



00382
6

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FISICAS
FACULTAD DE CIENCIAS

DIFRACCION DE ONDAS MONOCROMATICAS Y PULSOS
A TRAVES DE REJILLAS DIELECTRICAS
ESPACIO-TEMPORALE S.

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)
P R E S E N T A :
S A R A N I L S E N H O F S E T H

DIRECTOR DE TESIS: DR. VICTOR MANUEL ROMERO ROCHIN

MEXICO, D. F.

pcf

MAYO DE 2003

posgrado de ciencias físicas

1

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

PAGINACIÓN DISCONTINUA

**TESIS
CON
FALLA DE
ORIGEN**

Til Mormor og Mamma og Pappa

Mis más sinceros agradecimientos los dirijo al Dr. Víctor Manuel Romero Rochín por haber dirigido esta Tesis.

También agradezco a los miembros de mi sínodo, por sus sugerencias y comentarios.

A todos mis amigos del Instituto de Física de la UNAM.

Finalmente, deseo agradecer el apoyo económico para la realización de este trabajo a la Secretaría de Relaciones Exteriores, a la Dirección General de Estudios de Posgrado y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, a través de los proyectos 32634-E y G3273-E de DGEF.

Índice general

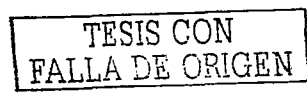
. Índice general	II
. Índice de figuras	VII
1. INTRODUCCIÓN Y ANTECEDENTES	1
2. DIFRACCIÓN DE ONDAS MONOCROMÁTICAS POR UNA REJILLA ESPACIALMENTE MODULADA	15
2.1. Eficiencia de Difracción	15
2.1.1. Teoría	15
2.1.2. Resultados numéricos	27
2.2. Relación de dispersión	30
2.2.1. Teoría	30
2.2.2. Resultados numéricos de la relación de dispersión	32
2.3. Resonancia de modos guiados	36
2.3.1. El origen físico de las resonancias	38
2.3.2. Dependencia de ϵ_1	40
2.4. Picos de Bragg	44
2.5. Resumen y conclusiones	48
3. DIFRACCIÓN DE PULSOS GAUSSIANOS POR REJILLAS ESPACIO-TEMPORALES	51
3.1. Resultados experimentales en $LiTaO_3$	51
3.2. Teoría	57
3.2.1. Pulso Gaussiano	57
3.2.2. Rejilla espacio-temporal lineal	57
3.2.3. Rejilla espacio-temporal no lineal	60
3.3. Resultados numéricos	70
3.3.1. Rejilla de difracción espacio-temporal lineal: el pulso incide con el ángulo de Bragg correspondiente al vector de onda K de la rejilla	71

3.3.2.	Rejilla de difracción espacio-temporal no lineal: el pulso incide con el ángulo de Bragg correspondiente al vector de onda fundamental, K , de la rejilla	73
3.3.3.	Rejilla de difracción espacio-temporal no lineal: el pulso incide con el ángulo de Bragg correspondiente al segundo sobretono del vector de onda fundamental, $2K$, de la rejilla	81
3.3.4.	Rejilla de difracción espacio-temporal no lineal: el pulso incide con el ángulo de Bragg correspondiente al tercer sobretono del vector de onda fundamental, $3K$, de la rejilla	84
3.4.	Resumen	89
4.	DISCUSION Y CONCLUSIONES	91
4.1.	Difracción de una onda monocromática por una rejilla dieléctrica espacialmente modulada estática	92
4.2.	Difracción de un pulso Gaussiano por una rejilla espacio-temporal	94
A.	Deducción de la eficiencia de difracción	99
A.1.	Difracción de una onda monocromática por una rejilla estática	99
A.2.	Difracción de un pulso por una rejilla espacio-temporal	101
B.	El sistema de $4n$ ecuaciones con $4n$ incógnitas $A\vec{x} = \vec{b}$ escrito explícitamente.	105
B.1.	Polarización s	105
B.2.	Polarización p	107
C.	Deducción de la relación de dispersión en el límite $\epsilon_1 \rightarrow 0$.	109
C.1.	Polarización s	109
C.2.	Polarización p	111
D.	Cálculo numérico de la la eficiencia de difracción	113
D.1.	como función de tiempo de retraso de un pulso Gaussiano de polarización s difractado por una rejilla espacio-temporal no-lineal.	128
D.2.	Los "headings" de las subrutinas de paquetería que emplean mis programas	144
E.	Publicaciones	149
.	Bibliografía	151

<p style="text-align: center;">TESIS CON FALLA DE ORIGEN</p>
--

Índice de figuras

1.1. Experimento de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva con dos pulsos de excitación. Dos pulsos, de frecuencias centrales y vectores de onda (ω_1, \vec{k}_1) y (ω_2, \vec{k}_2) y de duración más corta que un período de oscilación del modo vibracional a excitar, son sobrepuestos de manera espacial y temporal en el cristal. Este proceso genera polaritones-fonones coherentes $(\Omega, \pm \vec{K})$ contrapropagantes que forman una onda estacionaria en el cristal y cuyo vector de onda está determinado por la diferencia entre los vectores de onda de los dos pulsos de excitación $\vec{K} = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$	2
1.2. Relación de dispersión del polaritón-fonón. Para vectores de onda grandes, la razón de la rama superior se aproxima asintóticamente a $c/\sqrt{\epsilon(\infty)}$, donde c es la velocidad de la luz en el vacío y $\epsilon(\infty)$ es la constante dieléctrica en el infrarrojo cercano; es decir, el polaritón-fonon tiende a un fotón con velocidad del material. Esta rama inicia con el valor de la frecuencia longitudinal de los fonones óticos. La rama inferior tiene al principio la razón $c/\sqrt{\epsilon(0)}$, donde $\epsilon(0)$ es la constante dieléctrica en el infrarrojo lejano, y luego se aproxima al valor ω_T , la frecuencia transversal; en este caso el polaritón fonón se aproxima a un fonón óptico transversal. (figura p. 258 O. Madelung, <i>Introduction to Solid-State Theory, Springer Series in Solid-State Sciences 2, Springer-Verlag, 1978.</i>)	3
2.1. El sistema.	16
2.2. La eficiencia de difracción transmitida total como función de la frecuencia ω de una onda monocromática que incide con ángulo $\theta = 28^\circ$ sobre una rejilla (2.1) de anchura $d = 10,0K^{-1}$, con $\epsilon_0 = 3$ y $\epsilon_1 = 0,121$. (a) La onda incidente tiene polarización s . (b) La onda incidente tiene polarización s . (c) La primera resonancia en el caso de polarización s de la onda incidente graficado en el intervalo de frecuencia $\omega = 0,470751cK^{-1}$ a $\omega = 0,470752cK^{-1}$	29
2.3. (a) La rejilla de difracción (2.1) sin campos incidentes. (b) Guía de ondas convencional.	30



- 2.4. La primera Zona de Brilluin de la relación de dispersión $\omega = \omega(k_x)$ de una rejilla (2.1) con $\epsilon_0 = 3$ y $\epsilon_1 = 0,121$ en el caso de polarización s . (a) Las regiones limitadas desde abajo por las líneas punteadas y desde arriba por las líneas sólidas son las regiones de resonancia (ver texto). (b) Las líneas sólidas gruesas representan la relación de dispersión de los modos guiados de una rejilla de anchura $d = 1K^{-1}$. (c) La relación de dispersión para una rejilla de anchura $d = 10K^{-1}$ representada por las líneas sólidas gruesas. (d) La relación de dispersión para la rejilla en (b) en una orilla de la Zona de Brillouin calculada con la teoría exacta. Las ramas se abren en brechas. 34
- 2.5. Relación de dispersión correspondiente al caso TE para una rejilla (2.1) con $\epsilon_0 = 3$, $\epsilon_1 = 0,121$ y de espesor $d = 10,0K^{-1}$, representada por las líneas sólidas gruesas. La línea punteada gruesa representa la frecuencia ω de una onda monocromática de polarización s incidente con ángulo $\theta = 28^\circ$ sobre la rejilla, como función de k_x . La línea punteada gruesa $\frac{\omega}{c} = \frac{k_x}{\sin(28^\circ)}$ cruza las ramas en la relación de dispersión para nueve valores de la frecuencia en el intervalo $0 < \frac{\omega}{cK} < 1$ 37
- 2.6. La eficiencia de difracción como función de la anchura d de la rejilla con $\epsilon_0 = 3$ y $\epsilon_1 = 0,121$ para una onda monocromática incidente con ángulo $\theta = 28^\circ$ y frecuencia $\omega = 0,6cK^{-1}$. Esta combinación de los valores de los parámetros del sistema corresponde a dos eigenmodos propagantes en la rejilla (2.1) y un orden de difracción propagante en su exterior. 39
- 2.7. (a) Primera resonancia de la eficiencia de difracción transmitida por una rejilla de ancho $d = 1,0K^{-1}$ con $\epsilon_0 = 3$, $\epsilon_1 = 0,1, 0,2, \dots, 1,0$, como función de la frecuencia ω de una onda monocromática de polarización s que incide con ángulo $\theta = 28^\circ$. (b) Primera resonancia de la eficiencia de difracción transmitida por una rejilla de anchura $d = 5,0K^{-1}$ para los mismos datos que en (a). 42
- 2.8. (a) Desplazamiento $(\omega - \omega_1)$ de la primera resonancia correspondiente al caso cuando el espesor de la rejilla es $d = 1,0K^{-1}$ graficada en la **figura 2.7a** (línea sólida) y de la primera resonancia correspondiente al caso cuando $d = 5,0K^{-1}$ graficada en la **figura 2.7b** (línea punteada) como función de ϵ_1 . Los demás parámetros toman los mismos valores como en la **figura 2.7**. (b) Ensanchamiento $\Delta\omega$ de la primera resonancia correspondiente al caso cuando el espesor de la rejilla es $d = 1,0K^{-1}$ graficada en la **figura 2.7a** (línea sólida) y de la primera resonancia correspondiente al caso cuando $d = 5,0K^{-1}$ graficada en la **figura 2.7b** (línea punteada) como función de ϵ_1 . 43

- 2.9. La eficiencia de difracción transmitida como función del ángulo de incidencia θ de una onda monocromática de polarización s con frecuencia $\omega = 1,3cK^{-1}$ para tres diferentes anchuras de la rejilla $d = 10K^{-1}, 50K^{-1}, 100K^{-1}$. (a) El orden de difracción $l = -1$. El pico está ubicado en el ángulo de Bragg (2.80) con $n = 1$. (b) El orden de difracción $l = -2$. El pico está ubicado en el ángulo de Bragg (2.80) con $n = 2$ 45
- 2.10. La eficiencia de difracción transmitida como función del ángulo de incidencia θ de una onda monocromática de polarización s con frecuencia $\omega = 2,0cK^{-1}$ para tres diferentes anchuras de la rejilla $d = 10K^{-1}, 50K^{-1}, 100K^{-1}$. (a) El orden de difracción $l = -1$. El pico está ubicado en el ángulo de Bragg (2.80) con $n = 1$. (b) El orden de difracción $l = -2$. El pico está ubicado en el ángulo de Bragg (2.80) con $n = 2$ 46
- 3.1. Eficiencia de difracción como función del tiempo de retraso T del pulso de prueba difractado, para el caso cuando los polaritones-fonones en $LiTaO_3$ son excitados de manera armónica con pulsos de excitación no muy intensos. El pulso de prueba incide con el ángulo de empatamiento de fase ("phase-matching") correspondiente al vector de onda K de la rejilla espacio-temporal lineal. (p. 20, [9].) 53
- 3.2. Eficiencia de difracción como función del tiempo de retraso T . El espectro de abajo muestra un caso para pulsos de excitación de alta energía ($130\mu J$). El espectro de arriba muestra un ejemplo para pulsos de excitación no muy intensos ($28\mu J$). En ambos casos, el pulso de prueba incide con el ángulo de empatamiento de fase correspondiente al vector de onda K de la rejilla espacio-temporal. En la inclusión vemos la transformada de Fourier del espectro obtenido con pulsos de excitación de alta energía que muestra respuesta hasta el noveno sobretono en la frecuencia fundamental Ω . (p. 9692, [8]) 55
- 3.3. Espectroscopía de Sobretonos del Vector de Onda para un caso cuando el pulso de prueba incide con ángulo de empatamiento de fase del quinto sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla. Incluido vemos la transformación de Fourier de la eficiencia de difracción graficada como función del tiempo de retraso T que muestra respuesta para las frecuencias $\Omega(5K)$ y $2\Omega(5K)$. (p. 9693, [8]) 56

- 3.4. (a) Eficiencia de difracción transmitida total η_+ como función del tiempo de retraso para el caso de una rejilla espacio-temporal lineal (3.3). El ancho de la rejilla es $d = 55K^{-1}$, y los demás parámetros son $\Omega = 1,64Kc$, $K = 2,7 \times 10^5 m^{-1}$, $\epsilon_0 = 5,4756$ y $\epsilon_1 = 0,465$. La duración del pulso es $\tau = 1,62K^{-1}c^{-1}$, incide con ángulo $\theta = 3^\circ$ y su frecuencia central es $\tilde{\omega} = \frac{1}{2 \sin \theta} Kc$. Estos valores satisfacen la relación de Bragg (2.80). (b) Transformada de Fourier del espectro en (a). Vemos que son seleccionadas las componentes espectrales correspondientes a dos veces la frecuencia Ω de la rejilla. 72
- 3.5. (a) Eficiencia de difracción transmitida total η_+ como función del tiempo de retraso para una rejilla no lineal (3.53) formada por dos pulsos de excitación de energía total de $50\mu J$. Los parámetros de la función dieléctrica son los de la primera columna de la tabla 4.2. La constante dieléctrica de fondo es $\epsilon_0 = 5,4756$. La anchura de la rejilla es $d = 55K^{-1}$ y se consideró $K = 2,7 \times 10^5 m^{-1}$. Las frecuencias de la rejilla son $\Omega_K = 1,64Kc$, $\Omega_{2K} = 1,64(\frac{239}{126})Kc$ y $\Omega_{3K} = 1,64(\frac{289}{126})Kc$. La duración del pulso es $\tau = 1,62K^{-1}c^{-1}$ y el ángulo de incidencia es $\theta = 3^\circ$. La frecuencia central está dada por la relación de Bragg (2.80). (b) Transformada de Fourier del espectro en (a). (c) Transformada de Fourier de la eficiencia de difracción transmitida correspondiente al orden de difracción $l = -1$ 75
- 3.6. (a) Eficiencia de difracción transmitida total η_+ como función del tiempo de retraso en el caso de una rejilla espacio-temporal no lineal (3.53) formada por pulsos de excitación de energía total de $110\mu J$. Los valores de los parámetros que caracterizan la función dieléctrica son los de la segunda columna de la tabla 4.2. La anchura de la rejilla es $d = 40K^{-1}$. Todos los demás valores son los mismos que en la figura 3.5. (b) Transformada de Fourier del espectro en (a). (c) Transformada de Fourier de la eficiencia de difracción transmitida correspondiente al orden de difracción $l = -1$ como función del tiempo de retraso. 80
- 3.7. (a) Eficiencia de difracción transmitida total η_+ como función del tiempo de retraso para una rejilla espacio-temporal no lineal (3.53) formada por pulsos de excitación de $50\mu J$. El pulso incidente está centrado en la frecuencia $\tilde{\omega}$ dada por la relación de Bragg (2.80) correspondiente al segundo sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla: $\tilde{\omega} = \frac{Kc}{\sin(3^\circ)}$. Los demás parámetros del sistema tienen los mismos valores que en la figura 3.5. (b) Transformada de Fourier del espectro en (a). (c) Transformada de Fourier de la eficiencia de difracción transmitida correspondiente al orden de difracción $l = -2$ 83

- 3.8. (a) Eficiencia de difracción transmitida total η_+ como función del tiempo de retraso para una rejilla espacio-temporal no lineal (3.53) formada por pulsos de excitación de $50\mu J$. El pulso incidente está centrado en la frecuencia $\bar{\omega}$ dada por la relación de Bragg (2.80) correspondiente al tercer sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla: $\bar{\omega} = \frac{3K_c}{2\sin(3\sigma)}$. Los demás parámetros del sistema tienen los mismos valores que en la **figura 3.5.** (b) Transformada de Fourier del espectro en (a). (c) Transformada de Fourier de la eficiencia de difracción transmitida correspondiente al orden de difracción $l = -3$. . . 86
- 3.9. (a) Eficiencia de difracción transmitida total η_+ como función del tiempo de retraso en el caso de la rejilla espacio-temporal no lineal (3.53) formada por pulsos de excitación de $110\mu J$. El pulso incidente está centrado en la frecuencia $\bar{\omega}$ dada por la relación de Bragg (2.80) correspondiente al tercer sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla: $\bar{\omega} = \frac{3K_c}{2\sin(3\sigma)}$. Los demás parámetros del sistema tienen los mismos valores que en la **figura 3.5.** (b) Transformada de Fourier del espectro en (a). 88

VIII

The first part of the report deals with the general situation of the country and the position of the various groups. It is followed by a detailed account of the work done during the year, and a summary of the results. The report is written in a clear and concise style, and is well illustrated with diagrams and tables. It is a valuable document for those interested in the work of the organization, and for those who wish to know more about the country and its people.

The second part of the report deals with the work done during the year, and a summary of the results. It is followed by a detailed account of the work done during the year, and a summary of the results. The report is written in a clear and concise style, and is well illustrated with diagrams and tables. It is a valuable document for those interested in the work of the organization, and for those who wish to know more about the country and its people.

The third part of the report deals with the work done during the year, and a summary of the results. It is followed by a detailed account of the work done during the year, and a summary of the results. The report is written in a clear and concise style, and is well illustrated with diagrams and tables. It is a valuable document for those interested in the work of the organization, and for those who wish to know more about the country and its people.

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN Y ANTECEDENTES

Desde la disponibilidad de láseres capaces de generar pulsos de duración más cortos que un período vibracional molecular típico, la técnica de *Dispersión Raman Estimulada Impulsiva* (Impulsive Stimulated Raman Scattering (ISRS)) ha sido empleada con el propósito de excitar coherentemente los modos vibracionales Raman activos en diversos cristales y líquidos moleculares.

En el caso de la Dispersión Raman Estimulada Impulsiva no-resonante, el resultado es solamente movimiento vibracional en el estado base electrónico del sistema [1]. Esta excitación puede ser obtenida con un sólo pulso, o con dos pulsos cruzados en una geometría de *mezcla de cuatro ondas* (four wave mixing) o rejilla transitoria, a través de la cuál una fuerza espacialmente periódica y temporalmente impulsiva es ejercida; véase la **figura 1.1**. El uso de dos pulsos cruzados es particularmente importante en el caso de modos materiales dispersivos debido a que en este caso la respuesta vibracional está limitada a un intervalo angosto en frecuencias y vectores de onda. La viabilidad de estos experimentos se basa en el hecho que los pulsos de láser duran menos que los períodos típicos de oscilación del material; esto se traduce en una excitación impulsiva y coherente de los modos activos Raman. Esto es, si los pulsos son más cortos que el período de vibración, entonces, en el espacio de frecuencias el ancho de los pulsos es mayor que la frecuencia de oscilación. Por lo tanto, si el modo es Raman activo, tendremos excitación Raman estimulada del material directamente de los pulsos; es decir, dentro de los mismos pulsos existen pares de componentes cuyas diferencias de frecuencias satisfacen el criterio de dispersión Raman. Como la interacción ocurre en un tiempo muy breve, el resultado es una fuerza impulsiva sobre los modos Raman del material, y por selección debida a conservación de energía y momento, todos tienen la misma frecuencia y el mismo vector de onda. Es decir, se excitan de manera coherente.

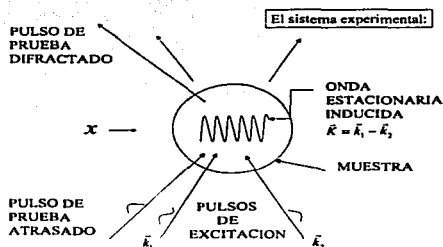


Figura 1.1: Experimento de Dispersión Raman Estimada Impulsiva con dos pulsos de excitación. Dos pulsos, de frecuencias centrales y vectores de onda (ω_1, \vec{k}_1) y (ω_2, \vec{k}_2) y de duración más corta que un período de oscilación del modo vibracional a excitar, son sobrepuestos de manera espacial y temporal en el cristal. Este proceso genera polaritones-fonones coherentes $(\Omega, \pm \vec{K})$ contrapropagantes que forman una onda estacionaria en el cristal y cuyo vector de onda está determinado por la diferencia entre los vectores de onda de los dos pulsos de excitación $\vec{K} = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$.

En los experimento de interés los sistemas son cristales ferroeléctricos como el tantalato de litio $LiTaO_3$ y el niobato de litio $LiNbO_3$ que son cristales no-centrosimétricos. En este caso, los modos Raman activos dispersivos resultan del acoplamiento entre los fonones ópticos polares y la radiación electromagnética con frecuencias y vectores de onda similares. El acoplamiento entre un fonón y un fotón con vectores de onda y frecuencias similares da lugar a una excitación elemental nueva, llamada polaritón-fonón.

Una manera más precisa de visualizar los polaritones-fonones es de la siguiente manera. Notamos primero que la relación de dispersión de los fonones ópticos transversales es débil y que las curvas de dispersión de fotones y fonones ópticos se intersectan para vectores de onda bajas; véase la figura 2.1. Cerca del punto de intersección, donde la energía y el momento son los mismo para ambas excitaciones, el acoplamiento es tan fuerte que ni el fonón óptico ni el fotón pueden seguir siendo considerados una excitación elemental. El fotón y el fonón óptico se acoplan linealmente para formar la excitación elemental nueva, el fonón-polaritón. Como vemos en la figura 2.1, la relación de dispersión del fonón-polaritón tiene dos ramas. Para vectores de onda grandes, la razón de la rama superior se aproxima

asintóticamente a $c/\sqrt{\epsilon(\infty)}$, donde c es la velocidad de la luz en el vacío y $\epsilon(\infty)$ es la constante dieléctrica en el infrarrojo cercano. La rama inferior tiene al principio la razón $c/\sqrt{\epsilon(0)}$, donde $\epsilon(0)$ es la constante dieléctrica en el infrarrojo lejano, y luego se aproxima al valor ω_T , la frecuencia transversal de los fonones ópticos.

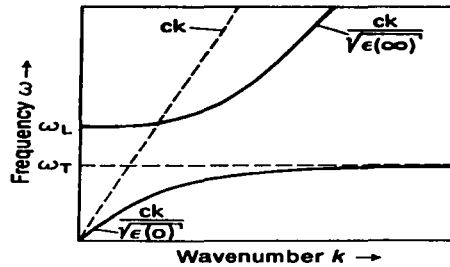


Figura 1.2: Relación de dispersión del polaritón-fonón. Para vectores de onda grandes, la razón de la rama superior se aproxima asintóticamente a $c/\sqrt{\epsilon(\infty)}$, donde c es la velocidad de la luz en el vacío y $\epsilon(\infty)$ es la constante dieléctrica en el infrarrojo cercano; es decir, el polaritón-fonón tiende a un fotón con velocidad del material. Esta rama inicia con el valor de la frecuencia longitudinal de los fonones ópticos. La rama inferior tiene al principio la razón $c/\sqrt{\epsilon(0)}$, donde $\epsilon(0)$ es la constante dieléctrica en el infrarrojo lejano, y luego se aproxima al valor ω_T , la frecuencia transversal; en este caso el polaritón fonón se aproxima a un fonón óptico transversal. (figura p. 258 O. Madelung, *Introduction to Solid-State Theory*, Springer Series in Solid-State Sciences 2, Springer-Verlag, 1978.)

La motivación del presente trabajo de investigación es entender teóricamente experimentos en los cuáles se utiliza la técnica de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva con dos pulsos ultracortos cruzados para excitar de manera coherente polaritones-fonones en cristales ferroeléctricos. Como se mencionó arriba, el experimento consiste en que dos pulsos, de duración más corta que el período de oscilación del modo vibracional a excitar, son sobrepuestos de manera espacial y temporal en el cristal, **figura 1.1**, y se traduce en una excitación impulsiva y coherente de los polaritones-fonones través de la mezcla óptica de las componentes de Fourier de los pulsos de excitación por medio de dispersión Raman estimulada [2]. Los polaritones-fonones tienen frecuencias $(\Omega, \pm\vec{K})$, es decir son contrapro-

pagantes y forman una onda estacionaria en el cristal cuyo vector de onda es determinado por la diferencia entre los vectores de onda de los dos pulsos de excitación $\vec{K} = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$. La frecuencia de los polaritones-fonones Ω es menor que la anchura espectral de los pulsos de excitación .

La onda estacionaria formada por los polaritones-fonones coherentemente excitados se refleja en que el índice de refracción del material queda modulado de tal forma que se comporta como una rejilla de difracción dieléctrica, espacialmente periódica y de duración limitada, capaz de difractar un tercer pulso de prueba que incide sobre la muestra cierto tiempo después que ha sido formada por los pulsos de excitación. El tercer pulso de prueba puede hacerse incidir sobre dicha rejilla espacio-temporal con el ángulo de *empatamiento de fase* (phase-matching), o de Bragg, correspondiente al vector de onda \vec{K} fundamental del polariton-fonón, o correspondiente a un sobretono de \vec{K} . El experimento consiste en medir la eficiencia de difracción transmitida por la rejilla espacio-temporal como función del tiempo de retraso entre la formación de la rejilla y la incidencia del pulso de prueba.

La técnica Dispersión Raman Estimulada Impulsiva con dos pulsos cruzados ha sido utilizada durante algún tiempo para excitar polaritones-fonones coherentes sólo en el régimen lineal de la respuesta del material [2] - [7]. En este régimen, donde la excitación coherente de los polaritones-fonones es armónica, la luz difractada, incidente con el ángulo de Bragg, es modulada con dos veces la frecuencia del polaritón-fonón [3].

En 1997, Brennan y Nelson [8] - [9] reportaron la excitación y detección de polaritones-fonones coherentes anarmónicos en los cristales ferroeléctricos tantalato de litio $LiTaO_3$ y niobato de litio $LiNbO_3$. Un laser Ti:zafiro y un sistema de amplificación operando a un nivel de repetición de $1kHz$ es capaz de producir pulsos de duración $\tau = 35fs$ y de longitud de onda central $\lambda = 800nm$ que tienen mas de $1mJ$ de energía. Estos pulsos son divididos en los dos pulsos de excitación, de igual intensidad y energía. El tercer pulso de prueba de baja energía es producido por reflexión parcial.

Debido a que los pulsos de excitación son muy intensos, se espera que la fuerza impulsiva que ejercen sobre el modo vibracional pueda ser lo suficientemente fuerte como para que las amplitudes vibracionales del material puedan llegar a exceder el límite armónico. Utilizando el método de Espectroscopía de los Sobretonos del Vector de Onda (Wavevector Overtones Spectroscopy, WOS), una variante de la Dispersión Raman Estimulada Impulsiva, donde el pulso de prueba a difractar incide sobre la muestra con el ángulo de Bragg correspondiente al vector de onda de un armónico seleccionado, Nelson y Brennan obtuvieron espectros que les condujeron a la conclusión de que habían detectado la presencia de anarmonicidades en las vibraciones de la red [8] - [9].

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

La respuesta detectada, cuando la energía total de los dos pulsos de excitación es intensa, de $130\mu J$, muestra respuesta hasta el noveno sobretono del vector de onda K fundamental del polaritón-fonón. Por otro lado, el espectro medido, cuando los pulsos de excitación tienen una energía total baja, de $28\mu J$, muestra oscilaciones correspondientes a dos veces la frecuencia del polaritón-fonón; esto está de acuerdo con lo esperado en el caso de excitación armónica [8].

Fenómenos indeseables como la autodifracción de los pulsos de excitación, la generación de luz blanca, los efectos fotorrefractivos y daños a la muestra pueden ocurrir cuando los pulsos de excitación son muy intensos. Sin embargo, los experimentos recientes [8] - [10], en concordancia con la teoría existente [11], indican la posibilidad de que la excitación anarmónica de polaritones-fonones pueda ocurrir cuando cristales ferroeléctricos no-centrosimétricos como $LiTaO_3$ y $LiNbO_3$ sean expuestos a la Dispersión Raman Estimulada Impulsiva con dos pulsos cruzados ultracortos suficientemente intensos.

La ferroelectricidad en los sistemas $Li(Nb, Ta)O_3$, que caracteriza a los perovskitas [12], está relacionada con un modo "suave" que puede ser excitado con la técnica de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva [13] - [14]. En los cristales ferroeléctricos, anti-ferroeléctricos y otros materiales polares que poseen dinámica de modo suave, la formación de dominios es asociada con el desarrollo de un desplazamiento permanente de los polaritones-fonones debajo de la temperatura de transición T_C [15]. En la proximidad de T_C , las ramas en la relación de dispersión del fonón-polaritón asociado con la transición de fase muestran frecuencias muy bajas en una región pequeña de la Zona de Brillouin cerca del vector de onda de éste, así que los efectos anarmónicos son importantes aún para amplitudes relativamente bajas. Debajo de T_C , los modos del fonón-polaritón pueden ser visualizados como vibraciones alrededor de los mínimos de la energía potencial de una estructura de pozo doble, donde cada pozo corresponde a una orientación de dominio diferente. Cuando un material ferroeléctrico no-centrosimétrico es expuesto a uno o varios pulsos de láser de duración más corta que un período oscilatorio del modo suave, como en los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva, una inversión permanente y completa de la orientación de los dominios ferroeléctricos puede ocurrir aún cuando la energía por átomo impartida por el pulso de láser sea considerablemente más baja que la energía térmica promedio. Las propiedades de los ferroeléctricos, y en particular del $LiTaO_3$ y del $LiNbO_3$, cuyas superficies de energía potencial son altamente anarmónicas con pozos dobles particularmente profundos, hacen que estos cristales sean apropiados para la inversión de dominios. Este mecanismo puede aplicarse para producir interruptores ópticos tan rápidos como la duración de los pulsos de excitación, del orden de femtosegundos. Esta es sólo una de muchas aplicaciones de la técnica de excitación Dispersión Raman Estimulada Impulsiva.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

La finalidad del presente trabajo es contribuir a un entendimiento teórico más profundo sobre el proceso de excitación de los polaritones-fonones en los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva. Más específicamente, hemos dirigido nuestro interés hacia los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva realizados por Nelson y Brennan en los cristales ferroeléctricos $LiTaO_3$ y $LiNbO_3$ [8] - [9], debido a que ellos interpretan que los espectros que miden son resultado de excitación anarmónica de los polaritones-fonones coherentes. Nuestro propósito es contribuir a aclarar si la respuesta observada realmente se debe a esa excitación anarmónica y no a algún otro efecto no lineal.

Esta tesis está basada en estudios anteriores realizados por Romero-Rochín [11] en colaboración con el grupo experimental dirigido por Nelson. El interés principal de Romero-Rochín et al. en [11] fue entender cómo el proceso de excitación Dispersión Raman Estimulada Impulsiva efectivamente genera los modos polaritón-fonón coherentes y cómo son mezclados por la interacción anarmónica, generada a su vez, por el modo ferroeléctrico polar. Debido a que en la aproximación de Placzek [11] la interacción Raman es lineal en el desplazamiento del fonón óptico transverso, la ecuación de Schrödinger pudo ser resuelta de manera exacta para encontrar el estado del sistema armónico. Las no-linealidades, debidas a la inclusión de anarmonicidades en el análisis, fueron descritas por medio de un esquema perturbativo.

El resultado principal de Romero-Rochín et al. [11] es una expresión para la polarización macroscópica que gobierna la modulación en el índice de refracción del material. Esta incluye anarmonicidades hasta cuarto orden. Encontraron que la respuesta correspondiente a los sobretonos del vector de onda y de la frecuencia fundamentales son una consecuencia de las anarmonicidades de la superficie de energía potencial del modo polar. Además, hallaron una condición de quasi-resonancia entre multipletes de la frecuencia fundamental y las frecuencias de los sobretonos, que causa la amplificación en la respuesta en los vectores de onda correspondientes.

Este trabajo de tesis está dirigido hacia una comprensión de los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva una vez que los dos pulsos intensos ultracortos de excitación han causado la formación de la rejilla espacialmente periódica y temporalmente impulsiva formada por polaritones-fonones coherentes anarmónicos en el cristal. Utilizando la teoría de Romero-Rochín et al. [11] y restringiendo el vector de onda de la rejilla a ser dirigido a lo largo del eje x , la rejilla espacio-temporal no lineal está modelada por la función dieléctrica,

$$\epsilon(x, T) = \epsilon_f + \bar{\epsilon}_1(T) \cos(Kx) + \bar{\epsilon}_2(T) \cos(2Kx) + \bar{\epsilon}_3(T) \cos(3Kx) \quad , \quad (1.1)$$

donde

$$\bar{\epsilon}_1(T) = x_K^{(1)} \sin(\Omega_K + \Delta\Omega_K)T - x_K^{(3)} [\sin 3\Omega_K T + 9 \sin \Omega_K T] \quad , \quad (1.2)$$

$$\bar{\epsilon}_2(T) = x_{2K} [1 - \cos \Omega_{2K} T + \frac{\Omega_{2K}^2}{(2\Omega_K)^2 - \Omega_{2K}^2} (\cos 2\Omega_K T - \cos \Omega_{2K} T)] \quad , \quad (1.3)$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$\bar{\epsilon}_3(T) = x_{3K} \left[\frac{3\Omega_K\Omega_{3K}}{(3\Omega_K)^2 - \Omega_{3K}^2} \sin \Omega_{3K}T - \frac{\Omega_{3K}^2}{(3\Omega_K)^2 - \Omega_{3K}^2} \sin 3\Omega_KT \right. \\ \left. + \frac{3\Omega_{3K}}{\Omega_K^2 - \Omega_{3K}^2} \sin \Omega_KT - \frac{3\Omega_K\Omega_{3K}}{\Omega_K^2 - \Omega_{3K}^2} \sin \Omega_{3K}T \right] , \quad (1.4)$$

donde T es el tiempo de retraso entre el instante de formación de la rejilla por los dos pulsos de excitación Dispersión Raman Estimulada impulsiva y el instante cuando incide el pulso de prueba a difractar. Los valores para las frecuencias Ω_K , Ω_{2K} y Ω_{3K} , el desplazamiento en frecuencia $\Delta\Omega_K$ causado por la interacción no lineal y los coeficientes no-dependientes del tiempo $x_K^{(1)}$, $x_K^{(3)}$, x_{2K} y x_{3K} correspondientes a dos valores de energía de los pulsos láser de excitación, $50\mu J$ y $110\mu J$, se presentan en el capítulo 3. En particular, en este trabajo se calcula el espectro de difracción de un pulso Gaussiano incidente sobre una rejilla con función dieléctrica como la indicada.

Es importante señalar que Brennan y Nelson no consideran que sus experimentos sean reproducibles del todo. Por lo tanto, la ambición de este trabajo de tesis no es el de lograr un acuerdo exacto con los experimentos [8] - [9], sino investigar si las tendencias halladas con la evidencia experimental pueden ser respaldadas teóricamente.

Sin embargo, antes de resolver el problema de difracción de un pulso Gaussiano por una rejilla espacio-temporal no lineal, es importante poder reproducir los resultados experimentales para el caso de excitación armónica de polaritones-fonones coherentes, en cuyo caso la rejilla espacio-temporal puede ser modelada por una función dieléctrica lineal. La función dieléctrica lineal puede ser representada de la siguiente manera,

$$\epsilon(x, t) = \epsilon_f + \epsilon_1 \text{Cos}(Kx) \text{Cos}(\Omega T) , \quad (1.5)$$

donde ϵ_f es la constante dieléctrica del fondo, ϵ_1 determina la modulación, $\vec{K} = \hat{x}K$ es el vector de onda, Ω la frecuencia de los polaritones-fonones coherentes y T es el tiempo de retraso entre el instante cuando fue creada la rejilla y el instante cuando incide el pulso Gaussiano a difractar. La dependencia temporal se incluye por medio de una aproximación adiabática [16], como explicamos a continuación.

En el sistema de difracción de un pulso de prueba por la rejilla espacio-temporal creada en el cristal por los pulsos de excitación de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva, son dos los parámetros que tienen la unidad de tiempo; el tiempo que tarda el pulso de prueba en atravesar la rejilla y el tiempo con que evoluciona la rejilla espacio-temporal. El período de oscilación del modo vibracional Raman-activo en los cristales $LiTaO_3$ y $LiNbO_3$ es del orden de picosegundos, así que la evolución temporal de la rejilla espacio-temporal es también del orden de picosegundos. El pulso de prueba a difractar, como los dos pulsos de

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

excitación, son de duración de femtosegundos. Por lo tanto, es válido utilizar una aproximación adiabática [16] en este sistema. Esto es, la rejilla espacio-temporal formada por los polaritones-fonones coherentemente excitados contrapropagantes puede ser considerada como estática desde el punto de vista del pulso de prueba que se difracta por ella.

La situación experimental que queremos modelar teóricamente se puede entender de la siguiente manera: Se envían pulsos de prueba sobre la rejilla espacio-temporal con intervalos en el tiempo ΔT . Debido a que la duración de los pulsos adentro de la rejilla es mucho más corta que la evolución temporal de la rejilla, los pulsos pasan tan rápido por ella que ésta aparenta ser estática desde el punto de vista de los pulsos. Pero entre cada pulso que incide ha transcurrido un tiempo ΔT que es largo en comparación con el tiempo de pasaje de los pulsos, así que cada pulso ve una rejilla estática diferente.

La validez de la aproximación adiabática ha permitido que el problema de difracción de un pulso por una rejilla espacio-temporal se reduzca al problema de la difracción del pulso por una serie de rejillas estáticas espacialmente moduladas, cada una de ellas caracterizada por un valor diferente de la modulación.

Antes de resolver el problema de la difracción de un pulso por una rejilla espacialmente modulada estática, se resuelve el problema de difracción de una onda monocromática por esta rejilla.

