

UNIVERSIDAD DE SONORA

CENTRO DE INVESTIGACION EN FISICA

BIBLIOTECA
C. I. F. - U. S.
UNIVERSIDAD DE SONORA

"EXCITONES-POLARITONES DE SUPERFICIE
EN PRESENCIA DE EFECTOS LINEALES EN
EL VECTOR DE LA ONDA"

TESIS

que para obtener el grado de Maestro en Ciencias
presenta:

Felipe Ramos Mendieta

Hermosillo, Sonora.

Julio de 1988.

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

PARA :

Luz Amanda y Amandita

AGRADECIMIENTOS

Al Profesor *Peter Halevi* por haberme propuesto el tema y por su marcado interés en el desarrollo del presente trabajo.

Al Centro de Investigación en Física de la Universidad de Sonora por su apoyo moral y laboral sin el cual hubiera sido muy difícil la conclusión de esta tesis.

Al Centro de Investigación en Física de la Universidad de Sonora y al Instituto de Ciencias de la Universidad Autónoma de Puebla por los apoyos económicos otorgados al *Proft. Halevi y a mí* para realizar las diferentes visitas recíprocas en las cuales se analizaba el avance de nuestro trabajo.

A los compañeros *Jorge Gaspar y Francisco Espinoza* por su ayuda en la elaboración de los programas de computadora utilizados en esta tesis.

A la *Stita. Irene Tapia* por su trabajo de mecanografiado.

C O N T E N I D O

INTRODUCCION	3
I. TEORIA DE POLARITONES	7
1. Excitones Polaritones	7
2. Polaritones de Volumen	11
3. Polaritones de Superficie	17
4. Excitones-Polaritones de volumen y superficie	
a) Caso Local	18
b) Caso No-Local	23
5. Capa Muerta	30
II. EXCITONES-POLARITONES DE VOLUMEN EN CdS CON EFECTOS LINEALES EN EL VECTOR DE LA ONDA. EXCITON B(n=1).	31
1. Energía del exciton B(n=1) en CdS	32
2. Función Dieléctrica en CdS. Exciton B(n=1)	35
3. Ondas Parciales	38
4. Condiciones Adicionales en la Frontera	40
III. DETECCION OPTICA DE EXCITONES-POLARITONES DE SUPERFICIE	47
1. Reflectividad Total Atenuada (ATR)	47
2. ATR en CdS. Exciton B(n=1)	48
IV. RELACION DE DISPERSION DE EXCITONES-POLARITONES DE SUPERFICIE. EXCITON B(n=1) EN CdS	54
1. Relación de Dispersión	54
2. Ondas Ligadas y Ondas Fugativas	61
3. Algoritmo Matemático para Resolver la Relación de Dispersión	65
V. RESULTADOS NUMERICOS Y CONCLUSION	72
1. Parámetros	72
2. Polaritones Superficiales con Amortiguamiento Espacial	73
3. Polaritones Superficiales con Amortiguamiento Temporal	75
4. Polaritones Superficiales con Frecuencia y Vector de Onda Complejos	78
5. Comparación de las relaciones Óptica y Electromagnética	80
6. Conclusiones	81
FIGURAS	86
TABLAS	109
REFERENCIAS	110
APENDICES	111

INTRODUCCION

En este trabajo se estudian las propiedades de los excitones polaritones de superficie en semiconductores dispersivos espacialmente. En estos materiales diversos autores han estudiado espectros de reflectividad a incidencias normal y oblicua en muestras semiinfinitas, transmitividad a través de películas delgadas y principalmente la relación de dispersión de los polaritones de volumen y de superficie. Nuestra finalidad es calcular la relación de dispersión de cierto tipo de excitones polaritones de superficie en CdS utilizando un modelo no local par la polarización excitónica del material. Un material es dispersivo espacialmente cuando la función dieléctrica que lo representa depende explícitamente del vector de onda \vec{Q} .

La Dispersión Espacial (también llamada no-localidad) introduce nuevas propiedades dieléctricas y ópticas a un semiconductor. La más importante es la predicción de la propagación de varias ondas en el volumen del semiconductor con la misma frecuencia pero con diferentes vectores de onda. Esto significa que al incidir una onda de luz sobre este material la propagación de energía por el medio se realiza por varias ondas parciales y no por una sola como ocurre en la óptica ordinaria. Este fenómeno (ocurrido en la vecindad de la energía de transición excitónica) crea nuevas propiedades a los excitones polaritones de superficie. La más impor-

portante de éstas es la introducción de un nuevo mecanismo de amortiguamiento de la onda superficial. El polaritón superficial ordinario es un modo electromagnético confinado a la superficie y es débilmente amortiguado en la dirección de propagación. La dispersión espacial permite la fuga de energía hacia el interior del material por medio de alguna de las ondas parciales contribuyendo al amortiguamiento de la onda de superficie convirtiéndola en un modo superficial virtual.

La propagación de varias ondas simultáneas en un material no local fué propuesto teóricamente por S.I. Pekar⁽¹⁾ en 1957. Después de ésto, varias técnicas experimentales han sido utilizadas con la finalidad de confirmar la teoría. En particular E.S. Koteles y G. Winterling⁽²⁾ utilizando la técnica de Dispersión Resonante de Brillouin encontraron evidencia directa de la propagación simultánea de tres modos polaritónicos en la vecindad espectral del excitón B(n=1) en CdS.

Por otro lado, extenso trabajo ha sido realizado por diferentes autores para determinar los efectos de la dispersión espacial sobre los polaritones de superficie. Maradudin y Mills⁽³⁾ calcularon la relación de dispersión para un material de energía excitónica parabólica en el vector de la onda \vec{Q} como en $Z_{n e} S_e$ CdS(A(n=1)). Ellos introducen sus propias condiciones adicionales en la frontera y dan una amplia explicación del concepto de amortiguamiento no-local. Por otro lado, Lagois y Fisher⁽⁴⁾ retomaron las ideas de Maradudin y Mills y calcularon la relación de dispersión de los excitones de

superficie en Z_n^0 ($C(n=1)$). Lagois y Fisher hacen uso de las condiciones adicionales de Pekar.

El concepto de Condición Adicional en la Frontera (ABC) es de suma importancia al estudiar propiedades de superficie en medios no-locales. Como se verá en el texto de este trabajo, el hecho de que en el medio con dispersión espacial se propaguen más de una onda, hace insuficiente las condiciones clásicas en la frontera (condiciones Maxwellianas). La experiencia ha mostrado que son los ABC de Pekar los más sensibles a los efectos no locales y por tanto nosotros los utilizaremos en los cálculos.

El trabajo que aquí desarrollamos tiene como antecedente los resultados publicados por P. Halevi y colaboradores en 1967 ⁽⁵⁾. En este trabajo preliminar fueron obtenidos los espectros de reflectividad total atenuada (ATR) para una muestra semiinfinita de CdS en el rango de energías del excitón $B(n=1)$. En sus cálculos utilizaron la expresión para la energía excitónica propuesta por G.D. Mahan y J.J. Hopfield ⁽⁶⁾ en la cual aparecen términos tanto cuadrático como lineal en el vector de onda \vec{Q} . Este término lineal tiene su origen en el desdoblamiento energético producido por efectos de interacción Spin-órbita del electrón y el hoyo del excitón con el campo cristalino del medio.

La reflectividad total atenuada, mencionada anteriormente es una técnica de prueba que sirve para detectar por resonancia los modos normales electromagnéticos de superficie en sólidos. Por tanto y casi por definición, los mínimos en el ATR están asociados con

un polaritón superficial. Los resultados de simulación numérica obtenidos por Halevi y colaboradores presentan dos mínimos, uno amplio y profundo asociado al polaritón de superficie ordinario que aparece aún cuando no se toma en cuenta el desdoblamiento de la energía del excitón $B(n=1)$. El otro es un mínimo angosto ubicado en la vecindad inferior de ω_T , (frecuencia de resonancia transversal del excitón). Este mínimo desaparece cuando no se considera el desdoblamiento energético arriba mencionado.

Estos resultados llevaron a sus autores a conjeturar sobre la posible existencia de una nueva onda superficial relacionada con el nuevo mínimo de ATR. La respuesta definitiva se obtendrá de la relación de dispersión electromagnética de los modos de superficie que aquí calcularemos.

El material de la tesis está distribuido de la siguiente manera: En el Capítulo I se estudian los fundamentos de las teorías de los excitones-polaritones y la dispersión espacial. En el Capítulo II se discute el modelo energético de Mahan y Hopfield para la energía del excitón $B(n=1)$ y se calculan los modos electromagnéticos de volumen. En el Capítulo III se calcula la reflectividad total atenuada para obtener la relación de dispersión óptica de los polaritones de superficie. En el Capítulo IV se calcula la relación de dispersión electromagnética y finalmente en el Capítulo V se discuten los resultados numéricos y se comparan con las soluciones ópticas.

CAPITULO I

TEORIA DE POLARITONES

El problema fundamental de la óptica cristalina consiste en determinar la propagación de las ondas de luz en cristales. Una vez determinada la función dieléctrica $\epsilon(\omega)$, las ecuaciones de Maxwell de la electrodinámica clásica son utilizadas para determinar la relación de dispersión de las ondas de luz en el medio. Originalmente, dicha función $\epsilon(\omega)$ fué modelada por un oscilador en donde la frecuencia transversal de oscilación ω_T era obtenida por experimentos indirectos. Posteriormente, una vez introducido el concepto de excitación elemental, la teoría de polaritones surge como un nuevo mecanismo para la descripción de las propiedades ópticas de sólidos. Basada en la creación de cuasipartículas constituídas en parte por un fotón y en parte por una excitación elemental del sólido, la teoría de polaritones provee una base física para observar e interpretar nuevos fenómenos ópticos.

En este capítulo se discute el concepto de Polaritón y específicamente el de excitones-polaritones en CdS. Se introduce también la teoría de la Dispersión Espacial.

I. - EXCITONES POLARITONES

La descripción de las propiedades físicas de sólidos se basa actualmente en las excitaciones elementales, Ejemplos de estas son; los fonones, debido a la vibración elástica de la red cristalina; los plasmones que corresponden a una oscilación

colectiva de todas las partículas que constituyen un gas de electrones; los excitones, definidos como un estado ligado - entre un electrón y un hoyo etc. Se entiende por polaritón a un estado acoplado entre una excitación elemental de un sólido y la radiación electromagnética. Cuando la frecuencia - de luz que incide sobre el material se encuentra en la región de energías características de una excitación elemental tanto el fotón de la luz como la excitación pierden su identidad contribuyendo ambos a la formación de una nueva cuasipartícula que dependiendo de la excitación de que se trate llamaremos excitón-polaritón, plamón-polaritón, fonón-polaritón, etc. Fuera de este rango de frecuencias y en ausencia de alguna - otra excitación activa, el fotón se propagará como en un vidrio de función dieléctrica constante.

Estamos interesados en estudiar los excitones-polaritones en CdS por tanto profundizaremos más en el concepto de - excitón.

El excitón fué introducido por *Frenkel, Peierl y Wannier* hace poco más de 50 años. Sus observaciones de los espectros de absorción de energía en algunos semiconductores en el rango del visible al ultravioleta los llevó a la formulación de dos modelos de excitón. *Frenkel* propuso al excitón como un estado - localizado tal como un estado excitado atómico. Este modelo - explica aceptablemente los espectros de los gases raros soli-

dificados (7). Por otro lado, el excitón de Wannier considera el radio excitónico mucho mejor a las dimensiones atómicas en donde un electrón se encuentra en la banda de conducción y un hoyo en la banda de valencia. Este par electrón-hoyo está ligado a través de una fuerza de Coulomb y puede viajar por el cristal teniendo un vector de onda \vec{Q} . Este mecanismo de transporte de energía no contribuye a la corriente eléctrica debido a que el excitón es neutro eléctricamente. De manera similar al átomo de hidrógeno el excitón tiene un estado base y distintos niveles de estados excitados. El excitón de Wannier explica en gran detalle los espectros de sólidos covalentes - tales como Ge, Si, CdS etc. y el de cristales iónicos de grandes constantes dieléctricas como Cu_2O (7).

Debido al gran radio del excitón de Wannier, la fuerza de interacción entre el electrón y el hoyo es apantallada por la parte del dieléctrico que se les interpone (ver fig. 1.1). Mott sugirió una modificación al modelo de Wannier introduciendo una constante dieléctrica de fondo ϵ en el potencial de interacción excitónico de la forma (7).

$$V = - \frac{e^2}{\epsilon r}$$

Este potencial da lugar a una serie infinita de estados discretos hidrogenoides cuyos energías están dadas por:

$$E_n(K) = - \frac{e^4 v}{2 \hbar^2 \epsilon^2 n^2} + \frac{\hbar^2 Q^2}{2M} \quad (1.1)$$

en donde $n=1,2,\dots$, $\mu^{-1} = m_e^{-1} + m_h^{-1}$, $M=m_e+m_h$, $\hbar Q$ es el momento del centro de masa. La energía $E_n(k)$ es medida desde el mínimo de la banda de conducción m_e y m_h son las masas del electrón y del hoyo respectivamente.

El primer término de la derecha de la ecuación 1.1 es la energía de formación del excitón. El segundo término corresponde a su energía cinética. El valor de la constante dieléctrica estática ϵ introducida por Mott dependerá del radio del excitón y puede calcularse experimentalmente.

El mecanismo principal de disociación del excitón es su interacción con los fonones. A temperaturas bajas cuando el número de fonones es reducido, el camino medio del excitón depende de la desviación que le producen las impurezas en el sólido⁽⁷⁾.

Específicamente para el CdS Thomas y Hopfield⁽⁸⁾ realizaron estudios tanto experimentales como teóricos para explicar los espectros de reflectividad y fluorescencia a temperaturas de 77° y 4.2°K. En la región de $\lambda \approx 5000\text{Å}$ observaron una estructura para las curvas de reflectividad que solo pueden explicarse si se acepta la existencia de 3 series excitónicas. Esta estructura en la reflectividad es observada sólo por luz de polarización P (campo eléctrico \vec{E} y vector de onda \vec{Q} perpendiculares al eje cristalino \vec{C}). Estas tres series surgen debido al desdoblamiento en tres niveles de la banda de valen-

cia en $\vec{Q}=0$ debido a efectos de acoplamiento 'Spin-Orbita. La fig. 1.2 muestra estos niveles. La formación de excitones se realiza con hoyos en cualquiera de los 3 niveles y con un electrón en la banda de conducción. Los excitones formados reciben el nombre de A, B ó C dependiendo de la banda de valencia ocupada por el hoyo.

II. - POLARITONES DE VOLUMEN

Ya se mencionó que un polaritón surge debido a la interacción de la radiación electromagnética con las excitaciones de un sólido. Procedemos a continuación a determinar la relación de dispersión de los polaritones. Para ello retomaremos las ideas pioneras de K. Huang⁽⁹⁾.

Considerando un cristal iónico diatómico con isotropía óptica, las ecuaciones macroscópicas que describen el comportamiento de la red son:

$$\ddot{\vec{W}} = b_{11} \vec{W} + b_{12} \vec{E} \quad (1.2)$$

$$\vec{P} = b_{21} \vec{W} + b_{22} \vec{E} \quad (1.3)$$

en donde \vec{W} es el desplazamiento relativo entre los iones positivo y negativo. \vec{P} es la polarización del medio. Los coeficientes b_{11} , b_{12} , b_{21} y b_{22} dependen de la substancia específica que se trate. La ecuación 1.2 describe un oscilador sujeto a una fuerza externa. La ecuación 1.3 toma en cuenta las polarizaciones de desplazamiento y electrónica.

Los modos vibracionales completos del sistema constituido por el campo de radiación y la red cristalina se obtienen combinando las ecuaciones (1.2) y (1.3) con las ecuaciones de Maxwell

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{E} + 4\pi\vec{P}) = 0 \quad (1.4)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{H} = 0 \quad (1.5)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \dot{\vec{H}} \quad (1.6)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{1}{c} (\dot{\vec{E}} + 4\pi\dot{\vec{P}}) \quad (1.7)$$

Este conjunto de 6 ecuaciones describen el "movimiento" del campo de radiación y la red del cristal considerando a estos como un sistema inseparable.

Proponiendo una solución oscilatoria de la forma:

$$\begin{aligned} \vec{W} &= \vec{W}_0 \\ \vec{P} &= \vec{P}_0 \\ \vec{E} &= \vec{E}_0 \\ \vec{H} &= \vec{H}_0 \end{aligned} \quad \times e^{i(\vec{Q} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (1.8)$$

el sistema de seis ecuaciones se reduce a:

$$-\omega^2 \vec{W} = b_{11} \vec{W} + b_{12} \vec{E} \quad (1.9)$$

$$\vec{P} = b_{21} \vec{W} + b_{22} \vec{E} \quad (1.10)$$

$$\vec{Q} \cdot (\vec{E} + 4\pi\vec{P}) = 0 \quad (1.11)$$

$$\vec{Q} \cdot \vec{H} = 0 \quad (1.12)$$

$$\vec{Q} \times \vec{E} = \frac{\omega}{c} \vec{H} \quad (1.13)$$

$$\vec{Q} \times \vec{H} = -\frac{\omega}{c} (\vec{E} + 4\pi\vec{P}) \quad (1.14)$$

De la ecuación (1.9) se obtiene:

$$\vec{W} = \frac{b_{12} \vec{E}}{-b_{11} - \omega^2} \quad (1.15)$$

Sustituyendo esto, la ecuación (1.10) queda:

$$\vec{P} = \frac{b_{21} b_{21}}{-b_{11} - \omega^2} + b_{22} \vec{E} \quad (1.16)$$

Sustituyendo (1.16) en (1.11) se tiene:

$$(\vec{Q} \cdot \vec{E}) \left(1 + 4\pi b_{22} + \frac{4\pi b_{12} b_{21}}{-b_{11} - \omega^2} \right) = 0 \quad (1.17)$$

Se observa que esta última ecuación tiene dos soluciones. En el primer caso:

$$\vec{Q} \cdot \vec{E} = 0 \quad (1.18)$$

lo cual implica que: $\vec{Q} \perp \vec{E}$. Por otro lado

$$1 + 4\pi b_{22} + \frac{4\pi b_{12} b_{21}}{-b_{11} - \omega^2} = 0 \quad (1.19)$$

que implica:

$$\vec{E} + 4\pi \vec{P} = 0$$

A partir de las ecuaciones (1.18) y (1.19) y sus implicaciones, consideramos las últimas 3 ecuaciones (1.12-1.14). Utilizando (1.19), la ecuación (1.14) tiene la solución

$$\vec{Q} \times \vec{H} = 0$$

lo cual requiere que \vec{H} se anule o sea paralela a \vec{Q} . Por otro lado la ecuación (1.12) requiere que \vec{H} se anule a que sea perpendicular a \vec{Q} . Entonces :

$$\vec{H} = 0$$

Con este último resultado la ecuación 1.3 queda:

$$\vec{Q} \times \vec{E} = 0$$

Por tanto a partir de la condición (1.19) se ha obtenido una primer solución general en donde:

$$\vec{W} \parallel \vec{P} \parallel \vec{E} \parallel \vec{Q}$$

De (1.19) se obtiene la frecuencia (longitudinal) de este modo de oscilación

$$\omega_L^2 = -b_{11} + \frac{4\pi b_{12} b_{21}}{1 + 4\pi b_{22}} \quad (1.20)$$

Este primer caso representa las soluciones longitudinales. El valor nulo del campo magnético indica que este campo no toma parte en estas oscilaciones.

El segundo tipo de solución se obtiene a partir de la ecuación (1.18). Considerando la ecuación (1.13) se concluye que en este modo vibracional los vectores \vec{Q} , \vec{E} y \vec{H} forman un sistema ortogonal. Las magnitudes de estos vectores están relacionados por:

$$QE = \frac{\omega}{C} H \quad (1.21)$$

Por otro lado, la ecuación 1.14 queda:

$$QH = \frac{\omega}{C} (E + 4\pi P)$$

Utilizando (1.16) y (1.21) esta ecuación se reduce a:

$$\left(\frac{CQ}{\omega}\right)^2 E = \left\{1 + 4\pi b_{22} + \frac{4\pi b_{12} b_{21}}{-b_{11} - \omega^2}\right\} E \quad (1.22)$$

dado que E es distinto de cero se tiene finalmente

$$\left(\frac{CQ}{\omega}\right)^2 = 1 + 4\pi b_{22} + \frac{4\pi b_{12} b_{21}}{-b_{11} - \omega^2} \quad (1.23)$$

La ecuación (1.23) representa las soluciones transversales. Esto es los vectores

$$\vec{Q}, (\vec{W} || P || \vec{E}), \vec{H}$$

son mutuamente perpendiculares.

Para determinar la forma explícita de los coeficientes b_{11} , b_{12} , b_{21} y b_{22} , Huang propuso comparar las soluciones (1.20) y (1.23) con la fórmula de dispersión de la luz en el infrarrojo dada por:

$$n^2 = \epsilon = \epsilon_{\infty} + \frac{(\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}) \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2}$$

en donde n es el índice de refracción, ω_T la frecuencia transversal de dispersión, ϵ_0 la constante dieléctrica de campos estáticos y ϵ_{∞} la función dieléctrica para ondas ópticas de - frecuencias alejadas de ω_T .

El índice de refracción puede expresarse en términos del vector de onda Q

$$n = \frac{CQ}{\omega}$$

y por tanto:

$$\left(\frac{CQ}{\omega}\right)^2 = \epsilon_{\infty} + \frac{(\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}) \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2} \quad (1.24)$$

comparando esta solución con la ecuación 1.23 se tiene que:

$$\begin{aligned}
 b_{11} &= \omega_T^2 \\
 b_{12} &= b_{21} = \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi} \right)^{1/2} \omega_T \\
 b_{22} &= \frac{\epsilon_\infty - 1}{4\pi}
 \end{aligned}$$

El cálculo presentado en esta sección muestra formalmente lo que entendemos por Polaritón. Al combinar las ecuaciones de la dinámica vibracional de la red cristalina (que en nuestro caso se hizo para un cristal diatómico) y las ecuaciones de la radiación electromagnética se obtiene una solución para el vector de la onda \vec{Q} en términos de la frecuencia ω (relación de dispersión). La frecuencia ω_T corresponde a un modo normal de la red cristalina y por tanto representa una excitación elemental del sólido. Así con este modelo de Polaritón puede determinarse la relación de dispersión de la luz en frecuencias vecinas a cualquier excitación elemental. Nosotros en particular enfocaremos los cálculos posteriores para obtener la relación de dispersión de los polaritones en CdS en la vecindad de la energía ω_T del excitón B(n=1).

Concluimos esta sección resumiendo dos aspectos del cálculo anterior que son de fundamental importancia en el resto de la tesis. De la ecuación 1.24 se implica que la solución transversal será de la forma:

$$Q^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega) \quad (1.25)$$

y de la ecuación (1.19), se tiene que la solución longitudinal satisface:

$$\epsilon(\omega) = 0 \quad (1.26)$$

Debe mencionarse además que en este cálculo no se han tomado en cuenta efectos de amortiguamiento fenomenológico en la oscilación de los iones cristalinos. Esto pudo introducirse en la ecuación 1.2 con un término más que se propondría proporcional a la velocidad \vec{W} .

III. - POLARITONES DE SUPERFICIE

Todas las excitaciones de volumen tienen sus correspondientes excitaciones superficiales. Así puede hablarse de plasmones superficiales, excitones superficiales, etc. El acoplamiento de estas excitaciones de superficie con los fotones de la luz da lugar a los polaritones de superficie. En materiales libres de efectos de dispersión espacial, la energía de estos polaritones se encuentra confinada completamente a la superficie de tal manera que la amplitud del campo electromagnético que lo define decae exponencialmente al alejarse perpendicularmente de la superficie.

La relación de dispersión de los polaritones de superficie se obtiene directamente de las ecuaciones de Maxwell considerando solo las funciones dieléctricas de los dos medios que definen la superficie. No es necesario definir una función dieléctrica superficial.

Debido a la característica no radiativa de estos polaritones (la onda está confinada a la superficie), no es posible acoplarlas directamente con los fotones de la luz. Posteriormente discutiremos la técnica de reflectividad total - atenuada utilizada para la detección de estos polaritones. El cálculo específico de la relación de dispersión para los excitones-polaritones de superficie se realizará en las siguientes secciones.

IV. - EXCITONES-POLARITONES DE VOLUMEN Y SUPERFICIE

I. - CASO LOCAL

Un medio local espacialmente es aquel en el que la polarización en un punto depende sólo de la intensidad del campo eléctrico en ese punto. Esto se manifiesta en una función dieléctrica que depende sólo de la frecuencia.

Para el caso de una transición excitónica directa, en - decir, aquella en la que la energía del excitón se expresa - como $E = \hbar\omega_T$ sin tener un término cinético debido a que la masa excitónica es muy grande, el modelo clásico de osciladores de Lorentz⁽¹⁰⁾ nos lleva a la siguiente función dieléctrica:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \frac{\omega_p^2}{\omega_T^2 - \omega^2} \quad (1.27)$$

en donde se desprecian los efectos de amortiguamiento fenomenológico. ω_T es la frecuencia transversal de resonancia, ω_p^2 es la fuerza del oscilador y ϵ_0 es una función dieléctrica de fondo que para nuestros fines consideramos constante.

Cabe mencionar que el resultado obtenido por Huang, el cual fué discutido en la sección ^{1.3} III, es general y no depende del modelo empleado para obtener la función dieléctrica. En este caso en particular se encuentra la función dieléctrica a partir de un modelo clásico. Los polaritones se obtienen según la propuesta de Huang.

Sustituyendo la función (1.27) en la relación (1.25) y resolviendo se obtienen los modos transversales en el material. Para los modos longitudinales no hay solución. Las soluciones transversales se muestran en la figura (1.3). Para interpretar estas curvas suponemos una onda plana de luz incidente normalmente a la superficie del material. Para frecuencias muy bajas $\omega \ll \omega_T$ la luz transmitida se propaga como en un vidrio de constante $\epsilon_0 + \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$. A medida que la frecuencia se acerca a la frecuencia de resonancia ω_T , los fotones de la luz se acoplan a los excitones del medio hasta llegar a la resonancia en $\omega = \omega_T$ encima de la cual deja de propagarse energía a través del material. La transmisión vuelve a ser finita encima de $\omega = \omega_L$ y para frecuencias mucho más grandes - la luz se propaga como en un vidrio de función dieléctrica ϵ_0 . Como puede observarse existe un gap de energía en donde no hay transmisión de luz por el material y consecuentemente la reflectividad R es igual a uno en ese intervalo. De la ecuación 1.26 se obtiene $\omega^2 = \omega_L^2 + \frac{\omega_p^2}{\epsilon_0}$, no obstante las oscila

ciones longitudinales no pueden excitarse por métodos ópticos en este caso.

Como se mencionó en la sección anterior los polaritones de superficie son la contraparte en la superficie de las modas polaritones de volumen. A continuación se presenta el cálculo de estos modos de superficie para la interface entre dos medias ópticamente isotrópicas (aire y un semiconductor - modelado por la función 1.27). Aplicamos las condiciones en frontera maxwellianas, según la figura (1.4), a campos de la forma:

$$\vec{E}, \vec{H} \propto e^{i(\vec{Q} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

con polarización P. Esto es $\vec{Q} = q_x \hat{i} + q_z \hat{k}$, $\vec{E} = E_x \hat{i} + E_z \hat{k}$ y $\vec{H} = H_y \hat{j}$.

