterior t , $j(t)$. Sabemos que la conductividad compleja es la transformada de Fourier de $j(t)$:

$$\hat{\sigma}(\omega) = \int_0^{\infty} j(t) \exp(i\omega t) dt. \quad (5.1)$$

Una función impulso- δ de campo es la fuerza dominante actuando sobre el sistema, así, inicialmente cada electrón se comporta como si fuera completamente libre. Sabemos que $j(0) = ne^2/m$, ya que $\hat{\sigma}(\omega)$ y $j(t)$ son transformadas de Fourier una de la otra. De ésta forma y considerando la regla de la suma para $\sigma_1(\omega)$, tenemos que [21]:

$$\int_0^{\infty} \sigma_1(\omega) d\omega = \left(\frac{\pi}{2}\right) j(0) = \frac{\omega_P^2}{8}. \quad (5.2)$$

Si la corriente inicial decae exponencialmente hacia cero, su valor de equilibrio con un tiempo de relajación τ , entonces se tiene:

$$j(t)/j(0) = \exp(-t/\tau), \quad (5.3)$$

y

$$\hat{\sigma}(\omega) = (ne^2\tau/m)/(1 - i\omega\tau). \quad (5.4)$$

Revisaremos a continuación la estadística de Poisson, que también utilizó Smith junto con la aproximación de la respuesta impulso para la generalización del modelo de Drude.

5.2. ESTADÍSTICA DE POISSON.

Se supone que cada electrón experimentará un choque con otro electrón dentro del metal de manera azarosa en el tiempo, pero, en promedio todos los electrones experimentarán un choque cada tiempo τ , el tiempo de relajación.

La probabilidad $p_n(0, t)$, de n eventos en un intervalo de tiempo $(0, t)$, está dada por la distribución de Poisson:

$$p_n(0, t) = (t/\tau)^n \exp(-t/\tau)/n!. \quad (5.5)$$

Observamos que la probabilidad de cero colisiones es $\exp(-t/\tau)$. Entonces, podemos ver a la ecuación (5.3) como una serie cuyo primer término da ésta probabilidad de cero colisiones. Tomando en cuenta lo que ocurre en la primera colisión y en las siguientes, Smith concluyó que:

$$j(t)/j(0) = \exp(-t/\tau) \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} C_n (t/\tau)^n / n! \right]. \quad (5.6)$$

El coeficiente C_n representa la fracción de la velocidad original que los electrones han conservado hasta la n -ésima colisión. Un efecto de memoria o de persistencia de la velocidad se agrega a este modelo. Utilizando la ecuación (5.1) obtenemos la forma para la generalización de la conductividad [21]:

$$\hat{\sigma}(\omega) = \frac{\sigma_0}{(1 - i\omega\tau)} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C_n}{(1 - i\omega\tau)^n} \right]. \quad (5.7)$$

Y la conductividad de corriente directa es entonces:

$$\hat{\sigma}_{DC}(0) = \sigma_0 \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} C_n \right]. \quad (5.8)$$

Para aplicar las relaciones de Kramers-Krönig a este nuevo modelo, debemos obtener la forma de la función dieléctrica, y separarla en partes real e imaginaria. Utilizaremos la ecuación (1.3), que relaciona la función dieléctrica con la conductividad, como se vió en el primer capítulo:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{i}{\omega} \hat{\sigma}(\omega). \quad (5.9)$$

Sustituyendo la ecuación (5.7) en (5.9), se obtiene la función dieléctrica para el modelo de Drude-Smith:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{i\sigma_0}{\omega(1 - i\omega\tau)} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{i\sigma_0 C_n}{\omega(1 - i\omega\tau)^{n+1}}. \quad (5.10)$$

A continuación se trunca ésta serie recién obtenida, sólo consideraremos hasta el término con coeficiente C_1 , esto se acostumbra hacer ya que todos los experimentos encontrados hasta la actualidad son descritos con precisión con ésta aproximación, y nos es necesario utilizar la serie completa, los fundamentos experimentales que sustentan esto se mencionan en la siguiente sección. Entonces, la función dieléctrica truncada del modelo de Drude-Smith es:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{i\sigma_0}{\omega(1 - i\omega\tau)} + \frac{i\sigma_0 C_1}{\omega(1 - i\omega\tau)^2}. \quad (5.11)$$

Posteriormente, que será de utilidad, separar la parte real y la parte imaginaria de manera explícita:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\sigma_0\tau}{(1 + \omega^2\tau^2)} \left[1 + \frac{2C_1}{(1 + \omega^2\tau^2)} \right], \quad (5.12)$$

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0}{\omega(1 + \omega^2\tau^2)} \left[1 + \frac{C_1(1 - \omega^2\tau^2)}{(1 + \omega^2\tau^2)} \right]. \quad (5.13)$$

5.3. EXPERIMENTOS QUE COMPROBARON EL MODELO DE DRUDE-SMITH, CONSIDERANDO SÓLO HASTA EL TÉRMINO C_1 .

Desde principios del siglo XXI, se ha investigado a los nanocristales de silicio (Si-NCs), ya que sus propiedades lumínicas pueden ser utilizadas en tecnología fotónica. En 2006 se observó en películas delgadas de estos nanocristales, que en el rango de los terahertz la conductividad también quedaba fuera de lo predicho por el modelo de Drude, ya que la parte real de la conductividad se debía suprimir para dichas frecuencias. En este mismo trabajo se prueba que el modelo de Drude-Smith explica perfectamente esta supresión en la parte real de la conductividad, (no llega a ser cero cuando $\omega \rightarrow 0$, de corriente directa). [24]

En 2007 estudiando películas delgadas de oro, M. Walther y D. G. Cooke observaron varios fenómenos también fuera de explicación del modelo de Drude y descritos con precisión por el modelo de Drude-Smith. Se estudiaron películas con gruesos de hasta 28 nanómetros, mientras más delgada era la película el comportamiento se alejaba del de el oro en bulto, ya que al variar el grueso de la película se desarrolla una transición de metal a aislante debido a los cambios por percolación. Se utilizó el nuevo modelo de Drude-Smith para describir este fenómeno y experimentalmente se encontró que C vale cero cuando el grueso de la película es igual ó mayor que 10 nm (todavía dentro del modelo de Drude), mientras que al reducir el grueso de la película, C comenzó a tomar valores negativos hasta llegar a valer -1 para un ancho de 6 nm aproximadamente.

En contraste con la teoría electromagnética, se encontró una variación en la frecuencia de plasma, el valor de ésta para el oro en bulto es $\omega_P/2\pi = 2080THz$, este valor fue obtenido con películas más gruesas que 20 nm, con gruesos menores y debido a la percolación y a la formación de islas en la película (que no transmiten ni reciben electrones, a menos que se encuentren demasiado cerca y los electrones pasen por efecto tunel), la frecuencia de plasma comienza a disminuir, como se muestra en la Figura 5.1.

En estos experimentos con películas delgadas de oro, también se graficó el tiempo de relajación para diferentes gruesos, encontrando que su valor es independiente del ancho de la película, excepto en el momento de percolación, en donde el tiempo de relajación tomó valores extremos. El valor promedio obtenido fue de 18 *fs* un poco más bajo que el de 25 *fs* que aparece en la literatura. [25]