Considerando la situación más sencilla de una placa dieléctrica ubicada en el vacío, infinita en el plano $x - z$ y limitada al espesor d en la dirección y , el vector de onda de la rejilla se encuentra dirigido a lo largo del eje x y la función dieléctrica que modela la rejilla espacialmente modulada toma la forma

$$\epsilon(x) = \epsilon_f + \epsilon_1 \cos(Kx) \quad . \quad (1.6)$$

Una onda monocromática de polarización s o p se hace incidir sobre la rejilla modelada por la función dieléctrica (1.6) con ángulo de incidencia θ y frecuencia ω , y la cantidad medible a calcular es la eficiencia de difracción reflejada y transmitida por la rejilla. Debido a que la rejilla es finita en la dirección y , la eficiencia de difracción transmitida (reflejada), cuando la señal a difractar es una onda monocromática, está definida como la razón entre el valor absoluto de la componente y del vector de Poynting transmitida (reflejada), promediada sobre una longitud de onda de la rejilla en la dirección x , y el valor absoluto de la componente y del vector del Poynting incidente.

Una vez desarrolladas las herramientas de cómputo requeridas para resolver de manera numérica el problema de difracción de una onda monocromática por la rejilla estática espacialmente modulada, el problema de difracción de un pulso de distribución Gaussiana,

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

por esta misma rejilla, puede ser resuelto con facilidad. Para esto, el pulso Gaussiano es dividido en sus componentes monocromáticas, y se repite el procedimiento de difracción de ondas planas para cada componente. El resultado final es la integral, ó suma, de dichas componentes.

Por lo tanto, cuando la señal incidente es un pulso, la definición de la eficiencia de difracción transmitida (reflejada) es la razón entre *la integral en el tiempo* de los valores absolutos de las componentes y de los vectores de Poynting transmitido (reflejada) e incidente. La integral debe hacerse sobre un tiempo tan largo que todas las componentes espectrales de los pulsos sean incluidas. Las cantidades anteriores deben ser previamente promediadas sobre una longitud de onda de la rejilla en la dirección x .

Debido a estas definiciones diferentes para la eficiencia de difracción, observamos que en el caso de difracción de una onda monocromática por la rejilla estática lineal (1.6), se obtiene la eficiencia de difracción en forma de un espectro como función de la frecuencia ω o del ángulo de incidencia θ de la onda monocromática incidente (e incluso, como vamos a ver, como función del espesor d que tiene la rejilla en la dirección y). Para el caso de difracción de un pulso, como se integra en el tiempo de duración del mismo, sólo se obtienen valores constantes para la eficiencia de difracción reflejada y transmitida de la rejilla. Sin embargo, conforme va evolucionando en el tiempo la rejilla espacio-temporal, los pulsos incidentes ven rejillas estáticas que tienen modulaciones diferentes, y de esta manera se obtienen las eficiencias de difracción reflejada y transmitida por la rejilla espacio-temporal como función del tiempo de retraso T del pulso incidente.

En el proceso del desarrollo de las herramientas requeridas para calcular la eficiencia de difracción transmitida por la rejilla espacio-temporal como función del tiempo de retraso en el caso cuando la señal incidente es un pulso Gaussiano, nos dimos cuenta de que fenómenos relacionados con la situación de difracción de una onda monocromática por la rejilla espacialmente modulada lineal estática (1.6), como el fenómeno de resonancia de los modos guiados por la estructura dieléctrica modulada y el fenómeno de difracción de Bragg debido a la periodicidad en la dirección x de la rejilla, podrían ser estudiados con nuestro análisis riguroso [17].

El problema de difracción de una onda monocromática de polarización s o p , frecuencia ω y ángulo de incidencia θ por la rejilla (1.6) lo resolvimos numéricamente sin ninguna aproximación, usando las ecuaciones de Maxwell y aplicando las condiciones a la frontera. De esta manera pudimos calcular la eficiencia de difracción transmitida y reflejada por la rejilla (1.6). Calculamos las eficiencias totales y las correspondientes a cada orden de difracción en el exterior de la rejilla, como función de la frecuencia ω , del ángulo de incidencia θ de la onda incidente y como función del espesor d de la rejilla. Encontramos que al graficar

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

la eficiencia de difracción como función de uno de estos tres parámetros, manteniendo los otros fijos, aparecieron en los espectros, destacando del fondo suavemente ondulado, picos muy pronunciados que iban, en la mayoría de los casos, desde transmisión a reflexión total en un intervalo muy reducido.

Para entender estos picos, calculamos la relación de dispersión de la estructura dieléctrica (1.6) en ausencia de campo incidente. Hallamos que la propagación electromagnética en el material se encuentra caracterizada por un conjunto de eigenmodos, cuya componente y del vector de onda es o puramente real o puramente imaginaria. Por estas propiedades, clasificamos a dichos modos como propagantes o como evanescentes, respectivamente. Una vez que el material se considera como una rejilla en el vacío, las condiciones de frontera producen que en el exterior de la rejilla, es decir, en el vacío, aparezcan también campos con componentes y del vector de onda tanto reales como imaginarios. A estos, les llamamos órdenes de difracción propagantes y evanescentes respectivamente. Así, cuando la modulación de la rejilla dieléctrica (1.6) es relativamente baja en comparación con la constante dieléctrica del fondo, esta estructura se comporta como una guía de ondas cuando el número de eigenmodos propagantes en su interior excede el número de órdenes de difracción propagantes en su exterior. Esto motiva a llamar *modos guiados* a los modos en exceso que se propagan dentro de la rejilla.

Sin embargo, al contrario de lo que es el caso para una guía de ondas dieléctrica convencional, en la estructura (1.6), debido a la modulación que tiene, y al acoplamiento con los campos en el exterior, los modos guiados pueden ser excitados por medio de una onda electromagnética incidente con frecuencia y ángulo de incidencia ajustados a valores que coincidan con los que caracterizan a determinado eigenmodo guiado en la rejilla.

El fenómeno no es nuevo. En 1902, R. W. Wood realizó experimentos con rejillas de superficie metálicas y observó que había variaciones bruscas en la intensidad de los diferentes órdenes espectrales en intervalos muy pequeños de la frecuencia de la luz incidente [18]. Como estos efectos no pudieron ser explicados dentro de las teorías de difracción entonces conocidas, Wood les nombró "anomalías" [19]. En 1965, Hessel y Oliner presentaron una teoría para las llamadas *anomalías de Wood* basada en un esquema de ondas guiadas [20], argumentando que existen dos tipos de anomalías, una anomalía tipo longitud de onda de Rayleigh, debido a que aparece un nuevo orden espectral para el ángulo rasante, y una anomalía tipo resonancia relacionado con las ondas guiadas soportables por la rejilla. Hessel y Oliner estudiaron difracción de luz por rejillas metálicas de superficie igual como Wood.

Existe una analogía entre las rejillas de difracción dieléctricas y las rejillas metálicas de superficie. En este contexto es interesante notar que Gaylord y Moharam en 1986 presentaron

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

un análisis riguroso de ondas acopladas aplicable para rejillas metálicas de superficie con bajo relieve [21]. En las rejillas metálicas, son los plasmones de superficie que son excitados por una onda electromagnética incidente con ángulo θ y frecuencia ω apropiados, en lugar de los modos guiados escapatorios¹ en el caso de una rejilla dieléctrica.

El fenómeno de resonancia de plasmones de superficie en rejillas metálicas [24] - [31] suele ser asociado con la denominación de *anomalías de Wood tipo resonancia* o simplemente *anomalías de Wood*. Sin embargo, el fenómeno de resonancia de modos guiados en estructuras dieléctricas moduladas [22] - [23] se manifiesta de la misma manera que el fenómeno de resonancia de plasmones de superficie en rejillas metálicas, es decir, en forma de variaciones de la intensidad de la luz muy pronunciadas en intervalos muy reducidos de la longitud de onda o de la frecuencia de la onda incidente o de su ángulo de incidencia. Por esta razón se puede hablar de anomalías de Wood referente al fenómeno de excitación de plasmones en superficie tanto como al fenómeno de excitación de modos guiados.

Las llamadas por Hessel y Oliner anomalías tipo longitud de onda de Rayleigh [20], y que también figuran en la literatura bajo el nombre de anomalías Rayleigh-Wood [32] o anomalías de Wood de segundo tipo [33], no son relevantes en nuestro estudio debido a que no ocurre nada especial donde están ubicadas. Simplemente indican para que valores de los parámetros se encuentran las transiciones de evanescente a propagante de los órdenes de difracción.

Para poder comprender los experimentos de Difracción Raman Estimulada Impulsiva de difracción de pulsos por rejillas espacio-temporales, es importante entender a profundidad los procesos de difracción de ondas monocromáticas por rejillas de difracción dieléctricas como las modeladas por la función dieléctrica en (1.6). Es suficiente considerar el sistema más sencillo de difracción por una rejilla plana, que es el problema como fue considerado originalmente por Born y Wolf [34] quienes estudiaron difracción de luz por ondas de ultrasonido. Se pueden considerar rejillas de difracción más complicadas, con varias funciones periódicas, o ubicadas entre diferentes medios dieléctricos, o con una dependencia del vector de onda \vec{K} inclinada. Estas complicaciones pueden ser necesarias para modelar alguna situación experimental determinada, otra que la que nosotros posteriormente deseamos modelar, pero el fenómeno cualitativo de las resonancias de los modos guiados es claramente independiente de tales detalles. Gaylord y Moharam han tratado una extensa variedad de situaciones de difracción por rejillas de gran diversidad [21], [35] - [51].

Las *anomalías de Wood tipo resonancia* han causado un interés enorme, principalmente por su aplicación en filtros ópticos [23], [52] - [68]. Wang, Magnusson, Bagby y Moharam [22]

¹“modos escapatorios” es una traducción libre de “leaky modes”

estudiaron el comportamiento de los campos evanescentes y propagantes asociados con una rejilla de difracción dieléctrica como la descrita en (1.6) utilizando la Teoría Rigurosa de las Ondas Acopladas, y encontraron que en el límite de modulación baja, $(\epsilon_1/\epsilon_f) \ll 1$, las ubicaciones de las resonancias pueden ser obtenidas de la ecuación de los eigenvalores de una guía de ondas convencional. En [23], Wang y Magnusson consideraron las aplicaciones del fenómeno de las resonancias de los modos guiados, como filtros cuya forma de línea es suave y cuya anchura de línea es arbitrariamente angosta, y explicaron como la anchura de línea de las resonancias puede ser controlada por la amplitud de modulación de la rejilla, ϵ_1 , y por el grado de confinamiento de los modos en la rejilla. Argumentan que estas estructuras también funcionan como polarizadores debido a que las resonancias ocurren para diferentes ubicaciones paramétricas para ondas incidentes de polarización s y p . Según si la estructura dieléctrica modulada es ubicada entre dos medios cuya constante dieléctrica es la misma, o entre dos medios con distintos valores de la constante dieléctrica, se puede obtener un filtro cuyo respuesta espectral es simétrica o antisimétrica, respectivamente. Los filtros de resonancia tipo guía de ondas pueden también operar como interruptores de alta eficiencia. Magnusson, en colaboración con Wang [53] y con Tibuleac [54], trataron el caso de integración de la rejilla tipo guía de ondas resonante en una estructura dieléctrica de multicapas que refleja las componentes espectrales fuera de resonancia al mismo tiempo que deja pasar la parte resonante, para así mejorar la respuesta del aparato.

Nuestro mayor logro, tratándose del fenómeno de las resonancias de los modos guiados, ha sido poder entender los espectros de difracción que surgen cuando una onda monocromática se difracta por una rejilla dieléctrica (1.6) enteramente desde la relación de dispersión $\omega = \omega(k)$ que caracteriza la propagación electromagnética de los modos guiados en la estructura dieléctrica modulada en cuestión. Encontramos las *regiones de resonancia*, definidas como las regiones en el espacio de parámetros del sistema que corresponden a situaciones tales que el número de modos propagantes en la rejilla exceden el número de órdenes de difracción propagantes en su exterior. Por medio de un esquema perturbativo pudimos entender el fenómeno de resonancia. Debido a que el campo afuera de la rejilla se acopla a todos los eigenmodos del interior, estos modos no pueden ser estrictamente evanescentes en el exterior de la rejilla sino que son acompañados por un número finito de órdenes de difracción, lo cual se refleja en que las ramas en la relación de dispersión tienen anchura finita. Es decir, los modos guiados tienen tiempo de vida finita que disminuye al aumentar ϵ_1 con respecto a ϵ_f . Por lo tanto, los modos guiados son escapatorios. Hemos realizado un análisis cualitativo que muestra como las resonancias se ensanchan y se desplazan al aumentar ϵ_1 con respecto a ϵ_f .

Como la estructura dieléctrica (1.6) es periódica en la dirección x , se espera un incremento en la respuesta de la rejilla cuando la frecuencia ω y el ángulo de incidencia θ de la onda monocromática incidente estén relacionados con el vector de onda de la rejilla K por la

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

relación de Bragg,

$$2\frac{\omega}{c} \sin \theta = nK \quad , \quad (1.7)$$

donde n es un número entero positivo y c es la velocidad de la luz en el vacío.

En la literatura existen varios análisis aproximados para difracción de Bragg con $n = 1$ en (1.7) [35] - [36], [69] - [70], pero son válidos para intervalos de parámetros reducidos. Con nuestro análisis numéricamente exacto pudimos encontrar respuesta, en concordancia con la relación de Bragg (1.7) para rejillas de difracción (1.6) relativamente gruesas ($d > 10,0K^{-1}$), no solo para $n = 1$ sino también para $n > 1$. En nuestro cálculo, la eficiencia de difracción que corresponde a un orden de difracción determinado puede ser obtenida por separado. Esto nos permitió comprender el fenómeno de difracción de Bragg que juega un papel importante en los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva.

El presente trabajo de tesis está organizado de la siguiente manera: En el capítulo 2 presentamos el análisis riguroso de los fenómenos relacionados con la difracción de ondas monocromáticas por la rejilla espacialmente modulada estática (1.6). En la sección 2.1 se presenta la teoría y la deducción de las expresiones para las eficiencias de difracción reflejada y transmitida con algunos espectros ilustrativos para la visualización del fenómeno de resonancia de modos guiados. En la sección 2.2 presentamos lo referente a la relación de dispersión de una estructura dieléctrica con modulación como la rejilla lineal estática (1.6). Se calcula la relación de dispersión exacta de este sistema y la relación de dispersión en el caso cuando se desprecia la modulación, que es el caso para una guía de ondas convencional. Las regiones de resonancia son obtenidas y se presentan las relaciones de dispersión correspondientes a algunos casos específicos. En la sección 2.3 se explica el fenómeno de resonancia de modos guiados y como dependen de la modulación las resonancias. El fenómeno de difracción de Bragg es tratado en la sección 2.4. En la sección 2.5 se incluye un resumen breve de nuestros resultados más prominentes referente a la difracción de ondas planas por la rejilla lineal no-dependiente del tiempo.

En el capítulo 3 presentamos el análisis riguroso de la difracción de un pulso Gaussiano por la rejilla espacio-temporal lineal (1.5) y por la rejilla espacio-temporal no lineal (1.1) con (1.2) - (1.4) realizado en el contexto con los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva en el cristal ferroeléctrico $LiTaO_3$. En la sección 3.1 presentamos los espectros experimentales medidos por Nelson y Brennan en el caso de excitación Dispersión Raman Estimulada Impulsiva de los polaritones-fonones en $LiTaO_3$ y referimos a las interpretaciones que ellos dan de sus resultados con respecto a la posible no-linealidad de la rejilla espacio-temporal generada en el cristal. En la sección 3.2 presentamos la teoría para calcular de manera numéricamente exacta los espectros de difracción en forma de la eficiencia de difracción como función del tiempo de retraso cuando un pulso Gaussiano se difracta

<p style="text-align: center;">TESIS CON FALLA DE ORIGEN</p>
--

por la rejilla espacio-temporal lineal (1.5) y por la rejilla espacio-temporal no lineal (1.1) con (1.2) - (1.4). Un resumen breve de la teoría que conduce a la expresión para la función dieléctrica que modela la rejilla espacio-temporal no lineal, desarrollada previamente por Romero-Rochín en colaboración con el grupo experimental de Nelson, ha sido incluido con el motivo de presentar un esquema completo para la comprensión del proceso de excitación Dispersión Raman Estimulada Impulsiva. En la sección 3.3 presentamos nuestros resultados numéricos en el caso de difracción de un pulso Gaussiano por la rejilla espacio-temporal lineal (1.5) y por la rejilla espacio-temporal no lineal (1.1) con (1.2) - (1.4) correspondiente a dos valores de energía de los pulsos láser de excitación.

En el capítulo 4 presentamos las conclusiones. Las conclusiones del análisis de difracción de ondas monocromáticas por la rejilla espacialmente modulada estática (1.6) se encuentran en la sección 4.1 y las conclusiones del análisis de difracción del pulso Gaussiano por la rejilla espacio-temporal lineal (1.5) y por la rejilla espacio-temporal no lineal (1.1), en el contexto de los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva, se encuentran en la sección 4.2.

Desarrollos demasiado laboriosos para tener lugar apropiado en el texto han encontrado su lugar natural en los apéndices, como es también el caso para algunos de los programas de Fortran 90 empleados en nuestro análisis.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Capítulo 2

DIFRACCIÓN DE ONDAS MONOCROMÁTICAS POR UNA REJILLA ESPACIALMENTE MODULADA

En este capítulo desarrollamos las herramientas requeridas para realizar un análisis riguroso de difracción de ondas monocromáticas por una rejilla espacialmente modulada estática, para la comprensión del fenómeno de resonancia de modos guiados y del fenómeno de difracción de Bragg. En la sección 2.1 se presenta la deducción de las expresiones para la eficiencia de difracción aplicables al caso de una onda monocromática incidente sobre una rejilla de difracción dieléctrica espacialmente modulada de manera sinusoidal. En la sección 2.2 calculamos la relación de dispersión, tanto en forma exacta como aproximada, que caracteriza tal rejilla dieléctrica. Hemos realizado el análisis para el caso de polarización s y p de los campos. En la sección 2.3 explicamos el fenómeno de resonancia de modos guiados y realizamos un análisis sobre cómo los picos de resonancia dependen de la modulación. En la sección 2.4 discutimos el fenómeno de difracción de Bragg. Las conclusiones sobre el análisis de difracción de ondas planas están incluidas en la sección 2.5.

2.1. Eficiencia de Difracción

2.1.1. Teoría

En esta sección tratamos en detalle el problema de la difracción de una onda monocromática por una rejilla espacialmente periódica. La rejilla de difracción está modelada como una

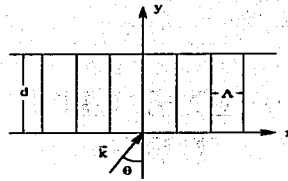


Figura 2.1: El sistema.

placa dieléctrica infinita en el plano $x - z$ y de anchura d en la dirección y . La modulación espacial de la placa en la dirección x , entra por medio de la función dieléctrica:

$$\epsilon(x) = \epsilon_0 + \epsilon_1 \cos(Kx) \quad , \quad (2.1)$$

donde ϵ_0 es la constante dieléctrica promedio del fondo, ϵ_1 representa la modulación y $K = \frac{2\pi}{\Lambda}$ es el vector de onda de la rejilla con periodicidad Λ . Calculamos la eficiencia de difracción reflejada y transmitida que surge cuando una onda plana, de polarización s o p , incide con ángulo θ y vector de onda $\vec{k}_{inc} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$ sobre la rejilla desde el vacío. En la figura 2.1 mostramos el sistema.

CAMPO TRANSVERSAL ELECTRICO (TE): POLARIZACIÓN s

Una onda plana de polarización s y frecuencia ω incide sobre la rejilla descrita por la función dieléctrica en (2.1) con ángulo de incidencia θ , frecuencia ω y vector de onda $\vec{k}_{inc} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$ donde

$$k_x = \frac{\omega}{c} \sin \theta \quad , \quad (2.2)$$

$$k_y = \frac{\omega}{c} \cos \theta \quad (2.3)$$

y c es la velocidad de la luz en el vacío. Entonces, el campo eléctrico incidente está dado por la siguiente expresión,

$$\vec{E}_{inc}(x, y, t) = \hat{z} E_0 e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{-i\omega t} \quad . \quad (2.4)$$

El problema consiste en encontrar la eficiencia de difracción reflejada y transmitida por la rejilla (2.1) de anchura d cuando una onda monocromática de polarización s incide sobre ella. Para poder calcular la eficiencia de difracción tenemos que encontrar los campos eléctricos y magnéticos en todo el espacio. El espacio se divide en tres regiones: La región 1, $y < 0$, es la región desde la cual la onda monocromática incide sobre la rejilla, y cuyo campo total consiste en la suma del campo correspondiente a la onda incidente (2.4) y los campos de las ondas reflejadas por la rejilla (2.1). La región 2, $0 < y < d$, está constituida por la rejilla dieléctrica; y la región 3, $y > d$, es aquella en la que propagan las ondas transmitidas por la rejilla.

Debido a la periodicidad $\Lambda = 2\pi/K$ en la dirección x de la rejilla (2.1), el campo eléctrico en la región 2 puede ser expresado como una suma infinita de ondas planas,

$$\vec{E}_{den}(x, y, z) = \hat{z} \sum_l V_l(y) e^{i(k_x + lK)x} e^{-i\omega t} \quad , \quad l = \dots - 1, 0, 1, \dots \quad , \quad (2.5)$$

donde $V_l(y)$ son las amplitudes de las ondas planas y que dependen de y . Para encontrarlas, primero notamos que las ecuaciones de Maxwell que gobiernan en la región 2 son,

$$\nabla \cdot (\epsilon(x)\vec{E}) = 0 \quad , \quad (2.6)$$

$$\nabla \times \vec{B} + i\frac{\omega}{c}\epsilon(x)\vec{E} = \vec{0} \quad , \quad (2.7)$$

$$\nabla \times \vec{E} - i\frac{\omega}{c}\vec{B} = \vec{0} \quad (2.8)$$

y

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad . \quad (2.9)$$

Eliminando el campo magnético de estas ecuaciones, se obtiene la ecuación que obedece el campo eléctrico en el interior de la rejilla ($0 < y < d$),

$$\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial y^2} + \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(x)\vec{E} = 0 \quad . \quad (2.10)$$

Sustituyendo en esta ecuación la expresión para el campo eléctrico (2.5) y la función dieléctrica (2.1), y usando la ortogonalidad de las ondas planas en x , obtenemos un conjunto infinito de ecuaciones diferenciales acopladas de segundo orden para las amplitudes $V_l(y)$. Dichas ecuaciones son las siguientes:

$$V_l''(y) + \alpha_l V_l(y) + \beta(V_{l-1}(y) + V_{l+1}(y)) = 0 \quad , \quad (2.11)$$

donde las primas indican derivadas con respecto a y . Los coeficientes α_l y β están dados como

$$\alpha_l = \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_0 - (k_x + lK)^2 \quad , \quad (2.12)$$

y

$$\beta = \frac{1}{2} \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_1 \quad . \quad (2.13)$$

En el límite $\epsilon_1 \rightarrow 0$, la rejilla dieléctrica (2.1) tiende a una placa dieléctrica uniforme con constante dieléctrica ϵ_0 . En lugar de un número infinito de ecuaciones acopladas (2.11), sólo queda la ecuación

$$V_0''(y) + \frac{\omega^2}{c^2} (\epsilon_0 - 1) V_0(y) = 0 \quad , \quad (2.14)$$

que describe la situación de propagación de dos ondas planas; una que se dirige hacia la frontera en $y = d$ y otra que regresa de ella. En el caso de la rejilla (2.1) con ϵ_1 finito, la modulación periódica en la dirección x implica que en lugar de dos ondas propagantes en el material, tenemos un número infinito de ondas planas, que veremos, pueden ser propagantes o evanescentes.

Las ecuaciones (2.11) pueden ser escritas en forma de una ecuación matricial

$$\vec{V}''(y) + \mathbf{M}\vec{V}(y) = \vec{0} \quad , \quad (2.15)$$

donde la matriz \mathbf{M} está dada por la expresión

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \alpha_2 & \beta & 0 & 0 & 0 & \dots & \vdots \\ \dots & \beta & \alpha_1 & \beta & 0 & 0 & \dots & \vdots \\ \dots & 0 & \beta & \alpha_0 & \beta & 0 & \dots & \vdots \\ \dots & 0 & 0 & \beta & \alpha_{-1} & \beta & \dots & \vdots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & \beta & \alpha_{-2} & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \quad . \quad (2.16)$$

Diagonalizando la matriz \mathbf{M} , que es ortogonal y de elementos reales, podemos expresar las amplitudes $V_l(y)$ como sumas infinitas sobre los eigenmodos del material,

$$V_l(y) = \sum_p (C_{pa} x_{pl} e^{i\kappa_p y} + C_{pb} x_{pl} e^{-i\kappa_p y}) \quad , \quad (2.17)$$

donde x_{pl} es la componente vectorial l del eigenmodo p correspondiente al eigenvalor $\lambda_p = \kappa_p^2$. Los coeficientes C_{pa} y C_{pb} son constantes de integración. Debido a las propiedades de la matriz \mathbf{M} , los eigenvalores $\lambda_p = \kappa_p^2$ son todos reales, aunque pueden ser negativos o positivos. Como vemos en la expresión (2.17), las soluciones para las funciones $V_l(y)$ dependen de las raíces cuadradas de los eigenvalores $\lambda_p = \kappa_p^2$. Por lo tanto, dependiendo si el eigenvalor λ_p es positivo o negativo, el vector de onda κ_p es puramente real o puramente

imaginario. En el primer caso llamaremos “propagante” al eigenmodo, y en el segundo lo llamaremos “evanescente”. Notamos que como los modos son propios del material no dependen del espesor d de la placa.

En principio, la matriz \mathbf{M} (2.16) es infinita. Para poder diagonalizarla numéricamente, tenemos que “cortarla” apropiadamente. Así, tendremos una matriz de dimensión n . Veremos más adelante que el número de eigenmodos propagantes, los que corresponden a los eigenvalores positivos, son los que determinan como se comporta físicamente el sistema. Por lo tanto, es importante cortar la matriz \mathbf{M} de tal manera que todos los eigenvalores positivos sean tomados en consideración.

Cuando $\epsilon_1 \ll \epsilon_0$ podemos ver desde las ecuaciones (2.11) que las componentes y de los vectores de onda κ_p de los eigenmodos están dados aproximadamente por la expresión

$$\kappa_p \approx \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_0 - (k_x + pK)^2} \quad . \quad (2.18)$$

Es fácil hallar cuáles son los eigenmodos propagantes del sistema en este límite.

Debido a la periodicidad en la dirección x de la rejilla (2.1) y el requerimiento de continuidad de los campos en las fronteras en $y = 0$ y $y = d$, la dependencia de la coordenada x de los campos en el exterior de la rejilla está restringida a ser la misma como la que tiene el campo adentro (2.5). Por lo tanto, los campos eléctricos reflejados y transmitidos por la rejilla pueden ser expresados de la siguiente forma,

$$\vec{E}_{ref}(x, y, t) = \hat{z} \sum_l R_l e^{i(k_x + lK)x} e^{-ik_{ly}y} e^{-i\omega t} \quad (2.19)$$

y

$$\vec{E}_{tra}(x, y, t) = \hat{z} \sum_l T_l e^{i(k_x + lK)x} e^{ik_{ly}y} e^{-i\omega t} \quad , \quad (2.20)$$

respectivamente. Debido a que las componentes x de los vectores de onda en el exterior de la rejilla son restringidos a tomar la forma $k_x + lK$, las componentes y están dadas por la expresión

$$k_{ly} = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + lK)^2} \quad , \quad l = \dots - 1, 0, 1, \dots \quad , \quad (2.21)$$

ya que tiene que cumplirse la ecuación de onda en el vacío. Los coeficientes R_l en (2.19) y las T_l en (2.20) son las amplitudes de los campos reflejados y transmitidos por la rejilla (2.1), respectivamente, y cada l corresponde a un determinado orden de difracción. Si la componente y del vector de onda correspondiente a un orden determinado de difracción expresado por (2.21) toma un valor real, entonces es un orden de difracción propagante.

En el caso contrario nos referiremos a un orden de difracción evanescente. Enfatizamos que el concepto de órdenes de difracción propagantes y evanescentes es de fundamental importancia para el entendimiento del análisis del problema.

Las amplitudes de reflexión R_l y transmisión T_l , las cuales necesitamos para calcular la eficiencia de difracción, las encontramos aplicando las condiciones a la frontera en $y = 0$ y en $y = d$ a los campos eléctricos y magnéticos. El campo eléctrico en la región 1 ($y \leq 0$) es la suma del campo eléctrico incidente (2.4) y los campos eléctricos reflejados (2.19),

$$\vec{E}_1(x, y, t) = \hat{z}(E_0 e^{ik_x x} e^{ik_y y} + \sum_l R_l e^{i(k_x + lK)x} e^{-ik_l y}) e^{-i\omega t} \quad (2.22)$$

El campo eléctrico en la región 2 ($0 < y < d$) está dado por la expresión que resulta cuando sustituimos la expresión para la amplitud $V_l(y)$ dada en (2.17) en la expresión (2.5),

$$\vec{E}_2(x, y, t) = \hat{z} \sum_l \sum_p x_{pl} (C_{pa} e^{ik_p y} + C_{pb} e^{-ik_p y}) e^{i(k_x + lK)x} e^{-i\omega t} \quad (2.23)$$

En la región 3 ($y \geq d$) el campo eléctrico consiste en los campos eléctricos transmitidos (2.20) de la rejilla,

$$\vec{E}_3(x, y, t) = \hat{z} \sum_l T_l e^{i(k_x + lK)x} e^{ik_l y} e^{-i\omega t} \quad (2.24)$$

El requerimiento de continuidad de la componente x del campo magnético en $y = 0$ y en $y = d$ da lugar a la otra mitad de ecuaciones que necesitamos para obtener un sistema cerrado de ecuaciones simultáneas. Las incógnitas son R_l , T_l , C_{pa} y C_{pb} . El tamaño de dicho sistema de ecuaciones es de cuatro veces la dimensión n de la matriz \mathbf{M} truncada. Nótese que el requerimiento de continuidad de la componente y del campo magnético en las fronteras da lugar a las mismas $2n$ ecuaciones que surgen al aplicar las condiciones de frontera a los campos eléctricos (2.22) - (2.24).

Las expresiones para las componentes x de los campos magnéticos en las tres regiones se obtienen de la ecuación de Maxwell (2.8), sustituyendo en ella las expresiones de los campos eléctricos correspondientes (2.22) a (2.24). Dichas expresiones son,

$$\vec{B}_{1x}(x, y, t) = \frac{c}{\omega} (E_0 k_y e^{ik_x x} e^{ik_y y} - \sum_l \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + lK)^2} R_l e^{i(k_x + lK)x} e^{-ik_l y}) e^{-i\omega t} \quad (2.25)$$

$$\vec{B}_{2x}(x, y, t) = \frac{c}{\omega} \sum_l \sum_p x_{pl} k_p (C_{pa} e^{ik_p y} - C_{pb} e^{-ik_p y}) e^{i(k_x + lK)x} e^{-i\omega t} \quad (2.26)$$

y

$$\vec{B}_{3x}(x, y, t) = \frac{c}{\omega} \sum_l \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + lK)^2} T_l e^{i(k_x + lK)x} e^{ik_l y} e^{-i\omega t} \quad (2.27)$$

Entonces, sustituyendo las expresiones para los campos (2.22) a (2.27) en las condiciones a la frontera,

$$E_1(x, 0, t) = E_2(x, 0, t) \quad , \quad (2.28)$$

$$E_2(x, d, t) = E_3(x, d, t) \quad , \quad (2.29)$$

$$B_{1x}(x, 0, t) = B_{2x}(x, 0, t) \quad (2.30)$$

y

$$B_{2x}(x, d, t) = B_{3x}(x, d, t) \quad , \quad (2.31)$$

se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones simultáneas, de cuatro veces la dimensión n de la matriz \mathbf{M} truncada:

$$\sum_p x_{pl}(C_{pa} + C_{pb}) - R_l = \delta_{l0} E_0 \quad , \quad (2.32)$$

$$\sum_p x_{pl}(e^{i\kappa_p d} C_{pa} + e^{-i\kappa_p d} C_{pb}) - e^{id\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + lK)^2}} T_l = 0 \quad , \quad (2.33)$$

$$\sum_p \kappa_p x_{pl}(C_{pa} - C_{pb}) + \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + lK)^2} R_l = \delta_{l0} \frac{\omega}{c} \cos \theta E_0 \quad (2.34)$$

y

$$-\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + lK)^2} \frac{\sum_p \kappa_p x_{pl}(e^{i\kappa_p d} C_{pa} - e^{-i\kappa_p d} C_{pb})}{e^{id\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + lK)^2}} T_l} = 0 \quad , \quad (2.35)$$

donde $l = \frac{-n}{2}, \dots, -1, 0, 1, \dots, \frac{n}{2} - 1$ si se toma en consideración un número n par. El índice p corre sobre los mismos valores que el índice l . Las $4n$ ecuaciones (2.32) - (2.35) pueden ser escritas en forma de una ecuación matricial $\mathbf{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$, donde la matriz \mathbf{A} , cuadrada y de dimensión $4n$, contiene los coeficientes; el vector \vec{x} contiene las amplitudes de reflexión R_l , transmisión T_l y las constantes de integración C_{pa} y C_{pb} ; y el vector \vec{b} contiene los fuentes. Resolviendo este sistema cerrado de ecuaciones simultáneas inhomogéneas, se encuentran las amplitudes de reflexión R_l y transmisión T_l correspondientes a cada orden de difracción l por separado. La eficiencia de difracción transmitida y reflejada por la rejilla (2.1) correspondiente a cada orden de difracción propagante puede ser, por lo tanto, calculada.

La eficiencia de difracción, reflejada o transmitida, está definida como la componente y del vector de Poynting correspondiente,

$$S_{l\pm}^y = \frac{c}{8\pi} E_{l\pm}^z B_{l\pm}^{z*} \quad , \quad (2.36)$$

promediado sobre una longitud de onda $\Lambda = \frac{2\pi}{K}$ de la rejilla en la dirección x y sobre un periodo $\frac{2\pi}{\omega}$, y dividido entre la componente y del vector de Poynting incidente,

$$\eta_{l\pm} \equiv \left| \frac{\bar{S}_{l\pm}^y}{S_i^y} \right| \quad . \quad (2.37)$$

En las ecuaciones (2.36) y (2.37) el signo (+) representa la situación de transmisión y el signo (-) la de reflexión. Explicitamente, la expresión para la eficiencia de difracción reflejada y transmitida correspondiente a cada orden de difracción l propagante, toman la forma

$$\eta_{l-} = \frac{\sqrt{1 - (\sin \theta + l \frac{c}{\omega} K)^2} R_l R_l^*}{\cos \theta} \frac{R_l R_l^*}{E_0^2} \quad (2.38)$$

y

$$\eta_{l+} = \frac{\sqrt{1 - (\sin \theta + l \frac{c}{\omega} K)^2} T_l T_l^*}{\cos \theta} \frac{T_l T_l^*}{E_0^2} \quad , \quad (2.39)$$

respectivamente. La deducción de estas expresiones se encuentra en el **apéndice A.1**.

Como la rejilla es no-disipativa la energía se conserva y, por lo tanto, debe cumplirse que

$$\sum_i (\eta_{l-} + \eta_{l+}) = 1 \quad . \quad (2.40)$$

Esta propiedad es ciertamente un requerimiento que debe cumplir el cálculo numérico. Sin embargo, no es suficiente. Podemos estar seguros de que los resultados numéricos obtenidos son correctos, es decir, que ya convergieron, cuando obtenemos los mismos valores con la matriz \mathbf{M} (2.16) truncada a la dimensión n como a la dimensión $n + 2$. Cuando este es el caso, sabemos que la dimensión n es la óptima para determinado conjunto de valores de los parámetros del sistema.

Dos son los factores relacionados con la dimensión n óptima de la matriz \mathbf{M} . El primer factor tiene que ver con las propiedades de la rejilla. El valor de n depende del valor de la razón ϵ_1/ϵ_0 . Intuitivamente, si la modulación de la rejilla es fuerte ($\epsilon_1/\epsilon_0 \sim 1$), el acoplamiento entre los modos es fuerte, lo cual implica que es necesario involucrar en el análisis un número n de ecuaciones acopladas (2.11) más grande que en el caso de modulación débil ($\epsilon_1/\epsilon_0 \ll 1$). La dimensión n de la matriz \mathbf{M} (2.16) a diagonalizar tiene que ser lo suficientemente grande para que sean tomados en consideración todos los eigenmodos propagantes

de la rejilla. Cuando el acoplamiento entre los modos es débil, la expresión (2.18) nos indica aproximadamente cuántos son los eigenmodos propagantes del sistema. El otro factor está relacionado con los parámetros que caracterizan la onda monocromática incidente. El número de órdenes de difracción l que se propagan en el exterior de la rejilla depende de la frecuencia ω y del ángulo de incidencia θ . Como se puede ver de la expresión para la componente y del vector de onda correspondiente al orden de difracción l , k_{ly} (2.21), el número de órdenes de difracción propagantes aumenta al aumentar ω y al disminuir θ . Cuando son muchos los órdenes de difracción l que son propagantes, es necesario involucrar en el análisis muchos más términos en los desarrollos de los campos (2.19) y (2.20).

CAMPO TRANSVERSAL MAGNETICO (TM): POLARIZACIÓN p

El procedimiento requerido para resolver el problema de difracción de una onda con polarización p es completamente análogo al caso de polarización s . Por lo tanto, haremos una descripción más breve de este caso.