Para la componente tangencial del campo eléctrico se tiene:

$$E_x^{(1)} = E_x^{(2)} \quad (1.28)$$

Para la componente tangencial del campo magnético se cumple que:

$$\frac{\epsilon_1}{q_z^{(1)}} E_x^{(1)} = -\frac{\epsilon_2}{q_z^{(2)}} E_x^{(2)} \quad (1.29)$$

Las ecuaciones 1.28 y 1.29 constituyen un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas (los campos $E_x^{(1)}$ y $E_x^{(2)}$). Por tanto la solución no trivial para los campos se obtiene solo si el determinante de los coeficientes se anula.

$$\frac{\epsilon_2}{q_z^{(2)}} - \frac{\epsilon_1}{q_z^{(1)}} = 0 \quad (1.30)$$

Dado que las ondas transversales satisfacen:

$$Q^2 = \frac{\omega^2}{C^2} \epsilon$$

entonces

$$q_z^2 = \frac{\omega^2}{C^2} \epsilon - q_x^2$$

Sustituyendo esto último en la ecuación 1.30 se tiene:

$$\epsilon_2^2 \left(\frac{\omega^2}{C^2} \epsilon_1 - q_x^2 \right) = \epsilon_1^2 \left(\frac{\omega^2}{C^2} \epsilon_2 - q_x^2 \right)$$

lo cual finalmente dá:

$$q_x^2 = \frac{\omega^2}{C^2} \frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \quad (1.31)$$

$$(q_z^{(1)})^2 = \frac{\omega^2}{C^2} \frac{\epsilon_1^2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \quad (1.32)$$

$$(q_z^{(2)})^2 = \frac{\omega^2}{C^2} \frac{\epsilon_2^2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \quad (1.33)$$

La ecuación 1.31 es la relación de dispersión para los modos electromagnéticos de superficie. El tipo particular de modo que ocurre en una frecuencia dada depende de la naturaleza de las funciones ϵ_1 y ϵ_2 de ambos medios (para el caso de aire y medio local, $\epsilon_1=1$ y $\epsilon_2=\epsilon$ está dada por la ecuación 1.27). La onda superficial ocurre solo en frecuencias -

donde $\epsilon_2 < 0$ y de tal manera que $|\epsilon_2| > 1$. El caso más general es aquel en el que ϵ_2 es compleja (esto se obtiene si se toma en cuenta el amortiguamiento fenomenológico en la ecuación 1.27). Con esta condición el vector q_x tendrá parte imaginaria y la onda superficial se amortiguará conforme se propague por la superficie. Por otro lado, para que la onda sea superficial la componente imaginaria de los vectores $q_z^{(1)}$ y $q_z^{(2)}$ debe ser de signo tal que el campo decaiga exponencialmente a cero cuando se aleje de la interface. Sólo así se confina la energía de la onda a la superficie.

La curva de dispersión de los modos superficiales con $\epsilon_2 = \epsilon(\omega)$ dada por la ecuación 1.27 se muestra en la figura 1.5. Como puede observarse la curva cae a la derecha de la línea de luz en el aire y existe solo en el rango de frecuencias $\omega_T < \omega < \omega_L$. Esto significa que la onda superficial no puede decaer a luz o bien que no puede ser excitada por luz que incide directamente sobre el material. Por otro lado tampoco puede radiarse energía hacia el interior del material debido a que se encuentra en el gap de frecuencias en donde no existe propagación a través del medio. Debido a estas condiciones la energía atrapada en la onda de superficie debe mantenerse ahí con un tiempo de vida media infinita cuando los efectos de disipación fenomenológicos son ignorados.

2.- CASO NO-LOCAL (EXCITON A(N=1))

Se mencionó anteriormente que en el caso local la polarización inducida en un punto del material, depende solo del valor del campo en ese punto. En general la respuesta de un material ante la acción de un campo eléctrico externo queda especificada por la relación ⁽¹¹⁾.

$$D_{\alpha}(\vec{r}, t) = \sum_{\beta} \int d^3x' \int dt' \epsilon_{\alpha\beta}(\vec{r}, \vec{r}'; t-t') E_{\alpha}(\vec{r}', t')$$

en donde $\epsilon_{\alpha\beta}$ son las componentes del tensor dieléctrico en el cual están contenidas las características del medio. La expresión anterior exhibe una respuesta no-local tanto en las coordenadas como en el tiempo (esto significa que la polarización en un punto depende del valor del campo eléctrico en los puntos vecinos y además en tiempo anteriores). Para un medio isotrópico y homogéneo esta expresión se reduce a:

$$D_{\alpha}(\vec{r}, t) = \int d^3x' \int dt' \epsilon(\vec{r}, \vec{r}'; t-t') E_{\alpha}(\vec{r}', t')$$

Realizando la transformada de Fourier tanto en \vec{r} como en t se obtiene:

$$D_{\alpha}(\vec{Q}, \omega) = \epsilon(\vec{Q}, \omega) E_{\alpha}(\vec{Q}, \omega)$$

En el caso local espacialmente (como se hizo en el caso 1 de esta sección) la función dieléctrica no depende en Q . En el caso no-local, que es el que ahora queremos introducir, utilizaremos un modelo para la función dieléctrica que depende explícitamente del vector de onda Q .

Si eliminamos la condición de masa infinita para el excitón, entonces aparece un nuevo término en la expresión para la energía debido al momento $\hbar Q$ con el cual se propaga por el medio. En estas condiciones la energía se escribe como:

$$\hbar\omega_c = \hbar\omega_T + \frac{\hbar^2 Q^2}{2m} \quad (1.33)$$

en donde $m=m_e+m_h$ es la masa del excitón. Elevando el cuadrado y despreciando términos de orden mayor a Q^2 , el modelo de osciladores nos lleva a la siguiente función dieléctrica.

$$\epsilon(\omega, Q) = \epsilon + \frac{\omega_p^2}{\omega_T^2 + DQ^2 - \omega^2} \quad (1.34)$$

en donde nuevamente se están despreciando efectos de amortiguamiento fenomenológico. El parámetro $D=\omega_T^2\hbar/m$ es una medida de la curvatura de la relación de dispersión. Sustituyendo la ecuación 1.34 en 1.25 y 1.26 se encuentran los polaritones de volumen considerando ahora dispersión espa-

cial. La figura 1.6 muestra las curvas de dispersión. Como puede observarse el primer efecto introducido por la dispersión espacial es que anula el gap de frecuencias en donde no había propagación de luz a través del material. Si consideramos de nuevo una onda incidente perpendicularmente sobre la superficie del semiconductor, encontramos que para $\omega > \omega_L$ existen dos ondas propagándose en el material. Esto es, la onda incidente puede excitar una combinación lineal de dos ondas. En esta situación aparecen tres incógnitas: la amplitud del campo reflejado y las amplitudes de los dos campos transmitidos. Dado que las ecuaciones de Maxwell permiten escribir solo dos ecuaciones como condiciones de frontera, nos vemos en la necesidad de plantear condiciones adicionales. Las condiciones adicionales en la frontera (ABC) que utilizaremos en este trabajo son los de Pekar que pronto discutiremos.

En la figura 1.6 se ve que para frecuencias $\omega < \omega_L$ aparece un solo modo polaritón. Aunque esto aparenta cierta completitud en las ecuaciones de Maxwell, la verdad es que los ABC son necesarios en todas las frecuencias ya que aunque en las regiones $\omega < \omega_L$ no hay parte real del modo superior, si existe una componente imaginaria. Esto indica que el campo eléctrico en el material en estas frecuencias estará

compuesto por una onda amortiguada y otra propagante. La energía es transmitida por el modo inferior pero el campo total estará constituido por una combinación lineal de un campo amortiguado y otro propagante. Este campo total es el que satisface las condiciones en la frontera maxwellianas y adicionales.

Para el caso de incidencia oblicua de luz con polarización P la onda longitudinal predicha por la ecuación 1.26 puede ser excitada.

Todo lo expuesto anteriormente acerca de excitones con energía de forma de la ecuación (1.33) es aplicable al excitón A(n=1) de CdS y para el C(n=1) de $(Z_n^0)^{(4,5)}$.

Para estudiar los polaritones excitones de superficie con efectos de dispersión espacial consideramos la frontera entre el medio semiconductor y el vacío $\epsilon=1$. El modo electromagnético superficial es construido por 4 ondas. Una transversal ubicada en el vacío y dos transversales y una longitudinal en el material. Estos cuatro campos se unen en la superficie por las condiciones de frontera. Nuevamente, para que el modo sea superficial el campo eléctrico debe de caer exponencialmente cuando se aleje en la dirección perpendicular de la superficie del material tanto hacia su interior como hacia el vacío.

Igual que en el caso local, la relación de dispersión de los excitones-polaritones de superficie en el caso no-local se obtiene a partir de un sistema de ecuaciones completo obtenido de las condiciones en la frontera. Por tanto dado que se tienen 4 campos y solo dos condiciones maxwellianas, es necesario introducir 2 ecuaciones adicionales. Estas se obtendrán de las ABC de Pekar que establece que la polarización excitónica P se anula en $Z=0$.

$$\vec{P}(Z=0) = 0$$

Dado que se trabaja con medios isotrópicos y homogéneos la polarización excitónica tiene la dirección del campo eléctrico y dado que la luz que se utiliza es de polarización P , tiene la forma:

$$\vec{P} = P_x \hat{i} + P_z \hat{k} .$$

Para completar el sistema de ecuaciones es necesario encontrar expresiones para P_x y P_z de tal forma que igualándolas cada una de ellas a cero en $Z=0$ se obtengan las dos ecuaciones faltantes. Para ello debe determinarse la susceptibilidad excitónica $\chi_e^{(k)}$ a partir de la expresión:

$$\epsilon(\omega, Q^{(k)}) = 1 + 4\pi \chi_e^{(k)}$$

en donde el índice k se refiere a las ondas parciales 1, 2 y 3 en el semiconductor (habrá entonces 3 susceptibilidades eléctricas). Con esto las componentes de la polarización toman la forma;

$$\sum_{k=1}^3 \chi^{(k)} E_x^{(k)} = P_x$$

$$\sum_{k=1}^3 \chi^{(k)} E_z^{(k)} = P_z$$

Con estas ideas podemos plantear el sistema de 4 ecuaciones siguiente:

$$E_x^{(0)} = \sum_{k=1}^3 E_x^{(k)} \quad (1.35)$$

$$\frac{\epsilon_x^{(0)} E_x^{(0)}}{q_z^{(0)}} = \sum_{k=1}^2 \frac{\epsilon_x^{(k)} E_x^{(k)}}{q_z^{(k)}} \quad (1.36)$$

$$\sum_{k=1}^3 \chi^{(k)} E_x^{(k)} = 0 \quad (1.37)$$

$$\sum_{k=1}^3 \beta^{(k)} E_x^{(k)} = 0 \quad (1.38)$$

La ecuación 1.35 corresponde a la componente tangencial del campo eléctrico. La ecuación 1.36 representa la componente tangencial del campo magnético. Obsérvese que en el lado derecho de estas dos ecuaciones se consideran los campos totales que están dados por suma directa de los

campos parciales. Además hay que tener en mente que el modo 3 es longitudinal y por tanto no hay campo magnético que intervenga en él. Las ecuaciones 1.37 y 1.38 son las componentes en P_x y P_z de la polarización excitónica. Los coeficientes $\beta^{(k)}$ están dados por:

$$\beta^{(k)} = \begin{cases} - \frac{q_x}{q_z^{(k)}} \chi^{(k)} & K=1,2 \\ \frac{q_z^{(k)}}{q_x} \chi^{(k)} & K=3 \end{cases}$$

La solución del sistema de ecuaciones (1.35-1.38) no es tan sencilla como en el caso local. Necesariamente este debe resolverse numéricamente. Nosotros no haremos este cálculo sino sólo comentaremos la solución que para el excitón $C(n=1)$ en $Z_n 0$ obtuvieron Ldgois y Fisher. La figura 1.7 muestra esquemáticamente esta solución. No obstante en el capítulo IV resolvemos detalladamente la relación de dispersión para el excitón $B(n=1)$ de CdS.

Uno de los resultados más importante que introduce la dispersión espacial es un nuevo mecanismo de amortiguamiento de la onda superficial aún en ausencia de efectos de amortiguamiento fenomenológico. Esta pérdida de energía se realiza a través de una de las ondas parciales del semi

conductor. Específicamente para el (Z_n^0) Lagois y Fisher determinan que la onda número 1 que tiene la característica de - que la parte real de su vector de onda es mucho mayor que la imaginaria extrae energía de la superficie. Solo las - otras ondas que cumplen que $|\operatorname{Re} q_z^{(k)}| < |\operatorname{Im} q_z^{(k)}|$ contribuyen a la formación de la onda. A este tipo de ondas que extraen - energía se les llama ondas "fuga" o "fugativas".

V. CAPA MUERTA

Thomas y Hopfield⁽⁸⁾ determinaron en 1965 que para que los espectros de reflectividad en CdS y (Z_n^{Te}) obtenidos experimentalmente coincidieron con los calculados teóricamente se debía introducir una capa delgada libre de polarización - excitónica en la superficie del semiconductor. Esta capa se conoce como capa muerta.

La capa muerta está relacionada con el radio finito - del excitón de Mott-Wannier. Al aproximarse el excitón a la superficie "siente" una fuerza repulsiva y es reflejado hacia el interior del cristal antes de que su centro de masa alcance la superficie. La forma específica del potencial de - repulsión es difícil de obtener. Thomas y Hopfield hicieron la aproximación a un potencial infinito ubicado a una distancia de la superficie del orden del doble del radio de Bohr para todos los semiconductores (fig. 1.8). Con esto en cuenta, las condiciones de Pekar se aplicaron en el interior del cristal a una distancia l de la superficie.

$$d = 2a_0$$

CAPITULO II

 EXCITONES - POLARITONES DE VOLUMEN
 EN CdS CON EFECTOS LINEALES EN EL
 VECTOR DE LA ONDA (EXCITON B(N=1)). ←

En el capítulo anterior se introdujo la teoría de la dispersión espacial que describe de manera adecuada las propiedades ópticas de la mayoría de los semiconductores con gap directo. En el marco de esta teoría, las propiedades ópticas de los semiconductores quedan determinadas por una función dieléctrica que depende explícitamente del vector de onda \vec{Q} . Despreciar la dispersión espacial es equivalente a suponer que la polarización excitónica - en un punto dado del material está determinada solamente por la intensidad del campo eléctrico en ese punto. Aunque esto es seguido una buena aproximación, lo cierto es que la intensidad del campo eléctrico en la vecindad del punto de interés afecta el valor de la polarización en ese punto.

Una medida de la dispersión espacial es el producto aQ ó a/λ en donde a es la constante de la red cristalina (distancia interatómica) y $\lambda=2\pi/Q$ la longitud de onda. En medios cristalinos la distancia a es del orden de las dimensiones moleculares, $a=10^{-7}$ ó 10^{-8} cm⁽¹²⁾. El parámetro a/λ es entonces muy pequeño aún en el rango óptico, $a/\lambda 10^{-3}$. ← ?
 La dispersión espacial es entonces considerada débil en el sentido de que el cociente a/λ es pequeño

$$a/\lambda \ll 1$$

Esta es la razón de porque es común en la óptica cristalina ignorar el efecto de la dispersión espacial.

En el presente capítulo se obtendrá la relación de dispersión de los excitones-polaritones $B(n=1)$ en CdS. Además se discutirán en detalle los ABC de Pekar.

I.- ENERGIA DEL EXCITON $B(N=1)$ EN CdS.

La figura 1.2 muestra la banda de conducción y las tres principales bandas de valencia en CdS. El excitón $B(n=1)$ está constituido por un electrón en la banda de conducción y un hoyo en la segunda banda de valencia. La simetría de estas bandas permite que la energía excitónica tenga términos lineales en el vector de la onda \vec{Q} si este es perpendicular al eje cristalino \hat{C} ⁽⁶⁾. Un primer trabajo experimental en el que se determina este término lineal fué hecho por Mahan y Hopfield en 1964 ⁽⁶⁾. Al realizar el experimento de reflectividad a incidencia normal en el rango de energías correspondientes al excitón $B(n=1)$ observaron que sólo para la geometría tal que $\vec{Q} \perp \hat{C}$, $\vec{E} \perp \hat{C}$ aparecía un pico anómalo de absorción en $\omega \approx \omega_T$ (frecuencia de resonancia). Para las geometrías $\vec{Q} \parallel \hat{C}$, $\vec{E} \perp \hat{C}$ y $\vec{Q} \perp \hat{C}$, $\vec{E} \parallel \hat{C}$ las curvas no mostraban ningún comportamiento anormal (ver fig. 2.1). En otras palabras,

el nuevo pico de absorción se detecta sólo con luz de polarización P cuando el plano de incidencia es perpendicular al eje cristalino \hat{C} . Mahan y Hopfield atribuyeron la causa de este comportamiento anormal al término lineal en el vector de la onda \vec{Q} predicho en cálculos teóricos pero que hasta entonces no había sido detectado. El cálculo específico de la energía del excitón B(n=1) se sale del objetivo de esta tesis. Sólo se hará una deducción heurística según la referencia 5.

La energía de bandas en semiconductores de gap directo por lo general es descrita por la relación parabólica

$$\hbar\omega_T(Q) = \hbar\omega_T(0) + \frac{\hbar^2 Q^2}{2m} \quad (2.1)$$

en donde \vec{Q} es el vector de onda y m la masa del excitón.

En el caso particular del excitón B del CdS la situación es más compleja. Debido a la simetría de este cristal, existe un campo eléctrico cristalino \vec{E}_c el cual es percibido por un electrón en movimiento como un campo magnético dando lugar a un acoplamiento Spin-órbita. La corrección a la energía del electrón en la banda de conducción es descrita por el hamiltoniano ^(13,14).

$$H' = \frac{\hbar}{4m^2 c} \hat{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} \phi \times \vec{P}) \quad (2.2)$$

en donde $\hat{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ son las matrices de Pauli, ϕ el

potencial eléctrico y \vec{P} el momento del electrón.

Considerando el campo \vec{E}_c paralelo al eje cristalino $\hat{C}(\parallel \hat{y})$, la expresión (2.2) puede escribirse como:

$$\begin{aligned} H' &= \frac{\hbar}{4m} \frac{1}{2c^2} \hat{\sigma} \cdot (-E_y P_z \hat{i}, 0, E_y P_x \hat{k}) \\ &= \frac{\hbar}{4m} \frac{1}{c^2} E_y (P_x \sigma_z - P_z \sigma_x) \\ &= \frac{\hbar^2}{4m} \frac{1}{2c^2} E_y (q_x \sigma_z - q_z \sigma_x) \end{aligned}$$

Por lo tanto, el efecto de campo cristalino sobre el excitón está descrito por:

$$H' = \phi_c (q_x \sigma_z - q_z \sigma_x)_e + \phi_v (q_x \sigma_z - q_z \sigma_x)_v$$

en donde el subíndice c se refiere al electrón en la banda de conducción y el subíndice v al hoyo en la banda de valencia.

Tomando en cuenta este efecto de acoplamiento del Spin del electrón y del hoyo con el campo cristalino la solución a la ecuación de Schrödinger-Pauli da los siguientes eigenvalores para la energía ⁽⁵⁾.

$$\begin{aligned} \hbar\omega_{\pm}(Q) &= \hbar\omega_T(0) + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}}(q_x^2 + q_z^2) + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}}q_y^2 \pm \phi(q_x^2 + q_z^2)^{1/2} \\ &= \hbar\omega_T(0) + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}}q_y^2 + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}}(q_{\perp} \pm \frac{m\phi}{\hbar^2})^2 - \frac{m\phi^2}{2\hbar^2} \end{aligned} \quad (2.3)$$

en donde m_{\perp} y m_{\parallel} son las masas transversal y longitudinal y $q_{\perp} = (q_x^2 + q_z^2)^{1/2}$ es la componente perpendicular del vector de onda al eje \hat{C} . La ecuación 2.3 expresa que la energía del excitón ha sufrido un desdoblamiento de la banda excitónica original. Estos dos mínimos de energía se encuentran separados por el vector de onda $\Delta Q = m\phi/\hbar^2$.

Como se verá más adelante, este desdoblamiento energético proporcional al vector de onda \vec{Q} dá lugar a tres modos polaritones transversales y dos longitudinales en el volumen del semiconductor. Koteles y Winterling ⁽²⁾ han utilizado la técnica de dispersión resonante de Brillouin para estudiar los excitones polaritones en CdS. Sus espectros obtenidos en la vecindad del excitón B(n=1) proveen una evidencia directa de la propagación simultánea de tres modos polaritones transversales. Los parámetros relevantes obtenidos para el excitón B(n=1) por Koteles y Winterling son $m = (1.2 \pm 0.1)m_0$ y $\phi = (5.6 \pm 0.4) \times 10^{-10}$ ev-cm.

II.- FUNCION DIELECTRICA EN CdS. EXCITON B(N=1).

Como se comentó en la sección anterior, la dependencia lineal de la energía en \vec{Q} se observa en cristales de sime-

tría wurtzita (como el CdS) sólo cuando tanto el campo eléctrico \vec{E} y el vector de onda \vec{Q} de la onda electromagnética incidente son perpendiculares al eje cristalino \hat{C}_1 el cual se escogerá en la dirección del eje y. Por tal motivo tomamos el plano de incidencia perpendicular al eje \hat{C} y la onda será tal que el campo eléctrico será paralelo a este plano y el vector de onda \vec{Q} no tendrá componente en el eje Y. Esta geometría corresponde a luz de polarización P (o bien a ondas transversales magnéticas TM). Con esta configuración el problema es esencialmente isotrópico (ver ecuación 2.3) y el material queda caracterizado por una función dieléctrica escalar $\epsilon(\omega, \vec{Q})$.

El modelo de Mahan y Hopfield ⁽⁶⁾ supone una generalización del modelo clásico de osciladores de Lorentz el cual establece que la función dieléctrica puede escribirse como ⁽¹⁰⁾.

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \frac{\omega_p^2}{\omega_T^2 - \omega^2 - i\nu\omega} \quad (2.4)$$

en donde ϵ_0 es una función dieléctrica de fondo, ω_T es la frecuencia de resonancia transversal, ω_p^2 es la fuerza del oscilador y ν es la frecuencia de colisión.

Dado que la energía del excitón $B(n=1)$ se desdobra en dos términos, se tienen dos eigenvalores en la frecuencia a los cuales llamaremos ω_{\pm} . Mahan y Hopfield dividen la fuerza del oscilador ω_p^2 en

dos partes iguales asignándolos a los dos tipos de osciladores ω_+ y ω_- . La función dieléctrica que esto da por resultado es la siguiente:

$$\epsilon(\omega, Q) = \epsilon_0 + \frac{\frac{1}{2} \omega_p^2}{\omega_+^2(Q) - \omega^2 - i\nu\omega} + \frac{\frac{1}{2} \omega_p^2}{\omega_-^2(Q) - \omega^2 - i\nu\omega} \quad (2.5)$$

en donde

$$\hbar \omega_{\pm}(Q) = \hbar \omega_T(0) \pm \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_{\perp}} \pm \phi Q \quad (2.6)$$

ϵ_0 es una constante dieléctrica de fondo, ω_p^2 es la fuerza del oscilador del excitón no desdoblado, $\omega_T(0)$ es la frecuencia de resonancia del excitón, ν representa el amortiguamiento fenomenológico, m_{\perp} es la masa transversal del excitón y ϕ es el parámetro de desdoblamiento excitónico. La ecuación 2.5 es la reducción de la ecuación 2.3 para la geometría descrita al inicio de la presente sección.

Las expresiones ω_+ y ω_- pueden aproximarse a

$$\omega_{\pm}^2(Q) \approx \omega_T^2(0) + DQ^2 \pm \psi Q \quad (2.7)$$

siendo Q pequeño. Se ha hecho la definición :

$$D = \frac{\hbar \omega_T(0)}{m_{\perp}} \quad \text{y} \quad \psi = \frac{2\omega_T(0)\phi}{\hbar}$$

Sustituyendo la ecuación 2.7 en 2.5 se obtiene:

$$\epsilon(\omega, Q) = \epsilon_0 + \frac{\frac{1}{2}\omega_p^2}{\omega_T^2 + DQ^2 + \psi Q - \omega^2 - i\nu\omega} + \frac{\frac{1}{2}\omega_p^2}{\omega_T^2 + DQ^2 - \psi Q - \omega^2 - i\nu\omega}$$

finalmente por conveniencia de cálculo numérico escribimos esta última expresión en términos de variables reducidas

$$\epsilon(\Omega, Q) = \epsilon_0 + \frac{\frac{\Omega_p^2 c^2}{2D}}{\Gamma^2 + Q^2 + \psi Q} + \frac{\frac{\Omega_p^2 c^2}{2D}}{\Gamma^2 + Q^2 - \psi Q} \quad (2.8)$$

en donde

$$\Omega_p = \frac{\omega_p}{\omega_T}, \quad \Omega = \frac{\omega}{\omega_T}, \quad \gamma = \frac{\nu}{\omega_T}, \quad Q = \frac{CQ}{\omega_T},$$

$$\psi = \frac{2C\psi}{\omega_T D} \quad \text{y} \quad \Gamma^2 = \frac{(1 - \Omega^2 - i\Omega\gamma)}{D} C^2$$

III.- ONDAS PARCIALES

Una vez definida la función dieléctrica (2.8) es posible determinar los modos electromagnéticos que se pueden propagar a través del semiconductor. Las ecuaciones (1.25) y (1.26) nos dicen que para los modos transversales se satisface:

$$Q^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega, Q)$$

que en variables reducidas se escribe como:

$$Q^2 = \Omega^2 \epsilon(\Omega, Q) \quad (2.9)$$

Sustituyendo (2.8) se obtiene la siguiente ecuación cúbica para Q^2

$$Q^6 + (2\Gamma^2 - \psi^2 - \Omega^4 \epsilon_0^2) Q^4 + (\Gamma^4 - 2\Omega^4 \epsilon_0^2 \Gamma^2 + \Omega^2 \epsilon_0 \psi^2 - \frac{\Omega^2 \Omega^2 C^2}{D}) Q^2 - \frac{\Omega^2 \epsilon_0^2 \Gamma^4}{D} - \frac{\Omega^2 \Omega^2 \Gamma^2}{D} = 0$$

Esta ecuación nos dá tres soluciones para los modos transversales los cuales se muestran en la fig. 2.2.

La relación de dispersión de los modos longitudinales se obtiene de :

$$\epsilon(\Omega, Q) = 0 \quad (2.10)$$

lo cual nos lleva a la siguiente ecuación cuadrática para Q^2 .

$$Q^4 + (2\Gamma^2 - \psi^2 + \frac{\Omega^2 C^2}{\epsilon_0 D}) Q^2 + \Gamma^4 \frac{\Omega^2 C^2 \Gamma^2}{\epsilon_0 D} = 0$$

Las dos soluciones obtenidas se muestran también en la fig. 2.2. Los parámetros utilizados en este cálculo son los listados en la referencia 5.