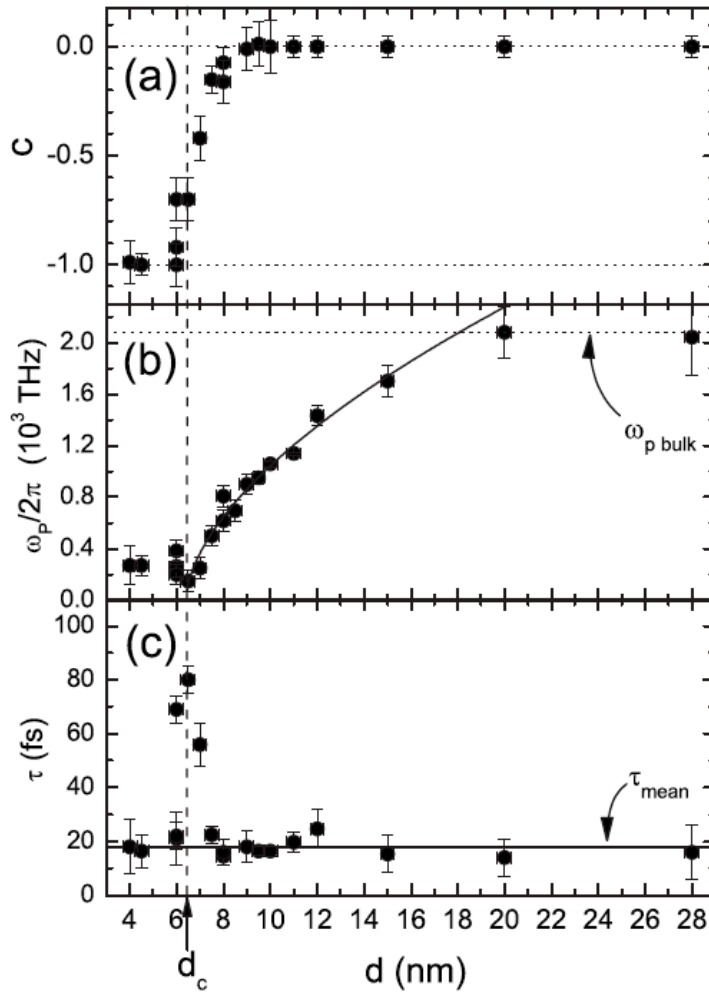


Figura 5.1: En éstas gráficas se observa el comportamiento de C , de la frecuencia de plasma y del tiempo de relajación para varios anchos de películas de oro . La línea punteada vertical marca la transición de percolación a $d_c = 6.4$ nm. La persistencia de la velocidad C se grafica en (a), toma valores de 0 a -1. La frecuencia de plasma efectiva de la película aumenta desde el ancho crítico hasta tomar el valor de bulto en anchos mayores a 20 nm (b). El tiempo de relajación varía muy poco desde su valor promedio de $\tau = 18$ fs, excepto en el ancho crítico en donde el valor se dispara. [25]

CAPÍTULO 6

RELACIONES DE KRAMERS-KRÖNIG PARA EL MODELO DE DRUDE-SMITH.

En este capítulo se analiza el problema propuesto para ésta tesis, se aplicarán las relaciones de Kramers-Krönig al Modelo de Drude-Smith, si éstas se satisficieran, se expondría de forma explícita que este modelo es causal: que la reacción viene después de la acción; y se obtendrán también, de manera explícita las relaciones para ir de la parte real a la imaginaria de la función dieléctrica de Drude-Smith, $\hat{\epsilon}(\omega)$, esto reducirá al doble el trabajo experimental, ya que sólo se deberá de medir alguna de las partes de la función ó la real ó la imaginaria, y de manera teórica, encontrar la otra parte faltante.

Para comprobar las relaciones de Kramers-Krönig con este modelo, se procederá como en los casos anteriores, comenzaremos con la parte imaginaria de la función dieléctrica y la sustituiremos en una de las relaciones de Kramers-Krönig y así obtendremos la parte real correspondiente. Para que las relaciones se satisfagan tendremos finalmente que hacer el proceso inverso, encontrar la parte imaginaria a partir de la real.

A diferencia del caso cuando se aplicaron las relaciones de Kramers-Krönig al modelo de Drude, aquí, para poder trabajar con la formula general de Drude-Smith, se dividirá el procedimiento en casos. La función dieléctrica de Drude-Smith es una serie infinita, y como para que se satisfagan los experimentos basta con tomar hasta el coeficiente C_1 . Es por ésta razón, que se probarán las relaciones de Kramers-Krönig para la función dieléctrica truncada hasta el término con coeficiente C_1 , la velocidad de los electrones será conservada sólo hasta su primer choque (en promedio). Aunque, al final de este capítulo las probaremos también para $n = 2$.

En el capítulo siguiente, se presentan algunas ideas para la demostración del caso general, es decir, sin truncar la función dieléctrica, el caso "n". Ahora, comenzaremos con la demostración para la serie truncada:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{i\sigma_0}{\omega(1 - i\omega\tau)} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{i\sigma_0 C_n}{\omega(1 - i\omega\tau)^{n+1}}. \quad (6.1)$$

Truncando la serie, considerando sus tres primeros términos:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{i\sigma_0}{\omega(1 - i\omega\tau)} + \frac{i\sigma_0 C_1}{\omega(1 - i\omega\tau)^2}. \quad (6.2)$$

Ahora se separan las partes reales e imaginarias para saber que es lo que tenemos que obtener al realizar las integrales de Cauchy:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\sigma_0\tau}{(1 + \omega^2\tau^2)} \left[1 + \frac{2C_1}{(1 + \omega^2\tau^2)} \right]. \quad (6.3)$$

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0}{\omega(1 + \omega^2\tau^2)} \left[1 + \frac{C_1(1 - \omega^2\tau^2)}{(1 + \omega^2\tau^2)} \right]. \quad (6.4)$$

6.1. CÁLCULO DE LA PARTE REAL DE LA FUNCIÓN DIELECTRICA A PARTIR DE LA PARTE IMAGINÁRIA.

Para empezar se escribe la parte imaginaria de la función dieléctrica para Drude-Smith:

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0}{\omega(1 + \omega^2\tau^2)} \left[1 + \frac{C_1(1 - \omega^2\tau^2)}{(1 + \omega^2\tau^2)} \right]. \quad (6.5)$$

Ahora, escribimos la relación de Kramers-Krönig que primero probaremos, la que sirve para encontrar la parte real a partir de la imaginaria:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\epsilon_2(\omega')}{\epsilon_0}}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (6.6)$$

Como primer paso, se sustituye la parte imaginaria de la función dieléctrica en la ecuación anterior:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\sigma_0}{\omega'(1 + \omega'^2\tau^2)} + \frac{\sigma_0 C_1(1 - \omega'^2\tau^2)}{\omega'(1 + \omega'^2\tau^2)(1 + \omega'^2\tau^2)}}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (6.7)$$

Con la ayuda de un poco de álgebra, transformaremos ésta integral en algo más manejable, como se muestra a continuación:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\sigma_0(1 + \omega'^2\tau^2) + \sigma_0 C_1(1 - \omega'^2\tau^2)}{\omega'(1 + \omega'^2\tau^2)^2}}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (6.8)$$

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{\sigma_0}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(1 + \omega'^2\tau^2) + C_1(1 - \omega'^2\tau^2)}{\omega'(\omega' - \omega)(1 + \omega'^2\tau^2)^2} d\omega'. \quad (6.9)$$

Se separa en dos integrales:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{\sigma_0}{\pi} \left[P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega'(\omega' - \omega)(1 + \omega'^2\tau^2)} + P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{C_1(1 - \omega'^2\tau^2)}{\omega'(\omega' - \omega)(1 + \omega'^2\tau^2)^2} d\omega' \right], \quad (6.10)$$

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{\sigma_0}{\pi} \left[P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega'(\omega' - \omega)(1 + i\omega'\tau)(1 - i\omega'\tau)} + P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{C_1(1 - \omega'^2\tau^2)}{\omega'(\omega' - \omega)(1 + i\omega\tau)^2(1 - i\omega\tau)^2} d\omega' \right]. \quad (6.11)$$

Para continuar deben efectuarse las dos integrales anteriores, y se hará con la misma técnica que se utilizó cuando se aplicó Kramers-Krönig a Drude, en el capítulo 4. Gracias a los resultados del teorema de Cuachy, de los del teorema del residuo y del valor principal, considerando sus polos y respectivos residuos.

En la primera integral, tenemos una función racional, de la forma $\frac{1}{h(\omega')}$, con polos simples en el denominador. Ya que todos los polos son de primer orden el residuo se calcula con el siguiente límite, como se hizo en el capítulo 4 [16]:

$$residuo = \lim_{\omega' \rightarrow \omega'_0} (\omega' - \omega'_0) f(\omega'). \quad (6.12)$$

Sabiendo que los polos que producirán residuo son los encontrados en el eje real o en el semi-plano superior complejo, para ésta primera integral se encuentran polos en $\omega' = 0$, $\omega' = \omega$ y en $\omega' = \frac{i}{\tau}$. A continuación se presentan sus respectivos residuos:

polos	residuos
$\omega' = 0$	$-\frac{1}{\omega}$
$\omega' = \omega$	$\frac{1}{\omega(1 + \omega^2\tau^2)}$
$\omega' = \frac{i}{\tau}$	$\frac{1}{2(\omega - \frac{i}{\tau})}$
$\omega' = -\frac{i}{\tau}$	No contribuye a la integral.