Una onda monocromática de frecuencia ω y polarización p incidente con ángulo θ y vector de onda $k_x = \frac{\omega}{c} \sin \theta$ sobre la rejilla (2.1), está representada por el campo magnético

$$\vec{B}_{inc}(x, y, t) = \hat{z} B_0 e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{-i\omega t} \quad . \quad (2.41)$$

El campo magnético en el interior de la rejilla es en este caso TM, y en analogía con el caso TE dado por la ecuación (2.5), puede expresarse como

$$\vec{B}_{den}(x, y, z) = \hat{z} \sum_l U_l(y) e^{i(k_x + lK)x} e^{-i\omega t} \quad , \quad l = \dots - 1, 0, 1, \dots \quad . \quad (2.42)$$

Eliminando el campo eléctrico de las ecuaciones de Maxwell (2.6) - (2.9) que aplican en la región $0 < y < d$, obtenemos la ecuación que debe obedecer el campo magnético en esta región:

$$\epsilon(x) \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial x^2} + \epsilon_1 K \sin(Kx) \frac{\partial \vec{B}}{\partial x} + \epsilon(x) \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial y^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon^2(x) \vec{B} = 0 \quad . \quad (2.43)$$

Al sustituir las expresiones (2.1) y (2.42) en (2.43), y usando la ortogonalidad de las ondas planas en x , surgen las ecuaciones diferenciales acopladas para las amplitudes $U_l(y)$,

$$\frac{1}{2} \epsilon_1 U_{l-1}''(y) + \epsilon_0 U_l''(y) + \frac{1}{2} \epsilon_1 U_{l+1}''(y) + \frac{1}{4} \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_1^2 U_{l-2}(y) + \beta_l^{P(-)} U_{l-1}(y) + \alpha_l^P U_l(y) + \beta_l^{P(+)} U_{l+1}(y) + \frac{1}{4} \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_1^2 U_{l+2}(y) = 0 \quad , \quad (2.44)$$

donde

$$\beta_l^{P(-)} = \epsilon_1 \left(\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_0 + \frac{1}{2} K(k_x + (l-1)K) - \frac{1}{2} (k_x + (l-1)K)^2 \right) \quad , \quad (2.45)$$

$$\alpha_l^P = \frac{\omega^2}{c^2}(\epsilon_0^2 + \frac{1}{2}\epsilon_1^2) - \epsilon_0(k_x + lK)^2 \quad (2.46)$$

y

$$\beta_l^{P(+)} = \epsilon_1(\frac{\omega^2}{c^2} - \frac{1}{2}K(k_x + (l+1)K) - \frac{1}{2}(k_x + (l+1)K)^2) \quad (2.47)$$

Las ecuaciones diferenciales acopladas (2.44) para las amplitudes $U_l(y)$ pueden ser escritas en forma de una ecuación matricial,

$$\vec{U}''(y) + \mathbf{M}^P \vec{U}(y) = 0 \quad (2.48)$$

de manera análoga al caso de polarización s . En el presente caso, la matriz \mathbf{M}^P está dada por

$$\mathbf{M}^P = \mathbf{M}_A^{-1} \mathbf{M}_B \quad (2.49)$$

donde, a su vez, las matrices \mathbf{M}_A y \mathbf{M}_B están dadas por las siguientes expresiones,

$$\mathbf{M}_A = \begin{bmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \epsilon_0 & \frac{1}{2}\epsilon_1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \frac{1}{2}\epsilon_1 & \epsilon_0 & \frac{1}{2}\epsilon_1 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & \frac{1}{2}\epsilon_1 & \epsilon_0 & \frac{1}{2}\epsilon_1 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & \frac{1}{2}\epsilon_1 & \epsilon_0 & \frac{1}{2}\epsilon_1 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\epsilon_1 & \epsilon_0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \quad (2.50)$$

y

$$\mathbf{M}_B = \begin{bmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \alpha_2^P & \beta_2^{P(-)} & \frac{1}{4}\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_1^2 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \beta_1^{P(+)} & \alpha_1^P & \beta_1^{P(-)} & \frac{1}{4}\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_1^2 & 0 & \dots \\ \dots & \frac{1}{4}\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_1^2 & \beta_0^{P(+)} & \alpha_0^P & \beta_0^{P(-)} & \frac{1}{4}\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_1^2 & \dots \\ \dots & 0 & \frac{1}{4}\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_1^2 & \beta_{-1}^{P(+)} & \alpha_{-1}^P & \beta_{-1}^{P(-)} & \dots \\ \dots & 0 & 0 & \frac{1}{4}\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_1^2 & \beta_{-2}^{P(+)} & \alpha_{-2}^P & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \quad (2.51)$$

respectivamente. Los eigenvalores $\kappa_p^2 = \kappa_p^2(k_x, \omega, K)$ que se obtienen al diagonalizar la matriz ortogonal \mathbf{M}^P son reales, y pueden ser positivos o negativos. Las amplitudes $U_l(y)$ se expresan como sumas infinitas sobre los eigenmodos del material,

$$U_l(y) = \sum_p (C_{pa} x_{pl} e^{i\kappa_p y} + C_{pb} x_{pl} e^{-i\kappa_p y}) \quad (2.52)$$

donde x_{pl} es la componente vectorial l del eigenmodo p , correspondiente a la componente y del vector de onda κ_p ; este último, de nuevo, resulta ser puramente real o puramente

imaginario. Los eigenmódos correspondientes a κ_p real propagan en la rejilla, y los denominamos modos propagantes. Los demás modos, con κ_p imaginario, son evanescentes.

En el exterior de la rejilla (2.1), los campos magnéticos reflejados y transmitidos están dados por las expresiones

$$\vec{B}_{ref}(x, y, t) = \hat{z} \sum_l R_l^P e^{i(k_x + lK)x} e^{-ik_y y} e^{-i\omega t} \quad , \quad (2.53)$$

y

$$\vec{B}_{tra}(x, y, t) = \hat{z} \sum_l T_l^P e^{i(k_x + lK)x} e^{ik_y y} e^{-i\omega t} \quad , \quad (2.54)$$

respectivamente, donde k_{ly} está dado por (2.21). Cada término por separado en las sumas (2.53) y (2.54) representa el campo magnético correspondiente a un orden de difracción $l = \dots - 1, 0, 1 \dots$, y dependiendo si k_{ly} es real o imaginario, el orden de difracción l es denominado propagante o evanescente.

El campo magnético en todo el espacio está dado por las expresiones,

$$\vec{B}_1(x, y, t) = \hat{z} (B_0 e^{ik_x x} e^{ik_y y} + \sum_l R_l e^{i(k_x + lK)x} e^{-ik_y y}) e^{-i\omega t} \quad , \quad y < 0 \quad , \quad (2.55)$$

$$\vec{B}_2(x, y, t) = \hat{z} \sum_l \sum_p x_{pl} (C_{pa} e^{i\kappa_p y} + C_{pb} e^{-i\kappa_p y}) e^{i(k_x + lK)x} e^{-i\omega t} \quad , \quad 0 \leq y \leq d \quad (2.56)$$

y

$$\vec{B}_3(x, y, t) = \hat{z} \sum_l T_l e^{i(k_x + lK)x} e^{ik_y y} e^{-i\omega t} \quad , \quad y > d \quad . \quad (2.57)$$

La componente x del campo eléctrico se obtiene al sustituir las expresiones (2.55) - (2.57) en la ecuación de Maxwell (2.7),

$$\vec{E}_{1x}(x, y, t) = \frac{c}{\omega} (-E_0 k_y e^{ik_x x} e^{ik_y y} + \sum_l k_{ly} R_l e^{i(k_x + lK)x} e^{-ik_y y}) e^{-i\omega t} \quad , \quad y < 0 \quad , \quad (2.58)$$

$$\vec{E}_{2x}(x, y, t) = -\frac{c}{\omega \epsilon(x)} \sum_l \sum_p x_{pl} \kappa_p (C_{pa} e^{i\kappa_p y} - C_{pb} e^{-i\kappa_p y}) e^{i(k_x + lK)x} e^{-i\omega t} \quad , \quad 0 \leq y \leq d \quad (2.59)$$

y

$$\vec{E}_{3x}(x, y, t) = -\frac{c}{\omega} \sum_l k_{ly} T_l e^{i(k_x + lK)x} e^{ik_y y} e^{-i\omega t} \quad , \quad y > d \quad . \quad (2.60)$$

Las condiciones a la frontera en $y = 0$ y $y = d$ son las siguientes,

$$B_1(x, 0, t) = B_2(x, 0, t) \quad , \quad (2.61)$$

$$B_2(x, d, t) = B_3(x, d, t) \quad , \quad (2.62)$$

$$E_{1x}(x, 0, t) = E_{2x}(x, 0, t) \quad (2.63)$$

y

$$E_{2x}(x, d, t) = E_{3x}(x, d, t) \quad . \quad (2.64)$$

Sustituyendo las expresiones para los campos (2.55) - (2.60), obtenemos el sistema cerrado de $4n$ ecuaciones inhomogéneas,

$$\sum_{p=1}^n x_{pl}^P (C_{pa}^P + C_{pb}^P) - R_l^P = -\delta_{l0} B_0 \quad , \quad (2.65)$$

$$\sum_{p=1}^n (x_{pl}^P e^{i\kappa_p^P d} C_{pa}^P + x_{pl}^P e^{-i\kappa_p^P d} C_{pb}^P) - e^{id\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + lK)^2}} T_l^P = 0 \quad , \quad (2.66)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{p=1}^n \kappa_p^P x_{pl}^P (C_{pa}^P - C_{pb}^P) + \frac{1}{2}\epsilon_1 R_{l-1}^P \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + (l-1)K)^2} \\ & + \epsilon_0 R_l^P \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + lK)^2} + \frac{1}{2}\epsilon_1 R_{l+1}^P \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + (l+1)K)^2} \\ & = \delta_{l(-1)} \frac{1}{2}\epsilon_1 \frac{\omega}{c} \cos \theta B_0 + \delta_{l0} \epsilon_0 \frac{\omega}{c} \cos \theta B_0 + \delta_{l1} \frac{1}{2}\epsilon_1 \frac{\omega}{c} \cos \theta B_0 \end{aligned} \quad (2.67)$$

y

$$\begin{aligned} & \sum_{p=1}^n \kappa_p x_{pl} (e^{i\kappa_p d} C_{pa} - e^{-i\kappa_p d} C_{pb}) \\ & - \frac{1}{2}\epsilon_1 T_{l-1}^P \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + (l-1)K)^2} e^{id\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + (l-1)K)^2}} \\ & - \epsilon_0 T_l^P \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + lK)^2} e^{id\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + lK)^2}} \\ & - \frac{1}{2}\epsilon_1 T_{l+1}^P \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + (l+1)K)^2} e^{id\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + (l+1)K)^2}} = 0 \quad , \quad (2.68) \end{aligned}$$

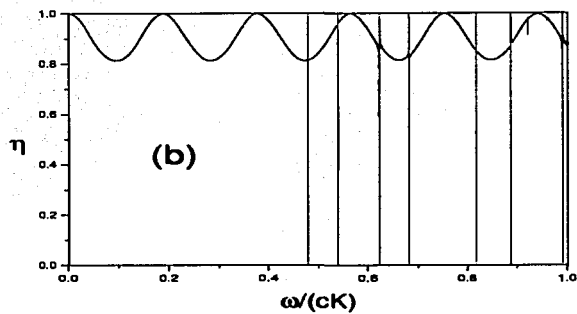
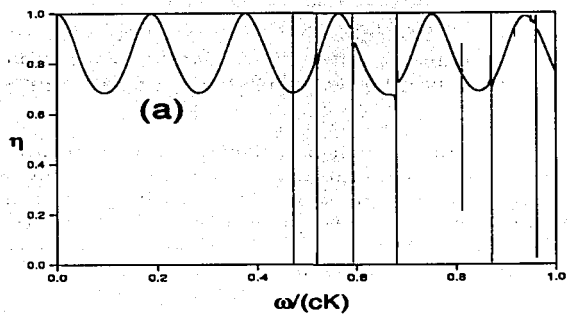
donde $l = -\frac{1}{2}n, \dots, -1, 0, 1, \dots, \frac{1}{2}n - 1$ si se toma en consideración un número n par. El índice p corre sobre los mismos valores como el índice l . Resolviendo este sistema de $4n$ ecuaciones simultáneas, se obtienen las amplitudes de los campos reflejados R_l y transmitidos T_l . La eficiencia de difracción se calcula utilizando las expresiones (2.38) y (2.39), sustituyendo B_0 por E_0 .

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

2.1.2. Resultados numéricos

En la **figura 2.2** mostramos la eficiencia de difracción transmitida total, $\eta_+ = \sum_l \eta_{l+}$ con η_{l+} dado por (2.39), como función de la frecuencia ω de una onda monocromática que incide con ángulo $\theta = 28^\circ$ sobre la rejilla (2.1) con $\epsilon_0 = 3$ y $\epsilon_1 = 0,121$; la anchura de la rejilla es $d = 10,0K^{-1}$. El caso cuando la onda incidente tiene polarización *s* se muestra en la **figura 2.2a** y el caso de polarización *p* de la onda incidente, para los mismos parámetros del sistema, se muestra en la **figura 2.2b**. Observamos que, aparte de las ondulaciones suaves de fondo en la eficiencia de difracción transmitida, aparecen picos muy pronunciados espaciados con intervalos irregulares entre si. La **figura 2.2c** muestra el primer pico de la eficiencia de difracción para el caso de polarización *s* en un intervalo de frecuencia amplificado.

Notamos que la mayoría de los “picos” van de reflexión total a transmisión total en un intervalo de frecuencia muy pequeño. Veremos más adelante que esos picos son las resonancias con los modos guiados escapatorios que se propagan en la rejilla. Para poder entender estas resonancias tenemos que conocer la relación de dispersión $\omega = \omega(k_x)$ que describe el material modelado por la función dieléctrica (2.1). La relación de dispersión nos da toda la información sobre los modos propios de la rejilla.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

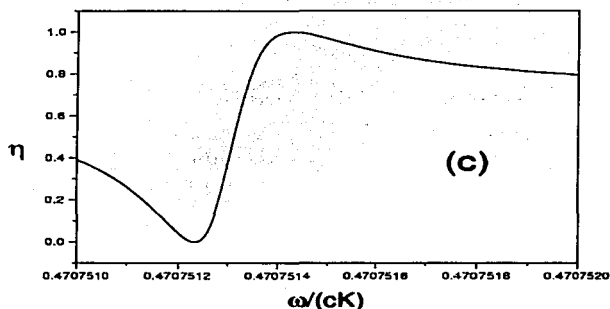


Figura 2.2: La eficiencia de difracción transmitida total como función de la frecuencia ω de una onda monocromática que incide con ángulo $\theta = 28^\circ$ sobre una rejilla (2.1) de anchura $d = 10,0K^{-1}$, con $\epsilon_0 = 3$ y $\epsilon_1 = 0,121$. (a) La onda incidente tiene polarización s . (b) La onda incidente tiene polarización s . (c) La primera resonancia en el caso de polarización s de la onda incidente graficado en el intervalo de frecuencia $\omega = 0,470751cK^{-1}$ a $\omega = 0,470752cK^{-1}$.

2.2. Relación de dispersión

2.2.1. Teoría

Para determinados valores de los parámetros del sistema, la rejilla modelada por la ecuación (2.1) puede ser entendida como una estructura de guía de ondas para los modos naturales del material. Un modo guiado es una solución de las ecuaciones de Maxwell en todo el espacio, incluida la rejilla, en ausencia de onda incidente. Dichos modos tienen la forma de ondas propagantes en la dirección x ; en la dirección y las ondas se propagan dentro de la rejilla y son evanescentes en su exterior. La situación se muestra en la figura 2.3a

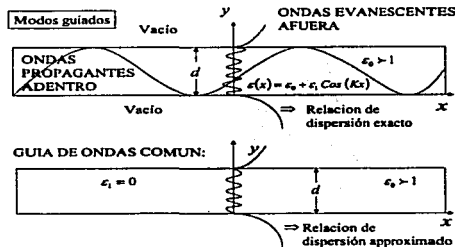


Figura 2.3: (a) La rejilla de difracción (2.1) sin campos incidentes. (b) Guía de ondas convencional.

Para encontrar la relación de dispersión exacta que describe la rejilla, $\omega = \omega(k_x)$, procedemos de manera similar al cálculo de las expresiones para la eficiencia de difracción en la sección anterior. La situación dentro de la rejilla sigue siendo descrita por las ecuaciones (2.11) en el caso TE, y por las ecuaciones (2.44) en el caso TM, pero debido a que ahora buscamos las soluciones correspondientes a los modos propios del material, no hay onda incidente. Así que consideramos $E_0 = 0$ en el caso TE y $B_0 = 0$ en el caso TM. En el exterior de la rejilla exigimos que la dependencia de la coordenada y de los campos tenga la forma $e^{-|k'_{iy}|y}$, con

$$k'_{iy} = \sqrt{(k_x + lK)^2 - \frac{\omega^2}{c^2}} \quad (2.69)$$

Es importante señalar que la rejilla de difracción dieléctrica (2.1) no es una guía de onda en el sentido estricto de la palabra, debido a que la modulación representada por un valor de ϵ_1 implica que los campos en el exterior se acoplan con todos los eigenmodos en el material. En otras palabras, no es posible encontrar valores para los parámetros k_x , ω y K del sistema, de tal manera que κ_l y k'_{ly} sean reales para todos los valores de l simultáneamente; y por lo tanto, no pueden existir modos guiados en la rejilla sin que estos sean acompañados por un número finito de órdenes de difracción propagantes en el exterior. El que el campo en el exterior que acompaña los modos guiados de la rejilla no pueda ser estrictamente evanescente, da lugar a que los modos guiados sean "escapatorios" (leaky modes), y esto a su vez implica que el tiempo de vida de dichos modos sea limitado.

Las expresiones explícitas para los campos en todo el espacio correspondientes a la situación de modos guiados, se obtiene realizando la sustitución

$$k_{ly} \rightarrow ik'_{ly} \quad (2.70)$$

con k'_{ly} dado en (2.69) y con $E_0 = 0$ en las ecuaciones (2.22) - (2.27) en el caso de polarización s , y con $B_0 = 0$ en las ecuaciones (2.55) - (2.60) en el caso de polarización p . El sistema cerrado de $4n$ ecuaciones simultáneas a resolver para encontrar la relación de dispersión $\omega = \omega(k_x)$ que describe los modos propios del material (2.1) se obtiene realizando estas mismas sustituciones en las ecuaciones (2.32) a (2.35) para el caso TE, y en las ecuaciones (2.65) a (2.68) para el caso TM. Los sistemas de $4n$ ecuaciones lineales simultáneas son ahora homogéneas y pueden ser escritos como $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{0}$, que tiene soluciones no triviales cuando $\det(\mathbf{A}(k_x, \omega, K)) = 0$. Para periodicidad constante de la rejilla K es fijo, y los ceros del determinante de la matriz $\mathbf{A}(k_x, \omega, K)$ dan la relación de dispersión $\omega = \omega(k_x)$ del sistema.

En el límite cuando $\epsilon_1 \ll \epsilon_0$, el acoplamiento entre los modos de la rejilla es débil. Suponiendo que en este caso podemos aproximar $\epsilon_1 \approx 0$ en las ecuaciones (2.11) para el caso TE y en las ecuaciones (2.44) para el caso TM, encontramos que los eigenmodos del material x_{pl} están dados aproximadamente por

$$x_{pl} \approx \delta_{pl} \quad (2.71)$$

y las componentes y de los vectores de onda tienen la forma

$$\kappa_p \approx \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_0 - (k_x + lK)^2} \quad (2.72)$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

A su vez, las expresiones para las amplitudes que determinan la propagación dentro de la rejilla tienen tan sólo un término, que en el caso de polarización s (2.17) tiene la forma,

$$V_l(y) \approx C_{1a} e^{i\kappa_l y} + C_{1b} e^{-i\kappa_l y} \quad , \quad (2.73)$$

con una expresión análoga para el caso de polarización p . El desacoplamiento entre los modos cuando $\epsilon_1 \rightarrow 0$ implica que podemos buscar soluciones para un eigenmodo a la vez, como en una guía de ondas convencional, vea la **figura 2.3b**. En el exterior de la rejilla exigimos campos evanescentes con una dependencia en la coordenada y de la forma $e^{-|k'_{ly}| |y|}$, con k'_{ly} dado por la ecuación (2.69). En el **Apéndice C** resolvemos este sencillo problema, y encontramos que los vectores de onda deben satisfacer, para cada $l = \dots -1, 0, 1, \dots$,

$$\tan\left(\frac{1}{2}\kappa_l d\right) = \begin{cases} \frac{|k'_{ly}|}{\kappa_l} & \text{si } l \text{ par} \\ -\frac{\kappa_l}{|k'_{ly}|} & \text{si } l \text{ impar} \end{cases} \quad , \quad (\text{TE}) \quad , \quad (2.74)$$

en el caso de polarización s . Y para el caso de polarización p se debe cumplir

$$\tan\left(\frac{1}{2}\kappa_l d\right) = \begin{cases} \frac{\epsilon_0 |k'_{ly}|}{\kappa_l} & \text{si } l \text{ par} \\ -\frac{\kappa_l}{\epsilon_0 |k'_{ly}|} & \text{si } l \text{ impar} \end{cases} \quad , \quad (\text{TM}) \quad , \quad (2.75)$$

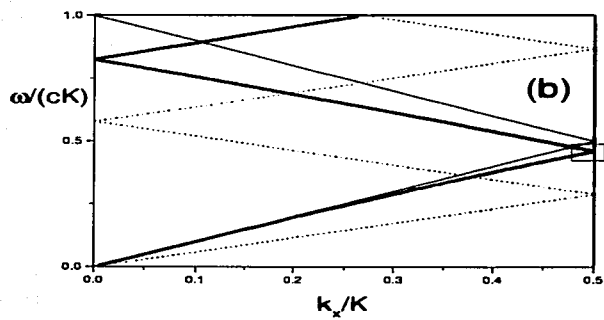
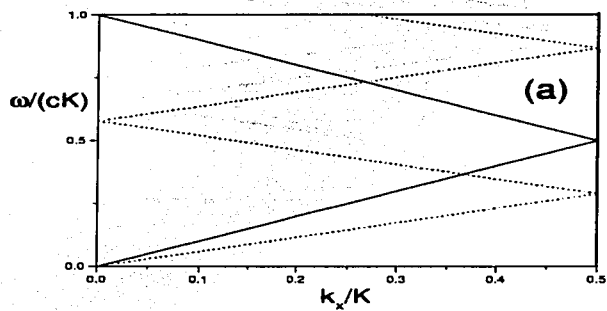
donde k'_{ly} está dado en (2.69) y κ_l en (2.72).

Para un valor de d dado, las ecuaciones (2.74) y (2.75) son las relaciones de dispersión $\omega = \omega(k_x)$ en el límite $\epsilon_1 \rightarrow 0$ para los casos de polarización s y p , respectivamente. Como veremos más adelante, las ramas en las relaciones de dispersión obtenidas desde las ecuaciones (2.74) y (2.75) son esencialmente idénticas a las que surgen al resolver las ecuaciones exactas (2.11) y (2.44) para valores de ϵ_1 y ϵ_0 en concordancia con la condición $\epsilon_1 \ll \epsilon_0$, salvo en las orillas de las zonas de Brillouin, donde las ramas calculadas con la teoría exacta se abren en brechas.

2.2.2. Resultados numéricos de la relación de dispersión

En la **figura 2.4** mostramos la primera Zona de Brillouin de la relación de dispersión $\omega = \omega(k_x)$ de los modos guiados en la rejilla (2.1) con $\epsilon_0 = 3$ y $\epsilon_1 = 0,121$ para el caso de polarización s .

La **figura 2.4a** muestra las propiedades genéricas de la relación de dispersión $\omega = \omega(k_x)$ para el caso TE. Las **figuras 2.4b** y **2.4c** son ejemplos específicos para rejillas de anchura



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

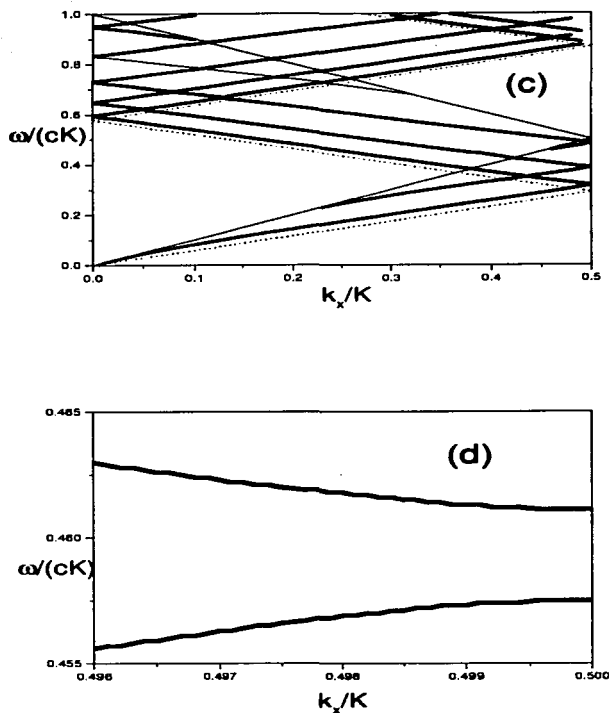


Figura 2.4: La primera Zona de Brillouin de la relación de dispersión $\omega = \omega(k_x)$ de una rejilla (2.1) con $\epsilon_0 = 3$ y $\epsilon_1 = 0,121$ en el caso de polarización s . (a) Las regiones limitadas desde abajo por las líneas punteadas y desde arriba por las líneas sólidas son las regiones de resonancia (ver texto). (b) Las líneas sólidas gruesas representan la relación de dispersión de los modos guiados de una rejilla de anchura $d = 1K^{-1}$. (c) La relación de dispersión para una rejilla de anchura $d = 10K^{-1}$ representada por las líneas sólidas gruesas. (d) La relación de dispersión para la rejilla en (b) en una orilla de la Zona de Brillouin calculada con la teoría exacta. Las ramas se abren en brechas.

$d = 1,0K^{-1}$ y $d = 10,0K^{-1}$, respectivamente, para este mismo caso de polarización. En la **figura 2.4d**, que muestra amplificadamente el cuadrado marcado en la **figura 2.4b**, podemos apreciar que las ramas en la relación de dispersión, calculadas con las ecuaciones exactas (2.11), se abren en brechas en las orillas de la zona de Brillouin. Con excepción de dichas brechas, la relación de dispersión calculada utilizando las ecuaciones aproximadas (2.74), que desprecian la modulación introducida por ϵ_1 , son esencialmente idénticas a las que se obtienen con la teoría exacta para los parámetros de la rejilla $\epsilon_0 = 3$ y $\epsilon_1 = 0,121$. Esto es de esperarse ya que $\epsilon_1 \ll \epsilon_0$.

Las propiedades generales que se siguen de la **figura 2.4a** nos muestran cuáles son las combinaciones de los parámetros k_x , ω y K que permiten la existencia de modos guiados en la estructura. Podemos distinguir la región de modos guiados como aquella limitada desde abajo por las líneas punteadas y desde arriba por las líneas sólidas. Subiendo en frecuencia, las líneas punteadas determinan el cambio de imaginario a real del vector de onda $\kappa_p = \kappa_p(k_x, \omega, K)$. Para rejillas de modulación débil ($\epsilon_1 \ll \epsilon_0$) dicho cambio ocurre cuando $\kappa_p \approx \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_0 - (k_x + lK)^2}$ (2.18) cambia de imaginario a real, es decir, cuando un determinado eigenmodo representado por κ_p cambia su característica de evanescente a propagante. Las líneas sólidas marcan a partir de qué conjunto de parámetros k_x , ω y K un determinado orden de difracción l cambia de evanescente a propagante, y son ubicadas donde $k'_{ly} = \sqrt{(k_x + lK)^2 - \frac{\omega^2}{c^2}}$ (2.69) cambia de imaginario a real. Por razones obvias, llamaremos *región de resonancias* a dicha zona. Ejemplos específicos en los que las ramas de la relación de dispersión se encuentran siempre dentro de la región de resonancias, son las **figuras 2.4b y 2.4c** para el caso TE, que corresponden a rejillas de anchuras $d = 1,0K^{-1}$ y $d = 10,0K^{-1}$, respectivamente.

Mencionamos aquí como un punto aparte que las líneas sólidas definidas por $k_{ly} = 0$ son las ubicaciones donde las anomalías Rayleigh-Wood [18, 19, 20] aparecen. Estos son los lugares donde los órdenes de difracción propagantes emergen. No hemos encontrado ningún comportamiento peculiar a lo largo de estas líneas.

Del análisis numérico de las ecuaciones exactas (2.11) de la estructura de los eigenmodos, encontramos que debajo de la primera línea punteada no hay ningún eigenmodo propagante, entre la primera y la segunda línea punteada hay uno, entre la segunda y la tercera hay dos, etc. De la misma manera, de la expresión para k'_{ly} (2.69), se puede ver que debajo de la primera línea sólida no hay ningún orden de difracción que propaga en el exterior de la rejilla, entre la primera y la segunda línea sólida propaga el orden $l = 0$, entre la segunda y la tercera propagan los dos primeros órdenes que aparecen, $l = 0$ y $l = -1$, etc. Por lo tanto, podemos concluir que en la región de resonancias el número de eigenmodos propagantes es siempre mayor que el número de órdenes de difracción propagantes. Afuera

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

de esta región, el número de eigenmodos propagantes en la rejilla es igual al número de órdenes de difracción propagantes en su exterior, así que no hay ningún modo propagante "sobrante" que se deje guiar por la rejilla dieléctrica (2.1) y por lo tanto no puede haber resonancia.

Debido a que el campo correspondiente a cada orden de difracción l en el exterior de la rejilla se acopla a todos los eigenmodos, los modos guiados son en general acompañados por un número finito de órdenes de difracción propagantes. Como el campo en el exterior de la rejilla correspondiente a tales modos guiados no puede ser nunca estrictamente evanescente, los modos guiados tienen tiempo de vida finita. Esto se refleja en que las ramas en las relaciones de dispersión en las **figuras 2.4b** y **2.4c** tienen anchura finita.

2.3. Resonancia de modos guiados

Las ubicaciones exactas de las resonancias observadas en la eficiencia de difracción graficada en las **figuras 2.2a** y **2.2b**, como función de la frecuencia ω de la onda monocromática incidente, pueden ser encontradas directamente de la relación de dispersión.

La eficiencia de difracción transmitida, sumada sobre todos los órdenes de difracción l propagantes en el exterior, se muestra en la **figura 2.2a**. Este caso corresponde a una onda monocromática de polarización s incidente con ángulo $\theta = 28^\circ$ sobre la rejilla (2.1) con $\epsilon_0 = 3$, $\epsilon_1 = 0,121$ y anchura $d = 10,0K^{-1}$. En el intervalo graficado, $0 < \frac{\omega}{cK} < 1$, observamos nueve picos. En la **figura 2.4c** está graficada la relación de dispersión $\omega = \omega(k_x)$ que describe la relación entre frecuencia ω y la componente k_x del vector de onda de los modos propios de una rejilla para los misma rejilla. Observamos también que la relación de dispersión contiene nueve ramas en el intervalo $0 < \frac{\omega}{cK} < 1$. Cada una de estas ramas representa uno de los nueve eigenmodos propagantes presentes en la estructura.

La relación de dispersión en la **figura 2.4c** corresponde al caso del espectro de difracción mostrado en la **figura 2.2a**. La relación entre la frecuencia ω y la componente k_x del vector de onda puede ser representada por la línea $\frac{\omega}{c} = \frac{k_x}{\sin(28^\circ)}$ y graficada junto con la relación de dispersión $\omega = \omega(k_x)$ que describe la propagación de los eigenmodos propios de la rejilla. Esto se muestra en la **figura 2.5**.

Observamos en la **figura 2.5** que la línea $\frac{\omega}{c} = \frac{k_x}{\sin \theta}$ cruza las ramas de la relación de dispersión en nueve puntos (ω, k_x) . Las resonancias en la eficiencia de difracción en la **figura 2.2a** están ubicadas exactamente en las frecuencias correspondientes a estos puntos. Por lo tanto podemos entender esos picos como las resonancias con los modos guiados en la

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

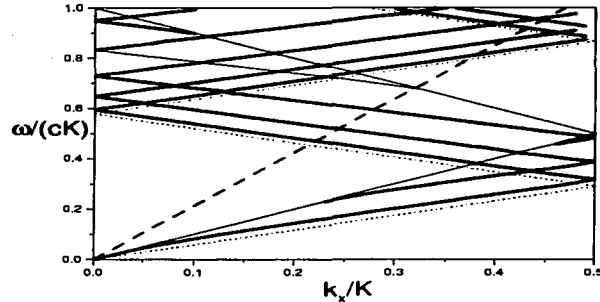


Figura 2.5: Relación de dispersión correspondiente al caso TE para una rejilla (2.1) con $\epsilon_0 = 3$, $\epsilon_1 = 0,121$ y de espesor $d = 10,0K^{-1}$, representada por las líneas sólidas gruesas. La línea punteada gruesa representa la frecuencia ω de una onda monocromática de polarización s incidente con ángulo $\theta = 28^\circ$ sobre la rejilla, como función de k_x . La línea punteada gruesa $\frac{\omega}{c} = \frac{k_x}{\sin(28^\circ)}$ cruza las ramas en la relación de dispersión para nueve valores de la frecuencia en el intervalo $0 < \frac{\omega}{cK} < 1$.

rejilla. En otras palabras, las cruces entre la línea $\frac{\omega}{c} = \frac{k_x}{\sin(28^\circ)}$ y las ramas de la relación de dispersión de los modos guiados determinan los valores de frecuencia que permite que una onda monocromática de polarización s incidente con ángulo $\theta = 28^\circ$ excite uno de estos modos, el modo cuyo eigenfrecuencia corresponde a la frecuencia de la señal incidente.

Si cambiamos el ángulo de incidencia θ , la línea que representa la onda incidente, $\frac{\omega}{c} = \frac{k_x}{\sin \theta}$, cambia su inclinación y cruza las ramas de la relación de dispersión de los modos guiados para otros valores de frecuencia. Así que los valores para la frecuencia de la señal incidente que permite excitación de los modos son otros. De manera análoga, se puede fijar la frecuencia ω y encontrar los valores de θ que corresponden a excitación de los modos guiados de un sistema determinado por los parámetros $(\epsilon_0, \epsilon_1, d, \omega)$ fijos.

Es muy útil poder conocer las ubicaciones de las resonancias directamente desde la relación de dispersión sin necesidad de graficar la eficiencia de difracción. Como vimos en la **figura**

2.2c, la primera resonancia para el caso TE con $(\epsilon_0, \epsilon_1, \theta, d) = (3, 0, 121, 28^\circ, 10, 0K^{-1})$ está ubicada en un intervalo de frecuencia muy pequeño, $\omega = 0,470751cK^{-1}$ a $\omega = 0,470752cK^{-1}$. Por lo tanto, si estuviéramos localizando las resonancias graficando la eficiencia de difracción, hubiera habido un riesgo de no detectar la presencia de todas las resonancias. El poder localizar las resonancias directamente de la relación de dispersión nos permite saber cuáles son los intervalos donde se encuentran, y al graficar la eficiencia de difracción, aumentar la precisión en estos intervalos. Sin embargo, es necesario graficar la eficiencia de difracción del sistema para conocer la forma y el tamaño de los picos de resonancia.

Vemos de las **figuras 2.2a y 2.2b** de la eficiencia de difracción que los picos de resonancia no siempre van desde 0 a 1. Hay unos picos apenas distinguibles alrededor de $\omega = 0,9cK^{-1}$. Aparte de estas figuras, hemos inspeccionado la eficiencia de difracción para muchos otros casos, y se encuentra como tendencia general que las resonancias tienden a disminuir al aumentar la frecuencia, incluso hasta que desaparecen por completo en algunos casos. Creemos que esto se debe al hecho de que al aumentar la frecuencia el número de eigenmodos que propagan en el material también aumenta, lo cual implica que la energía incidente tiene que ser distribuida entre muchos modos con el resultado de que habrá una menor excitación de los modos guiados correspondientes. Las resonancias están siempre presentes cuando el vector de onda de la onda incidente $|\vec{k}_{inc}| = \frac{\omega}{c}$ y el vector de onda de la rejilla $K = \frac{2\pi}{\Lambda}$ son de mismo orden de magnitud.

2.3.1. El origen físico de las resonancias

En la región de resonancias, el número de eigenmodos propagantes en el interior de la rejilla es mayor que el número de órdenes de difracción propagantes en su exterior. En la **figura 2.6** hemos graficado la eficiencia de difracción transmitida como función del espesor d de la rejilla dieléctrica (2.1) con $\epsilon_0 = 3$ y $\epsilon_1 = 0,121$ que resulta cuando una onda monocromática de polarización s incide con ángulo $\theta = 28^\circ$ y frecuencia $\omega = 0,6cK^{-1}$. Esta combinación de valores de los parámetros del sistema corresponde a la región de resonancias con dos eigenmodos propagantes en la rejilla, κ_0 y κ_{-1} , y un sólo orden de difracción propagante en su exterior, k_{0y} .

El eigenmodo propagante κ_0 y el orden de difracción propagante k_{0y} están fuertemente acoplados, y es este acoplamiento el responsable de la oscilación suave que vemos en la eficiencia de difracción en la **figura 2.6**. El próximo eigenmodo propagante, κ_{-1} , está acoplado principalmente al próximo orden de difracción, κ_{-1y} , que es evanescente. Es este acoplamiento entre el eigenmodo propagante y el orden de difracción evanescente correspondiente lo que da lugar a los picos practicamente periódicos que observamos en la **figura 2.6** en la

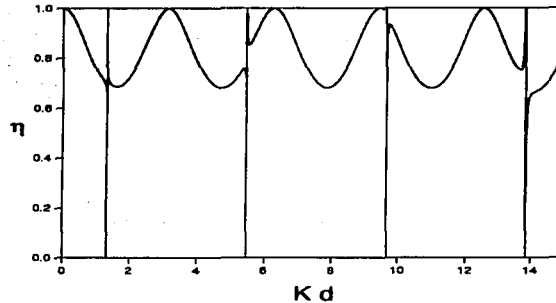


Figura 2.6: La eficiencia de difracción como función de la anchura d de la rejilla con $\epsilon_0 = 3$ y $\epsilon_1 = 0,121$ para una onda monocromática incidente con ángulo $\theta = 28^\circ$ y frecuencia $\omega = 0,6cK^{-1}$. Esta combinación de los valores de los parámetros del sistema corresponde a dos eigenmodos propagantes en la rejilla (2.1) y un orden de difracción propagante en su exterior.

gráfica de la eficiencia de difracción como función del espesor d de la rejilla (2.1). Sin embargo, debido a que ϵ_1 es finito, todos los eigenmodos de la rejilla están acoplados a todos los órdenes de difracción del sistema, propagantes y evanescentes. Cuando $\epsilon_1 \ll \epsilon_0$ el principal acoplamiento ocurre entre un determinado eigenmodo propagante, $\kappa_l = Re(\kappa_l)$, y el orden de difracción correspondiente, k_{ly} , siendo este propagante o evanescente.