En la figura 2.2 se observa que en la región $\omega_T < \omega < \omega_L$ los vectores de onda transversales Q_1 y Q_2 y el longitudinal Q_4 son esencialmente reales lo que los hace modos propagantes de energía. Por otro lado, en esta misma región el vector de onda transversal Q_3 y el longitudinal

Q_5 son ondas amortiguadas. Abajo de ω_T los modos $i=2$ y 3 exhiben un comportamiento complejo $q_{2,3} = \pm\delta + i$. El hecho de que el modo 3 tenga parte real negativa es resultado de escoger necesariamente $\text{Im } q_3 > 0$. Claramente este modo parcial no tiene un significado físico separado. Lo que realmente importa es que el campo total (compuesto por las cinco ondas parciales) no diverja. Este comentario se hace extensivo al modo $i=5$.

IV.- CONDICIONES ADICIONALES EN LA FRONTERA.

En la óptica clásica el problema de reflexión o transmisión de una onda de luz que incide sobre la superficie de un sólido queda resuelto por las ecuaciones de Maxwell. Las condiciones de frontera necesarias se obtienen al aplicar estas ecuaciones a una capa infinitesimal en la superficie del dieléctrico. Las componentes tangenciales de \vec{E} y \vec{H} al igual que las normales de \vec{D} y \vec{B} deben ser continuas en la frontera en ausencia de densidades de carga y corrientes superficiales. Las dos ecuaciones linealmente independientes que resultan de estas condiciones son suficientes para determinar la intensidad de los campos reflejados o transmitidos respecto al campo incidente. Las relaciones específicas obtenidas para la reflexión y transmisión se conocen como coeficientes de Fresnel.

Cuando se introduce el fenómeno de dispersión espacial la situación es completamente distinta. En nuestro caso, como ya se vió en la sección anterior, la energía electromagnética transmitida se realiza a través de 5 ondas parciales. Con las condiciones maxwellianas es imposible determinar las amplitudes de todos los campos y por lo tanto se hace necesario introducir condiciones adicionales en la frontera (ABC).

En los últimos 30 años, desde que Pekar introdujo la dispersión espacial y sus propias condiciones adicionales varios autores han propuesto distintas formas de ABC ⁽¹⁶⁾. Sin embargo la experiencia muestra que son los ABC de Pekar los más sensibles a los efectos no-locales en semiconductores. Pekar considera que la polarización excitónica se anula en la superficie del material

$$\vec{P}(z) \Big|_{z=0} = 0 \quad (2.11)$$

Experimentos realizados en 1985 por I. Broser y colaboradores ⁽¹⁷⁾ en la vecindad del excitón A(n=1) en CdS muestran que la propuesta de Pekar es la que explica más aceptablemente los resultados experimentales. Por otro lado P. Halevi y G. Hernández ⁽¹⁸⁾ encontraron fuerte evidencia teórica a favor de los ABC de Pekar al hacer cálculos de reflectividad y compararlos con

resultados experimentales también en CdS.

Dado que aquí se trabaja con luz de polarización P con la geometría ya explicada en las secciones anteriores, se tendrán componentes para la polarización excitónica tanto en la dirección x como en la z entonces debe cumplirse que:

$$P_x^{(+)}(0) = P_x^{(-)}(0) = P_z^{(+)}(0) = P_z^{(-)}(0) = 0$$

Esto último es una generalización del ABC de Pekar aplicada al excitón B(n=1) en donde los excitones + y - pueden considerarse como independientes.

En forma compacta la ecuación (2.8) puede escribirse como:

$$\epsilon(\Omega, Q) = \epsilon_0 + \epsilon_{(+)} + \epsilon_{(-)}$$

ó

$$\epsilon(\Omega, Q) = 1 + (\epsilon_0 - 1) + \epsilon_{(+)} + \epsilon_{(-)}$$

Por otro lado se sabe que la constante dieléctrica está relacionada con la susceptibilidad eléctrica de la siguiente forma:

$$\epsilon(\Omega, Q) = 1 + 4\pi \chi(\Omega, Q)$$

entonces

$$\chi(\Omega, Q) = \frac{\epsilon_r - 1}{4\pi} + \frac{\epsilon_{(+)}}{4\pi} + \frac{\epsilon_{(-)}}{4\pi}$$

o bien

$$\chi(\Omega, Q) = \chi_0 + \chi_{(+)} + \chi_{(-)}$$

en donde

$$\chi_{\pm}(\Omega, Q) = \frac{1}{8\pi} \frac{\Omega_p^2 C^2 / D}{\Gamma^2 + Q^2 \pm \psi Q} \quad (2.12)$$

Nos referiremos a $\chi_{(+)}$ y $\chi_{(-)}$ como las susceptibilidades de la polarización excitónica correspondientes a los excitones (+) y (-). Considerando las 5 ondas parciales del medio como planas, la polarización excitónica puede escribirse en términos de los campos de la siguiente forma:

$$P_x^{(+)} = \sum_{k=1}^5 \chi_{(+)}(\Omega, Q^{(k)}) E_x^{(k)} e^{iq_x^{(k)} z} e^{i(q_x x - \omega t)} \quad (2.13)$$

$$P_x^{(+)} = \sum_{k=1}^5 \chi_{(+)}(\Omega, Q^{(k)}) E_z^{(k)} e^{iq_z^{(k)} z} e^{i(q_x x - \omega t)} \quad (2.14)$$

$$P_x^{(-)} = \sum_{k=1}^5 \chi_{(-)}(\Omega, Q^{(k)}) E_x^{(k)} e^{iq_z^{(k)} z} e^{i(q_x x - \omega t)} \quad (2.15)$$

$$P_x^{(-)} = \sum_{k=1}^5 \chi_{(-)}(\Omega, Q^{(k)}) E_z^{(k)} e^{iq_z^{(k)} z} e^{i(q_x x - \omega t)} \quad (2.16)$$

Es conveniente escribir todos los componentes de la polarización en términos de la componente tangencial del campo eléctrico. Los modos transversales $k=1, 2$ y 3 satisfacen

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}^{(k)} = i q_x E_x^{(k)} + i q_z^{(k)} E_z^{(k)} = 0$$

$$E_z^{(k)} = - \frac{q_x}{q_z^{(k)}} E_x^{(k)} \quad (2.17)$$

Los dos modos longitudinales $k=4,5$ satisfacen:

$$\vec{\nabla}_x \cdot \vec{E}^{(k)} = \hat{i} (\partial_y E_z^{(k)}) + \hat{j} (\partial_z E_x^{(k)} - \partial_x E_z^{(k)}) + k (-\partial_y E_x^{(k)}) = 0$$

$$q_z^{(k)} E_x^{(k)} - q_x E_z^{(k)} = 0$$

$$E_z^{(k)} = \frac{q_z^{(k)}}{q_x} E_x^{(k)} \quad (2.18)$$

Sustituyendo las ecuaciones (2.17) y (2.18) en (2.14) y (2.16), todas las componentes de la polarización quedarán en términos de la componente E_x .

La condición de Pekar permitió encontrar 4 ecuaciones debido a que las 4 componentes de la polarización deben anularse en $z=0$. Sumadas a éstas las 2 ecuaciones obtenidas de las condiciones maxwellianas se tiene un conjunto de 6 ecuaciones con 6 incógnitas (Las amplitudes normalizadas de los campos del medio y la onda reflejada con el campo incidente). No es nuestro objetivo calcular la reflectividad. Aquí se desea calcular la relación de dispersión de los polaritones excitones de superficie. Como primer paso se realizan pruebas a la superficie del semiconductor para analizar su respuesta. Esto lo

haremos con la simulación numérica de la reflectividad total atenuada (ATR). Esta técnica y los resultados se discuten en el siguiente capítulo.

CAPITULO III

DETECCION OPTICA DE EXCITONES - POLARITONES DE SUPERFICIE

I.- REFLECTIVIDAD TOTAL ATENUADA (ATR).

El método ATR fué introducido en 1968 por A. Otto⁽¹⁹⁾ y es útil para la excitación de polaritones superficiales. Constituye una técnica excelente de prueba para determinar las propiedades ópticas de superficie de algún material.

Aunque originalmente el ATR fué utilizado para investigar plasmones superficiales en metales, posteriormente se hizo factible su aplicación al estudio de fonones y excitones de superficie⁽¹²⁾.

Como se recuerda del Capítulo I, la relación de dispersión de los polaritones de superficie cae a la derecha de la línea de luz en el vacío (esto significa que la componente paralela del momento de los fotones de la luz $\frac{h\omega}{c} \sin\theta$ es menor al momento de los polaritones de superficie) y por tanto se hace imposible el acoplamiento de la luz con los excitones de superficie. El ATR da solución a este problema utilizando un prisma de índice de refracción $n > 1$ para incrementar el momento de la luz al valor

$$\frac{\hbar\omega}{c} n \sin\theta$$

La figura 3.1 muestra el arreglo de ATR propuesto por Otto. Por la característica no radiativa de los polaritones de superficie (el campo electromagnético se encuentra confinado a la superficie), su excitación a través del prisma se realizará sólo para $\theta_i > \theta_c$ (ángulos de incidencia sobre la base del prisma mayores al ángulo crítico), es decir, en ángulos de reflectividad total en donde el campo en el gap de aire tiene la forma evanescente el cual se asemeja a la forma del campo electromagnético de la onda superficial. La fig. 3.2 muestra en el plano (ω, \vec{Q}) el mecanismo de acoplamiento de la luz con las excitaciones de superficie.

II.- ATR EN CdS . EXCITON B(N=1)

A continuación planteamos el problema del cálculo de la reflectividad total atenuada para determinar la dispersión óptica de los excitones polaritones de superficie en CdS utilizando el modelo de Mahan y Hopfield para la función dieléctrica. En este planteamiento consideramos un prisma de índice de refracción n . Se introduce además una capa muerta de espesor d . La configuración a resolver se muestra en la fig. 3.3. Se utilizarán

las condiciones maxwellianas y las adicionales de Pekar en la frontera del semiconductor. El haz incidente es de polarización P.

Aplicando las condiciones de frontera en la interfaz prisma-aire se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$E_{px}^{(+)} e^{-iq_p(1+d)} + E_{px}^{(-)} e^{iq_p(1+d)} = E_x^{(1+)} e^{-iq_{z1}(1+d)} + E_x^{(1-)} e^{iq_{z1}(1+d)} \quad (3.1)$$

$$\frac{\epsilon_p}{q_p} E_{px}^{(+)} e^{-iq_p(1+d)} - \frac{\epsilon_p}{q_p} E_{px}^{(-)} e^{iq_p(1+d)} = \frac{\epsilon_o}{q_{z1}} E_x^{(1+)} e^{-iq_{z1}(1+d)} - \frac{\epsilon_o}{q_{z1}} E_x^{(1-)} e^{iq_{z1}(1+d)} \quad (3.2)$$

en donde $\vec{E}^{(+)}$ y $\vec{E}^{(1-)}$ son las amplitudes del campo eléctrico que se propaga en la dirección $+\hat{k}$ ó $-\hat{k}$ en los medios prisma y aire respectivamente. q_p y q_{z1} son las magnitudes de la componente en el eje z del vector de onda en el prisma y en el aire. ϵ_p es la constante dieléctrica del prisma dada por $n^2 = \epsilon_p \cdot \epsilon_o$ es la constante dieléctrica del aire, $\epsilon_o = 1$. La ecuación 3.1 representa la continuidad de la componente tangencial del campo eléctrico. La ecuación 3.2 corresponde a la componente tangencial del campo magnético.

Nuevamente aplicamos las condiciones de continuidad en la frontera aire-capa muerta para obtener las siguientes ecuaciones:

$$E_x^{(1+)} e^{-iq_{z1}d} + E_x^{(1-)} e^{iq_{z1}d} = E_x^{(2+)} e^{-iq_{z2}d} + E_x^{(2-)} e^{iq_{z2}d} \quad (3.3)$$

$$\frac{\epsilon_0}{q_{z1}} E_x^{(1+)} e^{-iq_{z1}d} - \frac{\epsilon_0}{q_{z1}} E_x^{(1-)} e^{iq_{z1}d} = \frac{\epsilon_\infty}{q_{z2}} E_x^{(2+)} e^{-iq_{z2}d} - \frac{\epsilon_\infty}{q_{z2}} E_x^{(2-)} e^{iq_{z2}d} \quad (3.4)$$

Las ecuaciones 3.3 y 3.4 representan la continuidad de los componentes tangenciales del campo eléctrico y del campo magnético respectivamente. $\vec{E}^{(2+)}$ es la amplitud del campo eléctrico en las direcciones $+\hat{k}$ y $-\hat{k}$ en la capa muerta. q_{z2} es la componente en el eje z del vector de onda en la capa muerta. ϵ_∞ es la constante dieléctrica de fondo del semiconductor. *(valores de los parámetros \rightarrow cálculos num.)*

Finalmente se obtienen las ecuaciones de continuidad en la interface capa muerta-semiconductor.

$$E_x^{(2+)} + E_x^{(2-)} = \sum_{k=1}^5 E_x^{(k)} \quad (3.5)$$

$$\frac{\epsilon_\infty}{q_{z2}} E_x^{(2+)} - \frac{\epsilon_\infty}{q_{z2}} E_x^{(2-)} = \sum_{k=1}^3 \frac{\epsilon_k}{q_z^{(k)}} E_x^{(k)} \quad (3.6)$$

$$\sum_{k=1}^5 \chi^{(k)} E_x^{(k)} = 0 \quad (3.7)$$

$$-\sum_{k=1}^3 \chi_+^{(k)} \frac{q_x}{q_z^{(k)}} E_x^{(k)} + \sum_{k=1}^5 \chi_+^{(k)} \frac{q_z^{(k)}}{q_x} E_x^{(k)} = 0 \quad (3.8)$$

$$\sum_{k=1}^5 \chi_-^{(k)} E^{(k)} = 0 \quad (3.9)$$

$$-\sum_{k=1}^3 \chi_-^{(k)} \frac{q_x}{q_z^{(k)}} E_x^{(k)} + \sum_{k=1}^5 \chi_-^{(k)} \frac{q_z^{(k)}}{q_x} E_x^{(k)} = 0 \quad (3.10)$$

Las ecuaciones 3.5 y 3.6 representan la continuidad de las componentes tangenciales de \vec{E} y \vec{H} . Las ecuaciones (3.7 - 3.10) son los ABC de Pekar los cuales fueron discutidos con detalle en el capítulo anterior. $\vec{E}^{(k)}$ representa la amplitud del campo eléctrico de las ondas parciales en el semiconductor y ϵ_k es la constante dieléctrica para cada una de estas ondas. $q_z^{(k)}$ es la componente en el eje z de los vectores de onda $\vec{Q}^{(k)}$ de cada una de las ondas parciales.

Como se observa en las ecuaciones (3.1-3.10) forman un sistema de 10 ecuaciones con 10 incógnitas (los campos normalizados con el campo incidente). Nos interesa obtener resultados para la reflectividad:

$$R = \left| \frac{E_p^{(-)}}{E_p^{(+)}} \right|^2$$

No se discutirá aquí el programa de computadora realizado pues el ATR no es el objetivo primario de esta tesis.

Sólo se presentarán los resultados obtenidos. Los valores de los parámetros utilizados son los listados en el capítulo V y corresponden a la referencia 5. El espesor de la capa muerta es $d=70\text{Å}$. ($d=2a_0?$)

La figura 3.4 corresponde al ATR con barrido de frecuencia para distintos ángulos de incidencia. Como se observa todas las curvas presentan un mínimo amplio entre ω_T y ω_L y un mínimo no tan profundo como el anterior y mucho más angosto en la vecindad de ω_T . El primero de estos mínimos ha sido interpretado como correspondiente al polaritón ordinario fuertemente modificado por los efectos no locales⁽⁵⁾. Este se mantiene aún haciendo tender a cero el efecto lineal en la función dieléctrica ($\psi=0$) como se aprecia en la figura 3.5. Por otro lado, el nuevo mínimo que desaparece en $\psi=0$ ha sido propuesto como debido a un nuevo polaritón el cual tendrá su origen en el desdoblamiento lineal en el vector de la onda \vec{Q} de la energía del excitón $B(n=1)$. Se observa en las figuras 3.4 y 3.5 que el polaritón ordinario es fuertemente amortiguado por este efecto lineal en \vec{Q} (el ancho del pico ordinario es mayor cuando se toma en cuenta el término lineal).

Si se acepta que cualquier mínimo en ATR representa por definición el acoplamiento de la luz con una excita-

ción superficial entonces podemos trazar las curvas de dispersión de estos polaritones. Como se vé en la figura 3.6, la solución óptica muestra un nuevo polaritón de superficie en la vecindad inferior de ω_T . Este resultado ha sido discutido por P. Halevi y colaboradores en 1987 (5).

Seguidamente calcularemos la relación de dispersión electromagnética de los modos de superficie en CdS para el excitón B(n=1). Se espera que los resultados sean similares a los obtenidos en el caso óptico. Esto ayudará a aclarar la posible existencia de ese nuevo polaritón de superficie.

CAPITULO IV

RELACION DE DISPERSION DE EXCITONES-POLARITONES

EXCITON B(N=1) EN CdS.

El cálculo de la reflectividad total atenuada como técnica de prueba ha dado la posibilidad de que existan dos modos polaritónicos de superficie para el excitón B(n=1) en CdS. Aparte del pico de absorción ordinario aparece en las curvas de reflectividad otro pico pequeño en frecuencias vecinas a ω_T . Esto último podría deberse a la excitación de un nuevo polaritón o bien a algún otro efecto que en definitiva dependerá del término lineal en \vec{Q} de la función dieléctrica.

En esta parte del trabajo se realiza el cálculo analítico de la relación de dispersión y se discute el método matemático utilizado para resolverla. Esto es, calcularemos el vector de onda q_x paralelo a la superficie en función de la frecuencia ω . Se aplicarán las ecuaciones de Maxwell y las respectivas condiciones de frontera.

I.- RELACION DE DISPERSION

En ausencia de dispersión espacial (los parámetros D y ϕ iguales a cero en la ecuación 2.7) y en ausencia también de efectos disipativos del medio ($\nu=0$) las ecuaciones de Maxwell admiten soluciones que tienen el carác-

ter de onda de superficie. El campo electromagnético asociado a esta onda se localiza en la vecindad de la superficie cuando la onda es excitada. Esta onda existe sólo en valores de ondas tales que $CQ > \omega$ con ω tal que $\omega_T < \omega < \omega_L$ en donde no existen polaritones de volumen y la constante dieléctrica es negativa.

Exploraremos a continuación el efecto de la dispersión espacial en el CdS en la vecindad del excitón $B(n=1)$. Aunque ya se hizo algo de cálculo en capítulos anteriores y con el objetivo de que las soluciones sean lo más claras posible, el cálculo de la relación de dispersión será bastante detallado. Para ello plantearemos las ecuaciones de campo electromagnético en cada uno de los tres medios mostrados en la figura 4.1. Posteriormente se unirán estos campos con las condiciones maxwellianas y de Pekar. Cabe aclarar que para el cálculo de la relación de dispersión electromagnética no se considera luz incidente como en el caso de la reflectividad. Considerando ondas magnético transversales (polarización P), la forma de la componente tangencial del campo eléctrico en cada medio es:

$$E_x^{(1-)} = e^{-iq_z l z} e^{i(q_x X - \omega t)} \quad (\text{vacío})$$

$$(E_x^{(2+)}) e^{iq_z z} + E_x^{(2-)} e^{-iq_z z} e^{i(q_x X - \omega t)} \quad (\text{capa muerta})$$

$$\sum_{k=1}^5 E_x^{(k)} e^{iq_z^{(k)} z} e^{i(q_x X - \omega t)} \quad (\text{medio no-local})$$

Utilizando la ley de Ampère se encuentran los siguientes campos magnéticos.

$$\frac{\omega}{c q_{z1}} E_x^{(1-)} e^{-iq_{z1} z} e^{i(q_x X - \omega t)} \quad (\text{vacío})$$

$$\frac{\omega}{c} \frac{\epsilon_\infty}{q_{z2}} (E_x^{(2+)} e^{iq_{z2} z} - E_x^{(2-)} e^{-iq_{z2} z}) e^{i(q_x X - \omega t)} \quad (\text{capa muerta})$$

$$\sum_{k=1}^3 \frac{\omega}{c} \frac{\epsilon^{(k)}}{q_z^{(k)}} E_x^{(k)} e^{iq_z^{(k)} z} e^{i(q_x X - \omega t)} \quad (\text{medio no-local})$$

En las expresiones anteriores la constante dieléctrica del vacío $\epsilon = 1$, ϵ_∞ es la constante dieléctrica de fondo en el semiconductor, $\epsilon^{(k)}$ son las funciones dieléctricas asociadas a cada onda parcial en el semiconductor, $q_z^{(k)}$ son las componentes en la dirección z de los 5 vectores de onda en el medio no local, q_{z1} y q_{z2} son las componentes en z de los vectores de onda en el aire y en la capa muerta respectivamente. Estas componentes están dadas por:

$$q_{z1} = \left(\frac{\omega^2}{c^2} - q_x^2 \right)^{1/2}$$

$$q_{z2} = \left(\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_\infty - q_x^2 \right)^{1/2}$$

$$q_z^{(k)} = \left(\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon^{(k)} - q_x^2 \right)^{1/2}$$

La componente q_x es la misma en los 3 medios. Este q_x común describe los eigenestados en la frontera del semiconductor y el aire. Las componentes q_{z1} y $q_z^{(k)}$ son en general complejas. En el caso en que alguna de estas componentes sea esencialmente imaginario el signo en la raíz será aquel que garantice el amarre del campo a la superficie. En el caso en que existan parte real e imaginaria en alguna componente, la decisión en la selección del signo en la raíz de tal manera que quede bien definido un modo superficial se hace más complicada. Esto se discutirá en detalle en las siguientes secciones.

Utilizamos ahora la figura 4.1 para escribir las ecuaciones que representan las condiciones en la frontera. Estas son:

$$E_x^{(1-)} e^{iq_{z1}d} = E_x^{(2+)} e^{-iq_{z2}d} + E_x^{(2-)} e^{iq_{z2}d} \quad (4.1)$$

$$-\frac{1}{q_{z1}} E_x^{(1-)} e^{iq_{z1}d} = \frac{\epsilon_\infty}{q_{z2}} (E_x^{(2+)} e^{-iq_{z2}d} - E_x^{(2-)} e^{iq_{z2}d}) \quad (4.2)$$

$$E_x^{(2+)} + E_x^{(2-)} = \sum_{k=1}^5 E_x^{(k)} \quad (4.3)$$

$$\frac{\epsilon_{\infty}}{q_{z2}} E_x^{(2+)} - \frac{\epsilon_{\infty}}{q_{z2}} E_x^{(2-)} = \sum_{k=1}^3 \frac{\epsilon^{(k)}}{q_z^{(k)}} E_x^{(k)} \quad (4.4)$$

$$\sum_{k=1}^5 \chi_+^{(k)} E_x^{(k)} = 0 \quad (4.5)$$

$$\sum_{k=1}^5 \beta_+^{(k)} E_x^{(k)} = 0 \quad (4.6)$$

$$\sum_{k=1}^5 \chi_-^{(k)} E_x^{(k)} = 0 \quad (4.7)$$

$$\sum_{k=1}^5 \beta_-^{(k)} E_x^{(k)} = 0 \quad (4.8)$$

en donde $\chi_{\pm}^{(k)}$ son las susceptibilidades excitónicas definidas en la ecuación (2.12). Además:

$$\beta_{\pm}^{(k)} = \begin{cases} -\frac{q_x}{q_z^{(k)}} \chi_{\pm}^{(k)} & k=1, 2, 3 \\ \frac{q_z^{(k)}}{q_x} \chi_{\pm}^{(k)} & k=4, 5 \end{cases}$$

Las ecuaciones 4.1 y 4.3 definen la continuidad de la componente tangencial del campo eléctrico en $z=0$ y $z=-d$. Las ecuaciones 4.2 y 4.4 representan la continuidad del campo magnético en $z=0$ y $z=-d$. El resto de ecuaciones corresponden a las ABC de Pekar.

El conjunto de ecuaciones 4.1-4.8 constituyen un

sistema completo. La solución distinta de cero para los campos se obtiene cuando el determinante de los coeficientes es nulo. Nótese que todos los coeficientes son dependientes implícitamente del vector q_x y de la frecuencia ω . En lugar de resolver el sistema de ocho ecuaciones con ocho incógnitas reducimos el sistema de manera directa hasta llevarlo a otro sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas. El cálculo completo de la relación de dispersión se muestra en el apéndice A. Las siguientes definiciones aparecen en el cálculo:

$$A_k = \chi_{(-)}^{(k+1)} - \frac{\chi_{(-)}^{(-)} \beta^{(k+1)}}{\beta_{(-)}^{(1)}} \quad k=1,2,3,4.$$

$$B_k = \left(\beta_{(+)}^{(2)} - \frac{\beta_{(+)}^{(1)} \beta_{(-)}^{(2)}}{\beta_{(-)}^{(1)}} \right) \left(-\frac{A_{k+1}}{A_1} \right) + \beta_{(+)}^{(k+2)} - \frac{\beta_{(+)}^{(1)} \beta_{(-)}^{(k+2)}}{\beta_{(-)}^{(1)}} \quad k=1,2,3$$

$$\hat{C}_k = \left[\left(\chi_{(+)}^{(2)} - \frac{\beta_{(-)}^{(1)} \beta_{(-)}^{(2)}}{\beta_{(-)}^{(1)}} \right) \left(-\frac{A_z}{A_1} \right) + \chi_{(+)}^{(3)} - \frac{\chi_{(+)}^{(1)} \beta_{(-)}^{(3)}}{\beta_{(-)}^{(1)}} \right] \left(-\frac{B_{k+1}}{B_1} \right) +$$

$$+ \left(\chi_{(+)}^{(2)} - \frac{\chi_{(+)}^{(1)} \beta_{(-)}^{(2)}}{\beta_{(-)}^{(1)}} \right) \left(-\frac{A_{k+2}}{A_1} \right) + \chi_{(+)}^{(k+3)} - \frac{\chi_{(+)}^{(1)} \beta_{(-)}^{(k+3)}}{\beta_{(-)}^{(1)}} \quad k=1,2$$

$$G_k = 1 - \frac{\beta_{(-)}^{(k+2)}}{\beta_{(-)}^{(1)}} + \left(1 - \frac{\beta_{(-)}^{(2)}}{\beta_{(-)}^{(1)}} \right) \left(-\frac{A_{k+1}}{A_1} \right) \quad k=1,2,3$$

$$D_k = \left[\left(\frac{\epsilon_{q_z}^{(2)}}{q_z^{(2)}} - \frac{\epsilon_{q_z}^{(1)} \beta_{(-)}^{(2)}}{q_z^{(1)} \beta_{(-)}^{(1)}} \right) \left(-\frac{A_2}{A_1} \right) + \frac{\epsilon_{q_z}^{(3)}}{q_z^{(3)}} - \frac{\epsilon_{q_z}^{(1)} \beta_{(-)}^{(3)}}{q_z^{(1)} \beta_{(-)}^{(1)}} \right] \left(-\frac{B_{k+1}}{B_1} \right) +$$

$$+ \left(\frac{\epsilon^{(2)}}{q_z^{(2)}} - \frac{\epsilon^{(1)}}{q_z^{(1)}} \frac{\beta^{(2)}(-)}{\beta^{(1)}(-)} \right) \left(-\frac{A_{k+2}}{A_1} \right) - \frac{\epsilon^{(1)}}{q_z^{(1)}} \frac{\beta^{(k+3)}(-)}{\beta^{(1)}(-)} \quad k=1,2$$

$$F = D_2 - \frac{\hat{C}_2}{\hat{C}_1} D_1$$

$$H = \left(-\frac{\hat{C}_2}{\hat{C}_1} \right) \left(G_2 - \frac{B_2}{B_1} G_1 \right) + G_3 - \frac{B_3}{B_1} G_1$$

Con esto la relación de dispersión se expresa finalmente como:

$$\frac{q_{z2} - \epsilon_\infty q_{z1}}{q_{z2} + \epsilon_\infty q_{z1}} + \frac{\epsilon_\infty H + q_{z2} F}{\epsilon_\infty H - q_{z2} F} e^{-2iq_{z2}d} = 0 \quad (4.9)$$

La ecuación anterior contiene en general cantidades complejas debido a que las componentes de los vectores de onda perpendiculares a la superficie pueden tener parte imaginaria, aún en el caso en que el amortiguamiento fenomenológico sea cero. Entonces los polaritones de superficie tendrán soluciones complejas para el vector q_x ó para la frecuencia ω ó para ambas. Esto dependerá de la situación experimental a la cual quiera ajustarse la solución. Los coeficientes H y F, según se aprecia de las definiciones anteriores, contienen la información de los ABC de Pekar.