De acuerdo con el teorema del residuo, con el teorema de Cauchy y con el valor principal, tenemos que para los polos que se rodean con un semi-círculo su respectivo residuo será multiplicado por $i\pi$, mientras que para los que se rodean por medio de un círculo completo, su residuo tiene que ser multiplicado por $i2\pi$, esto es:

$$P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega'(\omega' - \omega)(1 + i\omega'\tau)(1 - i\omega'\tau)} = \left[-\frac{i\pi}{\omega} + \frac{i\pi}{\omega(1 + \omega^2\tau^2)} + \frac{i\pi}{(\omega - \frac{i}{\tau})} \right]. \quad (6.13)$$

Ahora, analizando la segunda integral a desarrollar:

$$P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{C_1(1 - \omega'^2\tau^2)}{\omega'(\omega' - \omega)(1 + i\omega\tau)^2(1 - i\omega\tau)^2} d\omega'. \quad (6.14)$$

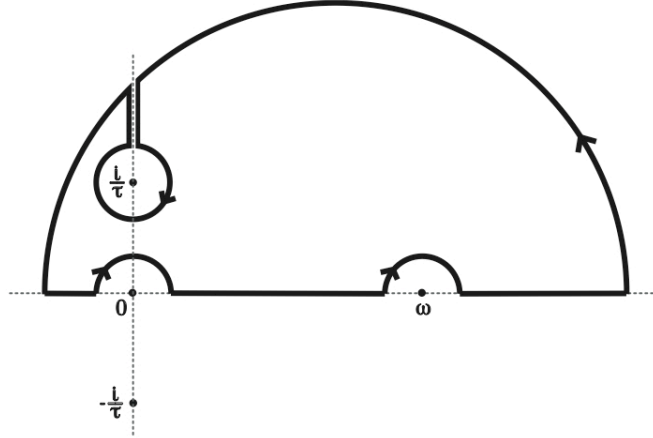


Figura 6.1: Trayectoria infinita, $R \rightarrow \infty$, por donde se integrará, permite saltar las indeterminaciones, aplicar el Teorema de Cauchy y el Teorema del Residuo. El polo $-\frac{i}{\tau}$, por encontrarse en el semi-plano inferior, no contribuye a la integral.

Encontramos igualmente una función racional, de la forma $\frac{g(\omega')}{h(\omega')}$, con un polo de segundo orden en el denominador. Igualmente se observa que cumple con que $g(\omega') \neq 0$, $h(\omega') = 0 = h'(\omega')$, y con que $h''(\omega') \neq 0$. De acuerdo con éstas condiciones y con las tablas para residuos [16], la fórmula para calcular residuos de polos de segundo orden que utilizaremos es:

$$residuo = 2 \frac{g'(\omega')}{h''(\omega')} - \frac{2}{3} \frac{g(\omega')h'''(\omega')}{[h''(\omega')]^2}. \quad (6.15)$$

Se presentan a continuación, los polos encontrados y sus respectivos residuos:

polos	residuos
$\omega' = 0$	$-\frac{C_1}{\omega}$
$\omega' = \omega$	$\frac{C_1(1-\omega^2\tau^2)}{\omega(1+\omega^2\tau^2)^2}$
$\omega' = \frac{i}{\tau}$	$-\frac{iC_1\tau}{2(1+i\omega\tau)} \left[1 - \frac{3+i2\omega\tau}{(1+i\omega\tau)} \right]$
$\omega' = -\frac{i}{\tau}$	No contribuye a la integral.

Una vez teniendo los residuos, y teniendo en cuenta que los polos $\omega' = 0$ y $\omega' = \omega$ se encuentran sobre el eje horizontal del plano complejo; y que el polo $\omega' = \frac{i}{\tau}$ se encuentra en el semi-plano superior, se puede aplicar el Teorema del Residuo, para resolver la segunda integral se tiene así:

$$P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{C_1(1-\omega'^2\tau^2)}{\omega'(\omega'-\omega)(1+i\omega\tau)^2(1-i\omega\tau)^2} d\omega' = \quad (6.16)$$

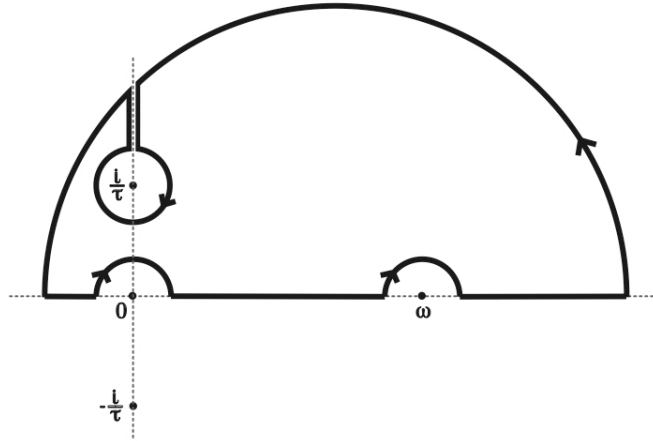


Figura 6.2: Trayectoria infinita por donde se integrará, permite saltar las indeterminaciones o los polos, aplicar el Teorema de Cauchy y el Teorema del Residuo. El polo $-\frac{i}{\tau}$, por encontrarse en el semi-plano inferior, tampoco contribuye al residuo total.

$$\left[-\frac{iC_1\pi}{\omega} + \frac{iC_1\pi(1-\omega^2\tau^2)}{\omega(1+\omega^2\tau^2)^2} + \frac{\pi C_1\tau}{(1+i\omega\tau)} \left[1 - \frac{3+i2\omega\tau}{(1+i\omega\tau)} \right] \right].$$

Ya resueltas las dos integrales por separado, tenemos lo necesario para determinar el valor de la integral original, para finalmente obtener la parte real de la función dieléctrica, en el modelo de Drude-Smith:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = \tag{6.17}$$

$$1 + \frac{\sigma_0}{\pi} \left[-\frac{i\pi}{\omega} + \frac{i\pi}{\omega(1+\omega^2\tau^2)} + \frac{i\pi}{(\omega - \frac{i}{\tau})} - \frac{i\pi C_1}{\omega} + \frac{i\pi C_1(1-\omega^2\tau^2)}{\omega(1+\omega^2\tau^2)^2} + \frac{\pi\tau C_1}{(1+i\omega\tau)} \left(1 - \frac{3+i2\omega\tau}{(1+i\omega\tau)} \right) \right],$$

que puede reescribirse como:

$$= 1 + \sigma_0 \left[-\frac{i\omega\tau^2}{(1+\omega^2\tau^2)} + \frac{i\tau}{(\omega\tau - i)} - \frac{iC_1\tau(3\omega\tau + \omega^3\tau^3)}{(1+\omega^2\tau^2)^2} + \frac{\tau C_1}{(1+i\omega\tau)} \left(1 - \frac{3+i2\omega\tau}{(1+i\omega\tau)} \right) \right]. \tag{6.18}$$

Sumando los dos primeros términos entre corchetes, desarrollando el último, y factorizando τ , se obtiene:

$$= 1 + \sigma_0\tau \left[\frac{i - \omega\tau}{(1+\omega^2\tau^2)(\omega\tau - i)} - \frac{iC_1(3\omega\tau + \omega^3\tau^3)}{(1+\omega^2\tau^2)^2} - \frac{C_1(2+i\omega\tau)}{(1+i\omega\tau)^2} \right]. \tag{6.19}$$

Ahora se factoriza $-\frac{1}{(1+\omega^2\tau^2)}$, resulta:

$$= 1 - \frac{\sigma_0\tau}{(1 + \omega^2\tau^2)} \left[-\frac{i - \omega\tau}{(\omega\tau - i)} + \frac{iC_1(3\omega\tau + \omega^3\tau^3)}{(1 + \omega^2\tau^2)} + \frac{C_1(2 + i\omega\tau)(1 - i\omega\tau)}{(1 + i\omega\tau)} \right]. \quad (6.20)$$

Sumando los términos que acompañan al coeficiente C_1 se obtiene:

$$= 1 - \frac{\sigma_0\tau}{(1 + \omega^2\tau^2)} \left[\frac{-i + \omega\tau}{(\omega\tau - i)} + \frac{iC_1(3\omega\tau + \omega^3\tau^3) + C_1(2 + i\omega\tau)(1 - i\omega\tau)(1 - i\omega\tau)}{(1 + \omega^2\tau^2)} \right]. \quad (6.21)$$

Ahora, sólo es cuestión de hacer un poco de álgebra para así obtener satisfactoriamente, la parte real de la función dieléctrica para Drude-Smith:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\sigma_0\tau}{(1 + \omega^2\tau^2)} \left[1 + \frac{2C_1}{(1 + \omega^2\tau^2)} \right], \quad (6.22)$$

que coincide con lo esperado.