Cuando el acoplamiento entre los modos es débil ($\epsilon_1 \ll \epsilon_0$) podemos utilizar la teoría de perturbaciones para encontrar las posiciones de las resonancias. En la teoría de perturbaciones, al orden más bajo, tenemos tan sólo el eigenmodo propagante κ_0 y el orden de difracción $l = 0$ propagante. Esta situación corresponde a una placa dieléctrica uniforme y, efectivamente, la teoría de perturbaciones aproxima muy bien las oscilaciones suaves de fondo observadas en la eficiencia de difracción de la figura 2.6. Para incluir el efecto de la modulación representada por ϵ_1 , es necesario proceder al próximo orden que incluye a κ_{-1} . En este caso, el orden de difracción próximo $l = -1$ acoplado al modo κ_{-1} , es evanescente y, por lo tanto, este modo queda atrapado en la estructura.

El comportamiento de dicho modo atrapado puede ser descrito de la siguiente manera. Considérese la propagación de un frente de onda del eigenmodo κ_{-1} , empezando en una posición arbitraria x en una de las paredes dentro de la estructura. Este frente se propaga hacia la pared opuesta, y al rebotar de ella, adquiere una fase $2\kappa_{(-1)}d - 2\phi$. Al llegar a la pared inicial, obtiene una fase adicional -2ϕ . Por lo tanto, la diferencia total de fase de este frente entre la posición inicial y la posición que tiene después de haberse dejado guiar por la estructura, de ida y vuelta, es igual a $2\kappa_{(-1)}d - 4\phi$. Los campos suman en fase cuando esta expresión es igual a $2m\pi$ con m entero así que las ubicaciones de las resonancias en la **figura 2.6** están dadas por la relación

$$\kappa_{(-1)}d - 2\phi = m\pi \quad , \quad m \text{ entero} \quad . \quad (2.76)$$

Suponiendo que el eigenmodo propagante κ_{-1} se acopla exclusivamente al orden de difracción evanescente correspondiente, $l = -1$, y aplicando condiciones de frontera, podemos calcular la fase ϕ . Esta está dada por la expresión

$$\tan \phi = \frac{|k_{-1y}|}{\kappa_{(-1)}} \quad , \quad (2.77)$$

donde k_{-1y} es la componente y del vector de onda del orden de difracción $l = -1$ y $\kappa_{(-1)}$ es la componente y del vector de onda del eigenmodo propagante en cuestión. La separación entre las resonancias en la **figura 2.6** es igual a $\Delta d = \frac{\pi}{\kappa_{(-1)}}$, y al resolver las ecuaciones (2.76) y (2.77) con $m = 0$ encontramos la posición de la primera resonancia.

Las ecuaciones (2.76) y (2.77) las podemos generalizar para que se apliquen a cada eigenmodo κ_l propagante en la rejilla cuyo orden de difracción l correspondiente es evanescente:

$$\kappa_p d - 2\phi = m\pi \quad (2.78)$$

y

$$\tan \phi = \frac{|k_{ly}|}{\kappa_p} \quad . \quad (2.79)$$

Las ecuaciones (2.78) y (2.79) para todo l pueden ser escritos como las soluciones positivas de la ecuación (2.74) para valores de m par, y las soluciones negativas de (2.74) para valores de m impar. Las ecuaciones (2.78) y (2.79) son la relación de dispersión de los modos guiados en el caso TE (2.74) . El análisis para el caso TM es completamente análogo.

2.3.2. Dependencia de ϵ_1

La eficiencia de difracción transmitida por una rejilla (2.1) con $\epsilon_0 = 3$ y $\epsilon_1 = 0,121$ y de anchura $d = 10,0K^{-1}$ como función de la frecuencia ω de una onda monocromática incidente con ángulo $\theta = 28^\circ$ en la **figura 2.2** fue calculada resolviendo las ecuaciones exactas

(2.11) para el caso TE (**figura 2.2a**) y (2.44) para el caso TM (**figura 2.2b**). Debido a que los valores $\epsilon_0 = 3$ y $\epsilon_1 = 0,121$ obedecen la condición $\epsilon_1 \ll \epsilon_0$, las posiciones de los picos de resonancia las pudimos encontrar de la relación de dispersión aproximada, (2.74) para el caso TE y (2.75) para el caso TM. Hallamos que para estos valores de los parámetros, las ramas de la relación de dispersión calculadas con la teoría exacta coincidieron con las calculadas aproximadamente salvo en las orillas de la Zona de Brillouin.

La modulación introducida por un valor finito de ϵ_1 implica que todos los modos del sistema están acoplados entre sí. Cuando ϵ_1 es pequeño con respecto a ϵ_0 , la propagación en la estructura es similar a la propagación en una guía de ondas convencional. La diferencia está en que los modos guiados por la rejilla son siempre acompañados por componentes propagantes en el exterior. Por lo tanto, el tiempo de vida de estos modos escapatorios es finita y sobra decir que es más larga mientras más pequeña es ϵ_1 en comparación con ϵ_0 .

El tiempo de vida de un modo guiado escapatorio determinado se refleja en las resonancias observadas en la eficiencia de difracción. Cuando ϵ_1 es pequeño, las resonancia están claramente definidas en intervalos de frecuencia muy pequeños, como vemos en la **figura 2.2**. Las ramas de la relación de dispersión calculadas con el método exacto son también muy angostas cuando $\epsilon_1 \ll \epsilon_0$, sin embargo, tienen anchura finita debido a que los modos guiados escapatorios que propagan en la rejilla tienen tiempo de vida finito.

En la **figura 2.7a** hemos graficado la primera resonancia en la eficiencia de difracción transmitida por una rejilla de espesor $d = 1,0K^{-1}$ y constante dieléctrica $\epsilon_0 = 3$ para diez valores diferentes de la modulación ϵ_1 , como función de la frecuencia ω de una onda monocromática con polarización s y ángulo de incidencia $\theta = 28^\circ$. En la **figura 2.7b** vemos el primer pico de resonancia en la eficiencia de difracción transmitida por una rejilla más ancha, de espesor $d = 5,0K^{-1}$, para los mismos diez valores de la modulación ϵ_1 . Observamos que las resonancias se ensanchan al aumentar ϵ_1 con respecto a ϵ_0 , y, en el caso cuando la rejilla es de espesor $d = 5,0K^{-1}$, el pico se ha desplazado visiblemente desde su posición correspondiente a $\epsilon_1 \rightarrow 0$.

En la **figura 2.8** mostramos el ensanchamiento y el desplazamiento de las resonancias graficadas en la **figura 2.7** como función de la modulación ϵ_1 . En la **figura 2.8a** la línea sólida muestra el desplazamiento de la resonancia correspondiente a $d = 1,0K^{-1}$ y la línea punteada representa el desplazamiento de la resonancia correspondiente a $d = 5,0K^{-1}$. La **figura 2.8b** muestra el ensanchamiento de las mismas resonancias. Vemos claramente que las resonancias se ensanchan y se desplazan de su posición en frecuencia correspondiente a $\epsilon_1 \rightarrow 0$ al aumentar ϵ_1 con respecto a ϵ_0 , y que este comportamiento es más prominente mientras más ancha es la rejilla. El desplazamiento en frecuencia puede ser positivo o negativo.

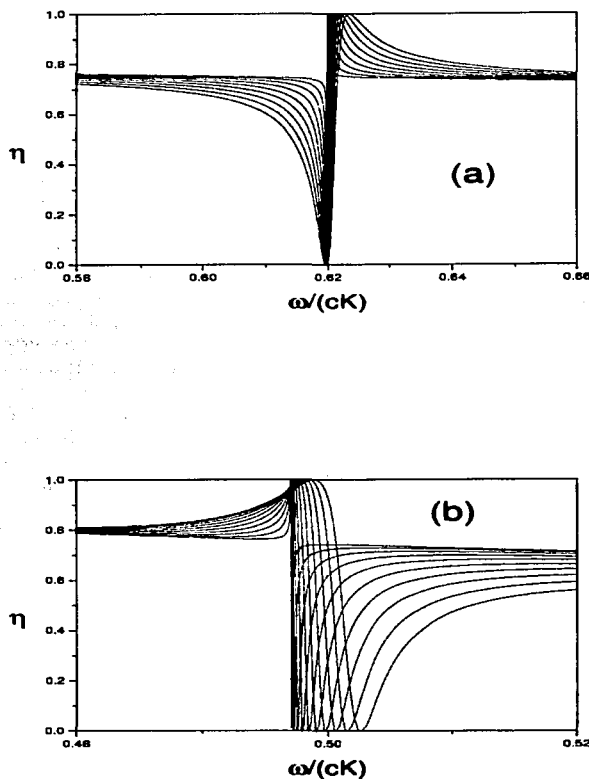


Figura 2.7: (a) Primera resonancia de la eficiencia de difracción transmitida por una rejilla de ancho $d = 1,0K^{-1}$ con $\epsilon_0 = 3$, $\epsilon_1 = 0,1,0,2, \dots, 1,0$, como función de la frecuencia ω de una onda monocromática de polarización s que incide con ángulo $\theta = 28^\circ$. (b) Primera resonancia de la eficiencia de difracción transmitida por una rejilla de anchura $d = 5,0K^{-1}$ para los mismos datos que en (a).

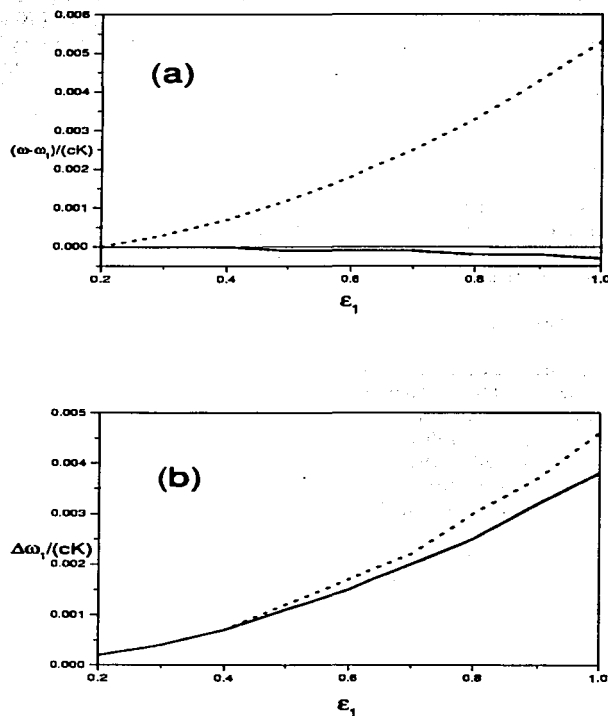


Figura 2.8: (a) Desplazamiento $(\omega - \omega_1)$ de la primera resonancia correspondiente al caso cuando el espesor de la rejilla es $d = 1,0K^{-1}$ graficada en la figura 2.7a (línea sólida) y de la primera resonancia correspondiente al caso cuando $d = 5,0K^{-1}$ graficada en la figura 2.7b (línea punteada) como función de ϵ_1 . Los demás parámetros toman los mismos valores como en la figura 2.7. (b) Ensanchamiento $\Delta\omega$ de la primera resonancia correspondiente al caso cuando el espesor de la rejilla es $d = 1,0K^{-1}$ graficada en la figura 2.7a (línea sólida) y de la primera resonancia correspondiente al caso cuando $d = 5,0K^{-1}$ graficada en la figura 2.7b (línea punteada) como función de ϵ_1 .

Cuando los valores de ϵ_1 y ϵ_0 son del mismo orden de magnitud, las ramas en la relación de dispersión son tan gruesas que posiblemente no se pueda hablar de modos guiados. Sin embargo, las ecuaciones de Maxwell (2.6) - (2.9) tienen solución incluso cuando ϵ_1 es mayor que ϵ_0 lo cual implica que la función dieléctrica $\epsilon(x) = \epsilon_0 + \epsilon_1 \cos(Kx)$ tiene valores negativos en algunas regiones del espacio. Esto es notable ya que la energía del sistema, representada por la eficiencia de difracción total (2.40), se conserva. No es muy claro como se puedan preparar rejillas de difracción con estas características.

2.4. Picos de Bragg

Debido a la periodicidad de la rejilla (2.1), se espera obtener respuesta amplificada en la eficiencia de difracción transmitida para el ángulo de incidencia θ relacionado con el vector de onda de la rejilla $K = \frac{2\pi}{\lambda}$ y con el vector de onda de la onda monocromática incidente $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ a través la relación de Bragg

$$2k \sin \theta = nK \quad , \quad n \text{ entero positivo.} \quad (2.80)$$

Claramente observamos respuesta cuando se cumple la relación de Bragg (2.80) para rejillas de espesor gruesa $d > 10,0K^{-1}$. En la **figura 2.9** hemos graficado la eficiencia de difracción transmitida como función del ángulo de incidencia θ de una onda monocromática con frecuencia $\omega = 1,3cK^{-1}$ para tres anchuras de la rejilla. Observamos, en la **figura 2.9a**, que el pico está ubicado para el valor de θ correspondiente al cumplimiento de la relación de Bragg (2.80) con $n = 1$ para esta frecuencia. En la **figura 2.9b** observamos que el pico está ubicado para el valor de θ correspondiente al cumplimiento de la relación de Bragg (2.80) con $n = 2$. En la **figura 2.10** hemos graficado la eficiencia de difracción transmitida como función del ángulo de incidencia θ de una onda monocromática con frecuencia $\omega = 2,0cK^{-1}$ para las mismas tres anchuras de la rejilla, y observamos respuesta al ángulo de Bragg con $n = 1$, **figura 2.10a**, y con $n = 2$, **figura 2.10b**, lo mismo como fue el caso para una onda incidente con frecuencia $\omega = 1,3cK^{-1}$.

Observamos que en general los picos aumentan al aumentar d , pero no siempre. Por ejemplo, de la **figura 2.9** para frecuencia $\omega = 1,3cK^{-1}$ de la onda incidente, se puede ver que el pico correspondiente al orden de difracción $l = -1$ para el ángulo de Bragg con $n = 1$ es más grande para $d = 50K^{-1}$ que para $d = 100K^{-1}$. Por otro lado de la **figura 2.10**, que corresponde a una onda incidente con frecuencia $\omega = 2,0cK^{-1}$, hallamos que ocurre lo contrario para el pico relacionado con el orden de difracción $l = -2$ para el ángulo de Bragg con $n = 2$.

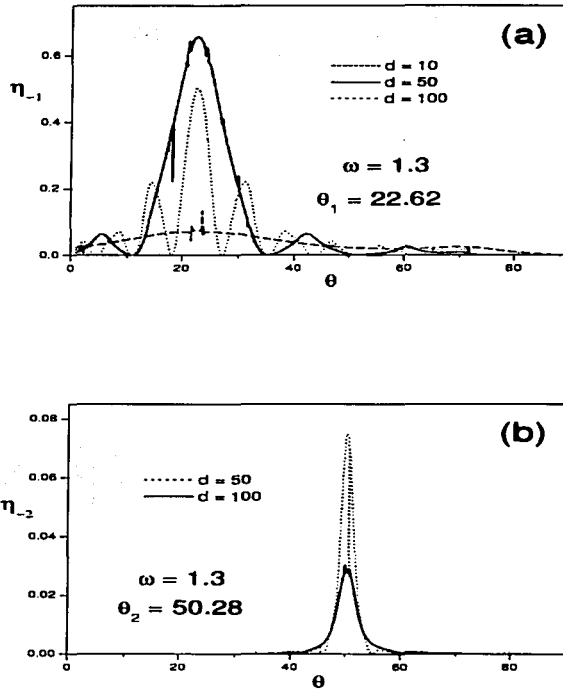


Figura 2.9: La eficiencia de difracción transmitida como función del ángulo de incidencia θ de una onda monocromática de polarización s con frecuencia $\omega = 1,3cK^{-1}$ para tres diferentes anchuras de la rejilla $d = 10K^{-1}, 50K^{-1}, 100K^{-1}$. (a) El orden de difracción $l = -1$. El pico está ubicado en el ángulo de Bragg (2.80) con $n = 1$. (b) El orden de difracción $l = -2$. El pico está ubicado en el ángulo de Bragg (2.80) con $n = 2$.

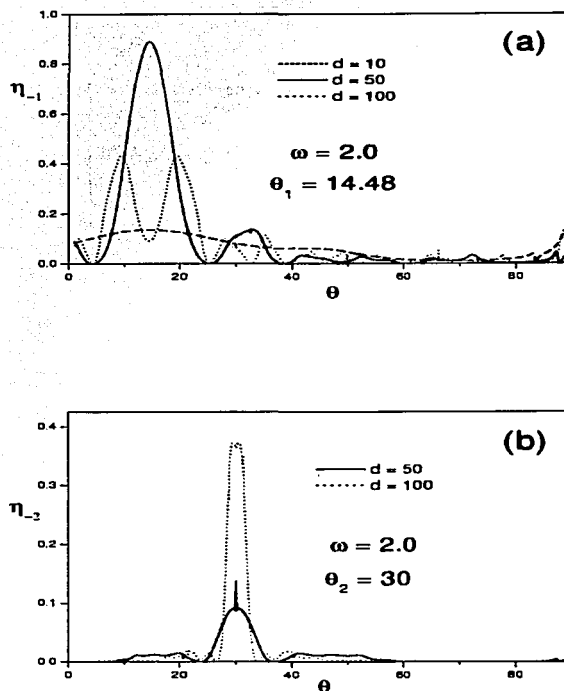


Figura 2.10: La eficiencia de difracción transmitida como función del ángulo de incidencia θ de una onda monocromática de polarización s con frecuencia $\omega = 2,0cK^{-1}$ para tres diferentes anchuras de la rejilla $d = 10K^{-1}, 50K^{-1}, 100K^{-1}$. (a) El orden de difracción $l = -1$. El pico está ubicado en el ángulo de Bragg (2.80) con $n = 1$. (b) El orden de difracción $l = -2$. El pico está ubicado en el ángulo de Bragg (2.80) con $n = 2$.

Vemos que aparte de los picos de Bragg existen picos secundarios que son interferencias tipo Fabrey-Perot debido a que la rejilla de difracción es finita. Estos picos secundarios pueden ser más grandes que el pico de Bragg, incluso tan grandes que el pico de Bragg queda completamente camuflado, como es el caso para frecuencia $\omega = 2,0cK^{-1}$ de la onda incidente y la rejilla de espesor $d = 100K^{-1}$, como podemos ver en la figura 2.10a. Los órdenes de difracción $l \geq 0$ no muestran respuesta significativa para ángulo de Bragg alguno. El comportamiento de estos órdenes de difracción ($l \geq 0$) es dominado principalmente por las interferencias tipo Fabrey-Perot.

En estudios previos ya ha sido encontrada respuesta para el ángulo de Bragg correspondiente a $n = 1$ en la ecuación (2.80) en el espectro de la eficiencia de difracción del primer orden de difracción transmitido ($l = -1$ en nuestra notación) para rejillas de espesor d grueso ($d > 10$). En la literatura existen varios análisis aproximados para estos picos de Bragg [69],[35],[70],[36], usando la teoría de las ondas acopladas y del tratamiento de difracción de luz por ondas del ultrasonido, pero estas teorías son válidas en un intervalo de parámetros muy reducido. Lo novedoso de nuestros resultados es que pudimos encontrar respuesta cuando se cumple la condición de Bragg (2.80) con $n > 1$, aparte de haber desarrollado un análisis numérico capaz de tratar el caso cuando $n = 1$ para un amplio rango de parámetros.

De la relación de dispersión de la rejilla, o de la expresión para la componente y del vector de onda correspondiente al orden de difracción l , $k_{ly} = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (k_x + lK)^2}$, podemos saber cuantos órdenes de difracción son los que propagan, dados la frecuencia ω y el ángulo de incidencia θ . Por ejemplo, correspondiente al intervalo $0 \leq \omega \leq K$, hay por lo mucho dos órdenes de difracción $l = 0$ y $l = -1$. Al aumentar la frecuencia ω , cada vez más órdenes de difracción aparecen, y cuando se cumple la relación de Bragg (2.80), los órdenes de difracción aparecen dos a la vez, $l = m-1$ y $l = -m$, m siendo un número entero positivo.

El resultado principal es que, en general, los órdenes de difracción $l = -m$ muestran picos para ángulos correspondientes a $n = m$ en la relación de Bragg (2.80). Esto se debe al hecho de que para diferentes órdenes de Bragg (es decir, para diferentes valores de n en (2.80)), el orden de difracción correspondiente, $l = -m$, es difractado en la misma dirección que el orden $l = 0$ transmitido. Utilizando la relación $k_x = \frac{\omega}{c} \sin \theta$ (2.2), la expresión para la componente y del vector de onda del orden de difracción difractado puede ser escrita de la siguiente manera:

$$k_{ly} = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (2\frac{\omega}{c} \sin \theta + lK - k_x)^2} \quad (2.81)$$

Cuando el ángulo de incidencia cumple con la relación de Bragg (2.81) para $n = -l$ vemos que la propagación del orden de difracción $l = -n$ está dirigida exactamente en la misma dirección que la onda incidente, $k_{ly} = k_y = \frac{\omega}{c} \cos \theta$, y el resultado es que la eficiencia de

difracción transmitida resulta amplificada.

Es importante señalar que los picos de Bragg con $n \geq 2$ pueden ser entendidos en el contexto de que son los picos de empataamiento de fase de Bragg de los *sobretonos* del vector de onda de la rejilla K , es decir, de nK . Esta interpretación puede ser tener relevancia para la comprensión de los experimentos realizados por Nelson y colaboradores de la difracción de un pulso por rejillas espacialmente periódicas y temporalmente. Ellos interpretan que la respuesta que detectan en los sobretonos correspondiente al vector de onda de la rejilla se debe a excitaciones no lineales en el cristal. Nosotros hemos mostrado que una rejilla con un sólo vector de onda K puede dar lugar a respuesta en los sobretonos nK también. La situación de difracción de un pulso Gaussiano por una rejilla espacio temporal la vamos a tratar en el próximo capítulo.

2.5. Resumen y conclusiones

En este capítulo hemos tratado dos fenómenos relacionados con la difracción de ondas electromagnéticas monocromáticas por una rejilla dieléctrica espacialmente modulada de manera sinusoidal no-disipativa: el fenómeno de la resonancia de modos guiados y el fenómeno de los picos de Bragg.

Como parte de nuestro estudio, desarrollamos las herramientas de cómputo necesarias para poder realizar un análisis riguroso y numéricamente exacto de esos dos fenómenos.

Resolviendo las ecuaciones de Maxwell en el interior de la rejilla y en su exterior y aplicando las condiciones a la frontera, pudimos encontrar las expresiones para los campos en todo el espacio. La cantidad medible a calcular es la eficiencia de difracción reflejada y transmitida por la rejilla. Debido a que la rejilla es finita en la dirección y e infinita en el plano $x - z$, la eficiencia de difracción reflejada (transmitida) se define como la razón de la componente y del vector de Poynting reflejada (transmitida), promediada sobre un periodo espacial y sobre un periodo temporal, y la componente y del vector de Poynting incidente. Pudimos calcular la eficiencia de difracción correspondiente a cada orden de difracción propagante reflejado y transmitido por separado.

La modulación senosoidal en la dirección x acopla los campos, lo cuál implica que la situación en el interior de la rejilla es descrita por un sistema infinito de ecuaciones diferenciales acopladas. El número de ecuaciones n a involucrar en el análisis numérico de un problema específico depende principalmente de la modulación de la rejilla. Consideramos un valor óptimo de n calculando los espectros tanto para n como para $n + 2$ ecuaciones, y

<p>TESIS CON FALLA DE ORIGEN</p>

hallando que difirieran entre sí en una parte en 10^{11} . Utilizamos como verificación adicional de nuestros resultados numéricos el hecho de que la eficiencia de difracción total, la suma sobre todos los órdenes reflejados y transmitidos, se debe mantener constante, debido a su vez a la conservación de la energía.

Al graficar la eficiencia de difracción reflejada y transmitida, correspondiente a cada orden de difracción por separado y a la suma, como función de la frecuencia de la onda monocromática incidente o como función de su ángulo de incidencia, observamos, para algunas combinaciones de los valores de los demás parámetros del sistema, la presencia de picos muy pronunciados ubicados a intervalos irregulares entre sí destacando de la ondulación suave del fondo. Notamos también que dichos picos son en su mayoría cambios muy abruptos que van desde transmisión total hasta reflexión total en un intervalo de frecuencia muy reducido. Con el fin de explicar la presencia de estos picos, calculamos la relación de dispersión que caracteriza a la propagación electromagnética en la estructura dieléctrica, en ausencia de campo incidente. Hallamos que la presencia de esos picos corresponde a la excitación o resonancia de los llamados modos guiados de la rejilla. Estos son modos análogos a los que se propagan en una guía de ondas convencional. Sin embargo, en el presente caso, existen muchos de ellos, y debido al acoplamiento con los órdenes de difracción del exterior, estos modos son "escapatorios", es decir, de vida media finita.

Pudimos encontrar que el fenómeno de resonancia de los modos guiados se presenta para combinaciones de los valores de los parámetros del sistema tales que el número de eigenmodos propagantes en la rejilla excede el número de órdenes de difracción propagantes en su exterior. Utilizando la relación de dispersión pudimos localizar las ubicaciones exactas de tales resonancias como función de la frecuencia de la onda monocromática incidente o como función de su ángulo de incidencia. Calculamos la relación de dispersión numéricamente exacta de la rejilla y encontramos que cuando la modulación es baja, ésta se aproxima muy bien por la relación de dispersión correspondiente a una guía de ondas convencional con el mismo espesor y constante dieléctrica de fondo. Se observan discrepancias sólo las orillas de la zona de Brillouin donde las ramas se abren en brechas.

Estudiando el caso de la eficiencia de difracción como función del espesor de la rejilla, manteniendo los demás parámetros a valores fijos, hallamos también la ubicación periódica de las resonancias, que pudimos explicar de manera sencilla usando teoría de perturbaciones. Este análisis no permitió explicar físicamente el origen de las resonancias. Por ejemplo, para dos modos propagantes en el interior, y uno propagante y otro evanescente en el exterior, hallamos que el propagante exterior se acopla fuertemente con uno de los propagantes en el interior dando lugar a las oscilaciones suaves de fondo. El restante propagante en el interior es el modo guiado que se acopla fuertemente con el evanescente en el exterior. Este análisis conduce de manera sencilla a una expresión que explica la ubicación de las resonancias,

para el caso de modulación débil $\epsilon_1 \ll \epsilon_0$.

Observamos que la periodicidad con que se presentan los picos de resonancia, en las gráficas de la eficiencia de difracción como función del espesor de la rejilla, desaparece cuando la modulación de la rejilla es grande; digamos, del orden de la constante dieléctrica del fondo. Esto se debe a que al aumentar la modulación el acoplamiento entre los eigenmodos y los órdenes de difracción es muy grande, y no se puede decir qué determinado eigenmodo se acopla con qué determinado orden de difracción. Aún si se pudiera hablar de modos guiados para modulación grande, los modos se vuelven tan escapatorios y quedan guiados a distancias tan cortas en la estructura que el concepto de modos guiados pierde sentido. Su tiempo de vida es ya muy corto. Estos aspectos se reflejan en el hecho de que las resonancias se ensanchan y se desplazan conforme aumenta la modulación.

Un fenómeno completamente independiente de la resonancia de los modos guiados es el fenómeno de la difracción de Bragg. Este consiste en que cuando una onda monocromática se difracta por una estructura periódica, la respuesta se amplifica cuando la frecuencia y el ángulo de incidencia de la onda obedecen la relación de Bragg, $2k \sin \theta = nK$, donde K es el vector de onda de la rejilla. Observamos respuesta de Bragg con $n = 1$ y también con $n = 2$ para rejillas de espesor grueso ($d > 10,0K^{-1}$).

Como resultado principal, hallamos que la eficiencia de difracción transmitida de los órdenes de difracción $l = -n$, por separado, muestran picos para ángulos correspondientes a $n = m$ en la relación de Bragg. La explicación es que el orden de difracción $l = -n$ transmitido está dirigido exactamente en la misma dirección como la onda monocromática incidente. Esto lo pone en una situación privilegiada comparado con los demás órdenes de difracción transmitidos.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Capítulo 3

DIFRACCIÓN DE PULSOS GAUSSIANOS POR REJILLAS ESPACIO-TEMPORALES

En este capítulo desarrollamos las herramientas necesarias para realizar un análisis riguroso de la difracción de un pulso Gaussiano por una rejilla espacio-temporal lineal y por una rejilla espacio-temporal no lineal, con el motivo de comprender los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva. En la sección 3.1 presentamos los resultados experimentales más destacados de Nelson y Brennan [8] - [9] y la interpretación que dan de sus mediciones. En la sección 3.2 se encuentra la deducción de las expresiones para la eficiencia de difracción como función del tiempo de retraso, aplicables al caso de difracción de un pulso Gaussiano por una rejilla espacio-temporal lineal y por una rejilla espacio-temporal no lineal. Esto se realiza siguiendo la teoría desarrollada por Romero-Rochín et al. [11] sobre el proceso de excitación anarmónica de los polaritones-fonones en un cristal de $LiTaO_3$. En la sección 3.3 presentamos nuestros resultados numéricos en forma de espectros de la eficiencia de difracción transmitida como función del tiempo de retraso del pulso, así como sus espectros de Fourier, para la rejilla no lineal para dos valores de energía del pulso de excitación; analizamos también el caso de una rejilla espacio-temporal lineal como referencia. En la sección 3.4 discutimos nuestros resultados en el contexto de los espectros experimentales.

3.1. Resultados experimentales en $LiTaO_3$

El experimento se inicia al superponer dos pulsos de láser ultracortos de manera espacial y temporal en un cristal ferroeléctrico no-centrosimétrico de tal manera que su modo Raman activo vibracional sea excitado. La duración de los dos pulsos de excitación tiene que ser

más corto que el periodo del modo Raman.

El modo Raman activo que se excita en los cristales ferroeléctricos son los llamados polaritones-fonones. Estos son una excitación elemental formada por el acoplamiento entre los fonones ópticos transversales del cristal con los fotones producidos por la vibración de los modos polares del mismo. El acoplamiento ocurre típicamente en el infrarrojo.

Para que los polaritones-fonones sean excitados de manera coherente es requisito que la duración de los pulsos de excitación sea más corta que un periodo de oscilación de dichas excitaciones. En esta situación, los pulsos de excitación ejercen una fuerza impulsiva sobre los polaritones-fonones, obligándolos a ser excitados coherentemente de tal manera que todos tienen la misma frecuencia Ω y vector de onda $\pm \vec{K}_p$.

Los polaritones-fonones coherentemente excitados se manifiestan en el cristal por medio de una fluctuación espacialmente periódica de duración limitada que evoluciona con el tiempo. Esta fluctuación hace que el índice de refracción del material aparezca modulada temporal y espacialmente. En otras palabras, se ha formado en el cristal ferroeléctrico no-centrosimétrico en cuestión una rejilla de difracción espacio-temporal.

Los dos pulsos de excitación que inciden sobre la muestra en geometría cruzada con vectores de onda centrales \vec{k}_1 y \vec{k}_2 determinan el vector de onda de la rejilla espacio-temporal $\vec{K} = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$. Hay una discrepancia entre el vector de onda de la rejilla \vec{K} y el vector de onda de los polaritones-fonones coherentemente excitados \vec{K}_p que es despreciable salvo para ángulos de excitación y vectores de onda \vec{k}_1 y \vec{k}_2 muy pequeñas.

Las características de la excitación del modo Raman-activo pueden ser investigadas difractando un tercer pulso por la rejilla espacio-temporal formada por los polaritones-fonones contrapropagantes.

Las oscilaciones de la rejilla son observadas en los experimentos variando el intervalo en el tiempo entre el instante de formación de la rejilla por los dos pulsos ultracortos cruzados y el instante cuando incide el pulso a difractar por ella. Cada valor del *tiempo de retraso* T de este tercer pulso de prueba difractado detecta un instante específico de la evolución temporal de la respuesta del material.

La técnica de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva ha sido empleada durante más que una década para excitar coherentemente modos Raman de manera armónica en diversos materiales que poseen dinámica de modo suave [2, 3, 4, 5, 6, 7, 10]. En este caso, la rejilla espacio-temporal que se forma en el cristal es lineal. La respuesta de tal material excitado

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

armónicamente se detecta difractando pulsos idénticos, con ángulo θ y frecuencia central $\bar{\omega}$ relacionados con el vector de onda de la rejilla K por la relación de Bragg $2\frac{\bar{\omega}}{c} \sin \theta = K$ (2.80). Los espectros de difracción de la señal transmitida por la rejilla como función del tiempo de retraso T del pulso muestra una oscilación periódica correspondiente a una frecuencia dos veces la frecuencia del fonón-polaritón Ω . Un ejemplo de la respuesta de $LiTaO_3$ para este caso de excitación armónica del modo vibracional se muestra en la figura 3.1.

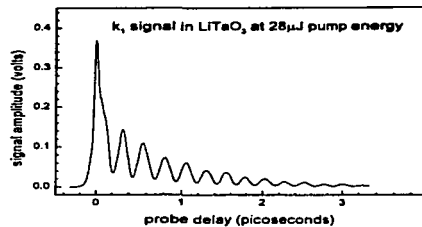


Figura 3.1: Eficiencia de difracción como función del tiempo de retraso T del pulso de prueba difractado, para el caso cuando los polaritones-fonones en $LiTaO_3$ son excitados de manera armónica con pulsos de excitación no muy intensos. El pulso de prueba incide con el ángulo de emparejamiento de fase (“phase-matching”) correspondiente al vector de onda K de la rejilla espacio-temporal lineal. (p. 20, [9].)

La novedad de los experimentos recientemente realizados por Brennan y Nelson [8] - [9] consiste en que reportan detección de respuesta *anarmónica* cuando los pulsos de excitación son muy intensos. Es decir, se interpreta que los polaritones-fonones en el cristal ferroeléctrico $LiTaO_3$ han sido excitados coherentemente pero de manera anarmónica. Como veremos más adelante esto se refleja en el hecho que no sólo se excita el modo fundamental del modo Raman, sino también sus sobretonos.

Los láseres de Titanio:Zafiro (Ti:Sapphire) empleados por Nelson et al. al realizar sus experimentos son capaces de producir pulsos ultracortos, de duración $\tau = 20fs$, de muy alta energía ($> 50\mu J$). Ellos argumentan que con esos láseres es posible desplazar el modo vibracional en $LiTaO_3$ una distancia del orden de magnitud de 10^{-2} Angstroms desde

su posición de equilibrio y que la fuerza restauradora iónica, o la polarización electrónica, puede cambiar de manera no lineal, produciendo anarmonicidades en las vibraciones de la red. Se espera que este posible comportamiento de vibración anarmónica de los fonopolaritones-fonones se vea reflejado en la respuesta detectada en los sobretonos de la frecuencia fundamental Ω del modo vibracional del material. Nelson et al arguyen, sin embargo, que un desplazamiento del modo vibracional del orden de 10^{-2} Angstroms es todavía pequeño; lo cual implica que la contribución anarmónica a la respuesta del material no es muy grande.

En el espectro inferior de la **figura 3.2** observamos la eficiencia de difracción como función del tiempo de retraso T del pulso de prueba, incidente al ángulo de empatamiento de fase de Bragg correspondiente al vector de onda fundamental de la rejilla, K , para el caso cuando los pulsos de excitación son suficientemente intensos como para esperar excitación coherente anarmónica. Como referencia, el espectro correspondiente a pulsos de excitación de baja energía, correspondiente a excitación armónica de los polaritones-fonones, es incluido en la gráfica superior de la **figura 3.2**. En la **figura 3.2** se muestra también la transformada de Fourier del espectro obtenido con pulsos de excitación de alta energía; se observan respuestas que parecen incluir hasta el noveno sobretono de la frecuencia fundamental Ω .

Como la señal difractada depende del cuadrado del desplazamiento del modo vibracional, la frecuencia fundamental Ω aparece como 2Ω en los espectros, la respuesta en el segundo armónico 2Ω aparece como 4Ω , etcétera. Se sabe que $LiTaO_3$ tiene también un modo relajante de decaimiento exponencial que puede hacer posible detectar respuesta también para 1Ω , 3Ω , etcétera.

La técnica de Espectroscopía de Sobretonos del Vector de Onda (Wavevector Overtone Spectroscopy (WOS)) es una variante de la técnica de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva, en la cual el pulso de prueba a difractar por la rejilla espacio-temporal incide, no con el ángulo de empatamiento de fase del vector de onda fundamental K , sino con el ángulo de empatamiento de fase correspondiente a determinado sobretono del vector de onda fundamental, nK .