II.- ONDAS LIGADAS Y ONDAS FUGATIVAS

La condición de que la energía esté confinada a la frontera cuando se excita una onda superficial entre dos medias queda especificada en el signo de la componente perpendicular a la interface del vector de onda en cada medio. En el caso en que ambos medios son locales (sus funciones dieléctricas no dependen de \vec{Q}) ambos vectores q_z son imaginarios y por tanto la selección de los signos al extraer raíz es relativamente sencilla. El signo será tal que el campo se atenúe exponencialmente al alejarse de la frontera.

La situación cambia en el caso de que uno de los dos medios sea no local. En esta caso los vectores de las ondas parciales $q_z^{(k)}$ son complejos de tal forma que el signo a considerar definirá la dirección de propagación de la onda parcial así como la variación en su amplitud. Para hacer un análisis de las posibles soluciones consideramos la figura 1.6. En el aire (medio local) solo una onda q_{z1} contribuye al modo superficial. En el semiconductor son varias las ondas $q_z^{(k)}$ que pueden existir. La naturaleza de las soluciones superficiales puede clasificarse en términos de los campos en los dos medios:

$$e^{iq'_{z1}z} \quad e^{-q''_{z1}z} \quad (\text{aire})$$

fig 22?

$$e^{i(q_z^{(k)})' z} - e^{-(q_z^{(k)})'' z} \quad (\text{medio no local})$$

la prima y la doble prima representan las partes real e imaginaria. Dependiendo del signo de los vectores de onda se obtienen las siguientes soluciones:

$$a) q_{z1}' , (q_z^{(k)})'' > 0 \quad y \quad (q_z^{(k)})' , q_{z1}'' < 0.$$

Este arreglo corresponde a un modo superficial ligado. El campo decae exponencialmente en la dirección perpendicular a la superficie (ver fig. 4.4a)

$$b) q_{z1} , (q_z^{(k)})' > 0 \quad y \quad (q_z^{(k)})'' , q_{z1}' < 0.$$

Esta configuración en los vectores de onda corresponde a un modo superficial "fugativo". El campo en el aire se "amarra" a la superficie, pero la onda parcial extrae energía de ella. (Ver fig. 4.4b).

Este tipo de soluciones surgen en principio en medios en donde los elementos disipativos son nulos (que tienen constante dieléctrica real debido a que $\nu=0$). Partimos de la expresión para modos transversales

$$q_x^2 + q_z^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon$$

La parte imaginaria de esta ecuación es:

$$2q_x' q_x'' + 2q_z' q_z'' = \frac{\omega^2}{c} \epsilon'' = 0$$

entonces

$$q_z' q_z'' = - q_x' q_x''$$

para que la onda se atenúe en la dirección de propagación, q_x' y q_x'' deben tener el mismo signo. Por tanto:

$$q_z' q_z'' < 0$$

Esta última condición nos lleva a las soluciones a y b expuestas anteriormente.

La onda fugativa (caso b) está matemáticamente caracterizada por campos que crecen exponencialmente en el dieléctrico hacia el cual la energía es radiada. Esto tiene significado físico sólo en una limitada región en la vecindad de la superficie y requiere de una fuente efectiva que produzca una onda superficial ligada por un lado y fugada por el otro⁽²⁰⁾.

Todo lo expuesto hasta aquí en la presente sección nos servirá para dar solución con sentido físico a la ecuación 4.9. Sin embargo la dispersión espacial y el amortiguamiento fenomenológico ν dan situaciones más

complicados que los expuestos en los casos a y b anteriores. Esto se discutirá con más detalle cuando se presenten las soluciones a la relación de dispersión.

III.- ALGORITMO MATEMATICO PARA RESOLVER LA RELACION DE DISPERSION.

La solución a la ecuación 4.9 puede darse para diferentes formas de ω ó q_x ya sea que uno de ellos sea real y el otro complejo o bien que ambas sean complejas. Para que las soluciones tengan sentido físico estas deben poderse asociar con algún experimento. En particular nosotros analizaremos los 3 casos siguientes.

a) q_x complejo y ω real. Esta selección describirá un modo electromagnético de superficie amortiguado espacialmente en la dirección en que se propaga. La ecuación 4.9 en este caso, es una función que depende implícitamente de q'_x , q''_x , y ω (nuevamente la prima representa parte real y la doble prima parte imaginaria)

$$F(q'_x, q''_x, \omega) = 0$$

b) q_x real y ω compleja. Esta solución describirá el comportamiento temporal de la onda de superficie si el sistema fué excitado al tiempo t con amplitud constante a lo largo de la superficie. La función (4.9) será de la forma:

$$F(q_x, \omega', \omega'')=0$$

c) q_x compleja y ω compleja. Exploraremos este tercer método de cálculo de la relación de dispersión en donde tanto q_x como ω son complejas. Esta solución estará sujeta a la condición ATR de tal manera que se satisfaga la siguiente ecuación:

$$\frac{q'_x + i q''_x}{\omega' + i \omega''} = \frac{n}{c} \text{sen} \theta$$

lo cual muestra que q'_x es proporcional a ω' y q''_x lo será a ω'' . Con esto la ecuación 4.9 se considerará implícita en ω', ω'' y θ

$$F(\omega', \omega'', \theta)=0$$

$$\text{con } q'_x = \frac{\omega'}{c} \text{sen} \theta \quad \text{y} \quad q''_x = \frac{\omega''}{c} n \text{sen} \theta$$

En el caso (a) se tiene como correspondencia experimental el ATR con barrido de ángulo. La anchura del pico de absorción está asociada a los mecanismos de amortiguamiento de la onda. Entonces el mínimo del pico en ATR define q'_x y el ancho definirá a q''_x . La correspondencia experimental para el caso (b) es el ATR con barrido de frecuencia. Nuevamente la anchura del pico de absorción estará asociado a ω'' y la posición del mínimo definirá a ω' .

Por último el caso (c) se limita a las soluciones con

q_x y ω complejas en donde el cociente $\frac{q_x}{\omega}$ es real consistente con el ATR barrido de ángulo.

El aspecto tal vez más importante en el cálculo de los modos superficiales es el signo que hay que tomar al evaluar la raíz que define a los vectores $q_z^{(k)}$ dadas por:

$$q_z^{(k)} = \pm \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon^{(k)} - q_x^2$$

En nuestro caso particular los signos deseados según el análisis hecho en la sección anterior, son (ver fig. 4.1)

$$\text{Re } q_{z1} < 0, \quad \text{Im } q_{z1} > 0 \quad (4.10)$$

$$\text{Re } q_z^{(k)} < 0, \quad \text{Im } q_z^{(k)} > 0 \quad (4.11)$$

?

k representa las ondas parciales en el medio no local. Esta selección es la solución física en el caso de que las partes reales son ceros o muy pequeños comparadas con las partes imaginarias correspondientes. No obstante puede ocurrir que la ecuación 4.9 no satisfaga estas condiciones y que algunos de los signos de los modos parciales no sean los deseados.

Este problema de los signos fué estudiado por Lagois y Fisher ⁽⁴⁾ al evaluar la relación de dispersión de

polaritones de superficie en $(Z_n 0)$. La energía del excitón $C(n=1)$ que ellos utilizaron es parabólica en \vec{Q} de tal manera que se tienen 3 modos electromagnéticos en el medio: 2 transversales y uno longitudinal (esto fué discutido en el capítulo I). Sus soluciones muestran que sólo el modo longitudinal y uno transversal se amarran a la superficie (satisfacen las relaciones 4.10 y 4.11). El otro modo transversal, de naturaleza no local, tiene vector de onda tal que oscila en la dirección de penetración al material y además incrementa su amplitud con la profundidad en el medio. Como ellos lo comentan, esto no carece de significado físico sino que se interpreta como un nuevo fenómeno debido a efectos no locales (onda fugativa). Esta onda extrae energía de la superficie contribuyendo al amortiguamiento de la onda superficial. En nuestros resultados numéricos seguiremos la línea de interpretación de Lagois y Fisher.

La solución a la ecuación 4.9, que como se ha visto puede escribirse como una función de dos variables dependientes y una independiente, consiste en que una vez fijada esta última se buscarán los valores de la pareja de variables que hacen que dicha función sea cero. Lograr esto no es fácil y mucho menos si no se conoce el comportamiento cualitativo de la función.

Para resolver este problema hemos implementado dos algoritmos. El primero es el método de "eigenvalles" (21) el cual permite ubicar los mínimos de funciones complejas de dos variables. El segundo es el método de minimización de Newton para funciones de varias variables (22) el cual requiere un punto muy cercano a la solución para que la iteración converja. Sin entrar en muchos detalles damos a continuación una descripción de estos métodos.

El método de eigenvalles consiste en definir una función auxiliar F para representar la ecuación 4.9. Para el caso de amortiguamiento espacial esta función es:

$$F(q'_x, q''_x, \omega) = F'(q'_x, q''_x, \omega) + iF''(q'_x, q''_x, \omega) = 0$$

en donde ω es fija. Para que q'_x y q''_x sean solución de esta función deben ser tales que F' y F'' se anulen simultáneamente. Una condición equivalente requiere que la magnitud de F se anule en q'_x y q''_x .

$$\left| F(q'_x, q''_x, \omega) \right| = 0$$

en donde $|F|$ es un número positivo. El método de eigenvalles consiste entonces en dibujar las curvas de nivel de la superficie característica $|F|$, llamada eigensuper-

ficie, sobre una región predefinida del espacio complejo $q_x = q'_x + iq''_x$. La figura 4.2 muestra esquemáticamente el tipo de curvas que se obtienen para cada una de las diferentes formas de solución discutidas anteriormente.

Este método de eigenvalles es suficiente para resolver la relación de dispersión cuando la función es relativamente sencilla o bien cuando se cuenta con un equipo de cómputo de gran velocidad con el cual pueda lograrse un barrido en malla muy detallado sobre el plano complejo. Nuestra situación dista mucho de ser ésta y por tanto hemos adoptado como algoritmo complementario el método iterativo de Newton.

El método de minimización de Newton para dos funciones que dependen de dos variables de un mismo plano, consiste en localizar el punto sobre ese plano en donde las dos funciones se hacen cero. Esto se muestra esquemáticamente en la figura 4.3. Sean las dos funciones $f(x,y)$ y $g(x,y)$. (x_0, y_0) es un punto inicial. Las relaciones de iteración son ⁽²²⁾

$$X = X_0 - \frac{F(x_0, y_0) \partial_y g(x_0, y_0) - g(x_0, y_0) \partial_y f(x_0, y_0)}{J}$$

$$Y = Y_0 - \frac{g(x_0, y_0) \partial_x f(x_0, y_0) - f(x_0, y_0) \partial_x g(x_0, y_0)}{J}$$

en donde J es el jacobiano del sistema definido por:

$$J = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial y} - \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial g}{\partial x}$$

Las fórmulas de iteración convergen a una solución si las funciones $f(x,y)$ y $g(x,y)$ y sus primeras y segundas derivadas son continuas y finitas en la región cercana a la solución (x,y) . J debe ser finito en esa región.

Para aplicar este algoritmo a nuestro problema hay que analizar la ecuación 4.9. Esta es una función compleja $F=F'+iF''$ en donde tanto la parte real como la imaginaria dependen de las mismas variables. La función F se anula solo cuando $F'=F''=0$. Por tanto, dibujadas las funciones F' y F'' sobre el mismo espacio complejo, la solución a la relación de dispersión se encuentra en el punto donde ambas son cero a la vez.

La condición de que el punto inicial en el proceso de iteración se encuentre muy cercano a la solución es salvada por el método de eigenvalles el cual nos ubica en la vecindad de dicha solución.

CAPITULO V

RESULTADOS NUMERICOS Y CONCLUSION

I.- PARAMETROS

A continuación se presentarán las soluciones obtenidas para la ecuación 4.9 considerando formas diferentes para la pareja (q_x, ω) . A partir de la ecuación 2.8 hemos decidido hacer el cambio a variables reducidas las cuales, no contemplan unidades. Los valores numéricos que toman los parámetros aparecen en la referencia 5 y son los siguientes:

<i>variables absolutas</i>	<i>variables reducidas</i>
$\omega_T = 20712.2 \text{ cm}^{-1}$	
$\omega_{LT} = \omega_L - \omega_T = 10.1 \text{ cm}^{-1}$	$\Omega_L = 1.000487$
$h\nu = 7.5 \times 10^{-5} \text{ eV}$	$\gamma = 2.9221 \times 10^{-5}$
$\phi = 5.6 \times 10^{-12} \text{ eV}$	$\psi = 13.55$
$\omega_P = 1735.83 \text{ cm}^{-1}$	$\Omega_P = 0.0838$
$D = 3.7645 \times 10^{11} \frac{\text{m}^2}{\text{seg}^2}$	$\frac{D}{C^2} = 4.1876 \times 10^{-6}$
$\epsilon_\infty = 7.2$	
$m = 1.2 \text{ m}$	
$z_0 = 70 \text{ \AA}^\circ$	$d = \frac{\omega_T}{C} z_0 = 0.091$

en donde z_0 es el espesor de la capa muerta en Angstroms .

Los otros parámetros ya han sido discutidos desde el capítulo II.

En los apéndices B y C se presentan la subrutina y el programa de minimización elaborados para resolver la ecuación 4.9. En ellas aparecen los comentarios pertinentes para entender la lógica de la programación.

Al resolver la ecuación 4.9 es necesario imponer algún criterio para la selección de los signos al extraer la raíz de vectores $q_x^{(k)}$. En principio proponemos que la componente de mayor magnitud sea de signo positivo. Esto ayudará a definir las ondas ligadas y las ondas "fugativas".

II.- POLARITONES SUPERFICIALES CON AMORTIGUAMIENTO ESPACIAL

En este caso las condiciones impuestas a las variables son que q_x sea complejo y ω real. La onda superficial será de la forma:

$$\vec{E} \propto e^{-i\omega t} e^{iq_x' x} e^{-q_x'' x}$$

con esto la amplitud de la onda decaerá a $\frac{1}{e}$ en $x = \frac{1}{q_x''}$. Los resultados numéricos para este caso se muestran en las figuras 5.1 y en la tabla 5.2.

Las curvas de la figura 5.1 sirven para comparar los dos tipos de amortiguamiento que se tienen en este problema: el no-local y el fenomenológico. La curva (a) corresponde a parámetros normales. Aquí se incluyen ambos amortiguamientos para el polaritón ordinario. En la curva (b) se hace $D \approx 0$, $\phi \approx 0$ y γ normal. En esta curva se puede apreciar lo importantes que son los efectos no locales y lo grande que es el amortiguamiento provocado al polaritón ordinario. Por último la curva (c) corresponde al polaritón puro en donde se ha hecho $D \approx 0$, $\phi \approx 0$ y $\gamma \approx 0$.

La tabla 5.1 muestra los valores numéricos que toman las variables que definen el modo ordinario con parámetros normales. Como se observa $q_z^{(3)}$ y $q_z^{(5)}$ son ligados a la superficie pero los demás son radiativos. En el aire el carácter es mixto $|q'_{z1}| \approx |q''_{z1}|$. En la figura 5.2 se ve que a frecuencias altas $q'_x < \frac{\omega}{c}$ y el modo se ubica en la zona radiativa. Aparentemente los componentes $q_z^{(1)}$, $q_z^{(2)}$ y $q_z^{(4)}$ destruyen la onda ordinaria para frecuencias relativamente altas ya que $q'_x \approx q''_x$. Con esto solo para frecuencias relativamente bajas se puede hablar de un polaritón ordinario bien definido.

En la figura 5.2 se muestra también la solución obte

nida en $\omega \approx \omega_T$. Analizando los valores de q'_x y q''_x en la tabla 5.1 se nota que este modo es fuertemente amortiguado ($q'_x \approx q''_x$). Este es el comportamiento de una onda evanescente y no de una onda legítima. Como en el caso del polaritón ordinario, aquí también sólo las ondas $q_z^{(3)}$ y $q_z^{(5)}$ contribuyen al amarre de energía en la superficie.

De estas apreciaciones puede concluirse que ω real y q_x complejo no conduce a un nuevo polaritón de superficie bien definido e incluso el polaritón ordinario es severamente amortiguado. Esto sugiere que ATR con barrido de ángulo no es una técnica conveniente de excitación (esto ocurre siempre que los efectos disipativos son muy fuertes).

III.- POLARITONES SUPERFICIALES CON AMORTIGUAMIENTO TEMPORAL.

En esta situación q_x es real y ω es compleja. La onda superficial es de la forma:

$$E \propto e^{iq_x X} e^{-i\omega' t} e^{\omega'' t}$$

Este tipo de solución describe la evolución temporal de una cierta cantidad de energía proporcionada a la superficie al tiempo t . La onda es superficial en el sentido de que a este instante t los campos decaen al alejarse de la

frontera (una especie de ~~una~~ [?] fotografía en donde el campo total decae tanto en la dirección del aire como en la del medio semiconductor). Al transcurrir el tiempo la amplitud de esta onda tiende a cero (la onda se amortigua en el tiempo). En estas condiciones necesariamente la parte imaginaria ω'' debe ser negativa. La figura 5.3 y la tabla 5.2 muestran los únicos resultados obtenidos que son compatibles con esta interpretación.

Para analizar las soluciones utilizamos como auxiliar la figura 2.2 para los modos de volumen en ATR que aunque no corresponden exactamente si tienen el comportamiento similar a los modos en la situación que se estudia ahora. En esta figura se observa que en la región $\omega_T < \omega < \omega_L$ existen tres modos - que se propagan sin amortiguamiento y dos que son puramente amortiguados.

Por tanto de manera natural se espera para un polaritón de superficie en esa región que las ondas parciales $q_z^{(3)}$ y $q_z^{(5)}$ amarren energía a la superficie mientras que las ondas $q_z^{(1)}$, $q_z^{(2)}$ y $q_z^{(4)}$ participen como elementos de fuga de energía. La solución obtenida debe ser consistente con esta interpretación y con aquella de que ω'' sea negativa. En la tabla 5.2 se vé que los valores de las variables que definen el polaritón ordinario están de acuerdo con lo expresado an

teriormente. Las ondas $q_z^{(1)}$, $q_z^{(2)}$ y $q_z^{(4)}$ están extrayendo energía de la superficie. La onda superficial es sostenida por $q_z^{(3)}$ y $q_z^{(5)}$. El valor de onda de vacío es tal que $|q_{z1}''| \gg |q_{z1}'|$ lo cual indica que el campo es completamente amortiguado hacia el vacío. Por otro lado, dado que $\omega' \gg \omega''$ la solución representa una onda de superficie que se amortigua muy lentamente.

La situación para $\omega' \approx \omega_T$ es muy distinta a la de la región $\omega_T < \omega' < \omega_L$. En la figura 2.2 se observa que ahora el comportamiento de los cinco modos parciales es mixto. Más aún, en este rango de frecuencias la dirección de propagación de $q_z^{(3)}$ y $q_z^{(5)}$ es opuesta a la de $q_z^{(1)}$, $q_z^{(2)}$ y $q_z^{(4)}$. Aunque está situación es muy distinta a la aparecida en $\omega_T < \omega < \omega_L$, queremos mantener los mismos criterios anteriores para la selección de los signos de los vectores $q_z^{(k)}$ (el signo positivo es para la componente de magnitud mayor en cada $q_z^{(k)}$). Analizando detenidamente la figura 2.2 se aprecia claramente que en $\omega' \approx \omega_T$ $q_z^{(1)}$ satisface $|(q_z^{(1)})'| > |(q_z^{(1)})''|$. Teniendo en mente este comportamiento de los modos parciales, esperaríamos que un polaritón superficial en $\omega' \approx \omega_T$ estuviera definido por el lado del semiconductor por un modo fugativo ($i=1$) y por cuatro modos ligados. Esto sería una solución aceptable.

En la figura 5.3 aparece la curva obtenida en la vecin-

dad de ω_T . Los valores numéricos correspondientes se muestran en la tabla 5.2. Esta solución es la única consistente con la condición de que $\omega'' < 0$ (cualquier solución con $\omega'' > 0$ debe descartarse ya que carece de significado físico). Como se ve en la tabla los signos de los vectores $q_z^{(k)}$ no concuerdan con nuestro criterio original. Por tanto esta solución no nos permite afirmar la existencia de un nuevo polaritón. No obstante hay que recordar que lo que realmente importa es que el campo total se amortigüe al penetrar al semiconductor independientemente de que parte de la energía se fugue por una o varias ondas parciales. Por tanto, la decisión final se obtendrá del cálculo del campo total $\vec{E}(z)$ en el semiconductor. Este cálculo no se realiza en el presente trabajo.

La forma cualitativa de la nueva solución es la que se espera a partir de los resultados de ATR con barrido de frecuencia (el nuevo mínimo en ATR se mantiene en la vecindad inferior de ω_T). Analizando los valores de ω'' se ve que este nuevo modo se amortigua muy lentamente.

IV. POLARITON DE SUPERFICIE CON q_x Y ω COMPLEJOS

Limitaremos estas soluciones a aquellas que son acordes al ATR. Es decir a aquellas frecuencias complejas $\omega = \omega' + i\omega''$ y vectores de onda $q_x + i q_x''$ que satisfacen el cociente

$$\frac{q_x}{\omega} = \frac{n}{c} \sin\theta$$

En donde $n=1.5$ es el índice de prisma y θ el ángulo de incidencia de la luz sobre la base del prisma. Dado que en estas condiciones el ángulo θ satisface $42^\circ < \theta < 90^\circ$, la solución se limita a una pequeña región del aspecto de frecuencias. En la figura 5.4 y la tabla 5.3 se muestran los resultados.

Como se observa las soluciones son similares al caso anterior. Los signos vectores $q_z^{(k)}$ no concuerdan con aquellos correspondientes a una solución ideal, según nuestro criterio original. Véase por ejemplo en el renglón correspondiente a $\omega' = 0.9999$ en la tabla 5.3. El vector $q_z^{(1)}$ es tal que $|(q_z^{(1)})'| \approx 2 |(q_z^{(1)})''|$. Según estas amplitudes, este debería ser un modo fugativo. No obstante la única solución obtenida que tiene sentido físico ($\omega'' < 0$) lo considera como un modo ligado.

Al igual que en la sección anterior concluimos que no pueden visualizarse los modos parciales uno a uno separadamente. Habrá que resolver el problema del campo total $\vec{E}(z)$ para dar una respuesta definitiva acerca de este nuevo polaritón.

V.- COMPARACION DE LAS RELACIONES OPTICAS Y ELECTROMAGNETICAS

La relación de dispersión óptica ha sido obtenida desde el capítulo III utilizando la técnica ATR. Los mínimos de las curvas de reflectividad definen una frecuencia y un vector de onda q_x que graficados nos dan la curva de dispersión óptica (fig. 3.6). ATR con barrido de ángulo debe dar resultados para los polaritones superficiales similares a la relación de dispersión electrodinámica con vector de onda compleja y frecuencia real. ATR con barrido de frecuencia da resultados aproximados a los obtenidos en la dispersión electrodinámica con frecuencia compleja y vector de onda real. La figura 3.5 muestra esta última situación. Se ha graficado la parte real de la frecuencia contra vector de onda real. Como se observa la comparación es bastante aceptable.

VI.- CONCLUSIONES

El trabajo que hemos realizado puede resumirse en los siguientes puntos:

a) Diferencia cualitativa entre las curvas correspondiente a modos electromagnéticos superficiales en los casos local y no-local. En el caso local (la función dieléctrica no depende de \vec{Q}) el modo se mantiene en las frecuencias $\omega_T < \omega < \omega_L$ y para valores grandes de vector de onda q_x la curva converge asintóticamente una frecuencia ω_s . Las componentes perpendiculares de los vectores de onda en cada uno de los medios que definen la superficie, son imaginarios y por tanto los campos se atenúan exponencialmente en esa dirección. La onda de superficie es amortiguada en la dirección de propagación debido solo a efectos fenomenológicos.

En el caso no-local (la función dieléctrica depende explícitamente de \vec{Q}) la curva de dispersión sufre una distorsión debido a efectos de amortiguamiento distintos al fenomenológico. Esto se debe a que en el rango $\omega_T < \omega < \omega_L$, a diferencia del caso local, pueden propagarse modos de volumen en el semiconductor. por

tanto la energía confinada a la superficie puede fugarse por medio de alguna de estas ondas de volumen. Este hecho se conoce como amortiguamiento no-local.

- b) El excitón B(n=1) en CdS está constituido por un electrón por la banda de conducción y un hoyo en la segunda banda de valencia. (En CdS la banda de valencia se desdobra en 3 niveles). La interacción tanto del hoyo como el electrón con el campo cristalino da lugar a un acoplamiento Spin-Orbita el cual provoca un desdoblamiento la energía base del excitón siendo esta proporcional al vector de onda \vec{Q} . Con esto la energía del excitón tiene términos cuadrático y lineal en el vector de la onda. Sustituyendo esta energía en un modelo generalizado de osciladores se obtiene la función dieléctrica del CdS.

Este desdoblamiento en la energía da como resultado que la energía electromagnética se propague a través del semiconductor por medio de cinco ondas parciales: 3 transversales y dos longitudinales. Por tanto, para describir las propiedades ópticas del CdS (reflectividad, transmitividad, etc) es necesario introducir condiciones adicionales de frontera. En todo el trabajo hemos utilizado los ABC de Pekar.