6.2. CÁLCULO DE LA PARTE IMAGINARIA DE LA FUNCIÓN DIELECTRICA A PARTIR DE LA PARTE REAL.

Debemos de recorrer el camino inverso para terminar de comprobar que el modelo de Drude-Smith cumple con la relaciones de Kramers-Krönig, en ésta ocasión utilizaremos la otra relación de Kramers-Krönig, la que sirve para obtener la parte imaginaria a partir de la parte real de la función de respuesta.

De la misma manera como ocurrió cuando se aplicó ésta relación a Drude, aquí también será necesario añadir un término extra para obtener la parte imaginaria correctamente, éste término será la conductividad de Drude-Smith de corriente directa, es decir la conductividad a frecuencia cero del modelo correspondiente.

De la misma manera que hemos hecho, escribiremos la parte real de la función dieléctrica para Drude-Smith:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\sigma_0\tau}{(1 + \omega^2\tau^2)} \left[1 + \frac{2C_1}{(1 + \omega^2\tau^2)} \right]. \quad (6.23)$$

Considerando el término extra (la conductividad de corriente directa para Drude-Smith), la relación de Kramers-Krönig que utilizaremos es la siguiente:

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_{0D-S}(0)}{\omega} - \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\epsilon_1(\omega')}{\epsilon_0} - 1}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (6.24)$$

Ahora se sustituye la conductividad de Drude-Smith para corriente directa, $\sigma_{0D-S}(0)$, la cual se obtiene considerando que la frecuencia es cero en la función de conductividad general para el modelo de Drude-Smith. La relación de Kramers-Krönig queda así:

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0(1 + C_1)}{\omega} + \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\epsilon_1(\omega')}{\epsilon_0} - 1}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (6.25)$$

Si se sustituye la parte real de la función dieléctrica, en la relación de Kramers-Krönig, obteniendo:

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0}{\omega} + \frac{\sigma_0 C_1}{\omega} - \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-\frac{\sigma_0 \tau}{(1 + \omega'^2 \tau^2)} \left[1 + \frac{2C_1}{(1 + \omega'^2 \tau^2)} \right]}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (6.26)$$

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0}{\omega} + \frac{\sigma_0 C_1}{\omega} - \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\left[-\frac{\sigma_0 \tau}{(1 + \omega'^2 \tau^2)} - \frac{2\sigma_0 \tau C_1}{(1 + \omega'^2 \tau^2)^2} \right]}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (6.27)$$

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0}{\omega} + \frac{\sigma_0 C_1}{\omega} + \frac{\sigma_0 \tau}{\pi} \left[P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{(\omega' - \omega)(1 + \omega'^2 \tau^2)} + P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2C_1 d\omega'}{(\omega' - \omega)(1 + \omega'^2 \tau^2)^2} \right]. \quad (6.28)$$

Es necesario evaluar dos integrales, y la primera de ellas es:

$$P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{(\omega' - \omega)(1 + i\omega'\tau)(1 - i\omega'\tau)}. \quad (6.29)$$

Observamos que involucra a una función racional de la forma $\frac{g(\omega')}{h(\omega')}$, en donde $g(\omega') = 1$ y $h(\omega') = (\omega' - \omega)(1 + i\omega'\tau)(1 - i\omega'\tau)$. Que presenta polos simples en $\omega' = \omega$ y en $\omega' = \frac{i}{\tau}$. También cumple con que $g(\omega' = \omega = \frac{i}{\tau}) \neq 0$, y $h(\omega' = \omega = \frac{i}{\tau}) = 0$, y $h'(\omega' = \omega = \frac{i}{\tau}) \neq 0$. De acuerdo con tablas, el residuo para estos polos puede calcularse con la siguiente fórmula [16]:

$$\frac{g(\omega')}{h'(\omega')} = \frac{1}{h'(\omega')}. \quad (6.30)$$

En donde, $h'(\omega') = 1 + 3\omega'^2 \tau^2 - 2\omega\omega' \tau^2$. Los residuos son:

polos	residuos
$\omega' = \omega$	$\frac{1}{(1 + \omega^2 \tau^2)}$
$\omega' = \frac{i}{\tau}$	$-\frac{1}{2(1 + i\omega\tau)}$
$\omega' = -\frac{i}{\tau}$	No contribuye a la integral.

Multiplicamos por $i\pi$ a los residuos de polos en el eje real complejo, y por $2i\pi$ a los residuos de polos en el eje imaginario, hecho esto podemos resolver la primera ecuación:

$$P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{(\omega' - \omega)(1 + i\omega'\tau)(1 - i\omega'\tau)} = \left[\frac{i\pi}{(1 + \omega^2 \tau^2)} - \frac{2\pi i}{2(1 + i\omega\tau)} \right]. \quad (6.31)$$

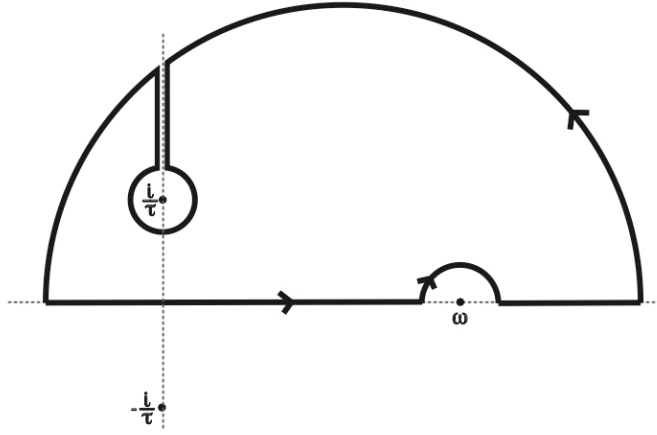


Figura 6.3: Trayectoria integral infinita, el polo $-i/\tau$ no contribuye al residuo ya que se encuentra en el semi-plano inferior complejo.

Ahora, consideremos la segunda integral para proceder a resolverla:

$$P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2C_1 d\omega'}{(\omega' - \omega)(1 + \omega'^2 \tau^2)^2}. \quad (6.32)$$

Se trata de un integrando racional de la forma $\frac{g(\omega')}{h(\omega')}$, en donde $g(\omega') = 2C_1$ y $h(\omega') = (\omega' - \omega)(1 + i\omega\tau)^2(1 - i\omega\tau)^2$. A continuación revisaremos las derivadas de las funciones $g(\omega')$ y $h(\omega')$ y las evaluaremos en los polos de la función ($\omega' = \omega$ y $\omega' = \frac{i}{\tau}$), para saber que tipo de fórmula utilizaremos para calcular los residuos.