Calculando la transformada de Fourier de la eficiencia de difracción, medida como función del tiempo de retraso T de un pulso de prueba que incide con el ángulo de empatamiento correspondiente al vector de onda de un sobretono nK , se espera respuesta principalmente para las componentes frecuenciales correspondientes a este sobretono, i. e. para $\Omega(nK)$, $2\Omega(nK)$ etcétera, cuando los pulsos de excitación son suficientemente intensos. En la **figura 3.3** vemos un ejemplo de la Espectroscopía de los Sobretonos del Vector de onda, donde ha sido graficada la eficiencia de difracción transmitida como función del tiempo de retraso T y la transformada de Fourier de este espectro en el caso de un pulso incidente con el ángulo de empatamiento de fase correspondiente al quinto sobretono $5\vec{K}$ del vector de onda

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

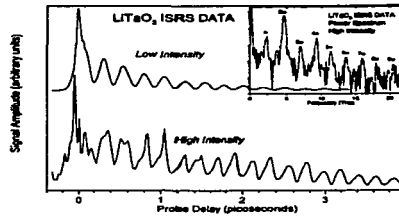


Figura 3.2: Eficiencia de difracción como función del tiempo de retraso T . El espectro de abajo muestra un caso para pulsos de excitación de alta energía ($130\mu J$). El espectro de arriba muestra un ejemplo para pulsos de excitación no muy intensos ($28\mu J$). En ambos casos, el pulso de prueba incide con el ángulo de empatamiento de fase correspondiente al vector de onda K de la rejilla espacio-temporal. En la inclusión vemos la transformada de Fourier del espectro obtenido con pulsos de excitación de alta energía que muestra respuesta hasta el noveno sobretono en la frecuencia fundamental Ω . (p. 9692, [8])

fundamental. Claramente se pueden observar picos en las frecuencias $\Omega(5\vec{K})$ y $2\Omega(5\vec{K})$ que manifiestan la presencia de dicho sobretono. Esto se interpreta como una indicación de que ha tendido lugar una excitación anarmónica significativa del modo vibracional.

La generación de los sobretonos del vector de onda fundamental \vec{K} de los polaritones-fonones puede ser entendido de la siguiente manera: Los pulsos ultracortos de excitación, sobrepuestos de manera temporal y espacial en el material, ejercen una fuerza impulsiva sobre el modo vibracional que al evolucionar en el tiempo sobre una superficie de energía potencial altamente anarmónica, como es el caso para el modo suave en $LiTaO_3$, la oscilación sinusoidal se distorsiona con el tiempo y se forma una rejilla no lineal constituida por fluctuaciones espaciales con el vector de onda fundamental \vec{K} además de múltiplos de \vec{K} , $n\vec{K}$, dando lugar a los sobretonos.

Brennan y Nelson argumentan que los valores relativamente altos que se encuentran para el desplazamiento del modo vibracional, cuando se utilizan pulsos de alta energía, son consistentes con el hecho de que se hayan logrado excitar coherentemente polaritones-fonones

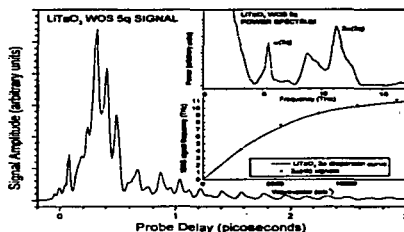


Figura 3.3: Espectroscopía de Sobretonos del Vector de Onda para un caso cuando el pulso de prueba incide con ángulo de empataamiento de fase del quinto sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla. Incluido vemos la transformación de Fourier de la eficiencia de difracción graficada como función del tiempo de retraso T que muestra respuesta para las frecuencias $\Omega(5K)$ y $2\Omega(5K)$. (p. 9693, [8])

con vectores de onda $n\vec{k}$. Sin embargo, las mediciones de la eficiencia de difracción son muy sensibles al alineamiento experimental, además que dependen de la intensidad de los pulsos de excitación y de que forma son sobrepuestos de manera temporal en la muestra, si tomar en cuenta tampoco que Brennan y Nelson no consideran reproducibles del todo sus experimentos. El máximo valor de la eficiencia de difracción transmitida medido fue 0,38, observado con un "spot size FWHM" de $160\text{micras} \times 20000\text{micras}$ para pulsos de $50\mu J$ de energía. Hallaron que para que los pulsos no produzcan generación de luz blanca, no pueden ser muy intensos; el umbral es cercano a $220\mu J$. Por otro lado, el pulso de prueba a difractar debe ser considerablemente menos intenso que los pulsos de excitación para que no modifique la rejilla mientras se propaga en ella. Sin embargo, la interacción entre el pulso de prueba y los pulsos de excitación no puede ser descartada completamente, sobre cercana al tiempo de retraso inicial $T = 0$ (ver figuras 3.1 y 3.2). Por lo tanto, las transformadas de Fourier de los espectros experimentales (ver figuras 3.2 y 3.3) fueron tomadas en un intervalo en el tiempo de retraso T excluyendo la inmediata vecindad de $T = 0$.

3.2. Teoría

En esta sección tratamos teóricamente el problema de difracción de un pulso Gaussiano por una rejilla de difracción espacialmente periódica y temporalmente impulsiva, con el motivo de modelar los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva realizados por Nelson et al. a partir de la formación de la rejilla formada por los polaritones-fonones excitados coherentemente debido al pasaje de los dos pulsos cruzados ultracortos en el ferroléctrico $LiTaO_3$.

3.2.1. Pulso Gaussiano

El señal a difractar por la rejilla espacio-temporal es un pulso Gaussiano en frecuencia ω . La dependencia en las coordenadas x y y es como en el caso de una onda monocromática. Para el caso de polarización s , y en el espacio de frecuencias ω , el campo eléctrico de un pulso Gaussiano de duración τ y con frecuencia central $\bar{\omega}$ tiene la forma

$$\vec{E}_i(x, y, \omega) = \hat{z}\tau e^{-\frac{(\omega - \bar{\omega})^2 \tau^2}{2}} e^{i\frac{\omega}{c} \sin \theta x} e^{i\frac{\omega}{c} \cos \theta y} \quad (3.1)$$

Tomando la transformada de Fourier inversa de esta expresión (3.1), se obtiene el campo eléctrico del pulso como función de tiempo t :

$$\vec{E}_i(x, y, t) = \hat{z} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\bar{\omega}(t - \frac{\sin \theta}{c} x + \frac{\cos \theta}{c} y)} e^{-\frac{(t - \frac{\sin \theta}{c} x + \frac{\cos \theta}{c} y)^2}{2\tau^2}} \quad (3.2)$$

Los pulsos de laser típicamente empleados en los experimentos son de duración $\tau = 20 fs$ y $\tau = 35 fs$.

3.2.2. Rejilla espacio-temporal lineal

La rejilla de difracción espacialmente periódica y temporalmente impulsiva, en el régimen lineal, la modelamos como una placa dieléctrica infinita en el plano $x - z$ y limitada al espesor d en la dirección y . Su dependencia espacial es como para la rejilla espacialmente periódica estática $\epsilon(x) = \epsilon_0 + \epsilon_1 \cos(Kx)$ (2.1) tratada en el capítulo anterior. La dependencia temporal de la rejilla la podemos incluir por medio de una aproximación adiabática, debido a que la duración τ del pulso (3.1) a difractar es del orden de femtosegundos mientras el periodo de oscilación del modo vibracional Raman activo en $LiTaO_3$ es del orden de picosegundos. Esta aproximación nos permite modelar la rejilla espacio-temporal lineal de la siguiente manera,

$$\epsilon(x, T) = \epsilon_0 + \epsilon_1 \cos(Kx) \cos(\Omega T) \quad (3.3)$$

donde Ω es la frecuencia de oscilación de la rejilla y que corresponde a la frecuencia de los polaritones-fonones armónicos excitados coherentemente; T es el tiempo de evolución temporal de la rejilla y que corresponde al *tiempo de retraso del pulso de prueba*. Los parámetros ϵ_0 , ϵ_1 y $K = \frac{2\pi}{\Lambda}$ son los mismos que para el caso de la rejilla estática (2.1).

El tiempo típico de la evolución de la rejilla es $2\pi/\Omega$. Este tiempo es mucho más largo que la duración τ del pulso. Es este el hecho que nos permite introducir la dependencia temporal de la rejilla de una manera tan sencilla, por que, debido a que $\tau \ll 2\pi/\Omega$, el pulso pasa tan rápidamente por la rejilla que esta aparenta ser estática desde el punto de vista del pulso. La escala de tiempo del pulso es del orden de femtosegundos y la escala de tiempo de la rejilla de orden de picosegundos.

La validez de la aproximación adiabática nos permite resolver el problema de difracción de un pulso (3.1) por una rejilla espacio-temporal convirtiéndolo en un problema de difracción de un pulso (3.1) por una serie de rejillas espacialmente moduladas estáticas (2.1),

$$\epsilon(x(T)) = \epsilon_0 + \bar{\epsilon}_1(T) \cos(Kx) \quad (3.4)$$

La cantidad susceptible de ser medida y que podemos calcular es la eficiencia de difracción transmitida por la rejilla (3.3) como función del tiempo de retraso T de un pulso Gaussiano (3.1) que incide sobre ella con ángulo θ y frecuencia central $\bar{\omega}$, relacionados con el vector de onda $K = \frac{2\pi}{\Lambda}$ de la rejilla por la relación de Bragg, $2\frac{\omega}{c} \sin \theta = K$ (2.80).

Para cada T un pulso Gaussiano (3.1) incide sobre la rejilla y pulsos son reflejados y transmitidos. Como la señal incidente es un pulso, las señales reflejadas y transmitidas son también paquetes de onda temporales. Por lo tanto, para poder detectarlos por completo, es necesario integrarlos sobre un tiempo muy largo en comparación con la duración que tienen.

La expresión para la eficiencia de difracción transmitida se deduce partiendo del vector de Poynting,

$$\vec{S} = \frac{c}{8\pi} \vec{E} \times \vec{H}^* \quad (3.5)$$

y como la rejilla (3.3) es infinita en el plano $x - z$ pero limitada a la anchura d en la dirección y , la componente y del vector de Poynting (3.5) es la que mide el flujo de energía a través del sistema en esta geometría.

Por lo tanto, la eficiencia de difracción transmitida η_+ (reflejada η_-) es en este caso la razón entre la componente y del vector de Poynting transmitido (reflejado) y la componente y del vector de Poynting incidente. Es importante señalar que ambas componentes deben ser integradas sobre un tiempo mucho más largo que la duración τ de los pulsos, de tal manera que todas las componentes frecuenciales sean incorporadas. Además, dichas componentes

se promedia sobre una longitud de onda Λ de la rejilla.

Como no hay disipación de energía en el sistema, la suma de las eficiencias de difracción transmitida η_+ y reflejada η_- , calculadas para cada instante T de evolución temporal de la rejilla (3.3), tiene que ser igual a uno:

$$\eta_-(T) + \eta_+(T) = 1 \quad (3.6)$$

Las expresiones para los campos eléctricos y magnéticos reflejados y transmitidos por la rejilla (3.3) correspondiente a un pulso incidente en el instante T , las obtenemos integrando las expresiones válidas para ondas monocromáticas sobre todas las componentes frecuenciales del pulso en cuestión.

En el caso de polarización s , la componente y del vector de Poynting es $S_y = EB_x^*$ (A.2); y para calcular las eficiencias de difracción reflejada η_- y transmitida η_+ necesitamos las expresiones para los campos eléctricos y magnéticos reflejados y transmitidos por la rejilla. Integrando las ecuaciones (2.19) y (2.20) sobre frecuencia, las expresiones para los campos eléctricos reflejados y transmitidos son, respectivamente,

$$\vec{E}_{(-)}(x, y, t) = \hat{z} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sum_l R_l(\omega) e^{i(\frac{\omega}{c} \sin \theta + lK)x} e^{-i\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (\frac{\omega}{c} \sin \theta + lK)^2} y} e^{-i\omega t} \quad (3.7)$$

y

$$\vec{E}_{(+)}(x, y, t) = \hat{z} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sum_l T_l(\omega) e^{i(\frac{\omega}{c} \sin \theta + lK)x} e^{i\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (\frac{\omega}{c} \sin \theta + lK)^2} y} e^{-i\omega t} \quad (3.8)$$

Las expresiones para las componentes x de los campos magnético correspondientes son

$$B_{x(-)}(x, y, t) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sum_l R_l(\omega) \frac{\sqrt{1 - (\sin \theta + l\frac{\omega}{c}K)^2}}{e^{-i\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (\frac{\omega}{c} \sin \theta + lK)^2} y}} e^{i(\frac{\omega}{c} \sin \theta + lK)x} e^{-i\omega t} \quad (3.9)$$

$$B_{x(+)}(x, y, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sum_l T_l(\omega) \frac{\sqrt{1 - (\sin \theta + l\frac{\omega}{c}K)^2}}{e^{i\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (\frac{\omega}{c} \sin \theta + lK)^2} y}} e^{i(\frac{\omega}{c} \sin \theta + lK)x} e^{-i\omega t} \quad (3.10)$$

En las expresiones anteriores $R_l(\omega)$ y $T_l(\omega)$ son las amplitudes de reflexión y transmisión.

Las expresiones para las eficiencias de difracción reflejada y transmitida, cuando la señal incidente en el instante T es un pulso Gaussiano (3.1), son

$$\eta_-(T) = \frac{1}{\sqrt{\pi\tau} \cos \theta} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sum_l R_l(\omega) R_l^*(\omega) \sqrt{1 - (\sin \theta + l\frac{\omega}{c}K)^2} \quad (3.11)$$

y transmitida

$$\eta_+(T) = \frac{1}{\sqrt{\pi\tau \cos\theta}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sum_l T_l(\omega) T_l^*(\omega) \sqrt{1 - (\sin\theta + l\frac{\omega}{c}K)^2} \quad (3.12)$$

La deducción de estas expresiones se encuentra en el **apéndice A.2.**

El procedimiento computacional para calcular las eficiencias de difracción empleando las expresiones (3.11) y (3.12) es el siguiente: Un instante $T = T_l$ dado de la evolución temporal de la rejilla (3.3) corresponde a una rejilla estática espacialmente modulada $\epsilon(x) = \epsilon_0 + \bar{\epsilon}_1 \cos Kx$ (2.1) con modulación dada por $\bar{\epsilon}_1 = \cos \Omega T_l$. En ese instante, un pulso Gaussiano (3.1) incide sobre tal rejilla estática. El pulso es una suma (o integral) de ondas monocromáticas con una distribución Gaussiana. Cada componente espectral del pulso es una onda monocromática con frecuencia ω cuyo peso con respecto a las demás componentes frecuenciales es $\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(\omega-\omega_0)^2}{2\sigma^2}}$. Empleando el procedimiento de la sección 2,1, podemos encontrar las amplitudes de reflexión $R_l(\omega)$ y de transmisión $T_l(\omega)$, para cada componente espectral ω , de todos los órdenes de difracción l propagantes en el exterior de la rejilla. Sumando todas las contribuciones correspondientes a cada componente frecuencial ω , se encuentra numéricamente el valor que toma la eficiencia de difracción reflejada, dadas por las ecuaciones (3.11) y (3.12). Enviando ahora sobre la rejilla (3.3) pulsos Gaussianos (3.1) en intervalos en el tiempo ΔT cubriendo un periodo de la oscilación $2\pi/\Omega$, es decir tomando "fotografías" en el intervalo temporal desde $T_1 = 0$ hasta $T_N = \frac{2\pi}{\Omega}$, y llevando a cabo el procedimiento arriba mencionado para cada instante T_i , la eficiencia de difracción reflejada y transmitida por la rejilla espacio-temporal (3.3) se encuentra como función del tiempo de retraso del pulso Gaussiano incidente. Encontramos que podemos discretizar el pulso en 5000 componentes espectrales para obtener una buena convergencia del valor de las eficiencias de difracción.

3.2.3. Rejilla espacio-temporal no lineal

Cuando los pulsos de excitación en la Dispersión Raman Estimulada Impulsiva son suficientemente intensos, se espera que los polaritones-fonones sean coherentemente excitados de manera anarmónica y que formen en el cristal ferroeléctrico una rejilla de difracción espacio-temporal no lineal. Romero-Rochín, Koehl, Brennan y Nelson [11], han desarrollado una teoría para entender los procesos que conducen a la formación de tal rejilla en un cristal de $LiTaO_3$ como un primer paso hacia la comprensión teórica de los experimentos [8] - [9]. La deducción de la expresión para la función dieléctrica que modela la rejilla es muy ilustrativa, y como el presente trabajo de investigación ha de ser considerado como la

extensión natural de ese trabajo, incluyo en lo siguiente un breve resumen de la ref. [11].

Se considera que el sistema consiste de un modo polar óptico transverso de frecuencia ω_T cuya polarización se acopla fuertemente al campo electromagnético en el infrarrojo resultando en la formación de polaritones-fonones en el cristal. Tal modo fonónico óptico es representado como desviaciones locales del modo ferroeléctrico fuera de equilibrio. El Hamiltoniano total del sistema se expresa como una suma de tres contribuciones,

$$H(t) = H_0 + H_{anh} + H_R(t) \quad . \quad (3.13)$$

La parte armónica H_0 está dada por el Hamiltoniano de Hopfield que describe la interacción entre la polarización de los fonones ópticos transversos y el campo electromagnético; la parte H_{anh} representa las contribuciones anarmónicas introducidas por medio de la teoría de perturbaciones y la parte $H_R(t)$ representa la interacción Raman que toma lugar entre los pulsos de excitación y el fonón óptico transverso.

La expresión para el Hamiltoniano de Hopfield es

$$H_0 = \int_V d^3r \left\{ \frac{1}{8\pi} \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}(\vec{r})}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{8\pi} (\nabla \times \vec{A}(\vec{r}))^2 \right. \\ \left. + \frac{\chi \omega_T^2}{2} (\vec{\Pi}_T(\vec{r}) - \frac{1}{c} \vec{A}(\vec{r}))^2 + \frac{1}{2\chi} \vec{P}_T(\vec{r}) \right\} \quad , \quad (3.14)$$

donde $\vec{A}(\vec{r})$ es el potencial vectorial electromagnético, $\vec{P}_T(\vec{r})$ es el campo de polarización correspondiente al modo óptico transverso, $\vec{\Pi}_T(\vec{r})$ es el momento conjugado generalizado. $c' = \frac{c}{\sqrt{\epsilon(\infty)}}$ con $\epsilon(\infty)$ siendo la constante dieléctrica en el infrarrojo cercano. La susceptibilidad χ está dada por

$$\chi = \frac{1}{4\pi} (\epsilon(0) - \epsilon(\infty)) \quad , \quad (3.15)$$

con $\epsilon(0)$ la constante dieléctrica en el infrarrojo lejano. Valores experimentales para $LiTaO_3$ son $\epsilon(0) \approx 34$, $\epsilon(\infty) \approx 8,5$ y $\omega_T \approx 200 \text{ cm}^{-1}$. El Hamiltoniano de Hopfield (3.14) puede ser escrito en versión de segunda cuantización en términos de los operadores de creación y aniquilación de los fotones y de los fonones ópticos. Aplicando la transformación de Hopfield, que transforma de los operadores de creación y aniquilación de los fotones y los fonones a los operadores de creación y aniquilación de los polaritones-fonones $\alpha_{\vec{k}}^{(j)}$ y $\alpha_{\vec{k}}^{(j) \dagger}$, el Hamiltoniano H_0 puede ser escrito como,

$$H_0 = \sum_{\vec{k}} \sum_{j=1}^2 \hbar \omega_{\vec{k}}^{(j)} \alpha_{\vec{k}}^{(j) \dagger} \alpha_{\vec{k}}^{(j)} \quad , \quad (3.16)$$

siendo $\omega_{\vec{k}}^{(j)}$, con $j = 1$ y $j = 2$, las frecuencias de los polaritones-fonones de las dos ramas de la relación de dispersión $\omega_{\vec{k}}^4 - \omega_{\vec{k}}^2(\omega_L^2 + c'^2 k^2) + \omega_T^2 c'^2 k^2 = 0$. Aquí ω_L es la frecuencia

longitudinal dada por la relación de Lyddane-Sachs-Teller $\omega_L^2 = \frac{\epsilon(0)}{\epsilon(\infty)} \omega_T^2$.

La energía potencial del modo suave en $LiTaO_3$ es representada por un potencial cuártico de la forma

$$V(Q_p) = -\frac{1}{4} m \omega_T^2 Q_p^2 + \frac{1}{64 |V(Q_0)|} m^2 \omega_T^4 Q_p^4, \quad (3.17)$$

donde las posiciones $\pm Q_0$ son las mínimas correspondientes a las configuraciones de equilibrio ferroeléctrico con el valor del potencial $|V(Q_0)| = 17,3mRy$. ω_T es la frecuencia de las pequeñas oscilaciones alrededor de estos mínimos y m es la masa reducida del modo. La superficie de la energía potencial cercana a la geometría de equilibrio puede ser descrita en términos de desplazamientos pequeños $Q = Q_p - Q_0$ alrededor del mínimo de la energía potencial local en Q_0 :

$$V(Q) = V(Q_0) + \frac{1}{2} m \omega_T^2 Q^2 + \gamma Q^3 + \lambda Q^4, \quad (3.18)$$

donde

$$\gamma = \left(\frac{m^3 \omega_T^6}{32 |V(Q_0)|} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.19)$$

y

$$\lambda = \frac{m^2 \omega_T^4}{64 |V(Q_0)|}. \quad (3.20)$$

Q se identifica como la amplitud del desplazamiento vibracional del modo óptico transverso que, en forma de segunda cuantización y después de haber sido aplicada la transformación de Hopfield, toma la forma

$$\bar{Q}(\vec{r}) = \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_T} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{e}_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} [f_k(\alpha_{\vec{k}}^{(1)} + \alpha_{-\vec{k}}^{(1)}) + g_k(\alpha_{\vec{k}}^{(2)} + \alpha_{-\vec{k}}^{(2)})]. \quad (3.21)$$

En los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva en $LiTaO_3$, son excitados eficazmente sólo los polaritones-fonones de la rama más baja, con $j = 1$, y podemos despreciar la minúscula contribución proveniente de la rama más alta, con $j = 2$, así que

$$\bar{Q}(\vec{r}) \approx \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_T} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{e}_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} f_k(\alpha_{\vec{k}} + \alpha_{-\vec{k}}), \quad (3.22)$$

con

$$f_k = \left[\frac{\omega_T \omega_k (\omega_L^2 - \omega_T^2)}{(\omega_T^2 - \omega_k^2)^2 + \omega_T^2 (\omega_L^2 - \omega_T^2)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.23)$$

Así, la contribución anarmónica hasta cuarto orden puede ser escrita como

$$H_{anh} = H_3 + H_4, \quad (3.24)$$

con

$$H_n = \sum_{\vec{k}_1 \dots \vec{k}_n} \phi_n(\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_n) \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_n, 0} : (\alpha_{\vec{k}_1}^- + \alpha_{-\vec{k}_1}^+) \dots (\alpha_{\vec{k}_n}^- + \alpha_{-\vec{k}_n}^+) \quad , \quad (3.25)$$

y donde las funciones $\phi_n(\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_n)$ son dadas por las expresiones

$$\phi_3(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3) = \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} \gamma \left(\frac{\hbar}{2m\omega_T} \right)^{\frac{3}{2}} f_{k_1} f_{k_2} f_{k_3} \quad , \quad (3.26)$$

y

$$\phi_4(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4) = \frac{1}{N} \lambda \left(\frac{\hbar}{2m\omega_T} \right)^2 f_{k_1} f_{k_2} f_{k_3} f_{k_4} \quad . \quad (3.27)$$

La parte del Hamiltoniano que tiene que ver con la interacción Raman en el caso de la excitación Dispersión Raman Estimulada Impulsiva no-resonante puede ser expresada en término de la polarizabilidad del modo fotónico $\vec{P}_R(\vec{r}, t)$ y el campo eléctrico de los pulsos de excitación, $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_1(\vec{r}, t) + \vec{E}_2(\vec{r}, t)$,

$$H_R(t) = - \int_V d^3r \vec{P}_R(\vec{r}, t) \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) \quad , \quad (3.28)$$

donde $\vec{P}_R(\vec{r}, t)$ está dada en términos de la amplitud de la vibración óptica $\vec{Q}(\vec{r}, t)$, del tensor de polarizabilidad diferencial de tercer orden del modo local ferroeléctrico transversal $\vec{\alpha}'$ y de la densidad de modos ρ :

$$\vec{P}_R(\vec{r}, t) = \rho \vec{\alpha}' : \vec{Q}(\vec{r}, t) \vec{E}(\vec{r}, t) \quad . \quad (3.29)$$

Dos aproximaciones son realizadas. Primero, los pulsos de excitación representados por los campos $\vec{E}_1(\vec{r}, t)$ y $\vec{E}_2(\vec{r}, t)$ son considerados externos e independientes de los modos fotónicos. Segundo, se supone válida la aproximación de Plazcek, la cual implica que la interacción Raman es considerada exclusivamente de segundo orden en el campo externo y lineal en el desplazamiento del fonón óptico. La primera aproximación desprecia procesos que no involucran dos fotones y es bien obedecido debido a que las frecuencias ópticas de los pulsos de excitación son mucho más altas que las frecuencias del infrarrojo para las cuáles ocurren los acoplamientos fonón-fotón que producen los polaritones-fonones. La segunda aproximación implica que, por medio de la interacción Raman, exclusivamente procesos de un sólo fonón son involucrados. Aunque mecanismos de dispersión Raman de orden más alto no pueden ser ignorados por completo, se supone que son de inferior importancia debido a que las sumas de las frecuencias de los polaritones-fonones coherentemente excitados tienen que encontrarse dentro de las bandas frecuenciales de los pulsos de excitación para que se cumpla el requisito de conservación de energía. Utilizando la versión de segunda

cuantización y aplicando la transformación de Hopfield, el Hamiltoniano que describe la interacción Raman toma la forma

$$H_R(t) = \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} \sum_{\vec{k}} \sum_n \bar{\Lambda}_k : \vec{E}(\vec{r}_n, t) \vec{E}(\vec{r}_n, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_n} (\alpha_{\vec{k}} + \alpha_{-\vec{k}}) \quad , \quad (3.30)$$

donde cada punto \vec{r}_n corresponde a una celda unitaria en el cristal y

$$\bar{\Lambda}_k = \left(\frac{\hbar}{2m\omega_T} \right)^{\frac{1}{2}} f_k \vec{\alpha}' \cdot \hat{e}_k \quad . \quad (3.31)$$

Tenemos entonces el Hamiltoniano total del sistema (3.13) en término de los operadores de creación y aniquilación de los polaritones-fonones, donde H_0 está dado solamente por (3.16) con $j = 1$

$$H_0 = \sum_{\vec{k}} \hbar\omega_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^{\dagger} \alpha_{\vec{k}} \quad , \quad (3.32)$$

es decir, sólo consideramos la rama inferior.

Conociendo el Hamiltoniano total del sistema, se calcula el estado de los polaritones-fonones coherentemente excitados suponiendo que el sistema se encuentra en el estado base antes de exponerlo a los pulsos de excitación. El valor de expectación del desplazamiento del modo suave $\vec{Q}(\vec{r}_n)$ en este estado está relacionada con la polarización macroscópica $\vec{P}(\vec{r}, t)$ que causa la modulación en el índice de refracción del material.

Resolviendo la ecuación de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \Psi(t) \rangle = H(t) | \Psi(t) \rangle \quad , \quad (3.33)$$

considerando de manera exacta los partes H_0 (3.32) y $H_R(t)$ (3.30) y de manera perturbativa la parte H_{anh} (3.24), el estado del sistema $| \Psi(t) \rangle$ a primer orden en H_{anh} , está dado por la expresión

$$| \Psi(t) \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \tilde{H}_R(\tau)} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{\tau} d\tau' \tilde{H}_R(\tau')} \tilde{H}_{anh}(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{\tau} d\tau' \tilde{H}_R(\tau')} \right] | 0 \rangle \quad . \quad (3.34)$$

t_0 es un tiempo en el pasado lejano antes de que los pulsos de excitación entran la muestra y t es un tiempo mucho después de que la han atravesado. Se supone de manera tácita ordenamiento temporal en la exponenciales y $\tilde{H}_R(t)$ y \tilde{H}_{anh} son los operadores correspondientes a (3.30) y (3.24) en la representación de la interacción.

La excitación de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva es "impulsiva" debido a que la duración τ_L de los pulsos de excitación es más corto que el periodo de oscilación del modo Raman activo.

Se suponen pulsos de excitación Gaussianos,

$$\vec{E}_j(\vec{r}_n, t) = \vec{E}_0 e^{-\frac{(t - \frac{\hat{k}_j \cdot \vec{r}_n}{c''})^2}{2\tau_L^2}} \cos \bar{\omega}(t - \frac{\hat{k}_j \cdot \vec{r}_n}{c''}) \quad , \quad j = 1, 2 \quad , \quad (3.35)$$

con vectores de onda centrales $\vec{k}_j = \frac{\hat{k}_j \bar{\omega}}{c''}$, donde $\bar{\omega}$ es la frecuencia central de los pulsos, $c'' = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_{opt}}}$ es la velocidad de la luz en el cristal correspondiente a frecuencias ópticas, y se consideran tiempos $t - t_0 \gg \tau_L$.

Los vectores de onda de los polaritones-fonones coherentemente excitados y contrapropagantes en el cristal son seleccionados por el término Raman:

$$\vec{k}_r = + \frac{\bar{\omega}}{c''} (\hat{k}_1 - \hat{k}_2) + \omega_{k_r} \frac{(\vec{k}_1 + \vec{k}_2)}{2c''} \quad , \quad (3.36)$$

$$\vec{k}_l = - \frac{\bar{\omega}}{c''} (\hat{k}_1 - \hat{k}_2) + \omega_{k_l} \frac{(\vec{k}_1 + \vec{k}_2)}{2c''} \quad . \quad (3.37)$$

El vector de onda de los polaritones-fonones que se propagan hacia la derecha \vec{k}_r (3.36) difiere del vector de onda de los polaritones-fonones que se propagan hacia la izquierda \vec{k}_l (3.37). Sin embargo, se cumple que $\bar{\omega} \gg \omega_{k_r} = \omega_{k_l}$, y salvo en casos cuando $(\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \gg (\vec{k}_1 - \vec{k}_2)$, es válida la aproximación $\vec{k}_r = -\vec{k}_l \approx \vec{K}$, donde $\vec{K} = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$ es el vector de onda de la rejilla.

Despreciando la discrepancia entre (3.36) y (3.37), y tomando $\vec{K} = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$, obtenemos

$$-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \vec{H}_R(\tau) \approx i \frac{P_0}{\hbar} [(\alpha_{\vec{K}} + \alpha_{\vec{K}}^\dagger) + (\alpha_{-\vec{K}} + \alpha_{-\vec{K}}^\dagger)] \quad (3.38)$$

donde el coeficiente sin dimensión

$$\frac{P_0}{\hbar N^{\frac{1}{2}}} = \frac{\sqrt{\pi} \tau_L}{2\hbar} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_T} \right)^{\frac{1}{2}} \bar{\alpha}' : \hat{e}_K \vec{E}_0 \vec{E}_0 f_{\vec{k}} e^{-\frac{\alpha^2 \tau_L^2}{4}} \quad , \quad (3.39)$$

mide la transferencia de momento de los pulsos de excitación hacia el modo suave del cristal, a consecuencia de la excitación Dispersión Raman Estimulada Impulsiva. Este es el parámetro "pequeño" del desarrollo perturbativo a realizar para encontrar el valor de

expectación del desplazamiento del modo vibracional.

Con la aproximación (3.38), la acción de $H_R(t)$ se torna instantánea, y la expresión para el estado del sistema $|\Psi(t)\rangle$ toma la forma

$$|\Psi(t)\rangle \approx e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \left[\prod_{\vec{k}=\pm\vec{K}} e^{\frac{i}{\hbar} P_0(\alpha_{\vec{k}} + \alpha_{\vec{k}}^\dagger)} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^0 d\tau \prod_{\vec{k}=\pm\vec{K}} e^{\frac{i}{\hbar} P_0(\alpha_{\vec{k}} + \alpha_{\vec{k}}^\dagger)} \tilde{H}_{an\hbar}(\tau) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{H}_{an\hbar}(\tau) \prod_{\vec{k}=\pm\vec{K}} e^{\frac{i}{\hbar} P_0(\alpha_{\vec{k}} + \alpha_{\vec{k}}^\dagger)} \right] |0\rangle \quad (3.40)$$

Esta expresión indica que polaritones-fonones con vectores de onda $\pm\vec{K}$ son seleccionados coherentemente por la interacción Raman. De los términos anarmónicos (3.25) del Hamiltoniano se puede ver que polaritones-fonones son creados y aniquilados a través de la interacción, pero siempre de tal manera que se cumple el requisito de conservación de momento. Por ejemplo, el Hamiltoniano de tercer orden H_3 es proporcional a tres operadores de creación y/o aniquilación con el requerimiento de conservación $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3 = 0$, lo cual implica que la presencia de polaritones-fonones con vectores de onda $\pm\vec{K}$ permite procesos elementales con $\vec{k}_1 = \pm\vec{K}$ y $\vec{k}_3 = \pm 2\vec{K}$ con todas las permutaciones que satisfacen el requerimiento de conservación de momento. Un caso típico con $\vec{k}_1 = \vec{K}$, $\vec{k}_2 = \vec{K}$ y $\vec{k}_3 = -2\vec{K}$ da lugar a la contribución $\alpha_{2\vec{K}}^\dagger \alpha_{\vec{K}} \alpha_{\vec{K}}$ que implica que dos polaritones-fonones de vector de onda \vec{K} han sido aniquilados y un fonón-polaritón de vector de onda $2\vec{K}$ ha sido creado. Al orden cuártico, el Hamiltoniano (3.25) implica que los polaritones-fonones con vectores de onda fundamentales $\pm\vec{K}$ pueden dar lugar a los sobretonos $\pm 3\vec{K}$.

La expresión para el valor de expectación del desplazamiento del modo suave toma la forma

$$\langle \Psi(t) | \vec{Q}(\vec{r}, t) | \Psi(t) \rangle \approx \left(\frac{\hbar}{2m\omega_T} \right)^{\frac{1}{2}} [\hat{e}_{\vec{K}} X_{\vec{K}}(t) \cos \vec{K} \cdot \vec{r} + \hat{e}_{2\vec{K}} X_{2\vec{K}}(t) \cos 2\vec{K} \cdot \vec{r} + \hat{e}_{3\vec{K}} X_{3\vec{K}}(t) \cos 3\vec{K} \cdot \vec{r}] \quad (3.41)$$

donde

$$X_{\vec{K}}(t) = x_{\vec{K}}^{(1)} \sin(\Omega_{\vec{K}} + \Delta\Omega_{\vec{K}})t - x_{\vec{K}}^{(3)} [\sin 3\Omega_{\vec{K}}t + 9 \sin \Omega_{\vec{K}}t] \quad (3.42)$$

$$X_{2\vec{K}}(t) = x_{2\vec{K}} \left[1 - \cos \Omega_{2\vec{K}}t + \frac{\Omega_{2\vec{K}}^2}{(2\Omega_{\vec{K}})^2 - \Omega_{2\vec{K}}^2} (\cos 2\Omega_{\vec{K}}t - \cos \Omega_{2\vec{K}}t) \right] \quad (3.43)$$

$$X_{3\vec{K}}(t) = x_{3\vec{K}} \left[\frac{3\Omega_{\vec{K}}\Omega_{3\vec{K}}}{(3\Omega_{\vec{K}})^2 - \Omega_{3\vec{K}}^2} \sin \Omega_{3\vec{K}}t - \frac{\Omega_{3\vec{K}}^2}{(3\Omega_{\vec{K}})^2 - \Omega_{3\vec{K}}^2} \sin 3\Omega_{\vec{K}}t + \frac{3\Omega_{\vec{K}}^2}{\Omega_{\vec{K}}^2 - \Omega_{3\vec{K}}^2} \sin \Omega_{\vec{K}}t - \frac{3\Omega_{\vec{K}}\Omega_{3\vec{K}}}{\Omega_{\vec{K}}^2 - \Omega_{3\vec{K}}^2} \sin \Omega_{3\vec{K}}t \right] \quad (3.44)$$

con el desplazamiento en frecuencia en (3.42) dado por la expresión

$$\frac{\Delta\Omega_{\vec{K}}}{\Omega_{\vec{K}}} = 36 \left(\frac{P_0 f_{\vec{K}}}{\hbar N^{\frac{1}{2}}} \right)^2 \frac{\lambda}{\hbar \Omega_{\vec{K}}} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_T} \right)^2 f_{\vec{K}}^2 \quad (3.45)$$

Las expresiones para los coeficientes de las amplitudes dependientes del tiempo (3.42)-(3.44) son

$$x_K^{(1)} = 4 \left(\frac{P_0 f_K}{\hbar N^{\frac{1}{2}}} \right) , \quad (3.46)$$

$$x_K^{(3)} = 12 \left(\frac{P_0 f_K}{\hbar N^{\frac{1}{2}}} \right)^3 \frac{\lambda}{\hbar \omega_K} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_T} \right)^2 f_K^2 , \quad (3.47)$$

$$x_{2K} = 24 \left(\frac{P_0 f_K}{\hbar N^{\frac{1}{2}}} \right)^2 \frac{\gamma}{\hbar \Omega_{2K}} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_T} \right)^{\frac{3}{2}} f_{2K}^2 , \quad (3.48)$$

$$x_{3K} = 32 \left(\frac{P_0 f_K}{\hbar N^{\frac{1}{2}}} \right)^3 \frac{\lambda}{\hbar \Omega_{3K}} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_T} \right)^2 f_{3K}^2 . \quad (3.49)$$

La polarización macroscópica $\bar{P}(\vec{r}, t)$ es identificada como el valor de expectación de la polarización cuántica Raman,

$$\bar{P}(\vec{r}, t) = \rho \bar{\alpha}' : \bar{E}_P(\vec{r}, t) < \Psi(t) | \bar{Q}(\vec{r}, t) | \Psi(t) > , \quad (3.50)$$

con $\bar{E}_P(\vec{r}, t)$ el campo eléctrico del pulso de prueba Gaussiano (3.35) y $< \Psi(t) | \bar{Q}(\vec{r}, t) | \Psi(t) >$ dado por el desarrollo (3.41) a condición de que el parámetro sin dimensión (3.39), que depende esencialmente de la intensidad de los pulsos de excitación, obedezca la condición

$$\left(\frac{P_0 f_{q_0}}{\hbar N^{\frac{1}{2}}} \right) < 1 . \quad (3.51)$$

El desarrollo (3.41), con las amplitudes dependientes del tiempo (3.42) - (3.44), indica claramente que los sobretonos del vector de onda se deben a las partes anarmónicas en la superficie de energía potencial del modo óptico vibracional. Cada sobretono en el vector de onda prueba una contribución que resulta del mismo orden anarmónico y del orden anarmónico siguiente. La frecuencia fundamental es igual a la frecuencia armónica más un corrimiento despreciable dependiente de la amplitud de la vibración. Algo muy importante refiriéndose a la detección experimental de los sobretonos es una estructura resonante, o tipo pulsación, en la dependencia temporal de las correcciones anarmónicas (3.43) y (3.44). Por ejemplo, en la ecuación (3.43), el término

$$\frac{\Omega_{2K}^2}{(2\Omega_K)^2 - \Omega_{2K}^2} (\cos 2\Omega_K t - \cos \Omega_{2K} t) , \quad (3.52)$$

da una gran amplificación a la contribución $X_{2K}(t)$ si Ω_{2K} es aproximadamente igual a $2\Omega_K$. Esta condición es esencialmente un empataamiento de fases como en el caso de generación armónica púramente óptica de excitación en la frecuencia ω y vector de onda \vec{q} fundamental. Para vectores de onda pequeños, la relación de dispersión de la rama más baja satisface la condición empataamiento de fase. De la contribución $X_{3K}(t)$ (3.44), se encuentra una condición potencial de quasi-resonancia en $\Omega_{3K} \approx 3\Omega_K$ o en $\Omega_{3K} \approx \Omega_K$. Para una situación de

<i>Duración</i>	$\tau_L = 20 \cdot 10^{-15} s$
<i>Vector de onda</i>	$K = 2700 cm^{-1}$
	$\Omega_K = 1,26 \cdot 10^{13} rad$
	$\Omega_{2K} = 2,39 \cdot 10^{13} rad$
	$\Omega_{3K} = 2,89 \cdot 10^{13} rad$
	$f_K = 0,513 \quad f_{2K} = 0,751 \quad f_{3K} = 0,849$
<i>Indice de refracción</i>	$n_{opt} = 2,34$
	$\lambda = 1,33 \cdot 10^{12} \frac{erg}{cm^3}$
	$\gamma = 3,19 \cdot 10^{19} \frac{erg}{cm^3}$
<i>Polarizabilidad diferencial</i>	$\alpha' = 3,2 \cdot 10^{-14} cm^2$

Cuadro 3.1: Valores de los parámetros del sistema.

vectores de onda intermedios, lo cual corresponde a la región de acoplamiento fonón-fotón fuerte, no es posible satisfacer ninguna de las condiciones. Para vectores de onda grandes es posible satisfacer esta última condición. Este fenómeno de quasi-resonancia puede ser parcialmente responsable de la observación experimenta de respuesta en los sobretonos aún cuando los pulsos de excitación son de intensidad moderada.