- c) Al realizar la simulación en computadora de ATR para determinar los modos de superficie ópticas en CdS (excitación $B(n=1)$), el espectro de reflectividad presenta dos mínimos. Uno de ellos corresponde al polaritón ordinario fuertemente afectado por los efectos no-locales. El otro mínimo aparecido en $\omega \approx \omega_T$ presumiblemente corresponde a un nuevo polaritón de superficie el cual tiene origen en el término lineal en Q de la energía del excitón.
- d) La relación de dispersión electromagnética con amortiguamiento espacial para los modos de superficie presenta dos soluciones. La primera corresponde al excitón-polaritón de superficie ordinaria. Esta curva presenta un doblés grande hacia la zona radiativa debido al fuerte amortiguamiento que le ocasionan los efectos no locales además del fenomenológico. Este modo ordinario es bien comportado solo en frecuencias bajas.
- La otra solución se ubica en $\omega \approx \omega_T$ la cual asociamos con una nueva onda superficial. Esta onda tiene carácter evanescentes) debido a que es fuertemente amortiguada. El comportamiento de los vectores de onda de las ondas parciales en el semiconductor es aceptable según los conceptos de onda ligados y ondas fugativas.

- e) Al igual que en el caso anterior, la relación de dispersión con amortiguamiento temporal presenta dos soluciones. El modo ordinario es distorsionado por efectos no locales y los vectores de onda $q_z^{(k)}$ se comportan aceptablemente según el criterio de ondas fugativas. Los modos parciales 1,2 y 4 extraen energía de la superficie. Los modos 3 y 5 amarran energía a la superficie. En $\omega \approx \omega_T$ la nueva solución presenta una curva muy aceptable. Por otro lado los signos de los vectores de onda $q_z^{(k)}$ no son los más afines a la interpretación de onda fugada y onda ligada. Sin embargo esta fue la única solución consistente con la condición de que $\omega'' < 0$. Este hecho no permite afirmar la existencia del nuevo polaritón de superficie.
- f) La solución de la relación de dispersión con q_x compleja y ω compleja es muy similar al caso anterior. Es clara la solución para el polaritón ordinario pero no así para el nuevo polaritón.
- g) Se ha hecho también la comparación entre las soluciones óptica (ATR) y electromagnética. En las curvas obtenidas se aprecia el similar comportamiento cualitativo de ambas soluciones. Este es el hecho que apoya con más fuerza la hipótesis del nuevo polaritón. Sin embargo,

debido a las dificultades en los signos de los vectores de onda, es necesario determinar el comportamiento del campo total tanto en el vacío como en el medio semiconductor en la relación de dispersión electromagnética y compararlo con aquellas del ATR. Esto vendría a dar una respuesta definitiva sobre la cuestión del nuevo polaritón.

FIGURA 1.1. Ilustración de los dos tipos de excitón a) excitón de Frenkel: el electrón y el hoyo se encuentran fuertemente ligadas, b) excitón de Mott-Wannier: la fuerza de atracción entre el electrón y el hoyo es apantallada por la parte del dieléctrico que se les interpone.

FIGURA 1.2. Estructura de bandas del CdS en $\vec{Q}=0$ deducida por D.G. Thomas y J.J. Hopfield⁽⁸⁾. La banda de valencia se desdobra en tres niveles debido a efectos de acoplamiento Spin-Orbita. El excitón B está constituido por un hoyo en la segunda banda de valencia y por un electrón en la banda de conducción.

FIGURA 1.3. Representación esquemática de la relación de dispersión de los polaritones de volumen en un medio local. Se aprecia el gap $\omega_T < \omega < \omega_L$ en donde no hay transmisión de energía electromagnética por el material.

FIGURA 1.4. Superficie de un medio material de función dieléctrica ϵ ubicada sobre el plano (x,y). Una onda superficial puede propagarse sobre este plano. El campo de esta onda decae exponencialmente en las direcciones $\pm z$ a partir del origen.

FIGURA 1.5. Representación esquemática de la relación de dispersión de los polaritones superficiales en un medio local. ^{a. n. dif. en el aire} La curva se mantiene en el intervalo $\omega_T < \omega < \omega_L$ y converge a ω_S .

FIGURA 1.6. Representación esquemática de los polaritones transversales de volumen en el caso no-local. La función dieléctrica depende de Q^2 . Como se observa, la no-localidad ha eliminado el rango de frecuencias en donde no había propagación de energía por el medio. Además en la región $\omega > \omega_L$ se transmiten simultáneamente dos modos polaritónicos transversales. En caso de incidencia oblicua de luz con polarización P aparece en tercer modo de carácter longitudinal que no se muestra en la figura.

FIGURA 1.7. Relación esquemática de la relación de dispersión de los polaritones superficiales en un medio no-local. Respecto al caso local, la curva es distorsionada debido al amortiguamiento no-local.

FIGURA 1.8. Gráfica esquemática del potencial de repulsión de excitones en la vecindad de la superficie del medio no-local.

FIGURA 2.1. Espectros de reflectividad del excitón B(n=1) en una muestra de CdS obtenidas por Hopfield y Thomas⁽⁸⁾, a) Vector de onda \vec{Q} y campo eléctrico \vec{E} paralelo y perpendicular al eje cristalino \hat{C} respectivamente, b) ambos, \vec{Q} y \vec{E} perpendiculares al eje \hat{C} y c) \vec{Q} perpendicular y \vec{E} paralelo al eje \hat{C} . Sólo en el caso (b) la reflectividad tiene un mínimo en la vecindad de ω_T debido a efectos de acoplamiento Spin-Orbita del electrón y el hoyo del excitón con el campo cristalino.

FIGURA 2.2. Relación de dispersión ($q_z^{(k)}$) para los 5 modos parciales de volumen del excitón B(n=1) en CdS. Real de $q_z^{(k)}$ e imaginario de $q_z^{(k)}$ son dibujados a la derecha y a la izquierda del origen respectivamente. Los modos 1,2 y 3 son transversales 4 y 5 modos longitudinales surgen porque los campos de polarización P (ángulo de incidencia $\approx 70^\circ$). Las líneas punteadas indican que la parte real de los modos 3 y 5 son negativos en la correspondiente región espectral.

FIGURA 3.1. ATR. Técnica experimental para excitar los polaritones de superficie. Para ángulos $\theta_i > \theta_c$ el campo eléctrico en el aire es evanescente y la componente del vector de onda paralela a la superficie es mayor a aquel valor que tomaría si no estuviera el prisma. Cuando se acopla el fotón con la excitación elemental aparece un mínimo en la reflectividad.

FIGURA 3.2. Debido a que el índice de refracción en el vacío es menor al del prisma, el vector de onda q_x se incrementa debido a la presencia del prisma. Por lo tanto, puede excitarse el polaritón superficial según muestra el punto de intersección de la recta de luz en el prisma con la curva de la relación de dispersión (caso local).

FIGURA 3.3. Geometría inicial para calcular la reflectividad. Se considera las superficies planas. En las tres interfaces se aplican las condiciones maxwellianas de frontera (6 ecuaciones). En la superficie $z=0$ se aplican los ABC de Pekar (4 ecuaciones). Normalizando todos los campos con la amplitud del campo incidente se obtiene un sistema de 10 ecuaciones con 10 incógnitas. La solución del sistema se realiza numéricamente.

FIGURA 3.4. Reflectividad total atenuada como una función de la frecuencia en la vecindad del excitón $B(n=1)$ de CdS. Las curvas corresponden a diferentes ángulos de incidencia. El mínimo amplio entre ω_T y ω_L corresponde al excitón polaritón ordinario. El mínimo angosto, aproximadamente en ω_T , corresponde posiblemente a un nuevo polaritón superficial no-local.

FIGURA 3.5. Reflectividad Total Atenuada como función de la frecuencia para distintos ángulos de incidencia haciendo tender a cero el parámetro α del término lineal en el vector de la onda en la energía del excitón $B(n=1)$. Desaparece el mínimo angosto en $\omega \approx \omega_t$ y sólo se mantiene el correspondiente al polaritón ordinario.

FIGURA 3.6. Relación de dispersión óptica a) polaritón ordinario, b) posible nuevo polaritón. Como se observa el "nuevo polaritón" cae en la vecindad inferior de ω_T .

FIGURA 4.1. Geometría para el cálculo de la relación de dispersión de los modos electromagnéticos de superficie. Se aplican las condiciones en la frontera de Maxwell y las adicionales de Pekar. En este cálculo no se considera luz incidente como en el caso de la reflectividad. El modo superficial surge de manera natural por la presencia de campos electromagnéticos en los 3 medios. d es el espesor de la capa muerta.

FIGURA 4.2. a) Representación esquemática de las curvas de nivel obtenidas con el método de eigenvalles utilizado para localizar los mínimos para una función $F(x,y)$. b) ω es la variable independiente y las componentes real e imaginarias de q_x son las variables dependientes. c) El vector de onda es la variable independiente y las variables independientes son las componentes real e imaginaria de la frecuencia. d) El ángulo es la variable independiente y las variables dependientes son la parte real e imaginaria de la frecuencia.

FIGURA 4.3. Representación esquemática para comprender el método de minimización de Newton. Se trata de localizar el punto (x,y) en donde las funciones f y g se anulan simultáneamente.

FIGURA 4.4. a) Campo electromagnético ligado a la superficie por ambos lados (polaritón superficial local) b) campo electromagnético ligado a la superficie por el lado local y "fugativo" por el lado no-local. Debido a esta fuga de energía la onda de superficie se amortiguará en la dirección de propagación.

FIGURA 5.1 Esta gráfica muestra la contribución de los efectos no-locales al amortiguamiento del modo superficial ordinario. a) Modo superficial ordinario considerando amortiguamiento no-local y fenomenológico. b) Los coeficiente del término cuadrático en Q y del término lineal en Q tienden a cero. Sólo se mantiene la contribución fenomenológica γ . c) Modo superficial puro $D \approx 0, \alpha \approx 0, \gamma \approx 0$.

FIGURA 5.2. Relación de dispersión de los excitones-polaritones de superficie en CdS. Se observa de estas dos figuras que el polaritón ordinario es fuertemente amortiguado por los efectos no-locales (la componente imaginaria del vector de onda incrementa en la región de frecuencia altas). El polaritón ordinario es bien comportado sólo en la región de frecuencias bajas. El nuevo polaritón es muy amortiguado en toda la región de frecuencias donde está definido.

FIGURA 5.3. Relación de dispersión de los polaritones superficiales con amortiguamiento temporal para el CdS. Las curvas nos muestran soluciones bien comportadas en donde el amortiguamiento temporal es muy pequeño en el rango de vectores de onda de interés. En la gráfica superior se muestra el efecto de la no localidad en la curva del polaritón ordinario ya que esta no converge a algún valor de $\text{Re } W$. Por otro lado la curva del nuevo polaritón se mantiene completamente en la vecindad inferior de ω_t . Excepto en la cercanía inmediata a la línea de luz $\omega' < \omega_t$.

FIGURA 5.4. Relación de dispersión de polaritones superficiales considerando q_x y ω complejos. La solución se limita a la condición de ATR (ver texto). Los resultados son muy similares a los obtenidos con amortiguamiento temporal. El rango de excitación es muy pequeño en q_x debido a que en ATR el ángulo de incidencia cae entre 42 y 90 grados. Nuevamente ambos polaritones son ondas bien definidas ya que el amortiguamiento es muy pequeño.

FIGURA 5.5. Comparación entre las relaciones de dispersión óptica (puntos) y electromagnética (línea continua). La curva óptica se obtuvo a partir de la reflectividad total Atenuada con un gap de aire de 2000 Å.