Las derivadas son:

$$g'(\omega') = 0,$$

$$h'(\omega') = 1 + 6\omega'^2\tau^2 + 5\omega'^4\tau^4 - 4\omega'\tau^2\omega - 4\omega'^3\tau^4\omega.$$

Ahora evaluamos la derivada $h'(\omega')$, en los polos:

$$h'(\omega' = \omega) = (1 + \omega^2\tau^2)^2,$$

$$h'(\omega' = \frac{i}{\tau}) = 1 - 6 + 5 - i4\omega\tau + i4\omega\tau = 0.$$

Observamos que la derivada $h'(\omega')$, en $\omega' = \omega$ es diferente de cero, mientras que en $\omega' = \frac{i}{\tau}$ es cero. Esto significa que para el polo $\omega' = \omega$ la fórmula del residuo es [16]:

$$residuo = \frac{g(\omega')}{h'(\omega')}. \quad (6.33)$$

También esto significa que para el polo $\omega' = \frac{i}{\tau}$, debemos de calcular las segunda y tercera derivada de h , así como utilizar la siguiente fórmula para calcular el residuo [16]:

$$residuo = 2 \frac{g'(\omega')}{h''(\omega')} - \frac{2}{3} \frac{g(\omega')h'''(\omega')}{[h''(\omega')]^2}. \quad (6.34)$$

Continuamos con la segunda y tercera derivada de h :

$$h''(\omega') = 12\omega'\tau^2 + 20\omega'^3\tau^4 - 4\omega\tau^2 - 12\omega'^2\tau^4\omega,$$

$$h'''(\omega') = 12\tau^2 + 60\omega'^2\tau^4 - 24\omega'\tau^4\omega,$$

Ahora que tenemos todas la derivadas podemos calcular los residuos para cada polo:

polos	residuos
$\omega' = \omega$	$\frac{2C_1}{(1+\omega^2\tau^2)^2}$
$\omega' = \frac{i}{\tau}$	$\frac{C_1(2+i\omega\tau)}{2(-i+\omega\tau)^2}$
$\omega' = -\frac{i}{\tau}$	No contribuye a la integral.

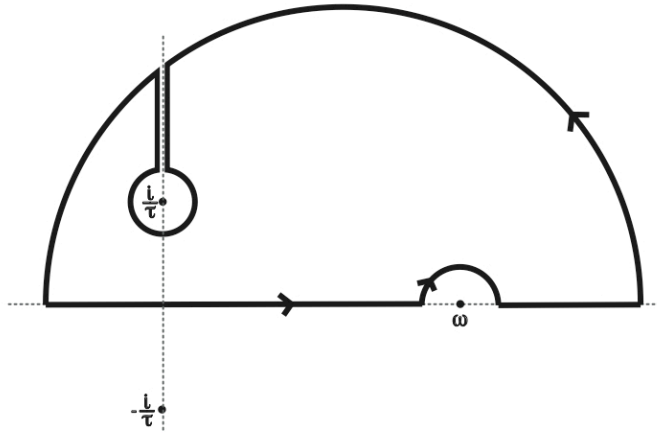


Figura 6.4: Trayectoria integral de Cauchy, infinita ya que $R \rightarrow \infty$.

Una vez obtenidos los residuos para cada polo, y considerando si fueron rodeados por medio de un semi-círculo o un círculo entero, podemos resolver la segunda integral:

$$P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2C_1 d\omega'}{(\omega' - \omega)(1 + \omega'^2 \tau^2)^2} = \left[\frac{2\pi i C_1}{(1 + \omega^2 \tau^2)^2} - \frac{\pi i C_1 (2 + i\omega\tau)}{(1 + i\omega\tau)^2} \right]. \quad (6.35)$$

Juntando estos dos últimos resultados, podemos obtener la integral deseada, es decir, encontrar la parte imaginaria de la función dieléctrica:

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0}{\omega} + \frac{\sigma_0 C_1}{\omega} + \frac{\sigma_0 \tau}{\pi} \left[P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{(\omega' - \omega)(1 + \omega'^2 \tau^2)} + P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2C_1 d\omega'}{(\omega' - \omega)(1 + \omega'^2 \tau^2)^2} \right]. \quad (6.36)$$

Gracias a estos teoremas (Cauchy, del residuo y valor principal), simplemente sustituimos, los resultados obtenidos para cada integral, lo que resulta:

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} &= \frac{\sigma_0}{\omega} + \frac{\sigma_0 C_1}{\omega} + \frac{\sigma_0 \tau}{\pi} \left[\frac{i\pi}{(1 + \omega^2 \tau^2)} - \frac{\pi i}{(1 + i\omega\tau)} + \frac{2\pi i C_1}{(1 + \omega^2 \tau^2)^2} - \frac{\pi i C_1 (2 + i\omega\tau)}{(1 + i\omega\tau)^2} \right], \\ &= \sigma_0 \tau \left[\frac{1}{\omega\tau} + \frac{C_1}{\omega\tau} + \frac{i}{(1 + \omega^2 \tau^2)} - \frac{i}{(1 + i\omega\tau)} + \frac{2iC_1}{(1 + \omega^2 \tau^2)^2} - \frac{iC_1(2 + i\omega\tau)}{(1 + i\omega\tau)^2} \right], \\ &= \sigma_0 \tau \left[\frac{1}{\omega\tau} + \frac{C_1}{\omega\tau} - \frac{\omega\tau}{(1 + \omega^2 \tau^2)} - \frac{3C_1 \omega\tau + C_1 \omega^3 \tau^3}{(1 + \omega^2 \tau^2)^2} \right], \\ &= \sigma_0 \left[\frac{1}{\omega(1 + \omega^2 \tau^2)} + \frac{C_1 - C_1 \omega^2 \tau^2}{\omega(1 + \omega^2 \tau^2)^2} \right], \\ &= \frac{\sigma_0}{\omega(1 + \omega^2 \tau^2)} \left[1 + \frac{C_1 - C_1 \omega^2 \tau^2}{(1 + \omega^2 \tau^2)} \right], \\ \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} &= \frac{\sigma_0}{\omega(1 + \omega^2 \tau^2)} \left[1 + \frac{C_1(1 - \omega^2 \tau^2)}{(1 + \omega^2 \tau^2)} \right]. \end{aligned} \quad (6.38)$$

Al obtener ésta ecuación se está demostrando que el modelo de Drude-Smith cumple con las relaciones de Kramers-Krönig, truncando la serie hasta $C_n = 1$, término que basta considerar para que la generalización de Smith se apegue a los resultados experimentales encontrados hasta ahora.

6.3. RELACIONES DE KRAMERS-KRÖNIG PARA $n=2$.

Para finalizar ésta sección revisaremos las relaciones de Kramers-Krönig para el siguiente término en la serie del modelo de Drude-Smith, C_2 . Como ya hemos comprobado éstas relaciones para el caso "0" (Drude) y para C_1 , sólo trabajaremos con el último término de la función dieléctrica, esto es:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{i\sigma_0}{\omega(1-i\omega\tau)} + \frac{i\sigma_0 C_1}{\omega(1-i\omega\tau)^2} + \frac{i\sigma_0 C_2}{\omega(1-i\omega\tau)^3}. \quad (6.39)$$

Quedándonos sólo con el término que acompaña a C_2 , tenemos:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{i\sigma_0 C_2}{\omega(1-i\omega\tau)^3}. \quad (6.40)$$

Separamos las partes real e imaginaria:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0 C_2 (\omega^2 \tau^3 - 3\tau)}{(1 + \omega^2 \tau^2)^3}, \quad (6.41)$$

y

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0 C_2 (1 - 3\omega^2 \tau^2)}{\omega(1 + \omega^2 \tau^2)^3}. \quad (6.42)$$

Así tenemos lo necesario para empezar la demostración.