Se consideraron dos casos diferentes de intensidad de los pulsos de excitación, correspondiente a valores totales de la energía de los pulsos de $\Delta J = 50 \mu J$ y $\Delta J = 110 \mu J$. Los valores de los parámetros del sistema están los indicados en la **tabla 3.1**. Los valores del parámetro adimensional (3.39), el desplazamiento en frecuencia (3.45), y las coeficientes (3.46) - (3.49) de las amplitudes dependientes del tiempo (3.42) - (3.44) en la expansión (3.41), se indican en la **tabla 3.2**.

	$\Delta J_1 = 50 \mu J$	$\Delta J_1 = 110 \mu J$
F_{0IK}	0,116	0,256
$\frac{\lambda \Omega_K^2}{\Omega_K}$	$1,57 \cdot 10^{-4}$	$7,58 \cdot 10^{-4}$
$x_K^{(1)}$	0,465	1,02
$x_K^{(3)}$	$6,1 \cdot 10^{-5}$	$6,5 \cdot 10^{-4}$
x_{2K}	$1,16 \cdot 10^{-3}$	$5,6 \cdot 10^{-3}$
x_{3K}	$1,7 \cdot 10^{-4}$	$1,8 \cdot 10^{-3}$

Cuadro 3.2: Valores para el parámetro adimensional, para el desplazamiento en frecuencia y para los coeficientes dependientes del tiempo en el desarrollo (3.41) para los casos de energía de los pulsos de $50 \mu J$ y $110 \mu J$.

El análisis de la difracción de un pulso por una rejilla dieléctrica espacio-temporal no lineal presentado en esta tesis con el motivo de modelar los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva es una extensión del estudio realizado en [11].

La rejilla de difracción espacio-temporal no lineal ubicada en el vacío, infinita en el plano $x - z$ y limitada a la anchura d en la dirección y , se modela por la función dieléctrica

$$\epsilon(x, T) = \epsilon_0 + \bar{\epsilon}_1(T) \cos(Kx) + \bar{\epsilon}_2(T) \cos(2Kx) + \bar{\epsilon}_3(T) \cos(3Kx) \quad , \quad (3.53)$$

en concordancia con el desarrollo (3.41). El vector de onda de la rejilla está dirigido a lo largo del eje x . Los coeficientes en (3.53) están dados por $\bar{\epsilon}_1(T) = X_{K}(T)$ (3.42), $\bar{\epsilon}_2(T) = X_{2K}(T)$ (3.43) y $\bar{\epsilon}_3(T) = X_{3K}(T)$ (3.44). Recordamos que, como la duración del pulso es mucho más corto que la evolución temporal de la rejilla (3.53), la aproximación adiabática puede utilizarse y, de nuevo, el problema se reduce al de la difracción dun pulso por una serie de rejillas espacialmente moduladas y estáticas, cada una correspondiente a un determinado instante T de la evolución temporal.

Para poder tratar la situación de la difracción del pulso (3.1) por la rejilla no lineal (3.53) para un T fijo, es necesario obtener primero las ecuaciones correspondientes a la difracción de una onda monocromática de la misma polarización por tal rejilla.

De manera completamente análoga al caso lineal, las ecuaciones diferenciales acopladas para las amplitudes que gobiernan la propagación en el interior de la región no lineal toman la forma,

$$\frac{d^2 V_l^{notin}}{dy^2} + \alpha_l V_l^{notin}(y) + \sum_{j=1}^3 \beta_j (V_{l-j}^{notin}(y) + V_{l+j}^{notin}(y)) = 0 \quad , \quad (3.54)$$

con α_l como en (2.12) y los tres términos de acoplamiento dados por

$$\beta_j = \frac{1}{2} \frac{\omega^2}{c^2} \bar{\epsilon}_j(T) \quad , \quad j = 1, 2, 3 \quad . \quad (3.55)$$

En este caso de polarización s de los campos, las amplitudes dependientes de y que rigen la propagación en la rejilla no lineal y que obedecen las ecuaciones (3.54) las hemos denominado $V_l^{notin}(y)$ para distinguirlas de las amplitudes de propagación en la rejilla lineal $V_l(y)$.

Como en el caso de una rejilla lineal, las ecuaciones (3.54) pueden ser escritas en forma de una ecuación matricial como en (2.15), pero la matriz a diagonalizar para poder expresar $V_l^{notin}(y)$ en término de los eigenmodos del material con propiedades no-lineales modelado

por la función dieléctrica (3.53), es diferente y toma la forma

$$\mathbf{M}^{nolin} = \begin{bmatrix} \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \\ \dots & \alpha_4 & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \beta_1 & \alpha_3 & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \beta_2 & \beta_1 & \alpha_2 & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \beta_3 & \beta_2 & \beta_1 & \alpha_1 & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & \beta_3 & \beta_2 & \beta_1 & \alpha_0 & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & \beta_3 & \beta_2 & \beta_1 & \alpha_{(-1)} & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & \beta_3 & \beta_2 & \beta_1 & \alpha_{(-2)} & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta_3 & \beta_2 & \beta_1 & \alpha_{(-3)} & \beta_1 & \beta_2 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta_3 & \beta_2 & \beta_1 & \alpha_{(-4)} & \beta_1 & \dots \\ \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \end{bmatrix}. \quad (3.56)$$

Las expresiones para las amplitudes $V_i^{nolin}(y)$, en forma de sumas infinitas de eigenmodos, son como para el caso lineal (2.17), y el procedimiento para obtener las amplitudes de reflexión R_i^{nolin} y transmisión T_i^{nolin} es el mismo también.

Conociendo los valores de las amplitudes de reflexión R_i^{nolin} y transmisión T_i^{nolin} , las expresiones para las eficiencias de difracción reflejada total $\eta_{-}^{nolin}(T)$ y transmitida total $\eta_{+}^{nolin}(T)$ son como en el caso de difracción del pulso (3.1) por la rejilla lineal (3.3) dadas en (3.11) y (3.12), respectivamente.

3.3. Resultados numéricos

En esta sección se reportan los resultados numéricos obtenidos al estudiar la difracción de un pulso Gaussiano (3.1) por una rejilla espacio-temporal.

En la subsección 3.3.1, se trata el caso de difracción por una rejilla espacio-temporal lineal dada por la ecuación (3.3). Se calcula la eficiencia de difracción transmitida como función del tiempo de retraso de un pulso Gaussiano, cuya frecuencia central y ángulo de incidencia están relacionados con el vector de onda de la rejilla por medio de la relación de Bragg.

En las subsecciones 3.3.2 - 3.3.4 se trata la situación de difracción de un pulso Gaussiano por una rejilla espacio-temporal no lineal dada por la ecuación (3.53). Se consideran dos casos diferentes dependiendo de la energía de los pulsos de excitación, a $50\mu J$ y a $110\mu J$. Como se puede ver en la tabla 3.2, el grado de anarmonicidad de la rejilla aumenta con la energía de excitación. Para estos dos casos de energía de excitación, calculamos la eficiencia

de difracción transmitida como función del tiempo de retraso.

En la subsección 3.3.2 se modela el variante clásico de los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva, en el sentido de que el pulso a difractar incide con ángulo y frecuencia central conectados con el vector de onda fundamental de la rejilla no lineal por medio de la relación de Bragg (2.80).

En las subsecciones 3.3.3 y 3.3.4 se modelan los experimentos para los cuales ha sido empleada la variante de la técnica Dispersión Raman Estimulada Impulsiva llamada Espectroscopía de los Sobretonos del Vector de Onda. El pulso a difractar incide ahora con ángulo y frecuencia central dados por la relación de Bragg, en el que el vector de onda es un determinado sobretono del vector de onda de la rejilla.

Se calculó la eficiencia de difracción transmitida para 2^{14} valores del tiempo de retraso en el intervalo $[0, 16 \frac{\pi}{\Omega K}]Kc$. Con este número de puntos podemos resolver frecuencias hasta $\delta\omega = \Omega K/8$; esta precisión es más que suficiente para nuestro análisis. Los espectros de Fourier aquí incluidos son graficados en el intervalo $[0, 5]Kc$ que es suficiente para visualizar la estructura.

3.3.1. Rejilla de difracción espacio-temporal lineal: el pulso incide con el ángulo de Bragg correspondiente al vector de onda K de la rejilla

En el caso de una rejilla de difracción espacio-temporal lineal, la función dieléctrica que la modela está dada por la relación (3.3). La eficiencia de difracción transmitida por una rejilla tal de anchura $d = 55K^{-1}$, con $\epsilon_0 = 5,4756$, $\epsilon_1 = 0,465$, $\Omega = 1,64Kc$ y $K = 2,7 \times 10^5 m^{-1}$, se muestra en la **figura 3.4a** como función del tiempo de retraso T . El pulso Gaussiano (3.1) tiene duración $\tau = 1,62K^{-1}c^{-1}$ e incide con ángulo $\theta = 3^\circ$ y frecuencia central dados por la relación de Bragg; $\bar{\omega} = \frac{Kc}{2\sin(3^\circ)}$. Vemos que las variaciones en el espectro se repiten con periodicidad.

En la **figura 3.4b** msotramos la transformada de Fourier del espectro de la **figura 3.4a**. Observamos que hay picos exclusivamente para las componentes frecuenciales seleccionadas según la formula $n\frac{\Omega}{\pi}$ con $\Omega = 1,64Kc$ y $n = 1, 2, \dots$. Este hecho refleja que la fluctuación periódica observada en el espectro en la **figura 3.4a** oscila con una frecuencia igual a dos veces la frecuencia Ω de la rejilla, lo cual está en concordancia con los resultados reportados en los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva con los polaritones-fonones excitados coherentemente de manera armónica.

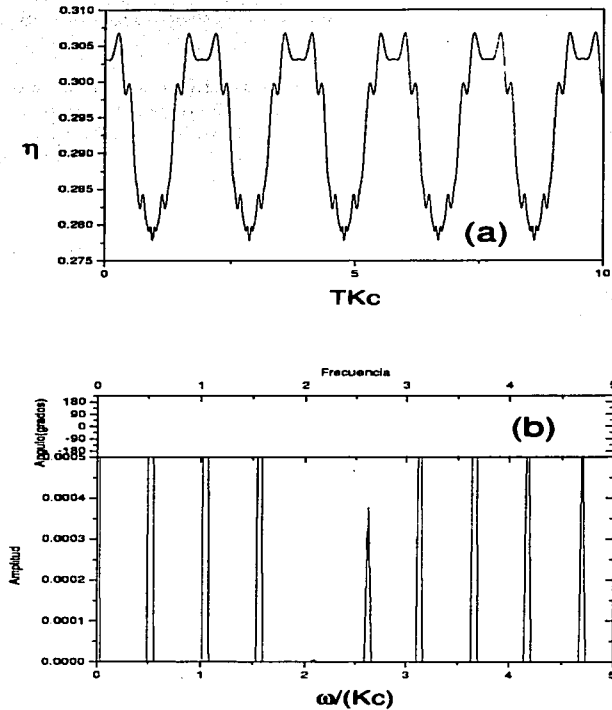


Figura 3.4: (a) Eficiencia de difracción transmitida total η_+ como función del tiempo de retraso para el caso de una rejilla espacio-temporal lineal (3.3). El ancho de la rejilla es $d = 55K^{-1}$, y los demás parámetros son $\Omega = 1,64Kc$, $K = 2,7 \times 10^5 m^{-1}$, $\epsilon_0 = 5,4756$ y $\epsilon_1 = 0,465$. La duración del pulso es $\tau = 1,62K^{-1}c^{-1}$, incide con ángulo $\theta = 3^\circ$ y su frecuencia central es $\bar{\omega} = \frac{1}{2\sin\theta}Kc$. Estos valores satisfacen la relación de Bragg (2.80). (b) Transformada de Fourier del espectro en (a). Vemos que son seleccionadas las componentes espectrales correspondientes a dos veces la frecuencia Ω de la rejilla.

3.3.2. Rejilla de difracción espacio-temporal no lineal: el pulso incide con el ángulo de Bragg correspondiente al vector de onda fundamental, K , de la rejilla

En esta subsección se trata la situación de difracción de un pulso Gaussiano (3.1) cuyo ángulo de incidencia y frecuencia central satisfacen la relación de Bragg con el vector de onda fundamental de la rejilla no lineal (3.53).

El grado de anarmonicidad de la rejilla (3.53) depende de la energía que tienen los pulsos de excitación. Hemos tratado los dos casos considerados por Romero-Rochín et al. [11], de $50\mu J$ y de $110\mu J$ de energía total de dichos los pulsos. Los valores de los parámetros que caracterizan la parte espacio-temporal de la función dieléctrica (3.53) para estas dos energías están dados en la **tabla 3.2**.

PULSOS DE EXCITACIÓN DE $50\mu J$ DE ENERGÍA

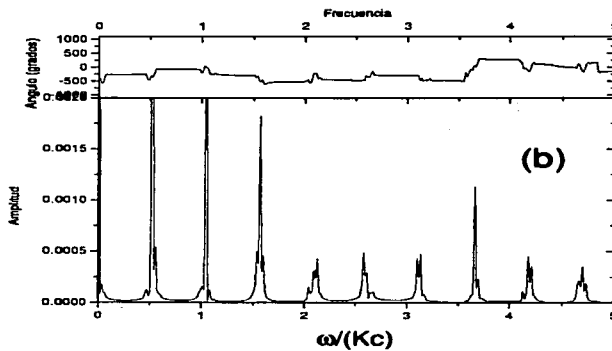
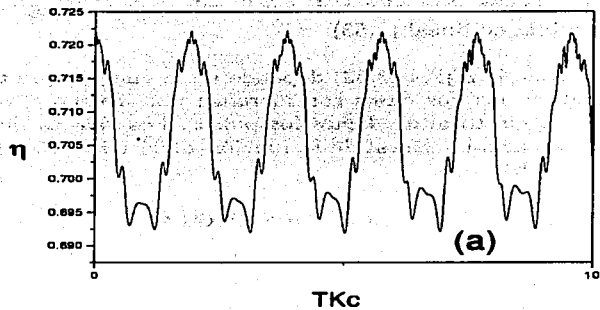
La **figura 3.5** corresponde al caso de $50\mu J$. La constante dieléctrica del fondo tiene el valor $\epsilon_0 = 5,4756$, y la contribución proveniente de los términos correspondientes a la fluctuación espacio-temporal en (3.53) están dados en la primera columna de la **tabla 3.2**. El vector de onda fundamental de la rejilla tiene el valor $K = 2.7 \times 10^5 m^{-1}$. La frecuencia fundamental es $\Omega_K = 1,64Kc$, y las frecuencias de las contribuciones anarmónicas están relacionados con Ω_K en concordancia con la teoría [11]: $\Omega_{2K} = 1,64(\frac{239}{126})Kc$ y $\Omega_{3K} = 1,64(\frac{239}{126})Kc$. El espesor de la rejilla es $d = 55,0K^{-1}$. El pulso difractado tiene duración $\tau = 1,62K^{-1}c^{-1}$, incide con ángulo $\theta = 3^\circ$, y su frecuencia central está dada por la relación de Bragg: $\bar{\omega} = \frac{Kc}{2\sin(3^\circ)}$.

En la **figura 3.5a** se grafica la eficiencia de difracción transmitida total (3.12) como función del tiempo de retraso del pulso. Observamos como se distorsiona el espectro al transcurrir el tiempo, en contraste al espectro periódico mostrado en la **figura 3.4a** correspondiente a la rejilla lineal (3.3).

En la **figura 3.5b** se muestra la transformada de Fourier de la eficiencia de difracción. Como en el caso de la rejilla lineal, (**figura 3.4b**), detectamos la presencia de picos para las componentes frecuenciales que cumplen la relación

$$\omega_n = n \frac{\Omega_K}{\pi} \quad , \quad n = 1, 2, \dots \quad , \quad (3.57)$$

con $\Omega_K = \Omega = 1,64Kc$. De la **figura 3.5b**, y en el intervalo $[0, 15]Kc$, se observan dichos picos claramente distinguibles con excepción de las componentes correspondientes a $n = 11, 16, 28$. Sin embargo, existe la posibilidad de que la respuesta correspondiente a estas tres frecuencias esté camuflada por la estructura en el alrededor inmediato.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

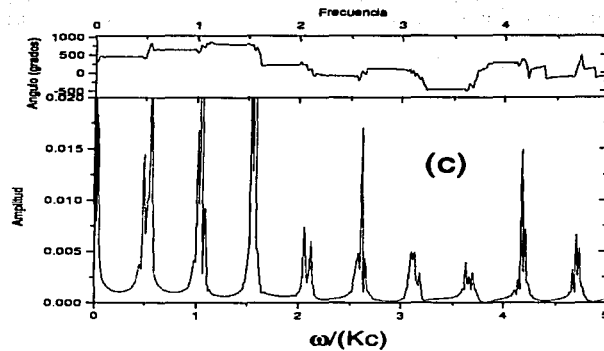


Figura 3.5: (a) Eficiencia de difracción transmitida total η_+ como función del tiempo de retraso para una rejilla no lineal (3.53) formada por dos pulsos de excitación de energía total de $50\mu J$. Los parámetros de la función dieléctrica son los de la primera columna de la tabla 4.2. La constante dieléctrica de fondo es $\epsilon_0 = 5,4756$. La anchura de la rejilla es $d = 55K^{-1}$ y se consideró $K = 2,7 \times 10^5 m^{-1}$. Las frecuencias de la rejilla son $\Omega_K = 1,64Kc$, $\Omega_{2K} = 1,64(\frac{239}{126})Kc$ y $\Omega_{3K} = 1,64(\frac{289}{126})Kc$. La duración del pulso es $\tau = 1,62K^{-1}c^{-1}$ y el ángulo de incidencia es $\theta = 3^\circ$. La frecuencia central está dada por la relación de Bragg (2.80). (b) Transformada de Fourier del espectro en (a). (c) Transformada de Fourier de la eficiencia de difracción transmitida correspondiente al orden de difracción $l = -1$.

En contraste a lo observado en el espectro de Fourier para el caso de una rejilla lineal (**figura 3.4b**), en el espectro para el caso de la rejilla no lineal (**figura 3.5b**) se detecta respuesta para componentes de frecuencia diferentes a los predichos por la relación (3.57). Como se puede ver en la **figura 3.5b**, los demás picos están ubicados en la cercanía de los predichos por tal fórmula. Generalmente, la respuesta es mayor para las frecuencias dadas por la relación (3.57).

La función dieléctrica (3.53) contiene también términos que varían con las frecuencias Ω_{2K} y Ω_{3K} . Por lo tanto, se investigó la posibilidad de que algunos de los picos no coincidentes con la relación (3.57) pudieran ser predichos por relaciones similares a este; es decir,

$$\omega_n^{2K} = n \frac{\Omega_{2K}}{2\pi} \quad , \quad n = 1, 2, \dots \quad , \quad (3.58)$$

$$\omega_n^{3K} = n \frac{\Omega_{3K}}{2\pi} \quad , \quad n = 1, 2, \dots \quad . \quad (3.59)$$

Sin embargo, en el intervalo $[0, 15]Kc$, se encontraron tan sólo dos picos que satisfacen la relación (3.58), $\omega_{17}^{2K} = 8,420Kc$ y $\omega_{18}^{2K} = 8,915Kc$, y tres posibles candidatos para la formula (3.59); $\omega_{14}^{3K} = 8,385Kc$, $\omega_{20}^{3K} = 11,978Kc$ y $\omega_{21}^{3K} = 12,577Kc$. El hecho de que unos cuantos picos para valores elevados de n coincidieron con las fórmulas (3.58) y (3.59) pudiera ser una coincidencia accidental pero ciertamente no es una tendencia general.

Como fue discutido en la sección 2.4, cuando una onda monocromática incide con el ángulo de Bragg (2.80) correspondiente al vector de onda de la rejilla estática, el orden de difracción transmitido $l = -1$ es mas ancho que los demás órdenes de difracción propagantes en el exterior de la rejilla. En el caso de difracción de un pulso, la situación resulta más compleja debido a que las componentes espectrales diferentes de la frecuencia central evidentemente no cumplen con la relación de Bragg. Sin embargo, se espera que la mayor parte de la señal transmitida acompañe al orden de difracción $l = -1$ cuando la frecuencia central y el ángulo de incidencia estén relacionados con el vector de onda fundamental de la rejilla a través de la relación de Bragg.

Experimentalmente, un detector es situado a cierta distancia de la muestra y en determinada posición con el motivo de detectar la señal transmitida. Este detector puede estar ubicado horizontalmente en paralelo con la superficie de la rejilla, de tal manera que detecte todos los órdenes transmitidos, o ubicado con determinado ángulo con el motivo de detectar la parte de la señal transmitida que acompaña a un orden de difracción seleccionado.

En nuestro cálculo numérico, la parte de la señal transmitida que acompaña a un determinado orden de difracción l seleccionado puede ser calculado por separado utilizando la

relación (3.12).

Según lo arriba mencionado, el orden $l = -1$ transmitido nos interesa en particular, y por lo tanto se graficó en la **figura 3.5c** el espectro de Fourier de la eficiencia de difracción correspondiente a este orden de difracción como función del tiempo de retraso del pulso.

Lo inmediatamente observable es que el espectro correspondiente al orden $l = -1$ transmitido (**figura 3.5c**) muestra más estructura que el espectro correspondiente a la suma de todos los órdenes de difracción transmitidos (**figura 3.5b**), lo cual aumenta la posibilidad de existencia de picos camuflados.

Investigando primero la presencia de componentes de Fourier según la fórmula (3.57), observamos en la **figura 3.5c** respuesta claramente distinguible en concordancia con esta relación salvo para las tres frecuencias $\omega_4 = 2,089Kc$, $\omega_{13} = 6,789Kc$ y $\omega_{13} = 12,011Kc$ donde la respuesta parece ser camuflado por la estructura prominente en la vecindad inmediata. Es interesante señalar que estas tres frecuencias sí están indiscutiblemente presentes en el espectro de la **figura 3.5b**.

En resumen, en el intervalo $[0, 15]Kc$, los dos espectros (**figuras 3.5 b y c**) juntos han revelado la presencia de todas las componentes de Fourier predichas por la fórmula (3.57).

La coincidencia entre los picos observados en el espectro de Fourier del orden de difracción $l = -1$ transmitido (**figura 3.5c**) y las fórmulas (3.58) y (3.59) para Ω_{2K} y Ω_{3K} , no es mayor que para el espectro de Fourier correspondiente a la suma de todos los órdenes transmitidos (**figura 3.5b**). En cuanto a la relación (3.58), se observa en la **figura 3.5c** respuesta significativa cerca de $\omega_1^{2K} = 0,495Kc$ y un pico muy pequeño cerca de $\omega_2^{2K} = 0,990Kc$ que podrían ser candidatas para el cumplimiento de esta relación. El único otro pico en el intervalo $[0, 15]Kc$ que puede ser considerado es el que está situado en la frecuencia $\omega_{18}^{2K} = 8,915Kc$. Picos en la **figura 3.5c** coincidentes con componentes de Fourier dados por la relación (3.59) en el intervalo $[0, 15]Kc$ son tres; $\omega_6^{3K} = 3,593Kc$, $\omega_{20}^{3K} = 11,978Kc$ y $\omega_{21}^{3K} = 12,577Kc$.

PULSOS DE EXCITACIÓN DE $110\mu J$ DE ENERGÍA

En la **figura 3.6a** se muestra la eficiencia de difracción transmitida total (3.12) como función del tiempo de retraso para la rejilla no lineal correspondientes al caso de pulsos de excitación de $110\mu J$ de energía, dados en la segunda columna de la **tabla 3.2**. Debido a razones numéricas, para este caso de energía de excitación consideramos una rejilla de espesor $d = 40,0K^{-1}$, manteniendo los demás parámetros con los mismos valores del caso de los pulsos de excitación de $50\mu J$ de energía.

<p style="text-align: center;">TESIS CON FALLA DE ORIGEN</p>
--

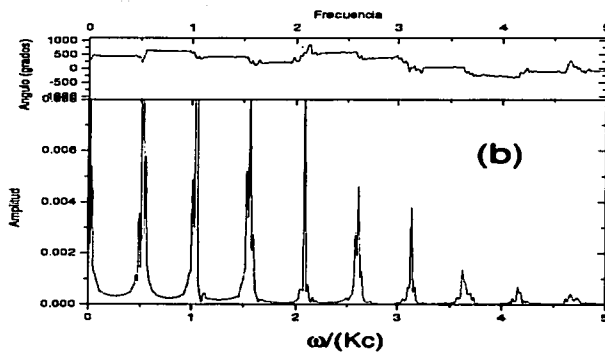
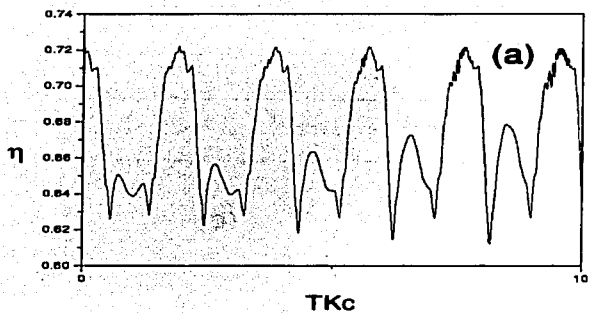
Lo más notable de la **figura 3.6a**, es que la contribución principal gobernada por la frecuencia fundamental Ω_K resulta ser de aproximadamente un orden de magnitud más grande que en la **figura 3.5a**. Este hecho se debe a que el valor del parámetro $x_K^{(1)}$, que determina el peso que tiene el término lineal del coeficiente $\bar{\epsilon}_1(T)$ (3.42) en la función dieléctrica (3.53), es para este caso de $110\mu J$ de energía de excitación más que el doble que en el caso de $50\mu J$. Como se puede ver claramente en la **tabla 3.2**, el desplazamiento en frecuencia introducido debido a la excitación anarmónica es despreciable para ambos casos de energía de excitación.

Otra observación inmediata al comparar la **figura 3.6a** con la **figura 3.5a**, es que la distorsión en el tiempo es mas rápida en el caso de $110\mu J$ de energía de excitación. Este hecho se debe a que los términos no-lineales en (3.53), el segundo término en el coeficiente $\bar{\epsilon}_1(T)$ (3.42) y los términos $\bar{\epsilon}_2(T)$ (3.43) y $\bar{\epsilon}_3(T)$ (3.44), son en el caso de $110\mu J$ de energía de excitación casi un orden de magnitud más grandes que en el caso de $50\mu J$ (ver **tabla 3.2**).

En la **figura 3.6b** hemos graficado el espectro de Fourier de la eficiencia de difracción transmitida total como función del tiempo de retraso (**figura 3.6a**). Observamos que dicho espectro muestra tener considerablemente más estructura que el espectro correspondiente a pulsos de excitación de $50\mu J$ (**figura 3.5b**), y la respuesta es también más grande. Para bajas frecuencias la respuesta se encuentra situada inmediatamente alrededor de las componentes de Fourier indicadas por la fórmula (3.57), pero conforme va aumentando la frecuencia, se observa que aparecen cada vez más picos, que no están situados necesariamente en la cercanía de las componentes de Fourier predichas por la relación (3.57).

En el intervalo $[0, 15]Kc$ encontramos picos distinguibles para 22 de los 28 componentes de Fourier (3.57). Es de suponer que hay respuesta para los demás 6 componentes ($n = 9, 12, 13, 15, 21, 28$ (3.57)), pero que están camufladas por la estructura en el alrededor inmediato de estas frecuencias. El hecho de que los picos presentes en la **figura 3.5b** también lo estén en la **figura 3.6b** refuerza esta creencia. En la **figura 3.6b** aparecen picos ausentes en **figura 3.5b**, lo cual es lógico debido a que los coeficientes dependientes del tiempo en la función dieléctrica (3.53) son aproximadamente un orden de magnitud más grandes en el caso de pulsos de excitación de $110\mu J$.

Se detectaron picos claramente distinguibles en la **figura 3.6b** en concordancia con la fórmula (3.58) para las frecuencias $\omega_1^{2K} = 0,495Kc$, $\omega_{15}^{2K} = 7,429Kc$, $\omega_{16}^{2K} = 7,925Kc$ y $\omega_{21}^{2K} = 10,401Kc$, y en concordancia con la fórmula (3.59) para las frecuencias $\omega_{12}^{3K} = 7,187Kc$ y $\omega_{13}^{3K} = 7,786Kc$. Se observa en la **figura 3.6b** también respuesta para las frecuencias $\omega_{31}^{3K} = 12,578Kc$ y $\omega_{22}^{3K} = 13,176Kc$ en concordancia con (3.59), pero estos picos no son claramente distinguibles debido a la estructura en su vecindad inmediata.



ESTA TESIS NO SALE
DE LA BIBLIOTECA
TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

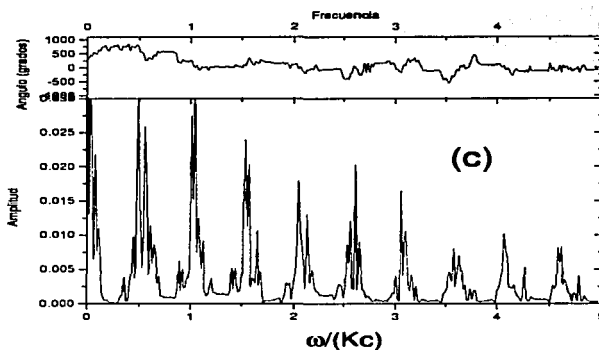


Figura 3.6: (a) Eficiencia de difracción transmitida total η_+ como función del tiempo de retraso en el caso de una rejilla espacio-temporal no lineal (3.53) formada por pulsos de excitación de energía total de $110\mu J$. Los valores de los parámetros que caracterizan la función dieléctrica son los de la segunda columna de la tabla 4.2. La anchura de la rejilla es $d = 40K^{-1}$. Todos los demás valores son los mismos que en la figura 3.5. (b) Transformada de Fourier del espectro en (a). (c) Transformada de Fourier de la eficiencia de difracción transmitida correspondiente al orden de difracción $l = -1$ como función del tiempo de retraso.

En la **figura 3.6c** está graficado el espectro de Fourier de la eficiencia de difracción correspondiente al orden de difracción $l = -1$ como función del tiempo de retraso. La **figura 3.6c** muestra todavía más estructura que la **figura 3.6b**. La posibilidad de existencia de respuesta camuflada es grande. Se encontró respuesta claramente distinguible en la **figura 3.6c** para la mitad de las componentes frecuenciales (3.57), la otra mitad siendo probablemente camuflados por la estructura prominente en su vecindad. Reportamos la presencia de picos distinguibles en la **figura 3.6c** en concordancia con la fórmula (3.58) para las frecuencias $\omega_7^{2K} = 0,495Kc$, $\omega_{16}^{2K} = 7,925Kc$, $\omega_{18}^{2K} = 8,915Kc$, $\omega_{20}^{2K} = 9,906Kc$, $\omega_{22}^{2K} = 10,896Kc$ y $\omega_1^{2K} = 11,887Kc$, y en concordancia con la fórmula (3.59) para las frecuencias $\omega_1^{3K} = 0,599Kc$, $\omega_{10}^{3K} = 6,588Kc$, $\omega_{12}^{3K} = 7,187Kc$, $\omega_{13}^{3K} = 7,786Kc$ y $\omega_{14}^{3K} = 8,385Kc$. Insistimos que la estructura del espectro en la **figura 3.6 c** indica que puede existir respuesta para muchas frecuencias diferentes de las que se observan picos distinguibles.

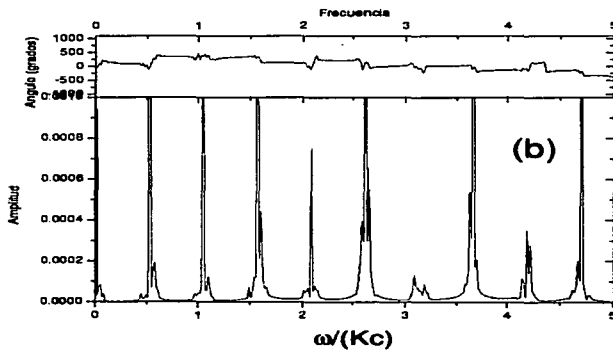
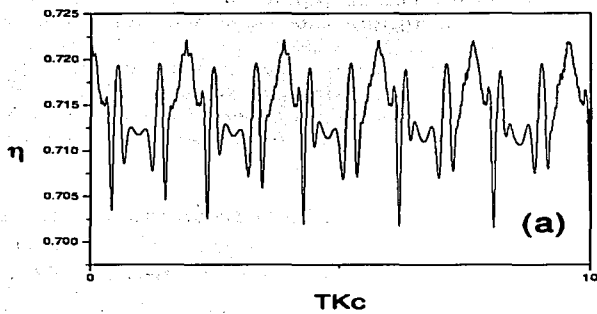
3.3.3. **Rejilla de difracción espacio-temporal no lineal: el pulso incide con el ángulo de Bragg correspondiente al segundo sobretono del vector de onda fundamental, $2K$, de la rejilla**

La variante de la técnica de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva donde el pulso a difractar incide con ángulo y frecuencia central relacionados por la relación de Bragg (2.80) con un determinado sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla es empleado en los experimentos de Espectroscopía de Sobretonos del vector de Onda.

Según las interpretaciones realizadas por Nelson et al [8] - [9], en este caso, el espectro de Fourier de la eficiencia de difracción transmitida como función del tiempo de retraso muestra respuesta para las componentes $\omega(nK)$, $2\omega(nK)$, etc.

En esta subsección tratamos el caso de una rejilla creada por pulsos de excitación de $50\mu J$ de energía, y se muestra en la **figura 3.7**. El único cambio realizado con respecto a la situación graficada en la **figura 3.5** es que la frecuencia central del pulso está dado por medio de la relación de Bragg (2.80) correspondiente al segundo sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla; $\tilde{\omega} = \frac{Kc}{\sin(3\alpha)}$.

En la **figura 3.7a** está graficada la eficiencia de difracción transmitida total como función del tiempo de retraso. Comparado con el espectro en la **figura 3.5a**, el espectro en la **figura 3.7a** aparece cualitativamente distinto. Las diferencias entre mínimos y máximos son aproximadamente las mismas en las dos figuras, pero la variación dominante en la **figura 3.7a** es más rápida que la del espectro en la **figura 3.5a**.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

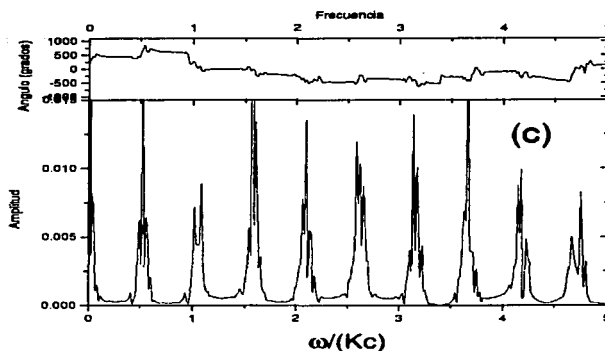


Figura 3.7: (a) Eficiencia de difracción transmitida total η_+ como función del tiempo de retraso para una rejilla espacio-temporal no lineal (3.53) formada por pulsos de excitación de $50\mu J$. El pulso incidente está centrado en la frecuencia $\bar{\omega}$ dada por la relación de Bragg (2.80) correspondiente al segundo sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla: $\bar{\omega} = \frac{Kc}{\sin(3\theta)}$. Los demás parámetros del sistema tienen los mismos valores que en la figura 3.5. (b) Transformada de Fourier del espectro en (a). (c) Transformada de Fourier de la eficiencia de difracción transmitida correspondiente al orden de difracción $l = -2$.