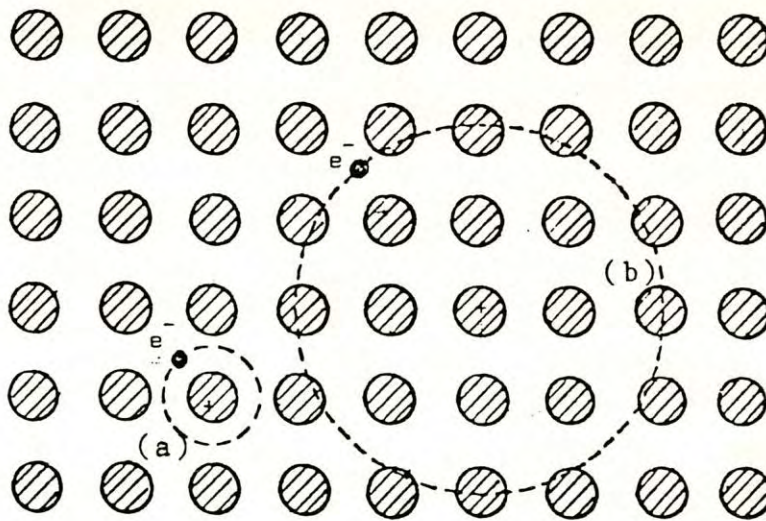


FIGURA 1.1

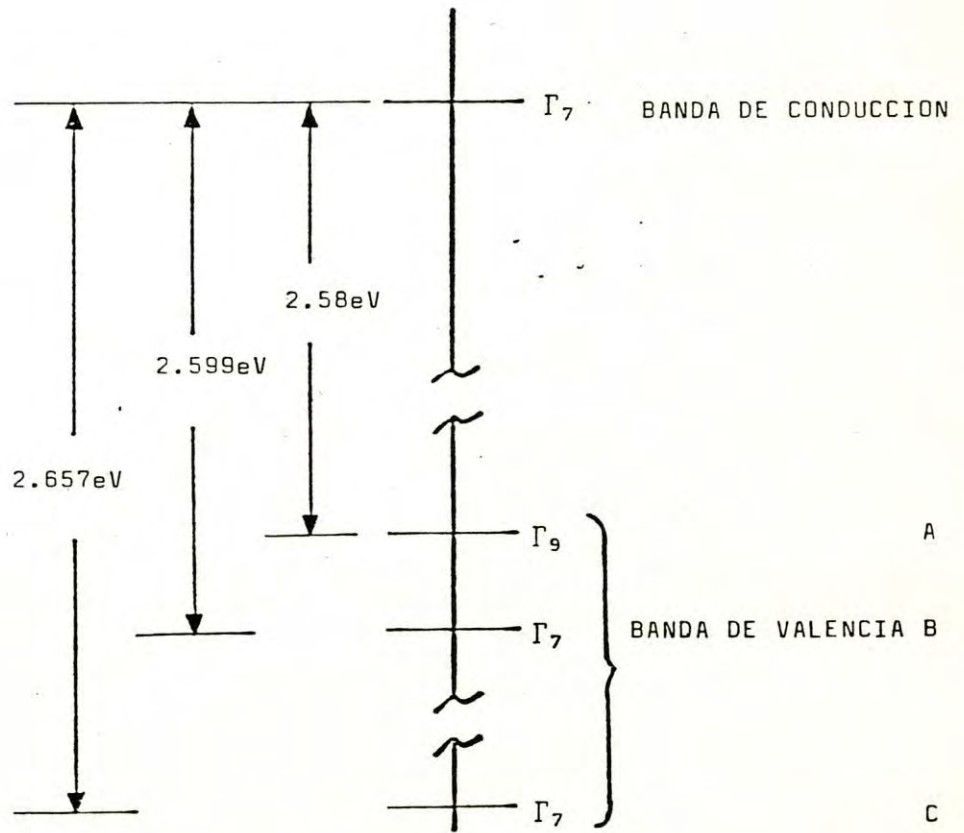


FIGURA 1.2

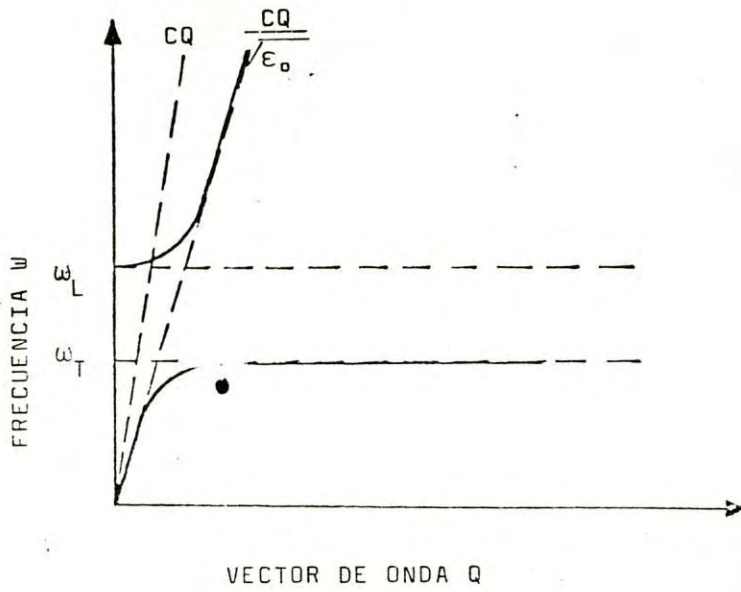


FIGURA 1.3

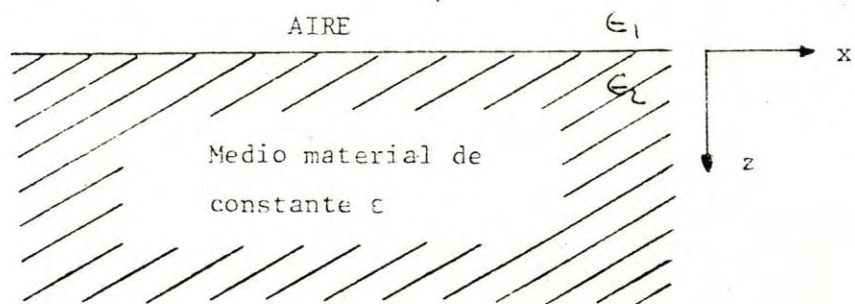


FIGURA 1.4

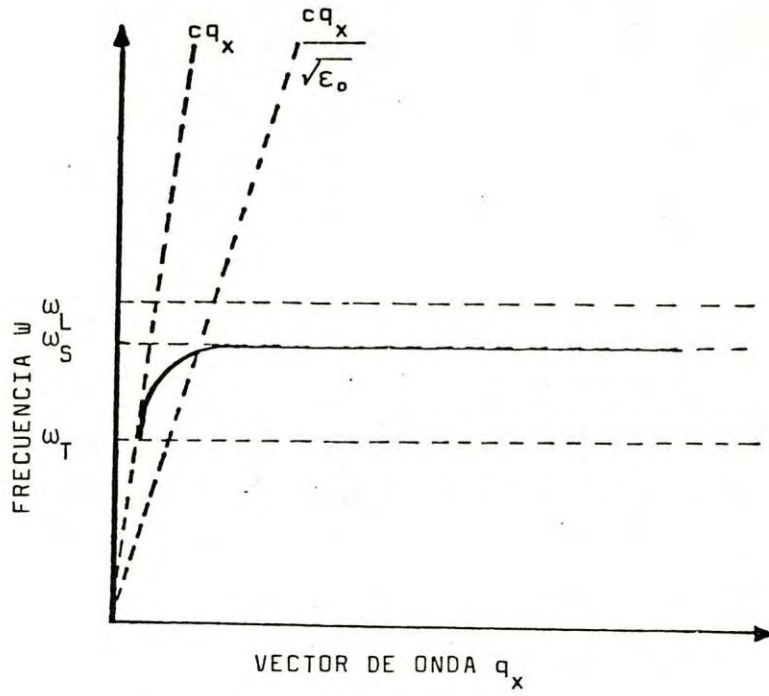


FIGURA 1.5

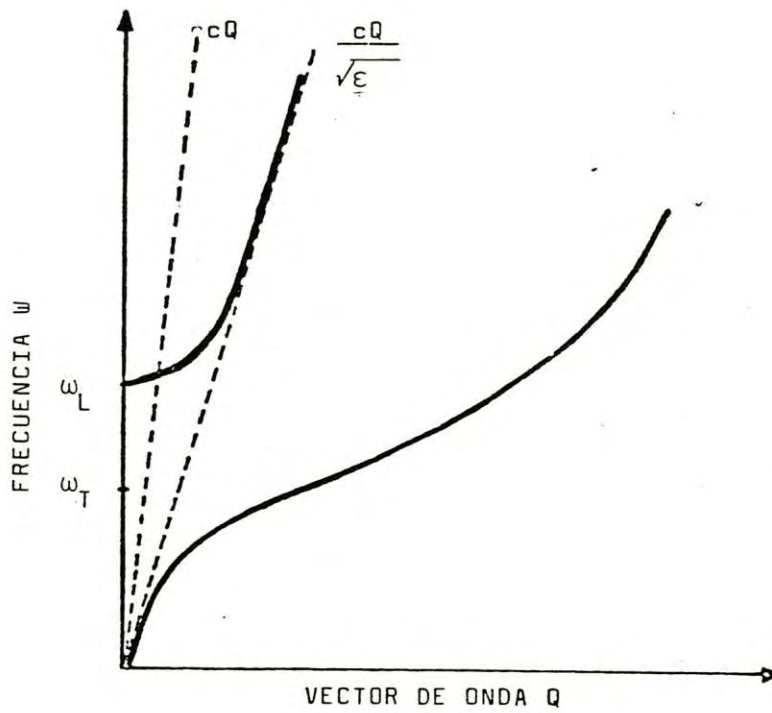


FIGURA 1.6

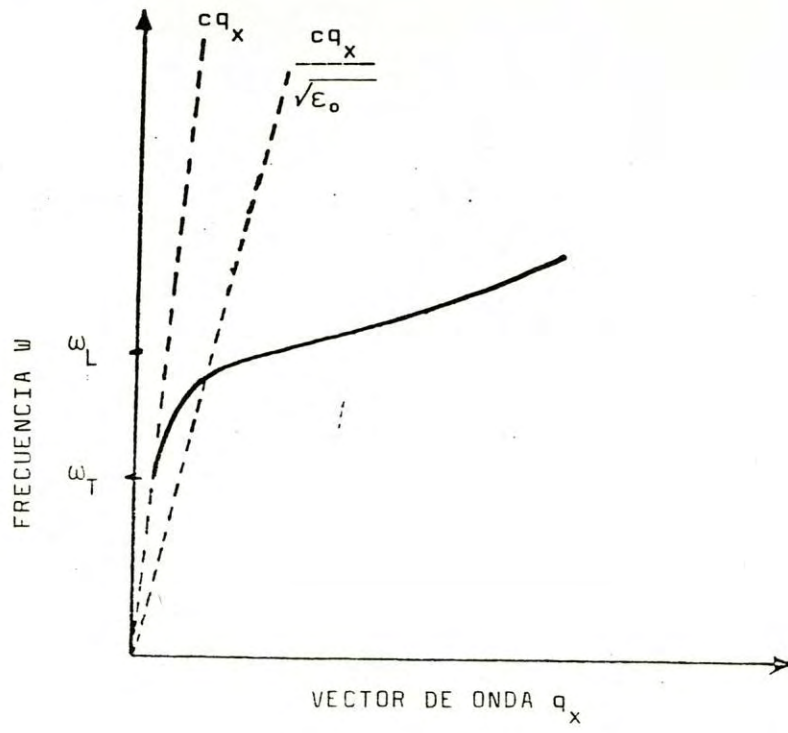


FIGURA 1.7

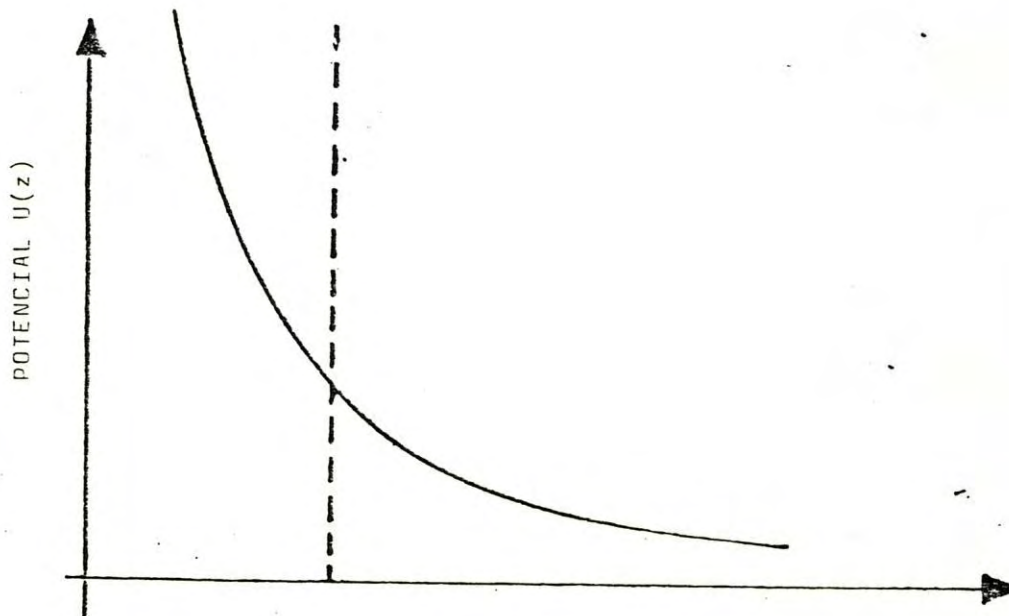


FIGURA 1.8

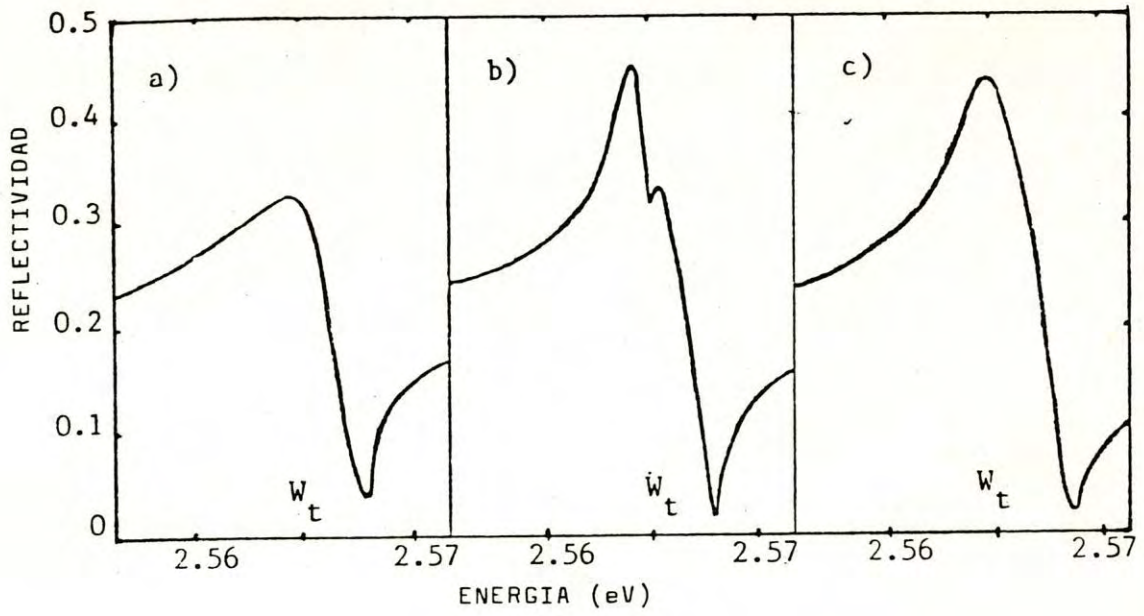


FIGURA 2.1

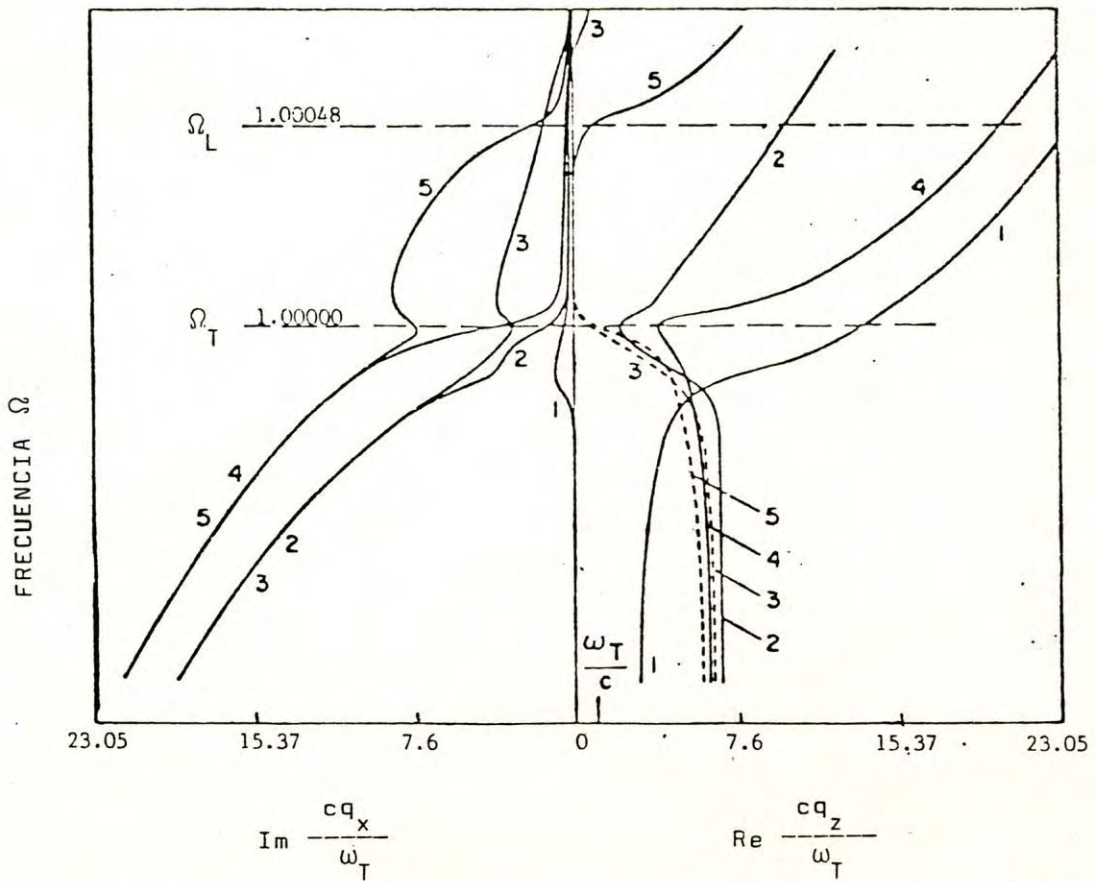
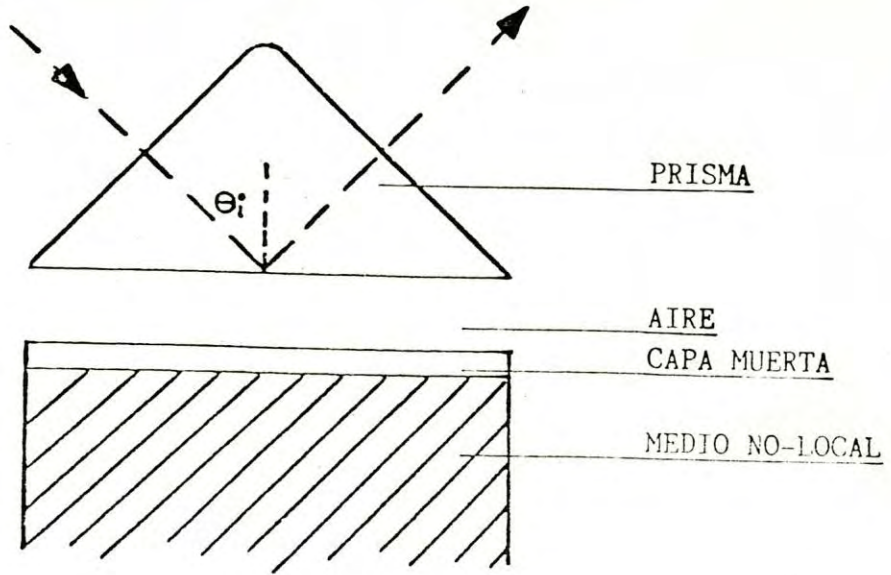


FIGURA 2.2



3.1

FIGURA 3.1

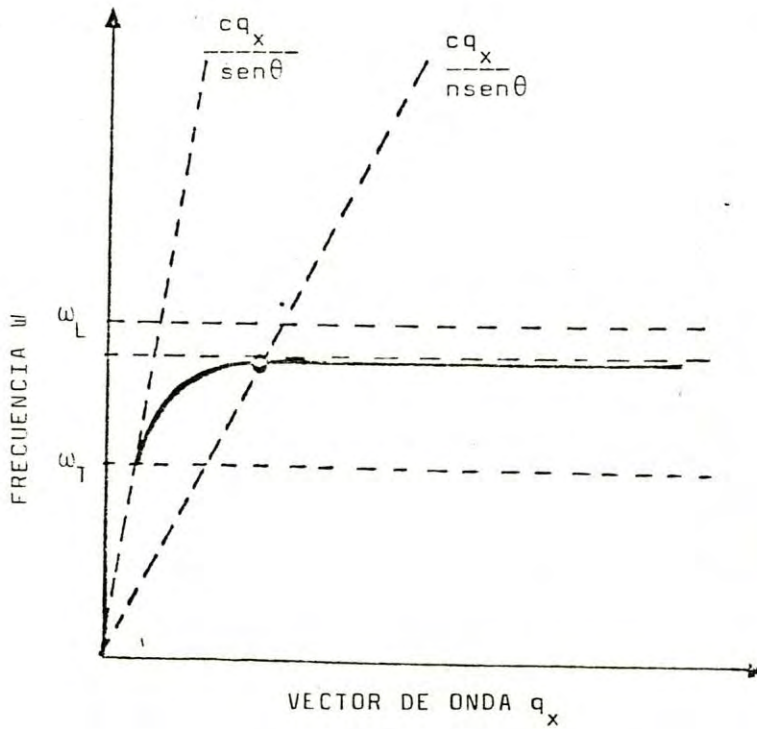


FIGURA 3.2

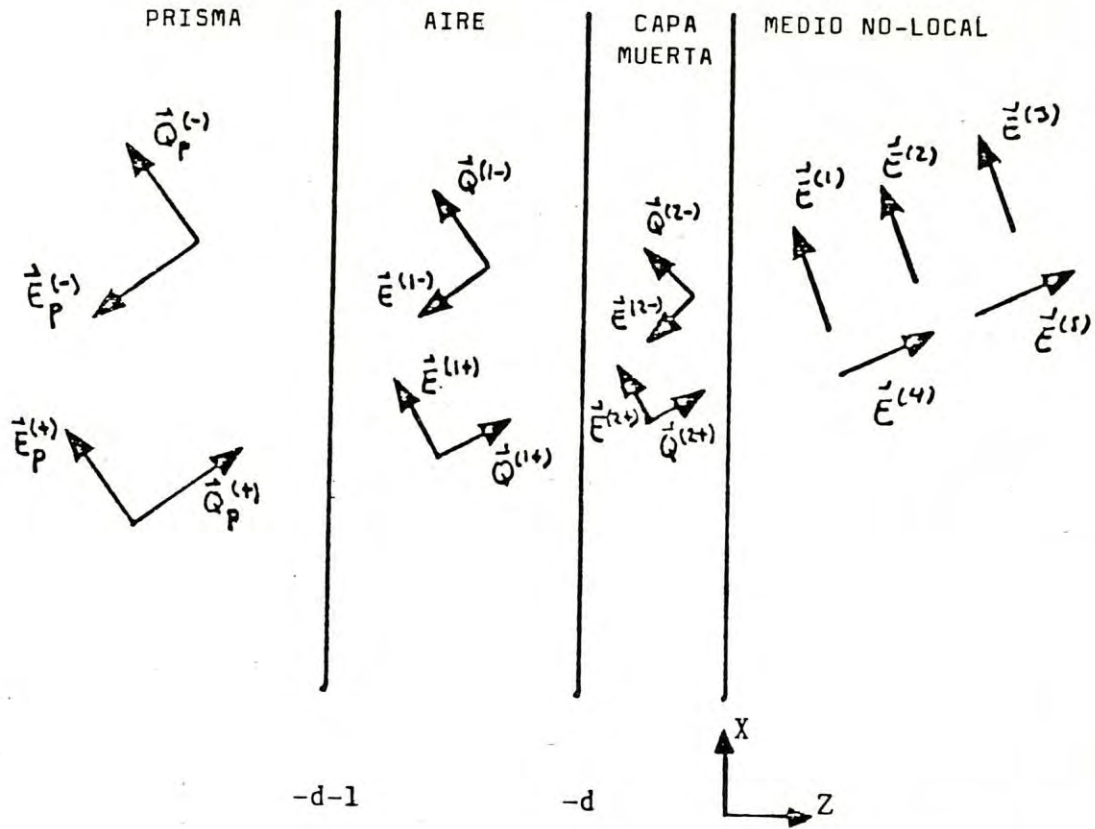


FIGURA 3.3

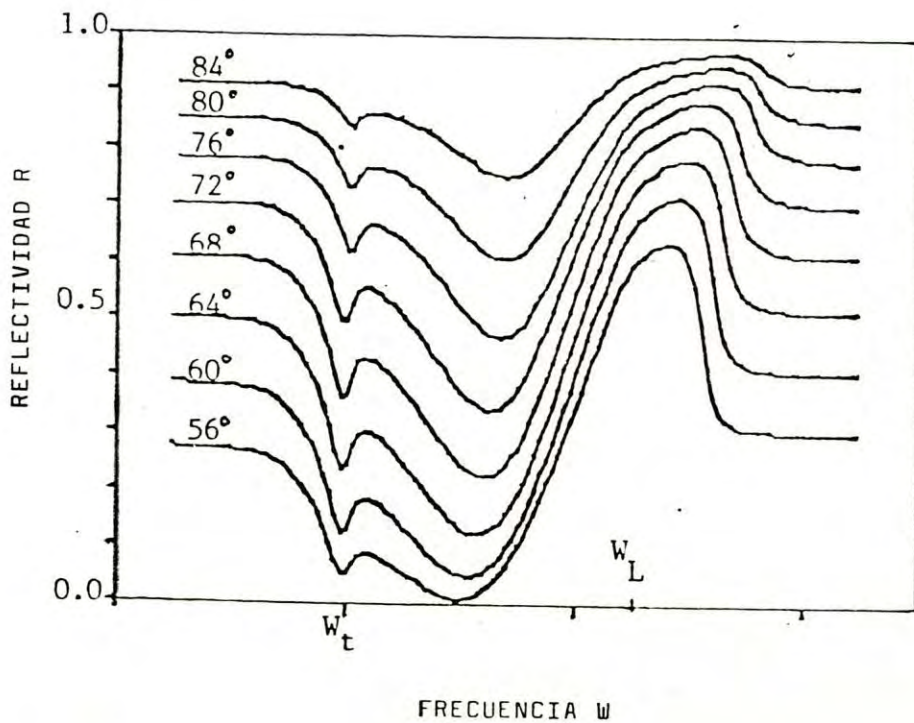


FIGURA 3.4

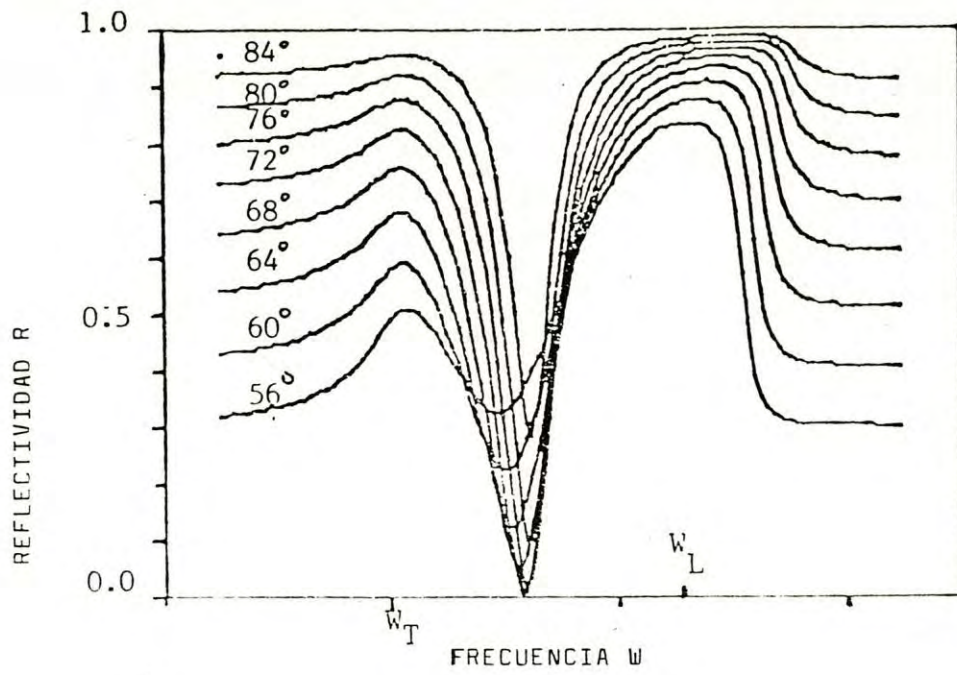


FIGURA 3.5

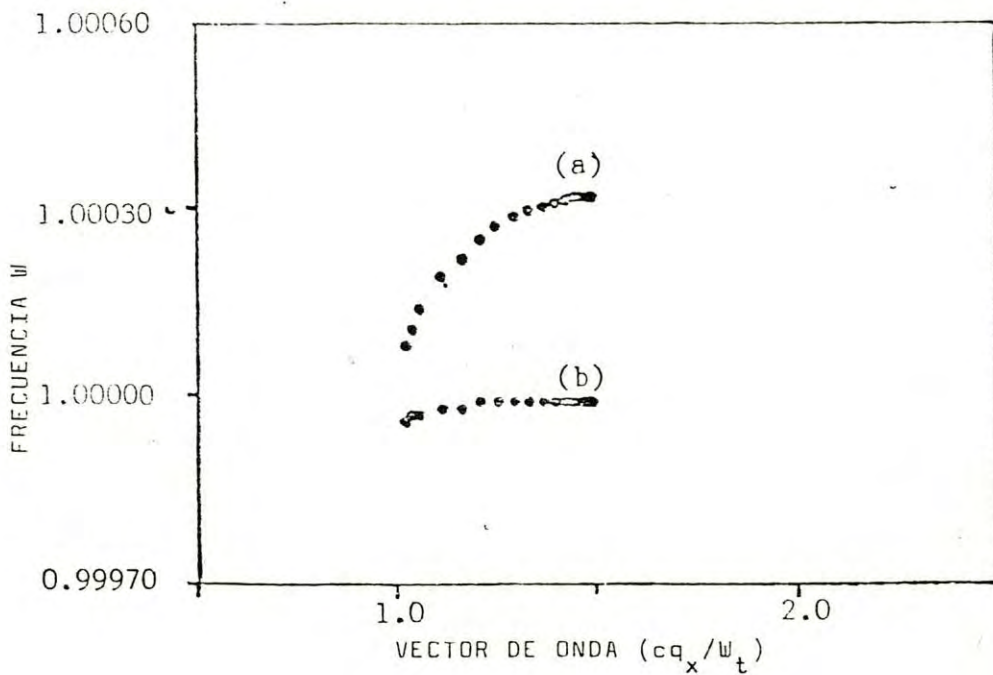


FIGURA 3.6

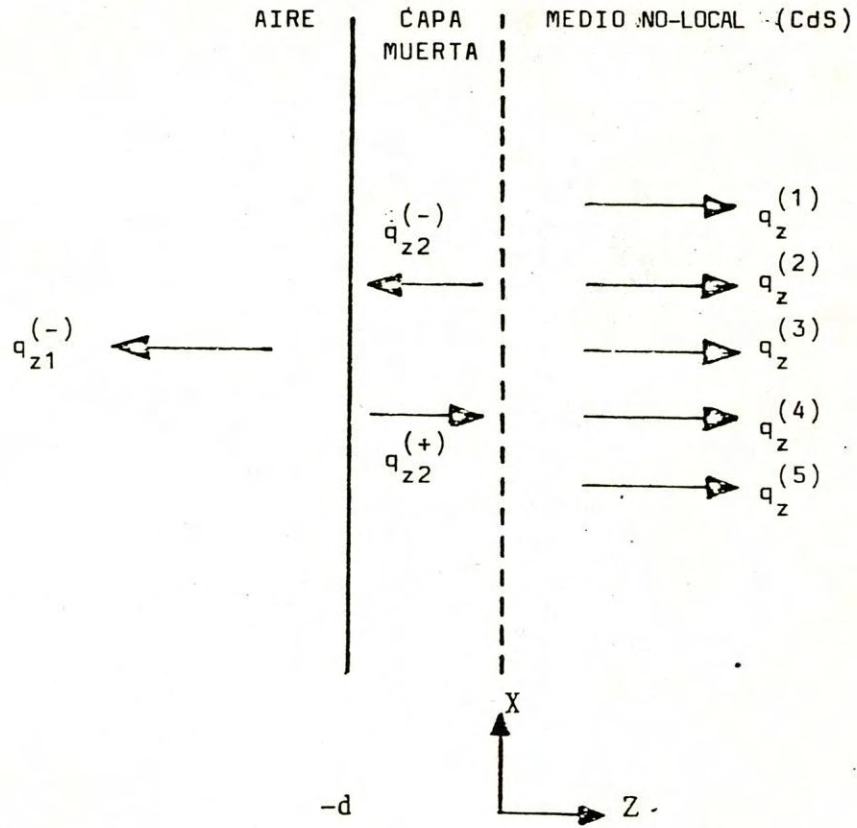
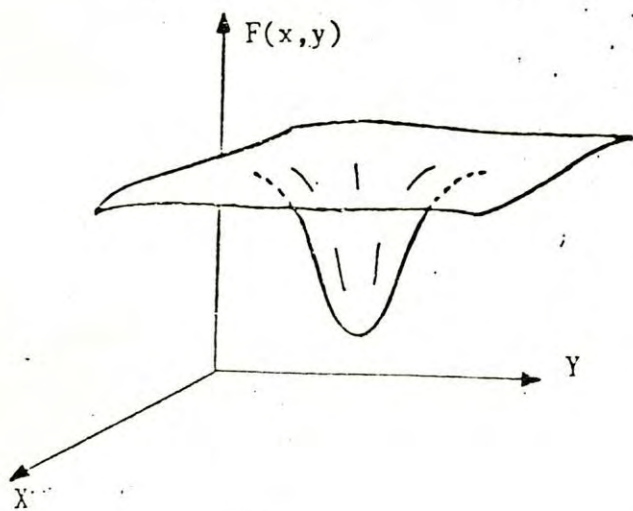
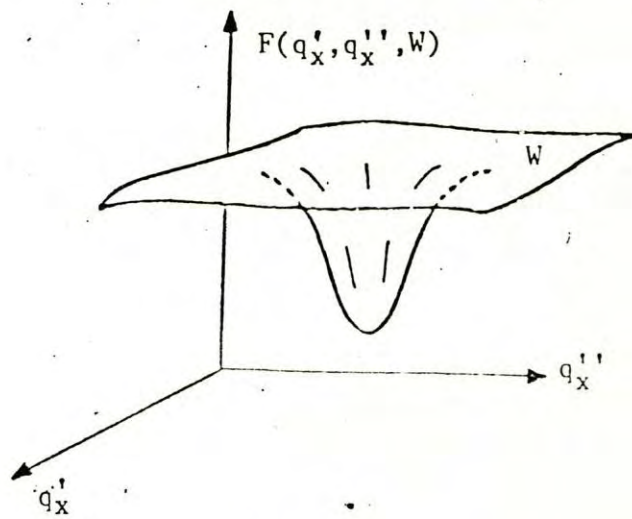


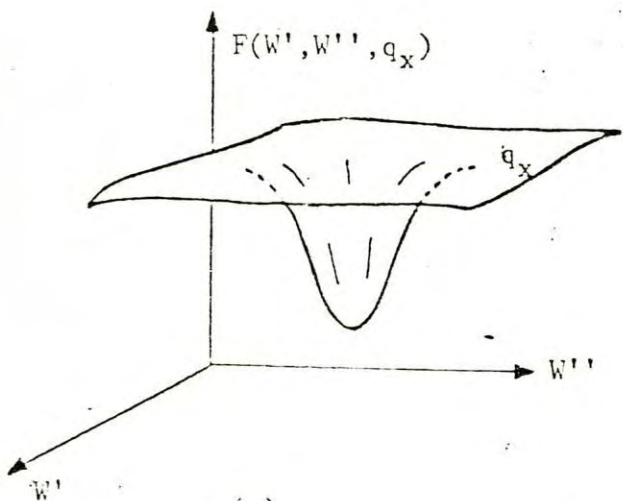
FIGURA 4.1



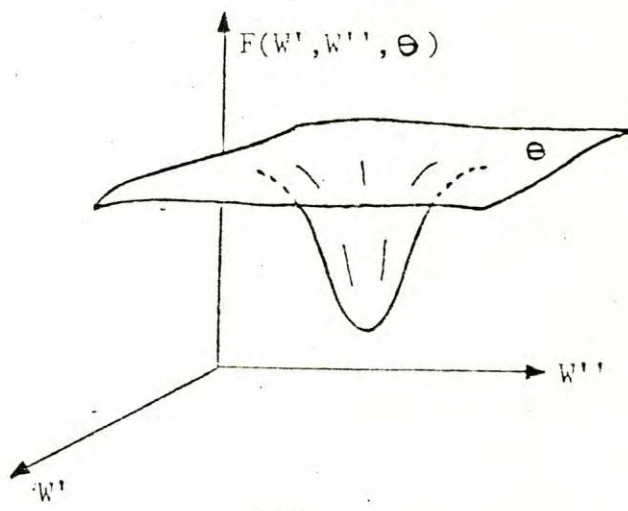
(a)



(b)



(c)



(d)

FIGURA 4.2

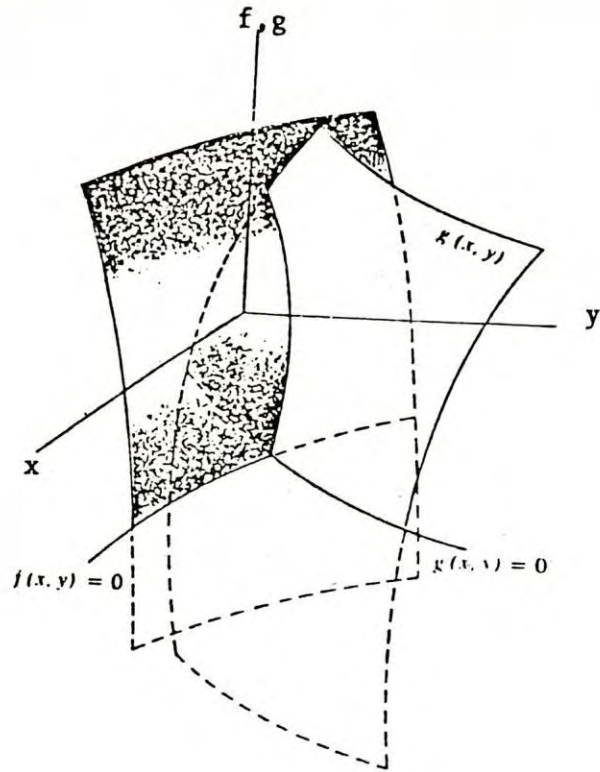


FIGURA 4.3

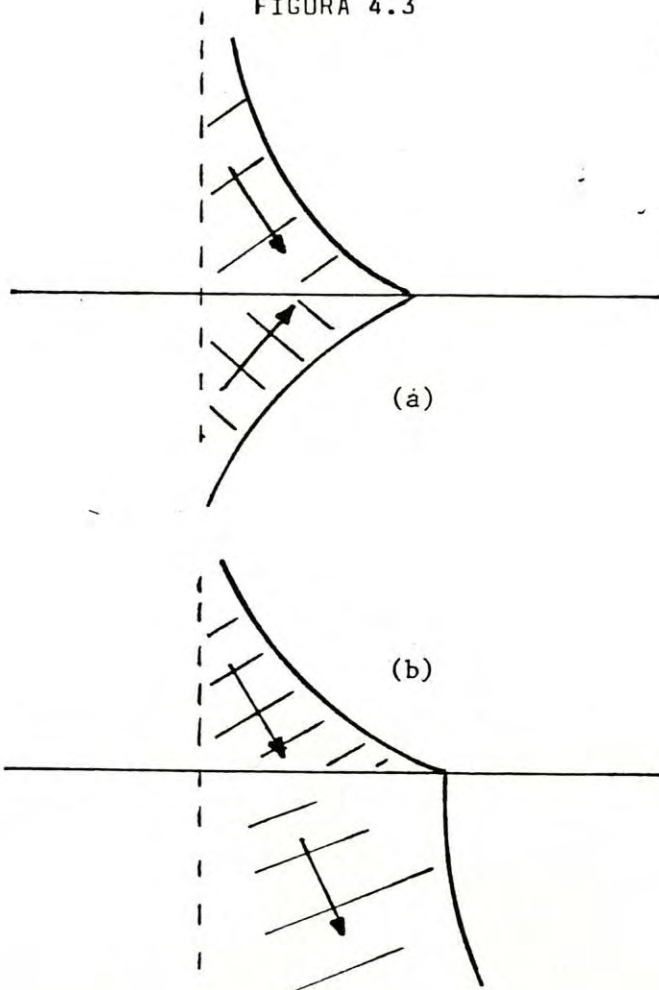


FIGURA 4.4

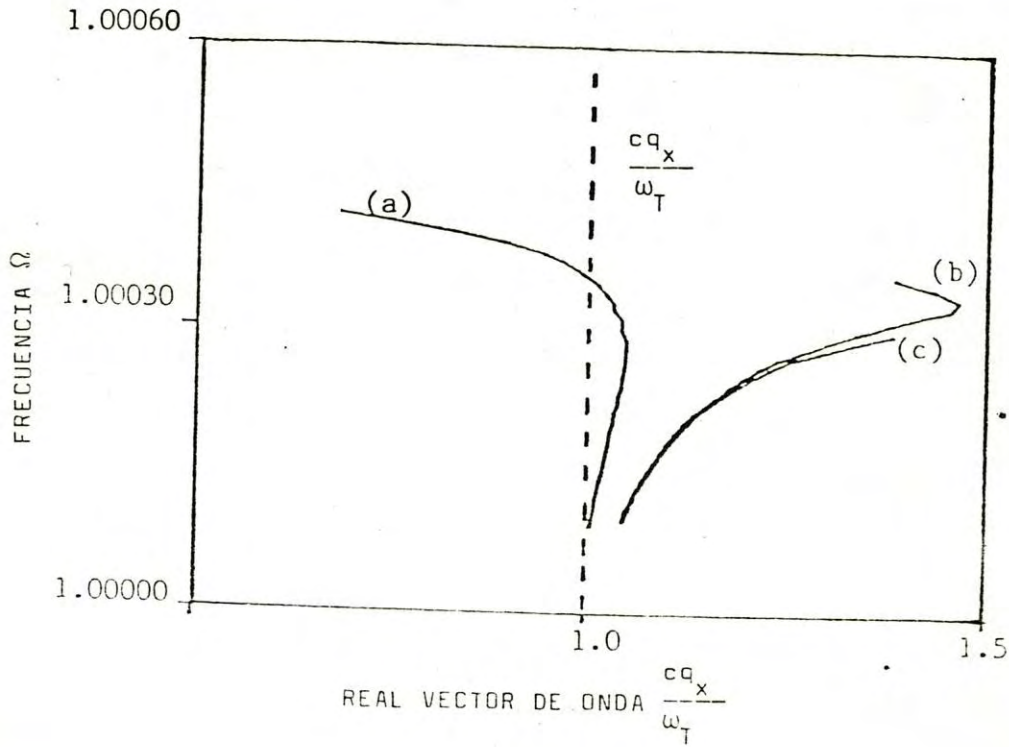


FIGURA 5.1

- a) Ansat no local y fenomenológico
- b) Ansat fenomenológico
- c) polaritón "limpio"