6.3.1. CÁLCULO DE LA PARTE REAL DE LA FUNCIÓN DILÉCTRICA A PARTIR DE LA PARTE IMAGINARIA.

Trataremos de encontrar la parte real a partir de la imaginaria, la relación de Kramers-Krönig que utilizaremos es la siguiente:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\epsilon_2(\omega')}{\epsilon_0}}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (6.43)$$

Ahora se sustituye la la parte imaginaria:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\sigma_0 C_2 (1 - 3\omega'^2 \tau^2)}{\omega' (1 + \omega'^2 \tau^2)^3}}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (6.44)$$

Por medio de un poco de álgebra, encontramos los polos de la función a integrar:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sigma_0 C_2 (1 - 3\omega'^2 \tau^2)}{\omega' (1 + \omega'^2 \tau^2)^3 (\omega' - \omega)} d\omega', \quad (6.45)$$

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sigma_0 C_2 (1 - 3\omega'^2 \tau^2)}{\omega' (\omega' - \omega) (1 + i\omega' \tau)^3 (1 - i\omega' \tau)^3} d\omega'. \quad (6.46)$$

Observamos que hay polos en $\omega' = 0$ en $\omega' = \omega$ y en $\omega' = \frac{i}{\tau}$, para calcular los residuos en este caso se utilizó el programa Mathematica (el código se puede revisar en el *Apéndice A.*), y se obtuvo:

polos	residuos
$\omega' = 0$	$-\frac{\sigma_0 C_2}{\omega}$
$\omega' = \omega$	$\frac{\sigma_0 C_2 (1 - 3\omega^2 \tau^2)}{\omega (1 + \omega^2 \tau^2)^3}$
$\omega' = \frac{i}{\tau}$	$\frac{\sigma_0 C_2 (-3\tau - 3i\omega\tau^2 + \omega^2 \tau^3)}{2(-i + \omega\tau)}$

Una vez conociendo los residuos, podemos resolver la integral deseada:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{1}{\pi} \left[-\frac{i\pi\sigma_0 C_2}{\omega} + \frac{i\pi\sigma_0 C_2 (1 - 3\omega^2 \tau^2)}{\omega (1 + \omega^2 \tau^2)^3} + \frac{i\pi\sigma_0 C_2 (-3\tau - 3i\omega\tau^2 + \omega^2 \tau^3)}{(-i + \omega\tau)} \right] \quad (6.47)$$

Con un poco más de álgebra se obtiene:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0 C_2 (\omega^2 \tau^3 - 3\tau)}{(1 + \omega^2 \tau^2)^3}. \quad (6.48)$$

Que coincide con la ecuación (6.41), por lo que se ha comprobado que se satisface la primera relación de Kramers-Krönig, para $n = 2$, en el modelo de Drude-Smith.

6.3.2. CÁLCULO DE LA PARTE IMAGINARIA DE LA FUNCIÓN DIELECTRICA A PARTIR DE LA REAL.

Para continuar con el caso opuesto, escribimos primero la relación de Kramers-Krönig correspondiente:

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_{0D-S}(0)}{\omega} - \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\epsilon_1(\omega')}{\epsilon_0}}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (6.49)$$

Y se sustituye el valor de la conductividad para corriente directa, $\sigma_{0D-S}(0)$, para el caso de $n = 2$, también se sustituye el la parte real de la función dieléctrica, esto es:

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0 C_2}{\omega} - \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\sigma_0 C_2 (\omega'^2 \tau^3 - 3\tau)}{(1 + \omega'^2 \tau^2)^3}}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (6.50)$$

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0 C_2}{\omega} - \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sigma_0 C_2 (\omega'^2 \tau^3 - 3\tau)}{(\omega' - \omega) (1 + \omega'^2 \tau^2)^3} d\omega', \quad (6.51)$$

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0 C_2}{\omega} - \frac{\sigma_0 C_2}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\omega'^2 \tau^3 - 3\tau)}{(\omega' - \omega) (1 + i\omega'\tau)^3 (1 - i\omega'\tau)^3} d\omega'. \quad (6.52)$$

Para resolver la integral, observamos que la función presenta dos polos, uno simple en $\omega' = \omega$ y otro de orden 3 en $\omega' = \frac{i}{\tau}$. Para calcular los residuos se utilizó nuevamente el programa Mathematica (*Apéndice A.*), y se obtuvo:

polos	residuos
$\omega' = \omega$	$\frac{(\omega^2\tau^3 - 3\tau)}{(1 + \omega^2\tau^2)^3}$
$\omega' = \frac{i}{\tau}$	$-\frac{i(\omega^2\tau^3 - i3\omega\tau^2 - 3\tau)}{2(\omega\tau - i)^3}$

Una vez obtenidos los residuos, resolvemos la integral deseada:

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0 C_2}{\omega} - \frac{\sigma_0 C_2}{\pi} \left[\frac{i\pi(\omega^2\tau^3 - 3\tau)}{(1 + \omega^2\tau^2)^3} - \frac{-\pi(\omega^2\tau^3 - i3\omega\tau^2 - 3\tau)}{(\omega\tau - i)^3} \right], \quad (6.53)$$

haciendo un poco de álgebra:

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0 C_2}{\omega} - \frac{\sigma_0 C_2 \omega \tau^2 (6 + 3\omega^2 \tau^2 + \omega^4 \tau^4)}{(1 + \omega^2 \tau^2)^3}, \quad (6.54)$$

y finalmente se obtiene:

$$\frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0 C_2 (1 - 3\omega^2 \tau^2)}{\omega (1 + \omega^2 \tau^2)^3}, \quad (6.55)$$

Que coincide con la ecuación (6.42), con lo que se concluye que las relaciones de Kramers-Krönig son satisfechas por el modelo de Drude-Smith, también en el caso del término $n = 2$.

CAPÍTULO 7

EXPLORANDO UNA POSIBLE DEMOSTRACIÓN DE LAS RELACIONES DE KRAMERS-KRÖNIG PARA LA SERIE COMPLETA DEL MODELO DE DRUDE-SMITH, EL CASO n .

En las secciones anteriores se han verificado las relaciones de Kramers-Krönig, tanto para el caso del modelo de Drude (abusando de la notación se le puede considerar el caso cero), como para dos casos del modelo Drude-Smith, $n = 1$ y $n = 2$. Se truncó la serie del modelo de Drude-Smith ya que basta considerar su primer término para describir el comportamiento de fenómenos ocurridos en películas delgadas y en transiciones críticas, como la de percolación. Puede ser probable que se encuentren en el futuro algunos otros fenómenos que requieran considerar más coeficientes dentro de la serie del modelo de Drude-Smith para ser descritos, pero no ha ocurrido. Para estos nuevos casos sería un procedimiento un poco más largo, pero igual al caso de C_1 y C_2 , el verificar las relaciones de Kramers-Krönig, ya que el valor de n sería conocido y finito. Estrategias matemáticas diferentes serán necesarias para verificarlas en el caso general, con la serie completa.

En ésta sección se abordará un método para verificar que el modelo de Drude-Smith general cumple con la relaciones de Kramers-Krönig, aplicándolas al último término, el C_n , de la función dieléctrica $\hat{\epsilon}(\omega)$.

La función dieléctrica resultante de Drude-Smith, que observamos abajo, es una serie cuyos coeficientes C_n representan la porción de la velocidad original del electrón que persiste a la n -ésima colisión, un efecto de memoria ó persistencia de la velocidad. Para comenzar con la verificación, se separará el último término de la serie el C_n , para posteriormente separarlo en sus partes reales e imaginarias:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{i\sigma_0}{\omega(1 - i\omega\tau)} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C_n}{(1 - i\omega\tau)^n} \right], \quad (7.1)$$

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)}{\epsilon_0} = 1 + \frac{i\sigma_0}{\omega(1 - i\omega\tau)} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{i\sigma_0 C_n}{\omega(1 - i\omega\tau)^{n+1}}. \quad (7.2)$$

El método será aplicar las relaciones de Kramers-Krönig entre las partes real e imaginaria del último término, C_n , de $\hat{\epsilon}(\omega)$. Una primera diferencia será que en C_n éstas partes real e

imaginaria serán nuevamente una serie infinita.