El espectro de Fourier de la eficiencia de difracción transmitida está graficado en la **figura 3.7b**. Con excepción de una sola componente Fourier ($\omega_6 = 3,133Kc$), encontramos respuesta para todas las componentes dadas por la relación (3.57) en el intervalo $[0, 15]Kc$.

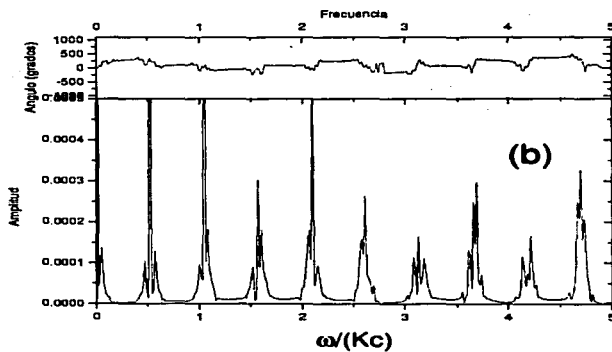
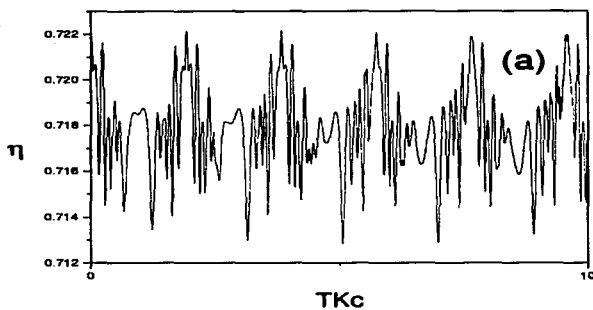
No se encontró respuesta significativa en la **figura 3.7b** para ninguna de las componentes de Fourier en concordancia con la relación (3.58), sólo tres picos muy pequeños comparados con los ubicados según la relación (3.57) situados en las siguientes frecuencias; $\omega_3^{2K} = 1,486Kc$, $\omega_{17}^{2K} = 8,420Kc$ y $\omega_{18}^{2K} = 8,915Kc$. Picos pequeños fueron detectados en el intervalo $[0, 15]Kc$ también para tres componentes frecuenciales en concordancia con la relación (3.59); $\omega_{20}^{3K} = 11,978Kc$, $\omega_{21}^{3K} = 12,577Kc$ y $\omega_{22}^{3K} = 13,176Kc$.

Como fue discutido en la sección 2.4, cuando una onda monocromática incide con ángulo y frecuencia relacionados por la relación de Bragg (2.80) con determinado sobretono n del vector de onda K de la rejilla estática (2.1), el orden de difracción $l = -n$ transmitido se ensancha. En la **figura 3.7c** se muestra el espectro de Fourier de la eficiencia de difracción transmitida correspondiente al orden de difracción $l = -2$. Encontramos que muestra tener más estructura que la **figura 3.7b**, lo cual implica la posible existencia de respuesta camuflada para las componentes (3.57) con $n = 8, 9, 10, 17, 18, 19, 20$ para las cuales no hubo respuesta. Para las componentes de Fourier correspondientes a los demás valores de n en la fórmula (3.57), sí se detectó respuesta claramente distinguible en el espectro en la **figura 3.7c**. Además, fueron encontrados seis picos distinguibles coincidentes con las componentes de la fórmula (3.58); $\omega_1^{2K} = 0,495Kc$, $\omega_{15}^{2K} = 7,429Kc$, $\omega_{16}^{2K} = 7,925Kc$, $\omega_{18}^{2K} = 8,915Kc$, $\omega_{20}^{2K} = 9,906Kc$, $\omega_{24}^{2K} = 11,887Kc$, y seis picos distinguibles coincidentes con componentes de la fórmula (3.59); $\omega_1^{3K} = 0,599Kc$, $\omega_8^{3K} = 4,791Kc$, $\omega_{13}^{3K} = 7,786Kc$, $\omega_{14}^{3K} = 8,385Kc$, $\omega_{21}^{3K} = 12,577Kc$, $\omega_{22}^{3K} = 13,176Kc$.

3.3.4. Rejilla de difracción espacio-temporal no lineal: el pulso incide con el ángulo de Bragg correspondiente al tercer sobretono del vector de onda fundamental, $3K$, de la rejilla

PULSOS DE EXCITACIÓN DE $50\mu J$ DE ENERGÍA

La **figura 3.8a** muestra la eficiencia de difracción transmitida como función del tiempo de retraso para de un pulso con ángulo de incidencia de $\theta = 3^\circ$ y cuya frecuencia central obedece la relación de Bragg (2.80) con el tercer sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla para el caso de pulsos de excitación de $50\mu J$ de energía. Los valores de los otros parámetros del sistema son los mismos que en la **figura 3.5**.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

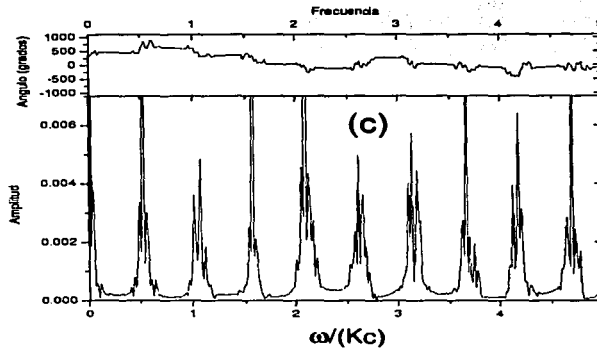


Figura 3.8: (a) Eficiencia de difracción transmitida total η_+ como función del tiempo de retraso para una rejilla espacio-temporal no lineal (3.53) formada por pulsos de excitación de $50\mu J$. El pulso incidente está centrado en la frecuencia $\bar{\omega}$ dada por la relación de Bragg (2.80) correspondiente al tercer sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla: $\bar{\omega} = \frac{3Kc}{2\sin(3\sigma)}$. Los demás parámetros del sistema tienen los mismos valores que en la figura 3.5. (b) Transformada de Fourier del espectro en (a). (c) Transformada de Fourier de la eficiencia de difracción transmitida correspondiente al orden de difracción $l = -3$.

En la **figura 3.8b** se muestra el espectro de Fourier de la eficiencia de difracción transmitida total. Con excepción de dos componentes posiblemente camufladas, $\omega_{11} = 5,744Kc$ y $\omega_{26} = 13,578Kc$, se observa en el intervalo $[0, 15]Kc$ respuesta claramente distinguible en concordancia con la relación (3.57).

Se detectó en la **figura 3.8b** la presencia de una sola componente en concordancia con la relación (3.58), $\omega_{18}^{2K} = 8,915Kc$, y tres componentes en concordancia con la relación (3.59); $\omega_{13}^{3K} = 7,786Kc$, $\omega_{14}^{3K} = 8,385Kc$, $\omega_{21}^{3K} = 12,578Kc$.

Debido a que el pulso incide con ángulo y frecuencia central relacionados por la relación de Bragg (2.80) con el tercer sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla, se muestra en la **figura 3.8c** el espectro de Fourier de la eficiencia de difracción transmitida correspondiente al orden de difracción $l = -3$.

La tendencia de respuesta en concordancia con la relación (3.57) persiste, considerando la posibilidad de respuesta camuflada para las componentes $n = 2, 12, 13, 17, 19, 20, 24, 25, 26$ en el intervalo $[0, 15]Kc$. El espectro en la **figura 3.8c** mostró respuesta claramente distinguible para cinco componentes en concordancia con la fórmula (3.58); $\omega_1^{2K} = 0,495Kc$, $\omega_{15}^{2K} = 7,429Kc$, $\omega_{22}^{2K} = 10,896Kc$, $\omega_{24}^{2K} = 11,887Kc$, $\omega_{26}^{2K} = 12,877Kc$, y para dos componentes en concordancia con la fórmula (3.59); $\omega_1^{3K} = 0,599Kc$, $\omega_8^{3K} = 4,791Kc$.

PULSOS DE EXCITACIÓN DE $110\mu J$ DE ENERGÍA

En la **figura 3.9a** vemos la eficiencia de difracción transmitida total como función del tiempo de retraso del pulso para el caso de pulsos de energía de $110\mu J$. Comparando con el caso de $50\mu J$, **figura 3.8a**, vemos que en el presente caso, conforme va aumentando el tiempo de retraso la distorsión es mayor y la amplitud de la fluctuación es también más significativa.

En la **figura 3.9b** está graficado el espectro de Fourier de la eficiencia de difracción. La estructura es más notable en la **figura 3.9b** que en la **figura 3.8b**. La tendencia de respuesta en concordancia con la fórmula (3.57) persiste, permitiendo la existencia de picos camuflados para las únicas dos componentes no claramente distinguibles en el intervalo $[0, 15]Kc$, las dadas por (3.57) con $n = 9, 24$.

El espectro en la **figura 3.9b** muestra respuesta en concordancia con la fórmula (3.58) para tres componentes, $\omega_1^{2K} = 0,495Kc$, $\omega_5^{2K} = 2,476Kc$, $\omega_{18}^{2K} = 8,915Kc$, y respuesta en concordancia con la fórmula (3.59) para cinco componentes $\omega_8^{3K} = 4,791Kc$, $\omega_9^{3K} = 5,390Kc$, $\omega_{13}^{3K} = 7,786Kc$, $\omega_{14}^{3K} = 8,385Kc$ y $\omega_{15}^{3K} = 11,983Kc$.

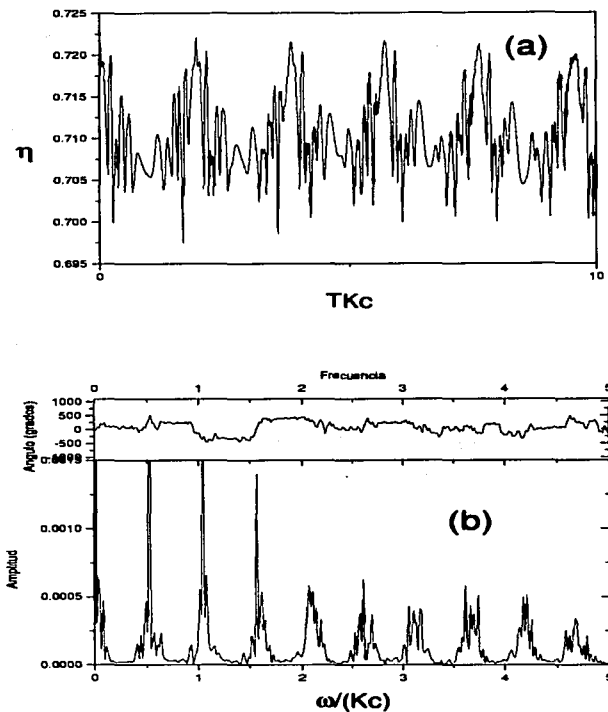


Figura 3.9: (a) Eficiencia de difracción transmitida total η_+ como función del tiempo de retraso en el caso de la rejilla espacio-temporal no lineal (3.53) formada por pulsos de excitación de $110\mu J$. El pulso incidente está centrado en la frecuencia $\bar{\omega}$ dada por la relación de Bragg (2.80) correspondiente al tercer sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla: $\bar{\omega} = \frac{3K_c}{2\sin(3\sigma)}$. Los demás parámetros del sistema tienen los mismos valores que en la figura 3.5. (b) Transformada de Fourier del espectro en (a).

3.4. Resumen

La presencia de respuesta para las componentes de Fourier de acuerdo a la relación (3.57) fue observada en todos los espectros. En el caso de la rejilla lineal (figura 3.4b), obviamente sólo hay respuesta en la frecuencia fundamental, (3.57), mientras que en los casos de rejillas no-lineales (figuras 3.5 - 3.9 b y c) hay respuestas en los fundamentales Ω_K , Ω_{2K} , Ω_{3K} y en sus sobretonos. Es importante señalar que la existencia única de sobretonos de Ω_K no indica ninguna no-linealidad, ya que solo nos dice que la señal es periódica; es decir, lo que se obtiene es la serie de Fourier de la señal. Es la presencia de componentes Ω_{2K} , Ω_{3K} y de sus sobretonos (y posibles sumas y restas de ellas mismas) (3.57) la indicación que los pulsos de excitación intensos realmente crearon una rejilla no lineal. Esto último parece estar de acuerdo con los resultados de Nelson et al. [8] - [9].

Por otro lado, según Nelson et al [8] - [9], el enviar sobre la muestra el pulso de prueba a difractar con ángulo de incidencia y frecuencia central relacionados por la relación de Bragg con determinado sobretono del vector de onda de la rejilla, implicaría la presencia de respuesta para las componentes frecuenciales correspondientes a este sobretono del vector de onda en particular. Es decir, debería haber respuesta en concordancia con la fórmula (3.58) correspondiente al segundo sobretono, y acuerdo concordancia con la fórmula (3.59) correspondiente al tercer sobretono. Nuestros resultados muestran que esto sólo ocurre en esporádicas frecuencias. Esto nos indica que la hipótesis de Nelson y Brennan no es completamente conclusiva.

Es posible también que la resolución de los espectros de Fourier no ha sido lo suficientemente alta como para detectar tales tendencias, ya que la estructura, particularmente en los espectros correspondientes a la rejilla (3.53) formada por pulsos de excitación de $110\mu J$, indica la posible existencia de respuesta camuflada. La tendencia de presencia de respuesta en concordancia con la relación (3.57) fue la dominante para todos los casos tratados.

Hemos de suponer que la presencia de los picos en los espectros de Fourier identificados por las relaciones (3.57) - (3.59) se deben a sumas y diferencias de las componentes frecuenciales presentes en la función dieléctrica (3.53) que modela la rejilla no lineal. Debido a la formidable complejidad de las amplitudes dependientes del tiempo (3.42) - (3.44) de esta función dieléctrica (3.53), la ubicación exacta de estos picos por medio de alguna fórmula sería muy difícil de encontrar.

Nuestros espectros numéricamente calculados se basan en la teoría [11]. Es posible que esta teoría necesite de un ajuste con el fin de adaptarse mejor a los experimentos realizados por Nelson et al [8] - [9]. Es posible que en dicha teoría los coeficientes que dan peso a los términos fluctuantes con las frecuencias correspondientes a los sobretonos en el vector de

onda, Ω_{2K} y Ω_{3K} , son demasiado pequeños en comparación con los términos fluctuantes con la frecuencia fundamental Ω_K o los términos fluctuantes con múltiplos de la frecuencia fundamental, $2\Omega_K$ y $3\Omega_K$. Esto es, como la fórmula (3.57) puede corresponder a la presencia de respuesta a la frecuencia fundamental Ω_K y también a la presencia de respuesta correspondiente a los múltiplos de la frecuencia fundamental, $2\Omega_K$ y $3\Omega_K$, es difícil discernir cuales de los términos fluctuantes con cualquiera de estas tres frecuencias en las coeficientes dependientes del tiempo (3.42) - (3.44) de la rejilla (3.53) son los que dominan.

El peso de los diferentes términos con las frecuencias Ω_K , $2\Omega_K$ y $3\Omega_K$, asimismo como el peso de los términos con las frecuencias Ω_{2K} y Ω_{3K} , varían con el tiempo de retraso. Por lo tanto, en los espectros este hecho debe reflejarse en que dichas frecuencias deberían dejar huellas en forma de respuesta de acuerdo con las fórmulas (3.57), (3.58) y (3.59), respectivamente, en diferentes intervalos en frecuencia. Por ejemplo, con respecto a la componente Ω_{2K} , hallamos que en un intervalo limitado se manifiestan picos en el espectro de acuerdo a la fórmula (3.58) con $n = 9, 11, 13, 15$. De manera similar, sólo se hallaron unos cuantos picos para el caso de la fórmula (3.59). De nuevo, aunque no del todo conclusivo, sí podría indicar una tendencia.

Como era de esperarse, se observa más estructura y más respuesta de acuerdo con las fórmulas (3.58) y (3.59) en los espectros de Fourier correspondientes al caso de la rejilla no lineal (3.53) formada por pulsos de excitación de $110\mu J$, que en los espectros correspondientes al caso de $50\mu J$. Esto refuerza nuestra opinión de que tal vez no han sido dados con suficiente peso los términos no-lineales en la función dieléctrica que modela la rejilla.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Capítulo 4

DISCUSION Y CONCLUSIONES

En el presente trabajo de investigación se realizó un análisis riguroso de la difracción de ondas electromagnéticas por rejillas dieléctricas no-disipativas.

La motivación principal es el entender teóricamente experimentos en los cuales se utiliza la técnica de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva, que consiste en superponer espacial y temporalmente dos pulsos láser ultracortos sobre una muestra que posea un modo Raman-activo; tal superposición crea una rejilla de difracción que es sondeada por otro pulso de baja intensidad. Esta técnica ha sido ampliamente desarrollada por el grupo experimental de Nelson, [8, 9]. En particular, nuestro interés radica en entender el caso cuando los pulsos son lo suficientemente intensos que dan lugar a una rejilla de difracción con contribuciones anarmónicas de los modos Raman presentes. El estudio experimental se realizó en cristales ferroeléctricos de $LiTaO_3$ y $LiNbO_3$ y los modos Raman son polaritones-fonones. La parte que nos interesa describir es la difracción del pulso de prueba. Según la teoría de Romero-Rochín et al. [11], se puede deducir la forma de la función dieléctrica del material que se origina por la interacción con los pulsos de excitación.

En breve, suponiendo que la rejilla ha sido ya formada por los pulsos de excitación y que se puede representar por medio de una función dieléctrica ya conocida, nuestro trabajo consiste en estudiar con detalle la difracción de un pulso de prueba por tal rejilla.

Como un pulso de radiación electromagnética puede descomponerse en sus componentes de Fourier, dividimos el presente trabajo de tesis en por dos partes. En la primera parte realizamos un análisis detallado de los fenómenos relacionados con la difracción de una onda monocromática por una rejilla dieléctrica espacialmente modulada y estática. La segunda parte trata ya el problema en sí de la difracción de un pulso Gaussiano por una rejilla dieléctrica espacio-temporal en el contexto de los experimentos arriba mencionados. Por medio de una aproximación adiabática de la evolución temporal de la rejilla, válida porque

la duración de los pulsos es muy corta, estudiamos tanto el caso en que la rejilla consiste de un solo modo Raman, apropiado para intensidades bajas de los pulsos de excitación, así como el caso en que se supone que existen sobretonos de varios modos fundamentales del cristal; el primer caso nos referimos como una rejilla lineal y el segundo como no lineal. A continuación describimos nuestras conclusiones de cada temo de estudio.

4.1. Difracción de una onda monocromática por una rejilla dieléctrica espacialmente modulada estática

En esta parte estudiamos el problema de la difracción de una onda monocromática incidente con un ángulo arbitrario sobre una placa dieléctrica sinusoidalmente modulada y ubicada en el vacío. Resolvimos el problema de manera numéricamente exacta para el caso de polarización s y polarización p de la onda incidente. Lo más interesante de este caso son el fenómeno de resonancia de modos guiados y el fenómeno de difracción de Bragg.

Resolvimos la ecuaciones de Maxwell para este problema. La situación en el interior de la rejilla dieléctrica es descrita por una suma infinita sobre los eigenmodos propagantes y evanescentes del material. La situación en el exterior de la rejilla es la que corresponde a ondas electromagnéticas en el vacío. Aplicando las condiciones de frontera, encontramos las expresiones completas para los campos eléctricos y magnéticos en todas las regiones del espacio para este problema. Debido a la modulación en la dirección x , todos los campos están acoplados entre sí, y las señales reflejadas y transmitidas por la estructura dieléctrica aparecen distribuidas entre diferentes órdenes de difracción, tanto propagantes como evanescentes también. Las cantidades mesurables y que pueden ser calculadas son las eficiencias de difracción, tanto transmitida como reflejada.

Encontramos que cuando el número de modos propagantes en el interior de la rejilla es mayor que el número de órdenes de difracción propagantes en el exterior, aparece el llamado fenómeno de resonancia de modos guiados. De manera sencilla, estos pueden verse como modos propagantes en el material que quedan "atrapados" debido a la falta de su contraparte en el exterior.

El fenómeno de resonancia de modos guiados es más ilustrativamente visualizado graficando la eficiencia de difracción como función de la frecuencia de la onda monocromática incidente. Para algunos combinaciones de los valores de los demás parámetros del sistema, picos, la mayoría que van desde transmisión total a reflexión total en intervalos muy pequeños,

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

fueron observados en los espectros. Pudimos explicar la presencia de estas resonancias, calculando la relación de dispersión de la rejilla dieléctrica considerándola aisladamente, como una guía de ondas con modulación, en ausencia de campo incidente.

La relación de dispersión da información sobre la propagación de los eigenmodos en una estructura dieléctrica. Como se mencionó, es fundamental para la comprensión del fenómeno de resonancia con los modos guiados el tener claro el concepto de distinción entre eigenmodos propagantes y evanescentes y entre órdenes de difracción propagantes y evanescentes.

El sistema no es una guía de ondas en el sentido estricto de la palabra. La modulación en la dirección x implica acoplamiento entre los campos, y por lo tanto, los modos son escapatorios. Hallamos que el tiempo de vida media de dichos modos disminuye al aumentar la modulación.

En el caso de baja modulación de la rejilla, comprobamos que las ramas de la relación de dispersión calculada de manera numéricamente exacta están perfectamente estimadas por las calculadas despreciando la modulación de la rejilla, al considerarla como una guía de ondas convencional, con excepción a las orillas de las zonas de Brillouin donde las ramas calculadas con la teoría exacta se abren en brechas. Sin embargo, no debemos perder de vista que es la modulación la que permite la excitación de los modos guiados en la estructura.

Podemos considerar a la eficiencia de difracción también como función de la anchura de la rejilla, manteniendo los parámetros que caracterizan sus propiedades dieléctricas y las que caracterizan la onda monocromática incidente a valores fijos. Es esta otra forma muy ilustrativa de visualizar el fenómeno de resonancia de modos guiados de tal manera que puede ser comprendido con facilidad, ya que variando la anchura manteniendo fijos los demás parámetros, tenemos una situación para la cuál podemos conocer el número de eigenmodos propagantes en la rejilla y el número de órdenes de difracción propagantes en su exterior. Es decir, podemos fijar los parámetros del sistema a valores tales que corresponden a una situación de por ejemplo dos eigenmodos propagantes en la rejilla y un sólo orden de difracción propagante en su exterior.

Los picos de resonancia en los espectros de la eficiencia de difracción como función de la anchura están ubicados para los valores en los cuales los campos correspondientes al modo guiado suman en fase, y por lo tanto están periódicamente espaciados entre sí, en el caso cuando la modulación de la rejilla es baja. La fórmula que da las posiciones de estos picos fue obtenida calculando la diferencia total de fase que adquiere un frente de onda del eigenmodo guiado al haber propagado ida y vuelta de la pared opuesta al inicial, y igualándola con la fase para la cuál los campos suman en fase.

Hemos realizado un análisis del efecto que tiene sobre los picos de resonancia en los espectros como función de la frecuencia de la onda monocromática incidente, el aumentar la modulación de la rejilla mantenido fija la constante dieléctrica del fondo. Efectivamente, al aumentar la modulación, las resonancias se ensanchan y se desplazan de las posiciones que ocupan en el límite de modulación muy baja. Observamos que esta tendencia aumenta al aumentar el espesor de la rejilla.

El otro fenómeno interesante es el de picos de Bragg, que es totalmente independiente del de la resonancia de los modos guiados. Es un fenómeno que se presenta en estructuras periódicas en forma de respuesta ensanchada cuando el vector de onda k y el ángulo de incidencia θ están relacionados con un múltiplo n del vector de onda de la rejilla por la relación de Bragg: $2k \sin \theta_n = nK$.

Considerando la eficiencia de difracción transmitida correspondiente a cada orden de difracción por separado, como función del ángulo de incidencia a frecuencia fija, observamos respuesta para el ángulo dado por la relación de Bragg correspondiente a esta frecuencia en el orden de difracción transmitido con $l = -n$ para rejillas de espesor grueso ($d > 10,0K^{-1}$). Es decir, la eficiencia de difracción transmitida correspondiente al orden de difracción $l = -1$ muestra respuesta ensanchada para el primer ángulo de Bragg ($2k \sin \theta_1 = K$), la eficiencia de difracción transmitida correspondiente al orden de difracción $l = -2$ muestra respuesta ensanchada para el segundo ángulo de Bragg ($2k \sin \theta_2 = 2K$), etcétera. Esta tendencia se debe a que, en esas situaciones, el orden de difracción correspondiente se transmite exactamente en la misma dirección que la onda incidente.

Observamos que el fenómeno de picos de Bragg se presenta en rejillas de cierto espesor. Sin embargo, picos tipo Fabrey-Perot también presentes en los espectros pueden, para algunas combinaciones de los valores de los parámetros del sistema, exceder en tamaño a los picos de Bragg camuflándolos por completo.

4.2. Difracción de un pulso Gaussiano por una rejilla espacio-temporal

En la segunda parte del presente trabajo de investigación, hemos estudiado el problema de la difracción de un pulso Gaussiano por una rejilla dieléctrica no-disipativa espacio-temporal.

La geometría del problema de difracción de un paquete de ondas por la rejilla espacio-temporal es la misma que en el caso de difracción de una onda monocromática por la rejilla espacialmente modulada estática. Por lo tanto, las herramientas de cómputo requeridas para resolver de manera numéricamente rigurosa este problema dependiente del tiempo, con la onda incidente siendo un pulso, son extendidas de las herramientas aplicables para el caso de la difracción de ondas monocromáticas por la rejilla estática.

Para el análisis de difracción de un pulso, consideramos solo el caso de polarización s de los campos electromagnéticos que es el caso para el cual las ecuaciones diferenciales acopladas a resolver son las más sencillas, ya que la polarización no es lo importante para el entendimiento de este problema; el tiempo de cómputo requerido sí lo es.

La situación experimental de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva es tal que la evolución temporal de la rejilla espacio-temporal, formada por los fonones-polaritones contrapropagantes en el cristal, es lenta en comparación con el tiempo que tarda en atravesar la rejilla el pulso de prueba. Por lo tanto, la dependencia temporal en nuestro modelo de la rejilla espacio-temporal pudo ser introducida por medio de una aproximación adiabática.

Primero consideramos el caso de difracción del pulso por una rejilla espacio-temporal lineal como caso de referencia, y luego el caso de difracción por una rejilla espacio-temporal no-lineal basándonos en la teoría previamente desarrollada por Romero-Rochín en colaboración con el grupo experimental de Nelson [11]. Calculamos e interpretamos los espectros de difracción que resultan cuando un pulso Gaussiano es difractado por la rejilla espacio-temporal no-lineal modelada por la función dieléctrica en [11].

Las cantidades mesurables a calcular son, como en el caso de difracción de una onda monocromática por la rejilla estática, la eficiencia de difracción reflejada y transmitida por la rejilla. En este caso, debido a que la señal incidente es ahora un pulso, tenemos que integrar sobre un tiempo tan largo que todas los componentes frecuenciales de los paquetes de ondas queden incluidas.

Para sondear los sobretonos en frecuencia, en los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva realizados por Brennan y Nelson [8]-[9], el pulso de prueba incide con ángulo y frecuencia central relacionados por la condición de Bragg con el vector de onda fundamental de la rejilla no-lineal. Análogamente para los sobretonos del vector de onda fundamental de la rejilla, el pulso de prueba es enviado sobre la muestra con ángulo de incidencia y frecuencia central relacionados por la relación de Bragg con el vector de onda del segundo sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla.

Como en el caso de la difracción de ondas monocromáticas, se puede calcular la eficiencia de difracción que corresponde a la parte del paquete de onda difractado que acompaña a un determinado orden de difracción propagante. Si escogemos los valores de los parámetros del sistema de tal manera que se cumpla la relación de Bragg $2\frac{\omega}{c} \sin \theta_n = nK$, se espera que el orden de difracción $l = -n$ ocupe una situación privilegiada respecto al de los demás órdenes. Por lo tanto, calculamos no sólo la eficiencia de difracción transmitida total como función del tiempo de retraso del pulso sino también la eficiencia de difracción transmitida correspondiente al orden de difracción seleccionado por la relación de Bragg del vector de onda en cuestión.

La información sobre las componentes frecuenciales presentes en la rejilla espacio-temporal la dan los espectros de Fourier de la eficiencia de difracción.

Hemos tratado dos casos de rejillas no-lineales correspondientes a la energía total que llevan los pulsos de excitación en los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva, $50\mu J$ y $110\mu J$, y que son los dos casos para los cuáles Romero-Rochín et al. [11] presentaron modelos para la función dieléctrica que modela la rejilla. Para estos dos casos de energía de excitación, analizamos la difracción para sobretonos en frecuencia y para el segundo y el tercer sobretono en el vector de onda fundamental de la rejilla no-lineal.

Según Nelson et al. [8] - [9], el hecho de que el espectro de Fourier de la eficiencia de difracción transmitida como función del tiempo de retraso muestra respuesta para la frecuencia fundamental Ω_K de la rejilla formada por pulsos de alta energía, de acuerdo la fórmula $n\frac{\Omega_K}{\pi}$ con valores de entero n de 1 a 9, es una indicación de la no-linealidad de la rejilla. Nuestro calculo, sin embargo, revela que para el caso de la rejilla *lineal* también se encuentra respuesta para dichos sobretonos.

Encontramos que la diferencia entre los espectros de Fourier de las eficiencia de difracción transmitidas, es que para el caso lineal sólo se encuentra respuesta para las componentes dadas por la fórmula $n\frac{\Omega_K}{\pi}$, mientras que en el caso no-lineal también se observa respuesta para otras componentes frecuenciales aparte de los predichas por esta fórmula.

Según Nelson et al [8] - [9], cuando el pulso de prueba incide con ángulo de incidencia y frecuencia central relacionados por la fórmula de Bragg con determinado sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla, el espectro de Fourier de la eficiencia de difracción muestra respuesta en concordancia con la fórmula $m\frac{\Omega_K}{\pi}$ con Ω_{nK} siendo la frecuencia correspondiente al sobretono del vector de onda en cuestión. Esta variante experimental es la llamada Espectroscopía de los Sobretonos del Vector de Onda. Más concretamente, Nelson y Brennan presentan el espectro de Fourier para el quinto sobretono, $n = 5$, $m = 1, 2, \dots, 5$.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

En base a la teoría de Romero-Rochín et al. [11], que da los valores de las frecuencias correspondientes al segundo y al tercer sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla, calculamos los espectros de la eficiencia de difracción para ángulos de incidencia y frecuencias centrales relacionados por la fórmula de Bragg con el segundo y con el tercer sobretono del vector de onda fundamental de la rejilla.

En nuestro cálculos hallamos que la señal difractada, como función del tiempo de retraso, tanto para incidencia en el fundamental como en los sobretonos, está compuesta en su mayoría por componentes de Fourier que obedecen la relación $n\frac{\Omega_K}{\pi}$, es decir, que son sobretonos del vector de onda fundamental, y sólo esporádicamente hallamos contribuciones de los sobretonos $m\frac{\Omega_{nK}}{\pi}$, con $n = 1, 2, \dots$. Aunque esto contrasta con las aseveraciones de Nelson y Brennan mencionadas arriba, ciertamente no es conclusivo.

Como nuestros resultados numéricos dependen de la teoría [11] que conduce a las expresiones para la función dieléctrica empleada para modelar la rejilla no-lineal, es posible que el hecho de que no veamos respuesta en concordancia con lo medido experimentalmente se deba a que los términos no-lineales en la función dieléctrica no han recibido suficiente peso en la teoría [11].

Lo que sí queda claro es que la sola presencia de sobretonos del vector de onda fundamental no es suficiente para afirmar que la rejilla contiene contribuciones anarmónicas de los modos Raman correspondientes; esto bien puede explicarse con el hecho de que existe periodicidad en la señal y que, por lo tanto, su descomposición espectral contenga solo sobretonos del fundamental. Aunque no hallamos un acuerdo bueno con los experimentos, sí podemos afirmar que la presencia de sobretonos (y sumas y restas de ellos) de componentes Ω_{2K} , Ω_{3K} , etcétera, son resultado de excitación anármonica en el cristal y que esta se debe a la alta energía de los pulsos de excitación. Esta afirmación se basa en el acuerdo con la teoría de Romero-Rochín et al. [11] que predice tales excitaciones sólo cuando se han incluido las anarmonicidades del modo ferroeléctrico.

Como una conclusión final creemos que las herramientas aquí desarrolladas para el análisis de la difracción de pulso junto con la teoría de la formación de la rejilla, abren la posibilidad de realizar análisis más precisos de los experimentos de Dispersión Raman Estimulada Impulsiva.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Apéndice A

Deducción de la eficiencia de difracción

El vector de Poynting $\vec{S} = \frac{c}{8\pi} \vec{E} \times \vec{H}^*$ mide el flujo de energía electromagnética en un sistema. Podemos calcular la energía que entra y sale de un volumen que encierra a la rejilla de difracción modelada por una placa dieléctrica infinita en el plano $x-z$ y limitada a la anchura d en la dirección y , como consecuencia de una señal electromagnética incidente. Debido a que la rejilla es infinita en el plano $x-z$, el flujo de energía que sale y entra de ella está relacionado exclusivamente con la componente y del vector de Poynting. En el caso de polarización s de los campos, $\vec{E} = \hat{z}E$, y con $\mu = 1$, el vector de Poynting expresado en términos de los campos toma la forma

$$\vec{S} = \frac{c}{8\pi} (-EB_y^* \hat{x} + EB_x^* \hat{y}) \quad (\text{A.1})$$

A.1. Difracción de una onda monocromática por una rejilla estática

En el caso de polarización s de los campos, la componente y del vector de Poynting (A.1) es

$$S_y = \frac{c}{8\pi} EB_x^* \quad (\text{A.2})$$

La eficiencia de difracción reflejada $\eta_{(-)}$ (transmitida $\eta_{(+)}$) por la rejilla espacialmente periódica modelada por la función dieléctrica $\epsilon(x) = \epsilon_0 + \epsilon_1 \cos(Kx)$ (2.1) está definida como la razón entre la componente y del vector de Poynting reflejado (transmitido), promediado sobre un periodo $\frac{2\pi}{K}$ y sobre una longitud de onda de la rejilla $\Lambda = \frac{2\pi}{K}$ en la dirección x , y

la componente y del vector de Poynting incidente,

$$\eta_{\pm} = \left| \frac{\bar{S}_y(\pm)}{S_{yi}} \right| \quad . \quad (\text{A.3})$$

La expresión para la componente y del vector de Poynting incidente se obtiene sustituyendo en (A.2) las expresiones para el campo eléctrico incidente,

$$E_i = E_0 e^{i\frac{\omega}{c} \sin \theta x} e^{i\frac{\omega}{c} \cos \theta y} e^{-i\omega t} \quad (\text{A.4})$$

y la componente x del campo magnético correspondiente,

$$B_{xi} = \cos \theta E_0 e^{i\frac{\omega}{c} \sin \theta x} e^{i\frac{\omega}{c} \cos \theta y} e^{-i\omega t} \quad (\text{A.5})$$

Obtenemos,

$$S_{yi} = \frac{c}{8\pi} \cos \theta E_0^2 \quad . \quad (\text{A.6})$$

La expresión para la componente y del vector de Poynting reflejado $S_{y(-)}(x, y, t)$ se obtiene sustituyendo en (A.2) la expresión para el campo eléctrico reflejado,

$$E_{z(-)} = \sum_l R_l(\omega) e^{i(\frac{\omega}{c} \sin \theta + lK)x} e^{-i\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (\frac{\omega}{c} \sin \theta + lK)^2} y} e^{-i\omega t} \quad (\text{A.7})$$

y para la componente x del campo magnético correspondiente,

$$B_{z(-)} = - \sum_l R_l(\omega) \sqrt{1 - (\sin \theta + l\frac{c}{\omega} K)^2} e^{i(\frac{\omega}{c} \sin \theta + lK)x} e^{-i\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (\frac{\omega}{c} \sin \theta + lK)^2} y} e^{-i\omega t} \quad (\text{A.8})$$

Se obtiene

$$\begin{aligned} S_{y(-)}(x, y, t) = & -\frac{c}{8\pi} \sum_{l, l'} R_l(\omega) R_{l'}^*(\omega') \\ & \sqrt{1 - (\sin \theta + l'\frac{c}{\omega'} K)^2} e^{i(\frac{\omega - \omega'}{c}) \sin \theta + (l - l') \frac{2\pi}{\lambda} x} \\ & e^{-i(\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (\frac{\omega}{c} \sin \theta + lK)^2} - \sqrt{\frac{\omega'^2}{c^2} - (\frac{\omega'}{c} \sin \theta + l'K)^2}) y} e^{-i(\omega - \omega') t} \quad , \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

donde los índices l y l' se refieren a los órdenes de difracción propagantes en el exterior de la rejilla (2.1).