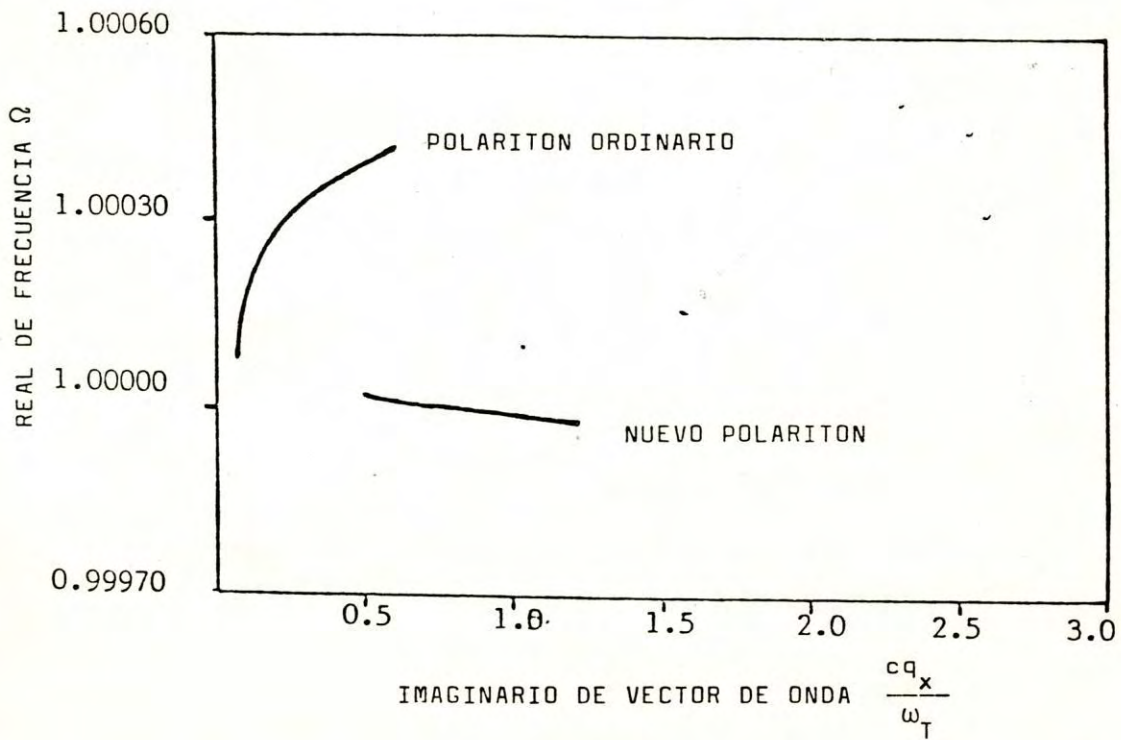
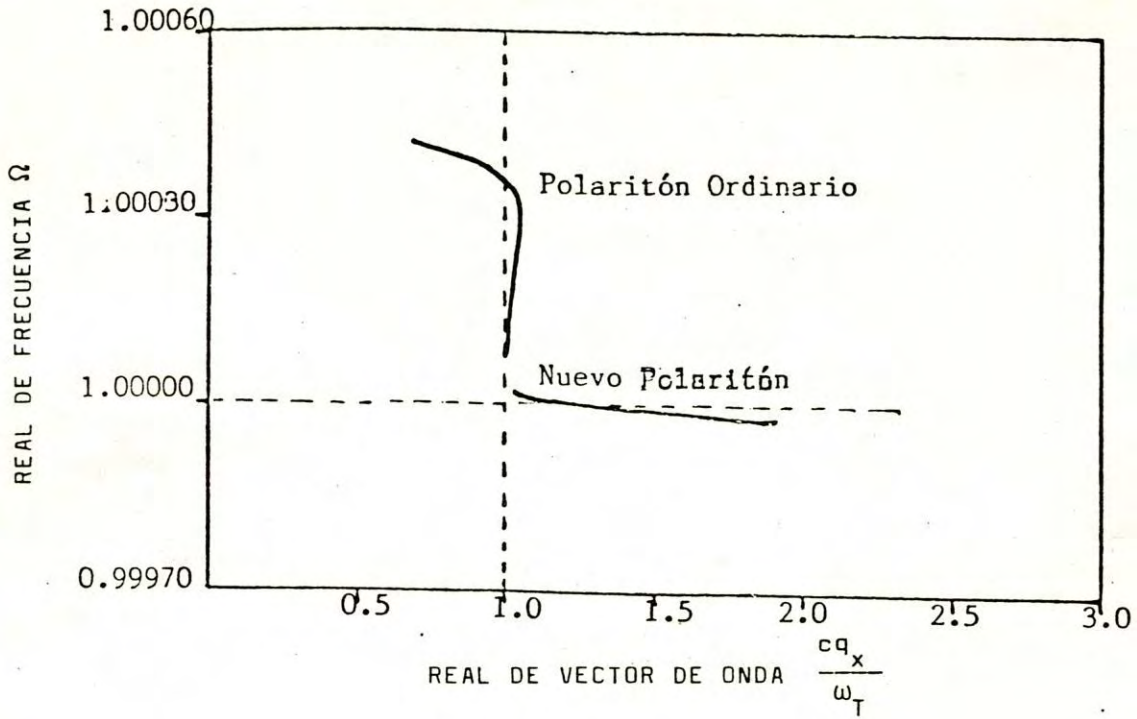


FIGURA 5.2

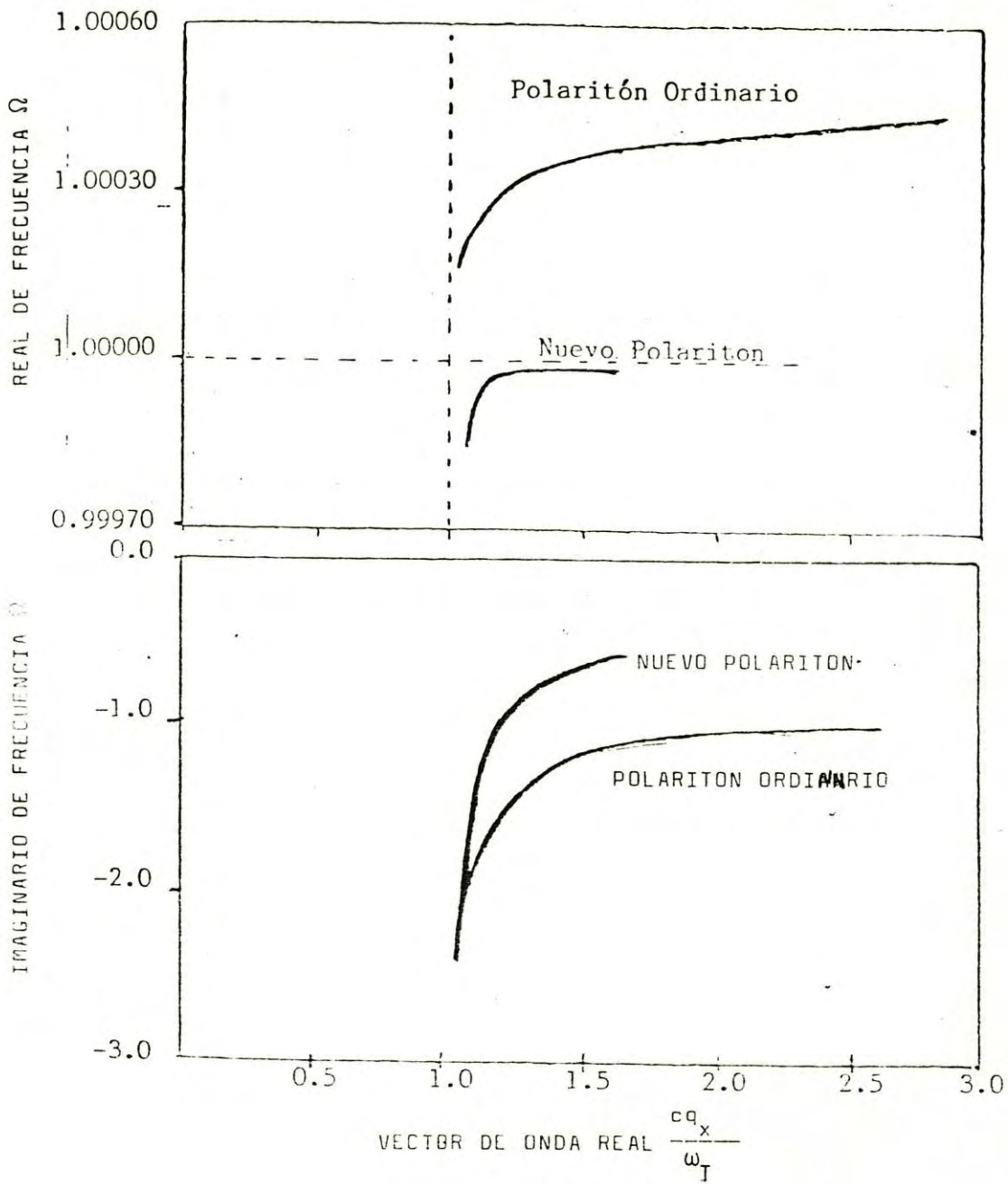


FIGURA 5.3

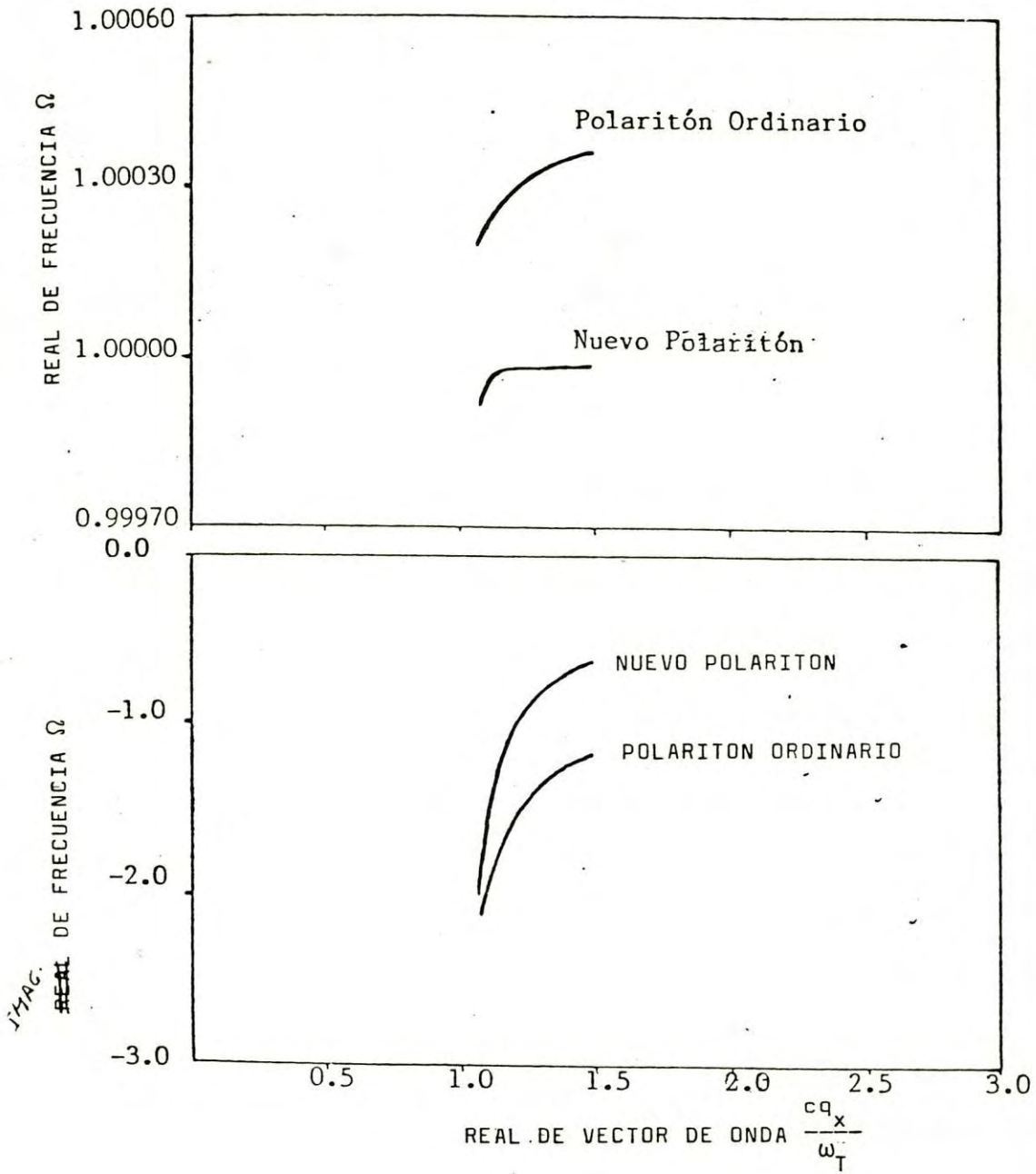


FIGURA 5.4

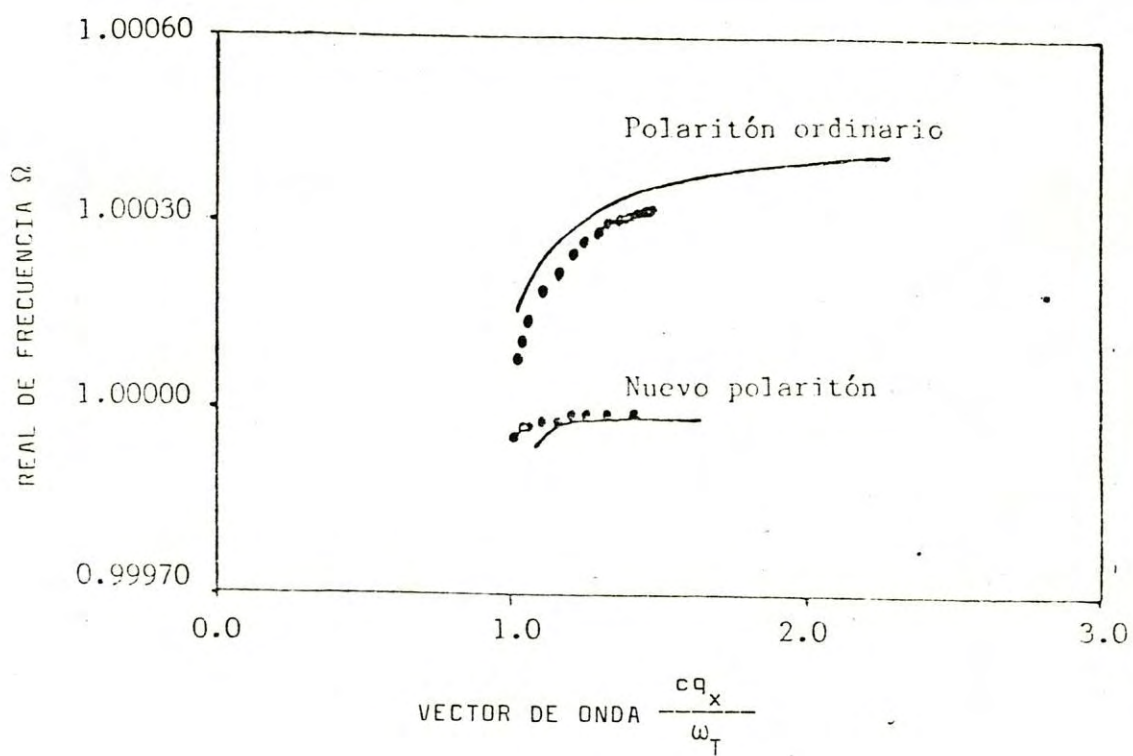


FIGURA 5.5

Ω	q_x	q_{z1}	$q_z^{(1)}$	$q_z^{(2)}$	$q_z^{(3)}$	$q_z^{(4)}$	$q_z^{(5)}$
1.00042	(0.689, 0.623)	(-1.045, 0.412)	(22.55, 0.201)	(9.24, 0.157)	(-0.269, 1.10)	(19.22, 0.245)	(0.333, 4.21)
1.00032	(1.039, 0.280)	(-0.539, 0.541)	(20.91, 0.230)	(7.75, 0.176)	(-0.046, 2.06)	(17.22, 0.295)	(0.200, 6.49)
1.00022	(1.034, 0.134)	(-0.340, 0.409)	(19.12, 0.272)	(6.27, 0.194)	(0.049, 2.75)	(14.84, 0.378)	(0.137, 7.86)
1.00012	(1.010, 0.081)	(-0.275, 0.300)	(17.04, 0.328)	(4.79, 0.203)	(0.044, 3.37)	(11.71, 0.549)	(0.043, 8.60)
1.00001	(1.235, 0.819)	(-1.046, 0.969)	(13.89, 0.393)	(2.17, 0.775)	(-1.024, 2.98)	(4.10, 2.965)	(-0.94, 7.66)
1.00000	(1.256, 0.838)	(-1.054, 0.996)	(13.86, 0.391)	(2.14, 0.812)	(-1.125, 2.98)	(4.02, 3.083)	(-0.99, 7.64)
0.99999	(1.544, 1.015)	(-1.185, 1.326)	(13.51, 0.372)	(1.86, 1.264)	(-1.633, 3.13)	(3.52, 4.496)	(-1.65, 7.49)
0.99998	(1.906, 1.205)	(-1.334, 1.715)	(13.14, 0.336)	(1.71, 1.646)	(-2.076, 3.45)	(3.55, 5.654)	(-2.31, 7.65)

TABLA 5.1

Ω	q_x	q_{z1}	$q_z^{(1)}$	$q_z^{(2)}$	$q_z^{(3)}$	$q_z^{(4)}$	$q_z^{(5)}$
(1.000425, -1.0×10^{-4})	2.406	(-4.6×10^{-5} , 2.19)	(22.44, -1.30)	(8.96, -1.24)	(-0.29, 2.58)	(19.15, -1.58)	(-2.03, 5.34)
(1.000324, -1.4×10^{-4})	1.266	(-1.8×10^{-4} , 0.78)	(21.04, -2.08)	(7.76, -1.86)	(-0.75, 2.14)	(17.47, -2.63)	(-1.98, 7.05)
(1.000226, -1.9×10^{-4})	1.086	(-4.6×10^{-4} , 0.42)	(19.65, -3.33)	(6.33, -2.79)	(-1.33, 2.57)	(15.90, -4.36)	(-1.99, 8.60)
(1.000163, -2.3×10^{-4})	1.031	(-9.2×10^{-4} , 0.25)	(18.68, -4.27)	(5.08, -3.37)	(-1.97, 2.99)	(14.90, -5.73)	(-1.82, 9.56)
(0.999981, -5.4×10^{-5})	1.734	(-3.8×10^{-5} , 1.41)	(-13.28, 1.38)	(-2.86, 1.99)	(1.22, 3.98)	(-5.81, 5.79)	(1.66, 8.70)
(0.999982, -5.6×10^{-5})	1.689	(-4.1×10^{-5} , 1.35)	(-13.30, 1.42)	(-2.90, 1.96)	(1.21, 3.99)	(-5.89, 5.79)	(1.65, 8.72)
(0.999983, -6.2×10^{-5})	1.505	(-5.5×10^{-5} , 1.12)	(-13.40, 1.63)	(-3.09, 1.87)	(1.16, 4.07)	(-6.34, 5.82)	(1.57, 8.88)
(0.999982, -8.3×10^{-5})	1.275	(-1.1×10^{-4} , 0.79)	(-13.56, 2.30)	(-3.46, 1.79)	(1.01, 4.44)	(-7.41, 6.25)	(1.42, 9.36)

TABLA 5.2

Ω	q_x	q_{z1}	$q_z^{(1)}$	$q_z^{(2)}$	$q_z^{(3)}$	$q_z^{(4)}$	$q_z^{(5)}$
(1.000360, -1.1×10^{-4})	(1.47, -1.74×10^{-4})	(1.28×10^{-4} , 1.08)	(21.64, -1.64)	(8.31, -1.50)	(-1.77, 2.87)	(18.19, -2.04)	(-1.53, 6.29)
(1.000320, -1.4×10^{-4})	(1.27, -1.77×10^{-4})	(1.09×10^{-4} , 0.78)	(21.07, -2.06)	(7.78, -1.84)	(-1.01, 2.34)	(17.51, -2.60)	(-1.98, 7.02)
(1.000270, -1.7×10^{-4})	(1.14, -1.93×10^{-4})	(9.54×10^{-5} , 0.56)	(20.33, -2.69)	(7.05, -2.33)	(-0.74, 2.14)	(16.65, -3.46)	(-2.01, 7.88)
(1.000170, -2.2×10^{-4})	(1.04, -2.32×10^{-4})	(6.53×10^{-5} , 0.29)	(18.95, -4.04)	(5.43, -3.25)	(-0.55, 2.06)	(15.15, -5.49)	(-1.88, 9.33)
(.9999830, -6.3×10^{-5})	(1.49, -9.40×10^{-5})	(7.46×10^{-5} , 1.11)	(-13.40, 1.64)	(-3.10, 1.87)	(1.55, 4.08)	(-6.36, 5.82)	(1.57, 8.89)
(.9999833, -6.8×10^{-5})	(1.41, -9.60×10^{-5})	(6.85×10^{-5} , 1.00)	(-13.45, 1.80)	(-3.21, 1.82)	(1.11, 4.16)	(-6.66, 5.90)	(1.52, 9.01)
(.9999800, -8.9×10^{-5})	(1.24, -1.11×10^{-4})	(6.60×10^{-5} , 0.74)	(-13.58, 2.49)	(-3.53, 1.79)	(0.97, 4.55)	(-7.64, 6.45)	(1.38, 9.49)
(.9999000, -2.0×10^{-5})	(1.06, -2.10×10^{-4})	(7.05×10^{-5} , 0.35)	(-13.26, 6.48)	(-3.85, 1.50)	(0.57, 7.37)	(-9.97, 10.12)	(1.10, 12.03)

TABLA 5.3

REFERENCIAS

- 1.- S. I. Pekar, Soviet Physics JETP, 6 (33), 758, 1958
- 2.- E. S. Koteles y G. Winterling, Phys. Rev. Letters, 44, 948, 1980
- 3.- A. A. Maradudin y D. L. Mills, Phys. Rev. B, 7, 2787; 1973
- 4.- J. Lagois y B. Fischer, Phys. Rev. B, 17, 3814, 1978
- 5.- P. Halevi, O. B. M. Hardouin Duparc, A. A. Maradudin y R. F. Wallis, Phys. Rev B, 36, 2783, 1987
- 6.- G. D. Mahan y J. J. Hopfield, Phys. Rev., 155, A428, 1964
- 7.- R. S. Knox, Theory of Excitons, Supplement 5, Solid State Physics, Academic Press 1963
- 8.- D. G. Thomas y J. J. Hopfield, Phys. Rev., 116, 573, 1959
- 9.- K. Huang, Proc. Roy. Soc. (London), 206, 352, 1951
- 10.- C. Kittel, INTRODUCCION TO SOLID STATE PHYSICS, Wiley
- 11.- J. D. Jackson, CLASSICAL ELECTRODYNAMICS, Wiley
- 12.- V. M. Agranovich y V. L. Ginzburg, CRISTAL OPTICS WITH SPATIAL DISPERSION AND EXCITONS, Solid State Sciences, 42, Springer Series
- 13.- L. I. Schiff, QUANTUM MECHANICS, McGRAW-HILL
- 14.- O. Madelung, INTRODUCCION TO SOLID-STATE THEORY, Solid State Sciences 2, Springer Series.
- 15.- N. W. Aschcroft y N. D. Mermin, SOLID STATE PHYSICS, Holt-Saunders International Editions
- 16.- P. Halevi y R. Fuchs, J. Phys. C, 17, 3889, 1984
- 17.- I. Broser, K. H. Pantke, M. Rosenzweig, Solid State Communications, 58, 441, 1986
- 18.- P. Halevi y G. H. Coccoletzi, Phys. Rev. Letters, 48, 1500, 1982
- 19.- A. Otto, Z. Physik, 216, 398, 1968
- 20.- G. J. Stegeman, J. J. Burke y D. G. Hall, Opt. Letters, 8, 383, 1983
- 21.- H. A. Scarton, Journal Of Computational Physics, 11, 1, 1973
- 22.- J. Pachner, Handbook of Numerical Analysis Applications, McGRAW-HILL

APENDICE A

Cálculo algebraico para la obtención de la Relación de Dispersión.