Empecemos apartando el n -ésimo término de $\hat{\epsilon}(\omega)$, ecuación (7.2):

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)_n}{\epsilon_0} = \frac{i\sigma_0 C_n}{\omega(1 - i\omega\tau)^{n+1}}. \quad (7.3)$$

Ahora separamos la ecuación anterior (7.3), en sus partes real e imaginaria:

$$\begin{aligned} \frac{\hat{\epsilon}(\omega)_n}{\epsilon_0} &= \frac{i\sigma_0 C_n}{\omega(1 - i\omega\tau)^{n+1}} \frac{(1 + i\omega\tau)^{n+1}}{(1 + i\omega\tau)^{n+1}}, \\ &= \frac{i\sigma_0 C_n (1 + i\omega\tau)^{n+1}}{\omega(1 + \omega^2\tau^2)^{n+1}}. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Utilizando el Teorema del Binomio de Newton y el Coeficiente Binomial, tenemos que:

$$\begin{aligned} (1 + i\omega\tau)^{n+1} &= \sum_{m=0}^{n+1} \frac{(n+1)!}{m!(n+1-m)!} (i\omega\tau)^m, \\ &= \sum_{m=0}^{n+1} C_m^{n+1} (i\omega\tau)^m. \end{aligned} \quad (7.5)$$

Utilizando estos resultados en la ecuación (7.4), obtenemos:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)_n}{\epsilon_0} = \frac{i\sigma_0 C_n}{\omega(1 + \omega^2\tau^2)^{n+1}} \sum_{m=0}^{n+1} C_m^{n+1} (i\omega\tau)^m, \quad (7.6)$$

$$= \frac{\sigma_0 C_n}{\omega(1 + \omega^2\tau^2)^{n+1}} \sum_{m=0}^{n+1} C_m^{n+1} i^{m+1} (\omega\tau)^m. \quad (7.7)$$

De acuerdo con la fórmula de Euler, y aprovechando el plano complejo tenemos que: $i^{m+1} = e^{i\frac{\pi}{2}(m+1)}$, esto nos ayudará a reescribir (7.7) de tal forma que podamos separar la parte real de la imaginaria:

$$\frac{\hat{\epsilon}(\omega)_n}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0 C_n}{\omega(1 + \omega^2\tau^2)^{n+1}} \sum_{m=0}^{n+1} C_m^{n+1} (\omega\tau)^m \left[\cos\left(\frac{\pi}{2}(m+1)\right) + i \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{2}(m+1)\right) \right]. \quad (7.8)$$

Escrita en ésta forma, es ahora posible separar las partes real e imaginaria, del n -ésimo término de la función dieléctrica del modelo de Drude-Smith:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)_n}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0 C_n}{\omega(1 + \omega^2\tau^2)^{n+1}} [C_1^{n+1}(\omega\tau) + C_3^{n+1}(\omega\tau)^3 + C_4^{n+1}(\omega\tau)^5 + \dots], \quad (7.9)$$

$$\frac{\epsilon_2(\omega)_n}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0 C_n}{\omega(1 + \omega^2 \tau^2)^{n+1}} [C_0^{n+1} + C_2^{n+1}(\omega\tau)^2 + C_4^{n+1}(\omega\tau)^4 + \dots]. \quad (7.10)$$

Como se puede observar, el n -ésimo término de la función dieléctrica es, otra vez, una serie infinita. Una manera de demostrar las relaciones de Kramers-Krönig sería ir aplicando éstas relaciones a los primeros términos de las series, y tratar de identificar algún patrón que permita deducir el caso "n". Por ésta razón, separamos a continuación los primeros términos dentro de las series:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)_{n1}}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0 C_n (n+1)\tau}{(1 + \omega^2 \tau^2)^{n+1}}, \quad (7.11)$$

$$\frac{\epsilon_2(\omega)_{n1}}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_0 C_n}{\omega(1 + \omega^2 \tau^2)^{n+1}}. \quad (7.12)$$

Ahora se planteará la integral resultado de aplicar las relaciones de Kramers-Krönig a estos dos últimos términos, queriendo obtener la parte real a partir de la imaginaria, esto es:

$$\frac{\epsilon_1(\omega)_{n1}}{\epsilon_0} = 1 + \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\sigma_0 C_n}{\omega'(1 + \omega'^2 \tau^2)^{n+1}}}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (7.13)$$

$$\frac{\epsilon_1(\omega)_{n1}}{\epsilon_0} = 1 + \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sigma_0 C_n}{\omega'(\omega' - \omega)(1 + \omega'^2 \tau^2)^{n+1}} d\omega'.$$

$$\frac{\epsilon_1(\omega)_{n1}}{\epsilon_0} = 1 + \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sigma_0 C_n}{\omega'(\omega' - \omega)(1 + i\omega'\tau)^{n+1}(1 - i\omega'\tau)^{n+1}} d\omega'.$$

Para resolver ésta integral, debemos tomar en cuenta que la función cuenta con tres polos en el denominador, dos simples y uno de grado $n + 1$:

polos	residuos
$\omega' = 0$	$-\frac{\sigma_0 C_n}{\omega}$
$\omega' = \omega$	$\frac{\sigma_0 C_n}{\omega(1 + \omega^2 \tau^2)^{n+1}}$

Para el polo de orden $n + 1$ las cosas son muy diferentes ya que para obtener su residuo serán necesarias técnicas matemáticas diferentes a las utilizadas. A continuación se planteará el procedimiento que tendría que ser completado para obtener dicho residuo de acuerdo con las tablas ordinarias en la literatura, [16]. Sea $f(z)$ la función de la cual queremos obtener el residuo y sea:

$$\varphi(z) = (z - z_0)^k f(z). \quad (7.14)$$

El residuo del polo de orden k se calcularía con la siguiente relación:

$$residuo = \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{\varphi^{(k-1)}(z)}{(k-1)!}. \quad (7.15)$$

Adaptando estos resultados a nuestro caso (grado $n + 1$), tendríamos lo siguiente:

$$\varphi(\omega') = (\omega' - \omega_0)^{n+1} \frac{\sigma_0 C_n}{\omega'(\omega' - \omega)(1 + i\omega'\tau)^{n+1}(1 - i\omega'\tau)^{n+1}}. \quad (7.16)$$

Para calcular el residuo tendríamos que obtener la $n + 1$ -derivada de $\varphi(\omega')$, lo cual es un problema bastante laborioso y nada trivial, incluso para una computadora. Ésta derivada tan complicada nos podría estar indicando que este no es el camino correcto para obtener el residuo. Sin embargo, existen otros posibles caminos para obtener este residuo, como la técnica de fracciones parciales y serie de Laurant, que de cualquier manera se sale de los tiempos y de los objetivos en este trabajo, dejando esta exploración como un avance dentro de este problema matemático.

También es claro porque se acostumbra truncar las serie de Drude-Smith, (aparte de por los hechos experimentales), ya que el grado matemático de los problemas involucrados se agranda mientras se consideren más y más términos.

CONCLUSIONES.

La espectroscopía óptica ha sido durante mucho tiempo una de las técnicas fundamentales en la investigación de materiales, gracias a su carácter no destructivo y por el equipo experimental requerido, comercialmente accesible.

Existe una creciente demanda en estimar el espectro óptico lineal y no-lineal de materiales tanto en bulto como en películas delgadas, se utiliza e inventa para ello novedosos dispositivos optoelectrónicos tanto detectores como fuentes de luz, en las áreas de ciencia, ingeniería, industria y medicina.

Muchas veces no es posible obtener de manera experimental todas las propiedades ópticas de alguna muestra investigada. Afortunadamente, el que se requiera causalidad espaciotemporal en la respuesta óptica de cualquier medio implica funciones óptica lineales con propiedades generales (linealidad, causalidad y estacionariedad) que pueden ser explotadas para obtener la mayor cantidad de información sobre propiedades ópticas del medio a partir de los datos experimentales accesibles ó obtenidos.

Las relaciones de Kramers-Krönig y las reglas de suma constituyen una herramienta teórica fundamental de validez general que nos permiten ensanchar nuestro conocimiento de fenómenos ópticos lineales. Estas relaciones describen la conexión fundamental entre la parte real y la imaginaria de funciones ópticas complejas lineales características de la interacción radiación-materia, como la susceptibilidad, la función dieléctrica, el índice de refracción y reflectividad. La parte real y la imaginaria están conectadas por una forma especial de las transformadas de Hilbert, las relaciones de Kramers-Krönig.

Las relaciones de Kramers-Krönig resumen propiedades muy generales que cumplen muchos sistemas que estudia la ciencia aunque existen fenómenos fuera de ellas, como la óptica no-lineal, aunque para estos casos se extrapola el mismo concepto a dichos ordenes. Son de mucha importancia ya que son consecuencia de la causalidad y la disipación, son generales e independientes de la complejidad de la dinámica del sistema estudiado. En el ámbito experimental son de mucha ayuda ya que a partir de la parte imaginaria de la respuesta se puede obtener la real, reduciendo el trabajo a la mitad y permite tener acceso a la parte disipativa de la respuesta a partir de la absorción y viceversa.

Durante el trabajo se abordaron varios modelos en los que se describe la interacción entre los materiales y la luz, en todos ellos se considera a los electrones del material como resortes, libres como en un gas (modelo para un plasma), libres con disipación (modelo de Drude), y, amortiguados con disipación (modelo de Lorentz). El modelo de Lorentz se utiliza para materiales dieléctricos mientras que el de Drude para metales, y para la época en que se

desarrollaron fueron geniales ya no se tenía una noción de lo que era el átomo.

De acuerdo a fenómenos encontrados en películas delgadas de oro y en mercurio líquido que se salían de la predicción del modelo de Drude, se tuvo que buscar un nuevo modelo para los metales, el de Drude-Smith. El modelo de Drude-Smith agregó la posibilidad de que los electrones recorran una trayectoria compleja entre los choques que van experimentando dentro de la nube electrónica del metal, con un factor C_n , que dice la cantidad promedio de ellos que mantendrá su velocidad original después de n choques.

La función dieléctrica del modelo de Drude-Smith es una serie infinita, cuyo término cero es el modelo de Drude, posteriormente viene una serie infinita de términos acompañados de los coeficientes que van desde C_1 hasta C_n . La clave al aplicar este modelo consiste en truncar la serie y sólo considerar hasta el término con coeficiente C_1 , esto basta para describir con precisión todos los experimentos hechos hasta la actualidad, como los encontrados en películas delgadas de oro y en mercurio líquido que salen de la explicación del modelo de Drude usual. Considerando esto se comprobó que el modelo de Drude-Smith cumple con las relaciones de Kramers-Krönig, para $n = 1$ y para $n = 2$.

Al aplicar las relaciones de Kramers-Krönig al modelo de Drude se tiene que agregar un término correspondiente a la conductividad a frecuencia cero, para poder llegar a la parte imaginaria de manera correcta. Cuando se aplicaron las relaciones al modelo de Drude-Smith también se tuvo que agregar un término, la conductividad a frecuencia cero, pero ahora correspondiente al modelo de Drude-Smith.

Al comprobar que las relaciones de Kramers-Krönig para la función dieléctrica completa del modelo de Drude-Smith, nos encontramos con una serie cuyos términos cada vez se hacen más grandes, de manera que el n -ésimo término es nuevamente otra serie. Para una demostración general sería necesario transformar dicha serie en algo más manejable, con ayuda por ejemplo de la técnica de fracciones parciales y series de Laurent.

En la parte central de ésta tesis, nos encontramos con integrales de funciones complejas, las cuales fueron resueltas por medio de los resultados y consecuencias del teorema de Cauchy, ideando trayectorias de integración que saltan las indeterminaciones de la función aprovechando regiones donde son holomorfas.

ApéndiceA.

A continuación se presenta el código que se utilizó para calcular los residuos de las integrales en la sección 6.3, el programa utilizado fue Mathematica:

PRIMERA INTEGRAL.

$$f[w] := \frac{\sigma c (1 - 3 w^2 t^2)}{w (w - \omega) (1 + I w t)^3 (1 - I w t)^3}$$

$$\text{In[2]:= Residue}[f[w], \{w, 0\}]$$

$$\text{In[5]:= } -\frac{C \sigma}{\omega}$$

$$\text{Residue}[f[w], \{w, \omega\}]$$

$$-\frac{C \sigma (-1 + 3 t^2 \omega^2)}{\omega (1 + t^2 \omega^2)^3}$$

$$\text{In[7]:= Residue}[f[w], \{w, (I/t)\}]$$

$$\frac{C \sigma (-3 t - 3 I t^2 \omega + t^3 \omega^2)}{2 (-I + t \omega)^3}$$

SEGUNDA INTEGRAL.

$$\text{In[11]:= } k[v] := \frac{\sigma c (v^2 t^3 - 3 t)}{(v - \omega) (1 + I v t)^3 (1 - I v t)^3}$$

$$\text{In[12]:= Residue}[k[v], \{v, \omega\}]$$

$$\frac{-3 C t \sigma + C t^3 \sigma \omega^2}{(1 + t^2 \omega^2)^3}$$

$$\text{In[13]:= Residue}[k[v], \{v, (I/t)\}]$$

$$-\frac{I C \sigma (-3 t - 3 I t^2 \omega + t^3 \omega^2)}{2 (-I + t \omega)^3}$$

BIBLIOGRAFÍA

- [1] W. Greiner, *Classical Electrodynamics*, Springer, (1998).
- [2] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, editado por John Wiley & Sons, (1975).
- [3] George Arfken, *Mathematical Methods for Physics*, editado por Academic Press, (1985).
- [4] Steven K. Lamoreaux, *The Casimir force: background, experiments, and applications*, Rep. Prog. Phys. **68** (2005) 201-236.
- [5] . Elizalde, A. Romeo, *Essentials of the Casimir effect and its computation*, Am. J. Phys. **59** (8), (1991).
- [6] . P. Dowling, *The Mathematics of the Casimir Effect*, Mathematics Magazine, Vol. 62, No.5 (Dec., 1989), pp. 324-331.
- [7] . Reyes-Galindo, J. Bárcenas, R. Esquivel-Sirvent, *A Nonstandar proof of Casimir effect cutoff-independence*, Instituto de Física, UNAM, (2008).
- [8] . L. Mochán, C. Villarreal y R. Esquive-Sirvent, *On Casimir Forces for Media with Arbitrary Dielectric Properties*, Centro de Ciencias Física, UNAM, (2002).
- [9] . L. Klimchitskaya, V. M. Mostepanenko, *Experiment and theory in the Casimir effect*, (2006).
- [10] . Esquivel-Sirvent, *Casimir force calculations near the insulator-conductor transition in gold thin films*, PhysRevA.77.042107, (2008).
- [11] R. W. Christy, *Classical Theory of Optical Dispersion*, Am. J. Phys. **40** (1408), (1972).
- [12] J. D. Felske, *Optical Properties of Dissipative Media* Am. J. Phys. **51** (10), October 1983.
- [13] Angel Alastuey, Marc Magro y Pierre Pujol, *Physique et outils mathématiques*, CNRS Éditions, (2008).
- [14] V. Lucarini, J. J. Saarinen, K. E. Peiponen y E. M. Vartiainen, *Kramers-Kronig Relations in Optical Materials Research*, Springer, (2005).
- [15] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics Eight Edition*, John Wiley & Sons, (2005).
- [16] J. E. Marsden, M. J. Hoffman, *Basic Complex Analysis*, Freeman & Company, (1973).
- [17] en Yu-Kuang Hu, *Kramers-Kronig in two lines*, Am. J. Phys. **57** (9), (1989).

- [18] . L. Klimchitskaya, U. Mohideen, V. M. Mostepanenko, *Kramers-Kronig relations for plasma-like permittivities and the Casimir force*, 05.30.-d, 77.22.Ch, 12.20.Ds, (2007).
- [19] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin *Solid State Physics*
- [20] . Reitz, J. Milford, R. W. Christy, *Fundamentos de la Teoría Electromagnética*, Addison-Wesley Iberoamericana.
- [21] N. V. Smith, *Classical generalization of the Drude formula for the optical conductivity*, PhysRevB.64.155106, (2001).
- [22] H. Ikezi, K. Schwarzenegger, A. L. Passner and S. L. McCall, *Optical properties of expanded fluid mercury*, PhysRevB.18.6.2494, (1978).
- [23] T. Inagaki, E. T. Arakawa and M. W. Williams, *Optical properties of liquid mercury*, PhysRevB.23.10.5246, (1981).
- [24] D. G. Cooke, A. N. MacDonald, A. Hryciw, J. Wang, Q. Li, A. Meldrum and F. A. Hegmann, *Transient terahertz conductivity in photoexcited silicon nanocrystal films*, PhysRevB.73.193311, (2006).
- [25] M. Walther, D. G. Cooke, C. Sherstan, M. Hajar, M. R. Freeman, and F. A. Hegmann, *Terahertz conductivity of thin gold films at the metal-insulator percolation transition*, PhysRevB.76.125408, (2007).