El sistema de ecuaciones a resolver es:

$$E_x^{(1-)} e^{iq_z^{(1-)}d} = E_x^{(2+)} e^{-iq_z^{(2+)}d} + E_x^{(2-)} e^{iq_z^{(2-)}d} \quad (1)$$

$$-\frac{\epsilon_0}{q_z^{(1-)}} E_x^{(1-)} e^{iq_z^{(1-)}d} = \frac{\epsilon_0}{q_z^{(2+)}} (E_x^{(2+)} e^{-iq_z^{(2+)}d} - E_x^{(2-)} e^{iq_z^{(2-)}d}) \quad (2)$$

$$E_x^{(2+)} + E_x^{(2-)} = \sum_{k=1}^5 E_x^{(k)} \quad (3)$$

$$\frac{\epsilon_0}{q_z^{(2+)}} E_x^{(2+)} - \frac{\epsilon_0}{q_z^{(2-)}} E_x^{(2-)} = \sum_{k=1}^3 \frac{\epsilon^{(k)}}{q_z^{(k)}} E_x^{(k)} \quad (4)$$

$$\sum_{k=1}^5 \chi^{(k)} + E_x^{(k)} = 0 \quad (5)$$

$$-\sum_{k=1}^3 \chi^{(k)} + \frac{q_x^{(k)}}{q_z^{(k)}} E_x^{(k)} + \sum_{k=4}^5 \chi^{(k)} + \frac{q_z^{(k)}}{q_x^{(k)}} E_x^{(k)} = 0 \quad (6)$$

$$\sum_{k=1}^5 \chi^{(k)} - E_x^{(k)} = 0 \quad (7)$$

$$-\sum_{k=1}^3 \chi^{(k)} - \frac{q_x^{(k)}}{q_z^{(k)}} E_x^{(k)} + \sum_{k=4}^5 \chi^{(k)} - \frac{q_z^{(k)}}{q_x^{(k)}} E_x^{(k)} = 0 \quad (8)$$

Para realizar el manipuleo algebraico reescribimos el sistema:

$$a_1 E_x^{(1-)} = a_2 E_x^{(2+)} + a_3 E_x^{(2-)} \quad (9)$$

$$-b_1 E_x^{(1-)} = b_2 E_x^{(2+)} - b_3 E_x^{(2-)} \quad (10)$$

$$E_x^{(2+)} + E_x^{(2-)} = E_x^{(1)} + E_x^{(2)} + E_x^{(3)} + E_x^{(4)} + E_x^{(5)} \quad (11)$$

$$c_1 E_x^{(2+)} - c_2 E_x^{(2-)} = c_3 E_x^{(1)} + c_4 E_x^{(2)} + c_5 E_x^{(3)} \quad (12)$$

$$d_1 E_x^{(1)} + d_2 E_x^{(2)} + d_3 E_x^{(3)} + d_4 E_x^{(4)} + d_5 E_x^{(5)} = 0 \quad (13)$$

$$f_1 E_x^{(1)} + f_2 E_x^{(2)} + f_3 E_x^{(3)} + f_4 E_x^{(4)} + f_5 E_x^{(5)} = 0 \quad (14)$$

$$g_1 E_x^{(1)} + g_2 E_x^{(2)} + g_3 E_x^{(3)} + g_4 E_x^{(4)} + g_5 E_x^{(5)} = 0 \quad (15)$$

$$h_1 E_x^{(1)} + h_2 E_x^{(2)} + h_3 E_x^{(3)} + h_4 E_x^{(4)} + h_5 E_x^{(5)} = 0 \quad (16)$$

La definición de c/u de los coeficientes es obvia.

DESARROLLO.

Despejando $E_x^{(1)}$ de (16) e introduciéndolo en (15) se tiene:

$$E_x^{(2)} = -\frac{1}{A_1} (A_2 E_x^{(3)} + A_3 E_x^{(4)} + A_4 E_x^{(5)})$$

en donde

$$A_k = -\frac{g_1}{h_1} h_{k+1} + g_{k+1} \quad k=1,2,3,4$$

sustituyendo en (14) las expresiones para $E_x^{(1)}$ y $E_x^{(2)}$ anteriores se obtiene:

$$E_x^{(3)} = - \frac{1}{B_1} (E_x^{(4)} B_2 + E_x^{(5)} B_3)$$

en donde

$$B_k = \left(- \frac{f_1 h_2}{h_1} + f_2 \right) \left(- \frac{A_{k+1}}{A_1} \right) + f_{k+2} - \frac{f_1 h_{k+2}}{h_1}$$

k=1,2,3

Introduciendo los resultados para $E_x^{(1)}$, $E_x^{(2)}$ y $E_x^{(3)}$ en (13) se tiene:

$$E_x^{(4)} = \frac{\hat{C}_2}{\hat{C}_1} E_x^{(5)}$$

con

$$\hat{C}_k = \left[\left(- \frac{d_1 h_2}{h_1} + d_2 \right) \left(- \frac{A_2}{A_1} \right) + d_3 - \frac{d_1 h_3}{h_1} \right] \left(- \frac{B_{k+1}}{B_1} \right) + \left(d_2 - \frac{d_1 h_2}{h_1} \right) \left(- \frac{A_{k+2}}{A_1} \right) + d_{k+3} - \frac{d_1 h_{k+3}}{h_1}$$

k=1,2

Con los resultados anteriores, las ecuaciones (12) y (11) nos permiten obtener 2 soluciones para $E_x^{(5)}$

$$E_x^{(5)} = \frac{1}{F} (c_1 E_x^{(2+)} - c_2 E_x^{(2-)})$$

$$E_x^{(5)} = \frac{E_x^{(2+)} + E_x^{(2-)}}{H}$$

en donde

$$F = D_2 - \frac{\hat{C}_2}{C_1} D_1$$

$$D_k = \left[\left(-\frac{C_3 h_2}{h_1} + C_4 \right) \left(-\frac{A_2}{A_1} \right) + C_5 - \frac{h_3}{h_1} C_3 \right] \left(-\frac{B_{k+1}}{B_1} \right) +$$

$$+ \left(C_4 - \frac{h_2}{h_1} C_3 \right) \left(-\frac{A_{k+2}}{A_1} \right) - \frac{C_3 h_{k+3}}{h_1} \quad k=1, 2$$

$$H = \left(-\frac{\hat{C}_2}{C_1} \right) \left(G_2 - \frac{B_2 G_1}{B_1} \right) + G_3 - \frac{B_3}{B_1} G_1$$

$$G_k = \left(1 - \frac{h_2}{h_1} \right) \left(-\frac{A_{k+1}}{A_1} \right) + 1 - \frac{h_{k+2}}{h_1} \quad k=1, 2, 3$$

Iguando las expresiones para $E_x^{(5)}$ se obtiene:

$$E_x^{(2+)} = \frac{C_2 H + F}{C_1 H - F} E_x^{(2-)}$$

con esto las ecuaciones 9 y 10 se reducen a las siguientes expresiones:

$$a_1 E_x^{(1-)} - \left[a_2 \left(\frac{C_2 H + F}{C_1 H - F} \right) + a_3 \right] E_x^{(2-)} = 0$$

$$-b_1 E_x^{(1-)} - \left[b_2 \left(\frac{C_2 H + F}{C_1 H - F} \right) - b_3 \right] E_x^{(2-)} = 0$$

La solución distinta de cero para los campos se obtiene solo si el determinante de los coeficientes se anula

$$a_1 \left[b_2 \left(\frac{C_2 H + F}{C_1 H - F} \right) - b_3 \right] + b_1 \left[a_2 \left(\frac{C_2 H + F}{C_1 H - F} \right) + a_3 \right] = 0$$

Sustituyendo las definiciones originales

$$\frac{\epsilon_{\infty} H + q_z^{(2)} F}{\epsilon_{\infty} H - q_z^{(2)} F} + \left(\frac{\epsilon_0 q_z^{(2)} - \epsilon_{\infty} q_z^{(1-)}}{\epsilon_0 q_z^{(2)} + \epsilon_{\infty} q_z^{(1)}} \right) e^{2iq_z^{(2)} d} = 0$$

H y F son funciones de las susceptibilidades eléctricas del medio no-local, de las correspondientes constantes dieléctricas y de los vectores de Onda.

APENDICE B

```

C PROGRAM FL21
C SUBROUTINA EIGENVALLES (FELAT)
C PROGRAMA PARA CALCULAR LA RELACION DE DISPERSION CON FRE-
C CUENCIA COMPLEJA Y VECTOR DE ONDA REAL
SUBROUTINE FELAT(FUN,EO,E00,WP,DC2,PSI,GA,D,DXR,QZ1,QZ2,
*QZ3,QZ4,QZ5,QZO1,WR,WI,ZOR,ZOI,Z1R,Z1I,Z2R,Z2I,Z3R,Z3I,Z4R,
*Z4I,Z5R,Z5I)
COMPLEX CC,CE00,CPS1,CPSI2,CDC2,CWP,CWP2,CGA,CW,CW2,CGM2,X1,
*X2,X3,S1,S2,S3,S4,QO1,QO2,QO3,QX,QX2,QZ1,QZ2,QZ3,QZ4,QZ5,S5,
*S6,S7,S8,S9,CE0,QZO1,QZO2,Q1,Q2,Q3,Q4,Q5,PJ1,PJ2,PJ3,PJ4,
*PJ5,AN1,AN2,AN3,AN4,AN5,CD,SS1,SS2,A1,A2,A3,B1,B2,B3,C1,C2,
*EPS1,EPS2,EPS3,C3,C4,C5,D1,D2,D3,D4,D5,F1,F2,F3,F4,F5,G1,G2,
*G3,G4,G5,H1,H2,H3,H4,H5,AA1,AA2,AA3,AA4,BB1,BB2,BB3,CC1,
*CC2,CC3,DDD1,DD1,DD2,FF,GG1,GG2,GG3,HH,FUN,CP1,QQ4,QQ5,QQX,
*QQIM,WWI,WW,CUN,FL,QZ2M,QZ3M
C *****
C *****
C ***** EL CALCULO SE BASA COMPLETAMENTE EN EL DESARROLLO DE LA
C RELACION DE DISPERSION HECHO EN EL APENDICE A *****
C *****
CE0=CMPLX(EO,0.0)
CE00=CMPLX(E00,0.0)
CWP=CMPLX(WP,0.0)
CWP2=CWP*CWP
CDC2=CMPLX(DC2,0.0)
CPS1=CMPLX(PSI,0.0)
CPSI2=CPS1+CPS1
CGA=CMPLX(GA,0.0)
CD=CMPLX(D,0.0)
PI=4.0*ATAN(1.0)
CP1=CMPLX(PI,0.0)
CCR=COS(2.0*PI/3.0)
CCI=SIN(2.0*PI/3.0)
CC=CMPLX(CCR,CCI)
CW=CMPLX(WR,WI)
DX=CMPLX(DXR,0.0)
CW2=CW*CW
P1=REAL(CW)
P2=AIMAG(CW)
GMR=(1.0-P1*P1+P2*P2+GA*P2)/DC2
GM1=-(2.0*P1*P2+GA*P1)/DC2
CGM2=CMPLX(GMR,GM1)
X1=2.0*CGM2-CE00*CW2-CPSI2
X2=CE00*CPSI2*CW2+CGM2*(CGM2-2.0*CE00*CW2)-CWP2*CW2/CDC2
X3=- (CE00*CW2*CGM2+CWP2*CW2/CDC2)+CGM2
S1=(3.0*X2-X1*X1)/9.0
S2=(9.0*X1*X2-27.0*X3-2.0*X1*X1*X1)/54.0
S3=DSQRT(S2*S2+S1*S1*S1)
S4=(S2+S3)**(1.0/3.0)
QO1=S4-S1/S4-X1/3.0
QO2=CC*S4-CC*CC*S1/S4-X1/3.0
QO3=CC*CC*S4-CC*S1/S4-X1/3.0
QX2=QX*QX

```

```

QZ1=CSQRT(QQ1-QX2)
QZ2M=CSQRT(QQ2-QX2)
QZ3M=CSQRT(QQ3-QX2)
S5=2.0*CGM2-CPSI2+CWP2/(CE00*CDC2)
S6=CGM2*CGM2+(CWP2*CGM2)/(CE00*CDC2)
S7=CSQRT(S5*S5-4.0*S6)
S8=(-S5+S7)/2.0
S9=(-S5-S7)/2.0
QZ4=CSQRT(S8-QX2)
QZ5=CSQRT(S9-QX2)
C   WRITE(*,*)QZ1,QZ2,QZ3,QZ4,QZ5
QQ4=CSQRT(S8)
QQ5=CSQRT(S9)
QZ01=CSQRT(CW2*CE0-QX2)
QZ02=CSQRT(CW2*CE00-QX2)
QZ2MN=ABS(REAL(QZ2M))
QZ3MN=ABS(REAL(QZ3M))
IF(QZ2MN-QZ3MN)4,5,5
5   QZ2=QZ2M
    QZ3=QZ3M
    GO TO 10
4   QZ2=QZ3M
    QZ3=QZ2M
10  IF(1-Z0R)10,11,14
    IF(REAL(QZ01)-0.0)13,14,14
13  QZ01=-QZ01
    GO TO 14
11  IF(REAL(QZ01)-0.0)14,16,16
16  QZ01=-QZ01
14  IF(1-Z0I)17,18,19
17  IF(AIMAG(QZ01)-0.0)20,19,19
20  QZ01=-QZ01
    GO TO 19
18  IF(AIMAG(QZ01)-0.0)19,23,23
23  QZ01=-QZ01
19  IF(1-Z1R)24,25,28
24  IF(REAL(QZ1)-0.0)27,28,28
27  QZ1=-QZ1
    GO TO 28
25  IF(REAL(QZ1)-0.0)28,29,29
29  QZ1=-QZ1
28  IF(1-Z1I)30,31,34
30  IF(AIMAG(QZ1)-0.0)33,34,34
33  QZ1=-QZ1
    GO TO 34
31  IF(AIMAG(QZ1)-0.0)34,36,36
36  QZ1=-QZ1
34  IF(1-Z2R)35,75,37
35  IF(REAL(QZ2)-0.0)38,37,37
38  QZ2=-QZ2
    GO TO 37
75  IF(REAL(QZ2)-0.0)37,39,39
39  QZ2=-QZ2
37  IF(1-Z2I)40,41,42
40  IF(AIMAG(QZ2)-0.0)43,42,42

```

```

43   QZ2=-QZ2
      GO TO 42
41   IF (AIMAG(QZ2)-0.0) 42,44,44
44   QZ2=-QZ2
42   IF (1-Z3R) 45,46,47
45   IF (REAL(QZ3)-0.0) 48,47,47
48   QZ3=-QZ3
      GO TO 47
46   IF (REAL(QZ3)-0.0) 47,49,49
49   QZ3=-QZ3
47   IF (1-Z3I) 50,51,52
50   IF (AIMAG(QZ3)-0.0) 53,52,52
53   QZ3=-QZ3
      GO TO 52
51   IF (AIMAG(QZ3)-0.0) 52,54,54
54   QZ3=-QZ3
52   IF (1-Z4R) 55,56,57
55   IF (REAL(QZ4)-0.0) 58,57,57
58   QZ4=-QZ4
      GO TO 57
56   IF (REAL(QZ4)-0.0) 57,59,59
59   QZ4=-QZ4
57   IF (1-Z4I) 60,61,62
60   IF (AIMAG(QZ4)-0.0) 63,62,62
63   QZ4=-QZ4
      GO TO 62
61   IF (AIMAG(QZ4)-0.0) 62,64,64
64   QZ4=-QZ4
62   IF (1-Z5R) 65,66,67
65   IF (REAL(QZ5)-0.0) 68,67,67
68   QZ5=-QZ5
      GO TO 67
66   IF (REAL(QZ5)-0.0) 67,69,69
69   QZ5=-QZ5
67   IF (1-Z5I) 70,71,72
70   IF (AIMAG(QZ5)-0.0) 73,72,72
73   QZ5=-QZ5
      GO TO 72
71   IF (AIMAG(QZ5)-0.0) 72,74,74
74   QZ5=-QZ5
72   Q1=CSQRT(QX2+QZ1*QZ1)
75   Q2=CSQRT(QX2+QZ2*QZ2)
76   Q3=CSQRT(QX2+QZ3*QZ3)
77   Q4=CSQRT(QX2+QZ4*QZ4)
78   Q5=CSQRT(QX2+QZ5*QZ5)
79   D1=CWP2/((8.0*CF1*(CGM2+Q1*Q1+Q1*CFI1))*CDC2)
80   D2=CWP2/((8.0*CF1*(CGM2+Q2*Q2+Q2*CFI1))*CDC2)
81   D3=CWP2/((8.0*CF1*(CGM2+Q3*Q3+Q3*CFI1))*CDC2)
82   D4=CWP2/((8.0*CF1*(CGM2+Q4*Q4+Q4*CFI1))*CDC2)
83   D5=CWP2/((8.0*CF1*(CGM2+Q5*Q5+Q5*CFI1))*CDC2)
84   G1=CWP2/((8.0*CF1*(CGM2+Q1*Q1-Q1*CFI1))*CDC2)
85   G2=CWP2/((8.0*CF1*(CGM2+Q2*Q2-Q2*CFI1))*CDC2)
86   G3=CWP2/((8.0*CF1*(CGM2+Q3*Q3-Q3*CFI1))*CDC2)
87   G4=CWP2/((8.0*CF1*(CGM2+Q4*Q4-Q4*CFI1))*CDC2)
88   G5=CWP2/((8.0*CF1*(CGM2+Q5*Q5-Q5*CFI1))*CDC2)

```



```

SS1=QZ01*CD
SS2=QZ02*CD
A1R=(COS(REAL(SS1)))*EXP(-AIMAG(SS1))
A1I=(SIN(REAL(SS1)))*EXP(-AIMAG(SS1))
A1=CMPLX(A1R,A1I)
A2R=(COS(REAL(SS2)))*EXP(AIMAG(SS2))
A2I=(-SIN(REAL(SS2)))*EXP(AIMAG(SS2))
A2=CMPLX(A2R,A2I)
A3R=(COS(REAL(SS2)))*EXP(-AIMAG(SS2))
A3I=(SIN(REAL(SS2)))*EXP(-AIMAG(SS2))
A3=CMPLX(A3R,A3I)
B1=CE0*A1/QZ01
B2=CE00*A2/QZ02
B3=CE00*A3/QZ02
C1=CE00/QZ02
C2=CE00/QZ02
EPS1=Q1*Q1/CW2
EPS2=Q2*Q2/CW2
EPS3=Q3*Q3/CW2
C3=EPS1/QZ1
C4=EPS2/QZ2
C5=EPS3/QZ3
F1=-D1*QX/QZ1
F2=-D2*QX/QZ2
F3=-D3*QX/QZ3
F4=D4*QZ4/QX
F5=D5*QZ5/QX
H1=-G1*QX/QZ1
H2=-G2*QX/QZ2
H3=-G3*QX/QZ3
H4=G4*QZ4/QX
H5=G5*QZ5/QX
AA1=G2-(G1*H2)/H1
AA2=G3-(G1*H3)/H1
AA3=G4-(G1*H4)/H1
AA4=G5-(G1*H5)/H1
BB1=((-F1*H2/H1)+F2)*(-AA2/AA1)+F3-(F1*H3)/H1
BB2=((-F1*H2/H1)+F2)*(-AA3/AA1)+F4-(F1*H4)/H1
BB3=((-F1*H2/H1)+F2)*(-AA4/AA1)+F5-(F1*H5)/H1
CCC1=((-D1*H2/H1)+D2)*(-AA2/AA1)+D3-(D1*H3)/H1
CC1=-((CCC1*BB2/BB1)+(D2-(D1*H2)/H1)*(-AA3/AA1)+D4-(D1*H4)/H1
CC2=-((CCC1*BB3/BB1)+(D2-(D1*H2)/H1)*(-AA4/AA1)+D5-(D1*H5)/H1
DDD1=(C4-(C3*H2/H1))*(-AA2/AA1)+C5-(C3*H3)/H1
DD1=DDD1*(-BB2/BB1)+(C4-(C3*H2)/H1)*(-AA3/AA1)-C3*H4/H1
DD2=DDD1*(-BB3/BB1)+(C4-(C3*H2)/H1)*(-AA4/AA1)-C3*H5/H1
FF=-((CC2*DD1/CC1)+DD2
CUN=CMPLX(1.0,0.0)
GG1=(-H2/H1+CUN)*(-AA2/AA1)+CUN-H3/H1
GG2=(-H2/H1+CUN)*(-AA3/AA1)+CUN-H4/H1
GG3=(-H2/H1+CUN)*(-AA4/AA1)+CUN-H5/H1
HH=(-CC2/CC1)*(GG2-BB2*GG1/BB1)+GG3-BB3*GG1/BB1
FL=(C2*HH+FF)/(C2*HH-FF)
FUN=A1*(B2*FL-B3)+B1*(A2*FL+A3)
RETURN
END

```

APENDICE C

```

C   PROGRAMA FL22
C   METODO DE MINIMIZACION DE NEWTON
C   PROGRAMA FL22-ITERFEL PARA REALIZAR LAS ITERACIONES
C   Y ASI ENCONTRAR LOS MINIMOS DE LA FUNCION F(QX,W)
COMPLEX FUN,QZ1,QZ2,QZ3,QZ4,QZ5,QZ01
DIMENSION EE(150),WE(8,150),EF(150),WF(8,150)
OPEN (9,FILE='RAM2.DAT',STATUS='NEW')
WRITE(9,299)
299  FORMAT(' EO,E00,WF,DC2,PSI,GA,D')
C   ***** PARAMETROS *****
E0=1.0
E00=7.2
WF=.0838
DC2=4.18766E-6
PSI=13.55
GA=2.921E-5
D=0.091
QXI=0.0
C   ***** ARCHIVO 9 *****
WRITE(9,*)EO,E00,WF,DC2,PSI,GA,D
WRITE(*,300)
WRITE(9,300)
C   ***** INFORMACION PARA INICIAR LA ITERACION *****
300  READ(*,*)QXR,DOXR,M,WR,WI,DHR,DH1,N
FORMAT(' QXR,DOXR,M,WR,WI,DHR,DH1,N')
WRITE(+,45)
WRITE(9,*)QXR,DOXR,M,WR,WI,DHR,DH1,N
WRITE(9,44)
44   FORMAT(' QZ1,QZ2,QZ3,QZ4,QZ5')
WRITE(9,45)
45   FORMAT(' QXREAL,WREAL,WIMAGINARIA,FUNCION')
C   ***** SELECCION DE SIGNOS DE QZ'S *****
C   WRITE(+,46)
46   FORMAT(' ESCOJA SIGNO NEG,NAT,POS (1,0,2)')
WRITE(+,47)
47   FORMAT(' REAL DE QZ0,IMAGINARIO DE QZ0')
READ(+,*)Z0R,Z0I
WRITE(+,48)
48   FORMAT(' REAL DE QZ1,IMAGINARIO DE QZ1')
READ(+,*)Z1R,Z1I
WRITE(+,49)
49   FORMAT(' REAL DE QZ2,IMAGINARIO DE QZ2')
READ(+,*)Z2R,Z2I
WRITE(+,50)
50   FORMAT(' REAL DE QZ3,IMAGINARIO DE QZ3')
READ(+,*)Z3R,Z3I
WRITE(+,51)
51   FORMAT(' REAL DE QZ4,IMAGINARIO DE QZ4')
READ(+,*)Z4R,Z4I
WRITE(+,52)
52   FORMAT(' REAL DE QZ5,IMAGINARIO DE QZ5')
READ(+,*)Z5R,Z5I
C   *****
C   ***** INICIA CALCULO SEGUN ALGORITMO NEWTON *****

```

```

QXR=QXR-DQXR
DO 15 J=1,M
QXR=QXR+DQXR
DO 17 I=1,N
WR=WR+DHR
CALL FELAT(FUN,EO,E00,WP,DC2,PSI,GA,D,QXR,QZ1,QZ2,QZ3,QZ4,
*QZ5,QZO1,WR,WI,ZOR,ZOI,Z1R,Z1I,Z2R,Z2I,Z3R,Z3I,Z4R,Z4I,Z5R,Z5I)
F1=REAL(FUN)
F2=AIMAG(FUN)
C   WRITE(*,*)F1,F2,W
WR=WR-2.0*DHR
CALL FELAT(FUN,EO,E00,WP,DC2,PSI,GA,D,QXR,QZ1,QZ2,QZ3,QZ4,
*QZ5,QZO1,WR,WI,ZOR,ZOI,Z1R,Z1I,Z2R,Z2I,Z3R,Z3I,Z4R,Z4I,Z5R,Z5I)
F3=REAL(FUN)
F4=AIMAG(FUN)
C   WRITE(*,*)F3,F4,W
WR=WR+DHR
WI=WI+DHI
CALL FELAT(FUN,EO,E00,WP,DC2,PSI,GA,D,QXR,QZ1,QZ2,QZ3,QZ4,
*QZ5,QZO1,WR,WI,ZOR,ZOI,Z1R,Z1I,Z2R,Z2I,Z3R,Z3I,Z4R,Z4I,Z5R,Z5I)
F5=REAL(FUN)
F6=AIMAG(FUN)
C   WRITE(*,*)F5,F6,W
WI=WI-2.0*DHI
CALL FELAT(FUN,EO,E00,WP,DC2,PSI,GA,D,QXR,QZ1,QZ2,QZ3,QZ4,
*QZ5,QZO1,WR,WI,ZOR,ZOI,Z1R,Z1I,Z2R,Z2I,Z3R,Z3I,Z4R,Z4I,Z5R,Z5I)
F7=REAL(FUN)
F8=AIMAG(FUN)
S1=F1-F3
S2=F2-F4
S3=F5-F7
S4=F6-F8
DF1WR=S1/(2.0*DHR)
DF2WR=S2/(2.0*DHR)
DF1WI=S3/(2.0*DHI)
DF2WI=S4/(2.0*DHI)
JACOB=DF1WR*DF2WI-DF1WI*DF2WR
C   WRITE(*,*)S1,S2,S3,S4,JACOB
WI=WI+DHI
CALL FELAT(FUN,EO,E00,WP,DC2,PSI,GA,D,QXR,QZ1,QZ2,QZ3,QZ4,
*QZ5,QZO1,WR,WI,ZOR,ZOI,Z1R,Z1I,Z2R,Z2I,Z3R,Z3I,Z4R,Z4I,Z5R,Z5I)
WMR=WR
WMI=WI
WR=WMR-(REAL(FUN)*DF2WI-AIMAG(FUN)*DF1WI)/JACOB
WI=WMI-(AIMAG(FUN)*DF1WR-REAL(FUN)*DF2WR)/JACOB
CALL FELAT(FUN,EO,E00,WP,DC2,PSI,GA,D,QXR,QZ1,QZ2,QZ3,QZ4,
*QZ5,QZO1,WR,WI,ZOR,ZOI,Z1R,Z1I,Z2R,Z2I,Z3R,Z3I,Z4R,Z4I,Z5R,Z5I)
FL=SQRT(REAL(FUN)*REAL(FUN)+AIMAG(FUN)*AIMAG(FUN))
WRITE(*,*)QZO1
WRITE(*,*)QZ1,QZ2,QZ3,QZ4,QZ5
WRITE(*,*)QXR,WR,WI,FL
IF(I-N)17,33,33
33 WRITE(9,*)QZO1
WRITE(9,*)QZ1,QZ2,QZ3,QZ4,0
WRITE(9,*)QXR,WR,WI,FL

```

```
EE(J)=QXR  
WE(1,J)=WR  
EF(J)=QXR  
WF(1,J)=WI  
17 CONTINUE  
15 CONTINUE  
CALL ENG(M,EE,WE,0.2,5.0)  
CALL ENG(M,EF,WF,0.2,5.0)  
CLOSE (9)  
STOP  
END
```

La subrutina ENG se utiliza para crear un archivo de datos para graficarse en ENERGRAPHICS. Fué adaptada para FORTRAN 77 por el estudiante ALVARO DIONI FERREIRA del Departamento de Física de la Universidad de Sonora.