Promediando la componente y del vector de Poynting reflejado (A.9) sobre un periodo $\frac{2\pi}{\omega}$, obtenemos la expresión

$$\begin{aligned} \bar{S}_{y(-)}(x, y) = & -\frac{c}{8\pi} \sum_{l, l'} R_l(\omega) R_{l'}^*(\omega) \sqrt{1 - (\sin \theta + l'\frac{c}{\omega'} K)^2} \\ & e^{i(l - l') \frac{2\pi}{\lambda} x} e^{-i(\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (\frac{\omega}{c} \sin \theta + lK)^2} - \sqrt{\frac{\omega'^2}{c^2} - (\frac{\omega'}{c} \sin \theta + l'K)^2}) y} \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Promediando ahora sobre una longitud de onda de la rejilla $\Lambda = \frac{2\pi}{K}$, debido a que la función dieléctrica es periódica en esa dirección, i.e. $\epsilon(x + \Lambda) = \epsilon(x)$, obtenemos

$$\bar{S}_y(-) = -\frac{c}{8\pi} \sum_l R_l(\omega) R_l^*(\omega) \sqrt{1 - (\sin \theta + l \frac{c}{\omega} K)^2} \quad . \quad (\text{A.11})$$

La eficiencia de difracción reflejada $\eta_{(-)}$ se obtiene dividiendo la expresión (A.11) entre la expresión (A.6) de acuerdo a la fórmula (A.3):

$$\eta_{(-)}(\omega) = \frac{1}{E_0^2 \cos \theta} \sum_l R_l(\omega) R_l^*(\omega) \sqrt{1 - (\sin \theta + l \frac{c}{\omega} K)^2} \quad . \quad (\text{A.12})$$

La deducción de la eficiencia de difracción transmitida $\eta_{(+)}$, se obtiene de manera análoga usando ahora los campos transmitidos. Obtenemos:

$$\eta_{(+)}(\omega) = \frac{1}{E_0^2 \cos \theta} \sum_l T_l(\omega) T_l^*(\omega) \sqrt{1 - (\sin \theta + l \frac{c}{\omega} K)^2} \quad . \quad (\text{A.13})$$

Vemos claramente de las expresiones (A.12) y (A.13) que la eficiencia de difracción correspondiente a cada orden de difracción l propagante puede ser calculada por separado, dando lugar a las expresiones (2.38) y (2.39) que obedecen las relaciones $\eta_{(-)} = \sum_l \eta_{l(-)}$ y $\eta_{(+)} = \sum_l \eta_{l(+)}$, cuya suma es 1 (2.40), lo cual refleja el hecho de que la energía total de este sistema no-disipativo se conserva.

Las expresiones (A.12) y (A.13) fueron deducidas para el caso de polarización s de los campos. Para el caso de polarización p el vector de Poynting es ahora

$$\vec{S}_y^p = \frac{c}{8\pi} E_x B^* \hat{y} \quad , \quad (\text{A.14})$$

y, por lo tanto, necesitamos las expresiones para el campo magnético y las componentes x de los campos eléctricos. El resto sigue de manera análoga al caso de polarización s .

A.2. Difracción de un pulso por una rejilla espacio-temporal

En el caso de difracción de un pulso por una rejilla espacio-temporal, se calcula la eficiencia de difracción reflejada y transmitida como función del tiempo de retraso T del pulso. La eficiencia de difracción transmitida η_+^{pul} (reflejada η_-^{pul}) está definida como la razón entre la

componente y del vector de Poynting transmitido (reflejado), integrado sobre un tiempo t infinito en comparación de la duración del pulso y promediado sobre una longitud de onda Λ de la rejilla, y la componente y del vector de Poynting incidente también integrado sobre $-\infty < t < +\infty$.

En el caso de polarización s , la componente y del vector de Poynting está dada en (A.2). La expresión para la componente y del vector de Poynting incidente se obtiene sustituyendo en (A.1) la expresión para el campo eléctrico

$$\vec{E}_i(x, y, t) = \hat{z} \frac{E_0}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\omega(t - \frac{\sin\theta}{c}x - \frac{\cos\theta}{c}y)} e^{-\frac{(t - \frac{\sin\theta}{c}x - \frac{\cos\theta}{c}y)^2}{2\tau^2}} \quad (\text{A.15})$$

y la componente x del campo magnético correspondiente

$$B_{ix}(x, y, t) = \frac{E_0}{\sqrt{2\pi}} \cos\theta e^{-i\omega(t - \frac{\sin\theta}{c}x - \frac{\cos\theta}{c}y)} e^{-\frac{(t - \frac{\sin\theta}{c}x - \frac{\cos\theta}{c}y)^2}{2\tau^2}} \quad (\text{A.16})$$

Obtenemos,

$$S_{iy}^{pul}(x, y, t) = \frac{cE_0^2}{16\pi^2} \cos\theta e^{-\frac{(t - \frac{\sin\theta}{c}x - \frac{\cos\theta}{c}y)^2}{\tau^2}} \quad (\text{A.17})$$

Al integrar la expresión (A.17) sobre un tiempo largo en comparación de la duración τ del pulso, $-\infty < t < +\infty$, la componente y del vector de Poynting incidente toma la forma

$$\bar{S}_{iy}^{pul} = \frac{cE_0^2 \cos\theta \tau}{16\pi^2} \quad (\text{A.18})$$

La expresión para la componente y del vector de Poynting reflejado $S_{(-)y}^{pul}(x, y, t)$ se obtiene sustituyendo en (A.2) la expresión para el campo eléctrico reflejado,

$$\vec{E}_{(-)}(x, y, t) = \hat{z} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sum_l R_l(\omega) e^{i(\frac{\omega}{c} \sin\theta + lK)x} e^{-i\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (\frac{\omega}{c} \sin\theta + lK)^2} y} e^{-i\omega t} \quad (\text{A.19})$$

y la expresión para la componente x del campo magnético reflejado,

$$B_{x(-)}(x, y, t) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sum_l R_l(\omega) \sqrt{1 - (\sin\theta + l\frac{\omega}{c}K)^2} e^{i(\frac{\omega}{c} \sin\theta + lK)x} e^{-i\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (\frac{\omega}{c} \sin\theta + lK)^2} y} e^{-i\omega t} \quad (\text{A.20})$$

Se obtiene

$$S_{(-)y}^{pul}(x, y, t) = \left(\frac{c}{8\pi}\right) \left(\frac{1}{2\pi}\right) \left(\frac{-1}{2\pi}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sum_l R_l(\omega) e^{i(\frac{\omega}{c} \sin\theta + lK)x} e^{-i\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (\frac{\omega}{c} \sin\theta + lK)^2} y} e^{-i\omega t} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \sum_{l'} R_{l'}(\omega') \sqrt{1 - (\sin\theta + l'\frac{\omega'}{c}K)^2} e^{-i(\frac{\omega'}{c} \sin\theta + l'K)x} e^{i\sqrt{\frac{\omega'^2}{c^2} - (\frac{\omega'}{c} \sin\theta + l'K)^2} y} e^{i\omega't} \quad (\text{A.21})$$

Integrando sobre $-\infty < t < +\infty$, obtenemos

$$\bar{S}_{(-)y}^{pul}(x, y) = \frac{-c}{16\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sum_{l,l'} R_l(\omega) R_{l'}^*(\omega) \sqrt{1 - (\sin\theta + l' \frac{c}{\omega} K)^2} e^{i(l-l')Kx} e^{-i(\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - (\frac{\omega}{c} \sin\theta + lK)^2} - \sqrt{\frac{\omega'^2}{c^2} - (\frac{\omega}{c} \sin\theta + l'K)^2})y} \quad (\text{A.22})$$

Promediando $\bar{S}_{(-)y}^{pul}(x, y)$ sobre un periodo Λ , llegamos a la expresión deseada,

$$\bar{S}_{(-)y}^{pul} = \frac{-c}{16\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sum_l R_l(\omega) R_l^*(\omega) \sqrt{1 - (\sin\theta + l \frac{c}{\omega} K)^2} \quad (\text{A.23})$$

La expresión para la componente y del vector de Poynting transmitido integrado sobre el tiempo $-\infty < t < +\infty$ y promediado sobre una longitud de onda Λ de la rejilla, $\bar{S}_{(+)y}^{pul}$, se obtiene de manera perfectamente análoga partiendo de las expresiones para el campo eléctrico transmitido (3.8) y la componente x del campo magnético transmitido (3.10):

$$\bar{S}_{(-)y}^{pul} = \frac{c}{16\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \sum_l T_l(\omega) T_l^*(\omega) \sqrt{1 - (\sin\theta + l \frac{c}{\omega} K)^2} \quad (\text{A.24})$$

Las expresiones para la eficiencia de difracción reflejada (3.11) y transmitida (3.12) en el caso cuando un pulso Gaussiano de polarización s se difracta por una rejilla espacio-temporal en su estado de evolución temporal correspondiente al instante T , son obtenidos al dividir las expresiones (A.23) y (A.24), respectivamente, entre la expresión (A.18).

Apéndice B

El sistema de $4n$ ecuaciones con $4n$ incógnitas $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ escrito explícitamente.

B.1. Polarización s

En el caso de polarización s , el sistema de ecuaciones simultáneas a resolver (2.32)-(2.35) con el fin de encontrar las amplitudes de reflexión R_i y de transmisión T_i requeridos para calcular la eficiencia de difracción se escriben en forma de una ecuación matricial $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ donde la matriz \mathbf{A} de dimensión $4n$ es cuadrática. Para poder visualizar de manera explícita la matriz \mathbf{A} , escribimos las $2n$ primeras columnas, $\mathbf{A}_{(1n)(2n)}$, y las $2n$ últimas columnas, $\mathbf{A}_{(3n)(4n)}$, por separado. Las $2n$ primeras columnas de \mathbf{A} son

$$\mathbf{A}_{(1n)(2n)} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{21} & x_{12} & x_{22} & \dots & x_{1n} & x_{2n} \\ x_{21} & x_{21} & x_{22} & x_{22} & \dots & x_{2n} & x_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n1} & x_{n2} & x_{n2} & \dots & x_{nn} & x_{nn} \\ x_{11}e^{ida_1} & x_{11}e^{-ida_1} & x_{12}e^{ida_2} & x_{12}e^{-ida_2} & \dots & x_{1n}e^{idna} & x_{1n}e^{-idna} \\ x_{21}e^{ida_1} & x_{21}e^{-ida_1} & x_{22}e^{ida_2} & x_{22}e^{-ida_2} & \dots & x_{2n}e^{idna} & x_{2n}e^{-idna} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{n1}e^{ida_1} & x_{n1}e^{-ida_1} & x_{n2}e^{ida_2} & x_{n2}e^{-ida_2} & \dots & x_{nn}e^{idna} & x_{nn}e^{-idna} \\ x_{11}K_1 & -x_{11}K_1 & x_{12}K_2 & -x_{12}K_2 & \dots & x_{1n}K_n & -x_{1n}K_n \\ x_{21}K_1 & -x_{21}K_1 & x_{22}K_2 & -x_{22}K_2 & \dots & x_{2n}K_n & -x_{2n}K_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{n1}K_1 & -x_{n1}K_1 & x_{n2}K_2 & -x_{n2}K_2 & \dots & x_{nn}K_n & -x_{nn}K_n \\ x_{11}K_1e^{ida_1} & -x_{11}K_1e^{-ida_1} & x_{12}K_2e^{ida_2} & -x_{12}K_2e^{-ida_2} & \dots & x_{1n}K_ne^{idna} & -x_{1n}K_ne^{-idna} \\ x_{21}K_1e^{ida_1} & -x_{21}K_1e^{-ida_1} & x_{22}K_2e^{ida_2} & -x_{22}K_2e^{-ida_2} & \dots & x_{2n}K_ne^{idna} & -x_{2n}K_ne^{-idna} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{n1}K_1e^{ida_1} & -x_{n1}K_1e^{-ida_1} & x_{n2}K_2e^{ida_2} & -x_{n2}K_2e^{-ida_2} & \dots & x_{nn}K_ne^{idna} & -x_{nn}K_ne^{-idna} \end{bmatrix} \quad (\text{B.1})$$

Apéndice C

Deducción de la relación de dispersión en el límite $\epsilon_1 \rightarrow 0$.

C.1. Polarización s

La relación de dispersión válida en el límite $\epsilon_1 \rightarrow 0$, se obtiene tratando por separado cada modo guiado escapatorio en la rejilla (2.1) como si estuviera viajando en una guía de ondas convencional. En el caso de polarización s , el campo eléctrico está dirigido a lo largo del eje z , y en las tres regiones del espacio toma la forma:

$$E_{1z}(x, y, z) = \sum_l R_l e^{i(k_x + lK)x} e^{ik_l^y y} e^{-i\omega t} \quad , \quad y < 0 \quad , \quad (C.1)$$

$$E_{2z}(x, y, z) = \sum_l e^{i(k_x + lK)x} (C_{1l} e^{i\kappa_l^y y} + C_{2l} e^{-i\kappa_l^y y}) e^{-i\omega t} \quad , \quad 0 < y < d \quad , \quad (C.2)$$

$$E_{3z}(x, y, z) = \sum_l T_l e^{i(k_x + lK)x} e^{-ik_l^y y} e^{-i\omega t} \quad , \quad y > d \quad . \quad (C.3)$$

Las expresiones para la componente x del campo magnético en las mismas tres regiones son:

$$B_{1x}(x, y, z) = -i \frac{c}{\omega} \sum_l R_l k_l^y e^{i(k_x + lK)x} e^{ik_l^y y} e^{-i\omega t} \quad , \quad y < 0 \quad , \quad (C.4)$$

$$B_{2x}(x, y, z) = i \frac{c}{\omega} \sum_l \kappa_l^y e^{i(k_x + lK)x} (C_{1l} e^{i\kappa_l^y y} - C_{2l} e^{-i\kappa_l^y y}) e^{ik_l^y y} e^{-i\omega t} \quad , \quad 0 < y < d \quad , \quad (C.5)$$

$$B_{3x}(x, y, z) = i \frac{c}{\omega} \sum_l T_l k_l^y e^{i(k_x + lK)x} e^{-ik_l^y y} e^{-i\omega t} \quad , \quad y > d \quad . \quad (C.6)$$

En las expresiones (C.1) - (C.6), k_l^y está dado en (2.69)

$$k_l^y = \sqrt{(k_x + lK)^2 - \frac{\omega^2}{c^2}} \quad , \quad (\text{C.7})$$

y κ_l^y en (2.18),

$$\kappa_l^y = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_0 - (k_x + lK)^2} \quad . \quad (\text{C.8})$$

Aplicando las condiciones a la frontera (2.28) - (2.31) a los campos (C.1) - (C.6), se obtiene un sistema homogéneo de cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas, que se puede escribir en forma de una ecuación matricial $\mathbf{A}_{4 \times 4} \vec{x} = \vec{0}$, con la matriz $\mathbf{A}_{4 \times 4}$ dado por

$$\mathbf{A}_{4 \times 4} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & e^{-k_l^y d} & -e^{i\kappa_l^y d} & -e^{-i\kappa_l^y d} \\ -ik_l^y & 0 & -\kappa_l^y & \kappa_l^y \\ 0 & i\kappa_l^y e^{-k_l^y d} & -\kappa_l^y e^{i\kappa_l^y d} & \kappa_l^y e^{-i\kappa_l^y d} \end{bmatrix} \quad (\text{C.9})$$

y el vector $\vec{x} = \langle R_l, B_l, C_{1l}, C_{2l} \rangle$. El sistema de ecuaciones tiene solución sólo cuando $\det(\mathbf{A}_{4 \times 4}) = 0$,

$$\kappa_l^y \kappa_l^y \tan^2\left(\frac{1}{2} \kappa_l^y d\right) + (\kappa_l^{y2} - k_l^{y2}) \tan\left(\frac{1}{2} \kappa_l^y d\right) - k_l^y \kappa_l^y = 0 \quad . \quad (\text{C.10})$$

Vemos que la ecuación (C.10) tiene una forma cuadrática, donde $x = \tan\left(\frac{1}{2} \kappa_l^y d\right)$, $A = \kappa_l^y \kappa_l^y$, $B = (\kappa_l^{y2} - k_l^{y2})$ y $C = -k_l^y \kappa_l^y$, y como

$$Ax^2 + Bx + C = 0 \Rightarrow x = \frac{1}{2A} (-B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}) \quad , \quad (\text{C.11})$$

obtenemos las soluciones (2.74) para la relación de dispersión $\omega = \omega(k_x)$ válida en el límite $\epsilon_1 \rightarrow 0$ en el caso de polarización s.

Si tomamos la solución de (2.74) para un entero l impar, $\tan\left(\frac{1}{2} \kappa_l^y d\right) = -\frac{\kappa_l^y}{|k_{ly}^y|}$, es fácil demostrar que es la misma expresión que habitualmente figura en la literatura,

$$\tan(k_l^y d) = \frac{2\kappa_l^y |k_{ly}^y|}{\kappa_l^{y2} - |k_{ly}^y|^2} \quad . \quad (\text{C.12})$$

Véamos. Si escribimos $\theta = k_l^y d$, entonces la parte impar de la relación (2.74) se puede escribir

$$\tan \frac{1}{2} \theta = -\frac{\kappa_l^y}{|k_{ly}^y|} \quad , \quad (\text{C.13})$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

que es lo mismo que

$$\frac{\sin \frac{1}{2}\theta}{\cos \frac{1}{2}\theta} = -\frac{\kappa_t}{|k_{ly}|} \quad , \quad (\text{C.14})$$

donde

$$\sin \frac{1}{2}\theta = -\frac{\kappa_t}{\kappa_t^2 + |k_{ly}|^2} \quad , \quad (\text{C.15})$$

y

$$\cos \frac{1}{2}\theta = \frac{|k_{ly}|}{\kappa_t^2 + |k_{ly}|^2} \quad . \quad (\text{C.16})$$

Usando ahora,

$$\sin \theta = 2 \sin \frac{1}{2}\theta \cos \frac{1}{2}\theta, \quad (\text{C.17})$$

$$\cos \theta = \cos^2 \frac{1}{2}\theta - \sin^2 \frac{1}{2}\theta \quad , \quad (\text{C.18})$$

y sustituyendo las expresiones (C.15) y (C.16) en las relaciones (C.17) y (C.18), obtenemos la expresión

$$\tan(k_t' d) = \frac{2\kappa_t |k_{ly}'|}{\kappa_t^2 - |k_{ly}'|^2} \quad . \quad (\text{C.19})$$

C.2. Polarización p

La deducción de la relación de dispersión $\omega = \omega(k_x)$ válida en el límite $\epsilon_1 \rightarrow 0$ en el caso de polarización p , (2.75), es completamente análoga. Las expresiones para el campo magnético, dirigido a lo largo del eje z para esta polarización, toman las siguientes formas en las tres regiones del espacio:

$$B_{1z}(x, y, z) = \sum_l R_l e^{i(k_x + lK)x} e^{ik_{ly}'y} e^{-i\omega t} \quad , \quad y < 0 \quad , \quad (\text{C.20})$$

$$B_{2z}(x, y, z) = \sum_l e^{i(k_x + lK)x} (C_{1l} e^{i\kappa_l' y} + C_{2l} e^{-i\kappa_l' y}) e^{-i\omega t} \quad , \quad 0 < y < d \quad , \quad (\text{C.21})$$

$$B_{3z}(x, y, z) = \sum_l T_l e^{i(k_x + lK)x} e^{-ik_{ly}'y} e^{-i\omega t} \quad , \quad y > d \quad . \quad (\text{C.22})$$

Las expresiones para la componente x del campo magnético en las mismas regiones, son las siguientes:

$$E_{1x}(x, y, z) = i \frac{c}{\omega} \sum_l R_l k_l' e^{i(k_x + lK)x} e^{ik_{ly}'y} e^{-i\omega t} \quad , \quad y < 0 \quad , \quad (\text{C.23})$$

$$B_{2x}(x, y, z) = -\frac{c}{\epsilon_0 \omega} \sum_l \kappa_l^y e^{i(k_x + lK)x} (C_{1l} e^{i\kappa_l^y y} - C_{2l} e^{-i\kappa_l^y y}) e^{i\kappa_l^y z} e^{-i\omega t}, \quad 0 < y < d, \quad (C.24)$$

$$B_{3z}(x, y, z) = -i\frac{c}{\omega} \sum_l T_l \kappa_l^y e^{i(k_x + lK)x} e^{-i\kappa_l^y y} e^{-i\omega t}, \quad y > d. \quad (C.25)$$

La expresión para k_l^y está dada en (C.7) y la expresión para κ_l^y en (C.8).

Las condiciones a la frontera (2.61) - (2.64) son aplicadas a los campos (C.20) - (C.25), y la matriz de dimensión 4×4 , cuyo determinante tiene que ser igual a cero para que haya solución, está dada por la expresión

$$\mathbf{A}_{4 \times 4}^{\mathbf{P}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & e^{-\kappa_l^y d} & -e^{i\kappa_l^y d} & -e^{-i\kappa_l^y d} \\ -i\epsilon_0 \kappa_l^y & 0 & -\kappa_l^y & \kappa_l^y \\ 0 & i\epsilon_0 \kappa_l^y e^{-\kappa_l^y d} & -\kappa_l^y e^{i\kappa_l^y d} & \kappa_l^y e^{-i\kappa_l^y d} \end{bmatrix}. \quad (C.26)$$

Como consecuencia de que el determinante de la matriz $\mathbf{A}_{4 \times 4}^{\mathbf{P}}$ tiene que ser igual a cero, obtenemos la ecuación cuadrática

$$\epsilon_0 \kappa_l^y \kappa_l^y \tan^2\left(\frac{1}{2} \kappa_l^y d\right) + (\kappa_l^y)^2 - (\epsilon_0 \kappa_l^y)^2 \tan\left(\frac{1}{2} \kappa_l^y d\right) - \epsilon_0 \kappa_l^y \kappa_l^y = 0. \quad (C.27)$$

Vemos que las soluciones en el caso *TM* son las dadas por (2.75), debido a que, si se realiza la sustitución $\kappa_l^y \rightarrow \epsilon_0 \kappa_l^y$ en la ecuación cuadrática (C.10) válida en el caso *TE*, obtenemos la ecuación cuadrática (C.27) válida en el caso *TM*.

Apéndice D

Cálculo numérico de la la eficiencia de difracción

En este apéndice mostramos el programa de Fortran 90 que calcula la eficiencia de difracción como función de la frecuencia ω de una onda monocromática de polarización p difractada por una rejilla espacialmente periódica.

PROGRAM freffp

** Version 16 de enero 2001**

Programa de Fortran 90 que calcula la eficiencia de difracción transmitida η_{l+} (2.39) para cada uno de los órdenes $l = -2, -1, 0, 1, 2$ por separado, la eficiencia de difracción reflejada $\eta_- = \sum_l \eta_{l-}$, transmitida $\eta_+ = \sum_l \eta_{l+}$ y la eficiencia de difracción total $\eta_- + \eta_+ = 1$ (como verificación de que no ha habido ningún error) como función de la frecuencia ω de una onda monocromática de polarización p que incide con ángulo θ sobre la rejilla (2.1) de anchura d . El programa aplica para un número par de de ecuaciones diferenciales (ned) (2.44).

PARAMETER ned=12

ned = número de ecuaciones diferenciales acopladas (2.44). El programa freffp aplica para un número ned par

IMPLICIT INTEGER (m,n,i,l)

IMPLICIT DOUBLE PRECISION (d,w,f,z)

IMPLICIT COMPLEX*16 (a,b,c)

DIMENSION IPIV(4*ned)

DIMENSION fv1(ned),fv2(ned),fv3(ned),wr(ned),wi(ned),dgm(ned)

DIMENSION dar(ned,ned),dai(ned,ned),zr(ned,ned),zi(ned,ned)

```

DIMENSION drlam(ned),dtemp(ned),drlam1(ned),drlam2(ned)
DIMENSION clam(ned),cgm(ned),cx(ned,ned),ca(4*ned,4*ned)
DIMENSION A(4*ned,4*ned),cb(4*ned,1),B(4*ned,1),dvd0(ned)
DIMENSION dvp(ned,ned)

```

```

ci=DCMPLX(0.0d0,1.0d0)
cc=DCMPLX(1.0d0,0.0d0)

```

```

OPEN(UNIT=10,file='WPdeftra2',status='REPLACE')
OPEN(UNIT=11,file='WPdeftra1',status='REPLACE')
OPEN(UNIT=12,file='WPdeftra0',status='REPLACE')
OPEN(UNIT=13,file='WPdeftraN1',status='REPLACE')
OPEN(UNIT=14,file='WPdeftraN2',status='REPLACE')
OPEN(UNIT=15,file='WPdeftotal',status='REPLACE')
OPEN(UNIT=16,file='WPdefref',status='REPLACE')
OPEN(UNIT=17,file='WPdeftra',status='REPLACE')

```

```

READ(*,*)deps0
READ(*,*)deps1
READ(*,*)dgretheta
READ(*,*)dd
READ(*,*)dwmin
READ(*,*)dwmax
READ(*,*)dwstep

```

Valores a entrar: eps0 = la constante dieléctrica del fondo, eps1 = la modulación, dgretheta = el ángulo en grados con que incide la onda monocromática de polarización p. Los siguientes parámetros estan reescalados en el vector de onda de la rejilla K: dd = la anhuira de la rejilla espacialmente periódica, (dwmin,dwmax) = el intervalo en frecuencia que se desea visualizar, dwstep = la precisión.

```

dpi=DACOS(-1.0d0)
dtheta=(dgretheta*dpi)/180.0d0
dsen=DSIN(dtheta)
dcose=DCOS(dtheta)

```

```

DO 70 dw=dwmin,dwmax,dwstep

```

```

CALL RESET2(ned,cgm,wr,wi,fv1,fv2,fv3,clam,dar,dai,zr,zi,cx)

```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

La subrutina *RESET2* da inicio a cero los arreglos $wr(ned)$, $wi(ned)$, $fv1(ned)$, $fv2(ned)$, $fv3(ned)$, $clam(ned)$, $dar(ned,ned)$, $zr(ned,ned)$, $zi(ned,ned)$, $cx(ned,ned)$

CALL ALFAPE(dar,ned,dw,deps0,deps1,dsen)

La subrutina *ALFAPE* llama las subrutinas *MATRAI* y *MATRB*. La subrutina *MATRAI* calcula la matriz inversa de la matriz M_A (2.50) truncada a la dimensión $ned \times ned$, empleando dos subrutinas de librería *ZGECO* y *ZGEDI*. La subrutina *MATRB* contiene la matriz M_B (2.51) truncada a la dimensión $ned \times ned$. La subrutina *ALFAPE* multiplica la matriz inversa de M_A , M_A^{-1} , con la matriz M_B , con el motivo de obtener la matriz M^P a diagonalizar. Los elementos de la matriz M^P son todos reales, y son contenidos por el arreglo bidimensional $dar(ned,ned)$ de salida de la subrutina *ALFAPE*.

CALL cg(ned,ned,dar,dai,wr,wi,1,zr,zi,fv1,fv2,fv3,ierr)

La subrutina de librería *cg* diagonaliza una matriz compleja. De entrada: las dimensiones de la matriz (cuadrática en este caso) es $ned \times ned$, los elementos de la matriz separados en su parte real ($dar(ned,ned)$) y su parte imaginario ($dai(ned,ned)$). El valor entero 1 quiere decir que queremos los eigenvalores y los eigenvectores. De salida: los eigenvalores separados en su parte real ($wr(ned)$) y su parte imaginario ($wi(ned)$), y los eigenvectores separados en su parte real ($zr(ned,ned)$) y su parte imaginario ($zi(ned,ned)$). Los eigenvectores no salen normalizados. $ierr=0$ si todo salio bien. $fv1(ned)$, $fv2(ned)$ y $fv3(ned)$ son arreglos temporales que no nos incumbe.

CALL NORMAL(ned,ned,zr,zi)

La subrutina *NORMAL* normaliza los eigenvectores $zr(ned,ned)$ (parte real) y $zi(ned,ned)$ (parte imaginario) calculados por la subrutina *cg* y escribe los eigenvectores normalizados en los mismos arreglos.

CALL COMUNO(ned,ned,wr,wi,zr,zi,cx,clam)

La subrutina *COMUNO* una los arreglos que contienen las partes reales y imaginarios de los eigenvalores ($wr(ned)$, $wi(ned)$) y de los eigenvectores normalizados ($zr(ned,ned)$, $zi(ned,ned)$) en los arreglos complejos $clam(ned)$ y $cx(ned,ned)$, respectivamente.

CALL GAMASE(ned,cgm,ci,cc,dw,dsen)

La subrutina *GAMASE* se encarga de ordenar en un arreglo complejo $cgm(ned)$, las componentes y de los ned vectores de onda k_{1y} dividido entre $\frac{\pi}{c}$ de los órdenes l de difracción

propagantes y evanescentes en el exterior de la placa dieléctrica espacialmente modulada (2.1) involucrados en el análisis.

CALL RAIZ(ned,clam,ci,cc)

La subrutina RAIZ toma la raíz cuadrada de los eigenvalores presentados en el arreglo complejo clam(ned) cuyo parte imaginario es cero. La raíz cuadrada del arreglo clam(ned) contiene los vectores de onda $\kappa_p = \kappa_p(K = 1, \omega, \sin \theta)$ de los modos propagantes (κ_p real) y evanescentes (κ_p imaginario) en el interior de la rejilla (2.1).

CALL RESET3m(ned,ca,cb)

*La subrutina RESET 3m inicia a cero los arreglos complejos ca(4*ned,4*ned) y cb(4*ned,1).*

CALL MATRIXP(ned,cx,clam,cgm,dd,dw,dcose,ci,cc,ca,cb,deps0,deps1)

*La subrutina MATRIXP da los valores a los elementos de la matriz M^P , constituido por (B.2) y (??) truncada a la dimensión $4 * ned \times 4 * ned$, y al vector \bar{b}^P (B.8) que contiene las fuentes, que a la salida son contenidos en los arreglos complejos ca(4*ned,4*ned) y cb(4*ned,1), respectivamente.*

CALL ZGESV(4*ned,1,ca,4*ned,IPIV,cb,4*ned,INFO)

*La subrutina de librería ZGESV resuelve un sistema complejo de ecuaciones lineales $Ax = B$. De entrada: ca(4*ned,4*ned) que contiene los elementos de la matriz compleja A que para nuestros intereses es una matriz cuadrática de dimensión $4 * ned \times 4 * ned$, cb(4*ned,1) es de entrada el vector de las fuentes $B = \bar{b}$, el integer 1 se refiere a que x y B son vectores. De salida, cb(4*ned,1) contiene las soluciones $x = \bar{x}$, que para nuestro empleo de la subrutina, son los $2 * ned$ constantes de integración, los ned amplitudes de reflexión R_i y los ned amplitudes de transmisión T_i en el mismo orden como aquí han sido mencionados empezando con el orden $l = \frac{ned}{2} - 1$. IPIV(4*ned) no nos interesa. INFO=0 quiere decir que todo salio bien.*

CALL DIFTRA(dd,ned,cgm,dcose,cb,dfr2,dfr1,dfr0,dfrN1,
1 dfrN2,deftot,dfrf,dfr)

*La subrutina DIFTRA calcula, empleando los valores de los amplitudes de reflexión R_i^P y de los amplitudes de transmisión T_i^P contenidos en la última mitad del arreglo cb(4*ned,1), la eficiencia de difracción transmitida η_{t+} (2.39) correspondiente a cada una de los órdenes*

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

de difracción $l = 2, 1, 0, -1, -2$ por separado, la eficiencia de difracción reflejada total $\eta_- = \sum_l \eta_{l-}$ con η_{l-} dado en (2.38), la eficiencia de difracción transmitida total $\eta_+ = \sum_l \eta_{l+}$ y la suma de η_- y η_+ para verificar que se cumple la condición de conservación de energía (2.40) como medida de seguridad.

```

WRITE(10,*)dw,dftr2
WRITE(11,*)dw,dftr1
WRITE(12,*)dw,dftr0
WRITE(13,*)dw,dftrN1
WRITE(14,*)dw,dftrN2
WRITE(15,*)dw,deftot
WRITE(16,*)dw,dftrf
WRITE(17,*)dw,dftr

70 ENDDO

CLOSE(UNIT=10)
CLOSE(UNIT=11)
CLOSE(UNIT=12)
CLOSE(UNIT=13)
CLOSE(UNIT=14)
CLOSE(UNIT=15)
CLOSE(UNIT=16)
CLOSE(UNIT=17)

END

TERMINA PROGRAMA PRINCIPAL

SUBROUTINE MATRAI(deps0,deps1,ned,cmatai)

IMPLICIT INTEGER (i)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (d)
IMPLICIT COMPLEX*16 (c)

DIMENSION cmatai(ned,ned)
DIMENSION cz(ned),cwork(ned),cdet(2),ipvt(ned)

```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

```
depsraz=0.5d0*(deps1/deps0)
cc0=DCMPLX(0.0d0,0.0d0)
cc1=DCMPLX(1.0d0,0.0d0)
```

```
DO i1=1,ned
  DO i2=1,ned
    cmatai(i1,i2)=cc0
  ENDDO
ENDDO
```

```
DO i1=1,ned
  cmatai(i1,i1)=cc1
ENDDO
```

```
DO i1=1,ned-1
  cmatai(i1,i1+1)=cc1*depsraz
  cmatai(i1+1,ned)=cc1*depsraz
ENDDO
```

```
DO i1=1,ned-1
  cmatai(i1,i1+1)=cc1*depsraz
  cmatai(i1+1,ned)=cc1*depsraz
ENDDO
```

```
DO i1=1,ned
  cz(i1)=cc0
  cwork(i1)=cc0
  ipvt(i1)=1
ENDDO
cdet(1)=cc0
cdet(2)=cc0
dcond=1.0d0
```

```
DO i1=1,ned
  DO i2=1,ned
    WRITE(50,*)i1,i2,cmatai
  ENDDO
ENDDO
```

```
CALL zgeco(cmatai,ned,ned,ipvt,dcond,cz)
```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

```
CALL zgedi(cmatat, ned, ned, ipvt, cdet, cwork, 01)
```

```
RETURN
END
```

```
SUBROUTINE MATRB(deps0, deps1, dsen, dw, ned, cmatb)
```

```
IMPLICIT INTEGER (i)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (d)
IMPLICIT COMPLEX*16 (c)
```

```
ddiag(i1)=dw*dw*(deps0+deps1*0.5d0*(deps1/deps0))-
1 (dw*dsen+DBLE(i1))*(dw*dsen+DBLE(i1))
```

```
duppdi(i1)=dw*dw*deps1+
1 0.5d0*(deps1/deps0)*(dw*dsen+DBLE(i1-1))-
2 0.5d0*(deps1/deps0)*(dw*dsen+DBLE(i1-1))*(dw*dsen+DBLE(i1-1))
```

```
downndi(i1)=dw*dw*deps1-
1 0.5d0*(deps1/deps0)*(dw*dsen+DBLE(i1-1))-
2 0.5d0*(deps1/deps0)*(dw*dsen+DBLE(i1-1))*(dw*dsen+DBLE(i1-1))
```

```
DIMENSION cmatb(ned, ned)
```

```
depsraz=0.5d0*(deps1/deps0)
cc0=DCMPLX(0.0d0, 0.0d0)
cc1=DCMPLX(1.0d0, 0.0d0)
dcincd=0.5d0*depsraz*deps1
```

```
DO i1=1, ned
  DO i2=1, ned
    cmatb(i1, i2)=cc0
  ENDDO
ENDDO
```

```
DO i1=1, ned
  cmatb(i1, i1)=cc1*ddiag((ned/2)-i1)
ENDDO
```

```
DO i1=1, ned-1
```

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

120

```
      cmatb(i1,i1+1)=cc1*duppdi((ned/2)-i1)  
      cmatb(i1+1,i1)=cc1*downdi((ned/2)-i1)  
    ENDDO
```

```
    DO i1=1,ned-2  
      cmatb(i1,i1+2)=cc1*dcincd  
      cmatb(i1+2,i1)=cc1*dcincd  
    ENDDO
```

```
  RETURN  
  END
```

SUBROUTINE RESET3m(ned,ca,cb)

```
  IMPLICIT INTEGER (i,n)  
  IMPLICIT COMPLEX*16 (c)
```

```
  DIMENSION ca(4*ned,4*ned),cb(4*ned,1)
```

```
  DO i1=1,4*ned  
    cb(i1,1)=DCMPLX(0.0d0,0.0d0)  
    DO i2=1,4*ned  
      ca(i1,i2)=DCMPLX(0.0d0,0.0d0)  
    ENDDO  
  ENDDO
```

```
  RETURN  
  END
```

SUBROUTINE RAIZ(ned,clam,ci,cc)

```
  IMPLICIT INTEGER (i,n)  
  IMPLICIT COMPLEX*16 (c)
```

```
  DIMENSION clam(ned)
```

```
  DO i1=1,ned  
    IF (DREAL(clam(i1)) .LE. 0.0d0) THEN  
      clam(i1)= ci*DSQRT(-DREAL(clam(i1)))  
    ELSE
```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

```

      clam(i1)= cc*DSQRT(DREAL(clam(i1)))
    ENDIF
  ENDDO

  RETURN
  END

SUBROUTINE GAMASE(ned,cgm,ci,cc,dw,dsen)

  IMPLICIT INTEGER (i,n)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (d)
  IMPLICIT COMPLEX*16 (c)

  dgama(i3)=1.0d0-(dsen+i3*(1.0d0/dw))*(dsen+i3*(1.0d0/dw))

  DIMENSION cgm(ned)

  i2=0
  DO i1=(ned/2)-1,(-ned/2),-1
    i2=1+i2
    IF (dgama(i1) .LE. 0.0d0) THEN
      cgm(i2)=ci*DSQRT(-dgama(i1))
    ELSE
      cgm(i2)=cc*DSQRT(dgama(i1))
    ENDIF
  ENDDO

  RETURN
  END

SUBROUTINE ALFAPE(dar,ned,dw,deps0,deps1,dsen)

  IMPLICIT INTEGER (i,n)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (d)
  IMPLICIT COMPLEX*16 (c)

  DIMENSION dar(ned,ned),cmatai(ned,ned),cmatb(ned,ned)
  DIMENSION cmat(ned,ned)

  CALL MATRAI(deps0,deps1,ned,cmatai)

```

```
CALL MATRB(deps0,deps1,dsen,dw,ned,cmatb)
```

```
cmat=MATMUL(cmatai,cmatb)
```

```
dar=DREAL(cmat)
```

```
RETURN
```

```
END
```

```
SUBROUTINE RESET2(ned,cgm,wr,wi,fv1,fv2,fv3,clam,  
1 dar,dai,zr,zi,cx)
```

```
IMPLICIT INTEGER (i,n)
```

```
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (d,w,f,z)
```

```
IMPLICIT COMPLEX*16 (c)
```

```
DIMENSION cgm(ned),wr(ned),wi(ned),fv1(ned),fv2(ned)
```

```
DIMENSION fv3(ned),clam(ned),dar(ned,ned),dai(ned,ned)
```

```
DIMENSION zr(ned,ned),zi(ned,ned),cx(ned,ned)
```

```
DO i1=1,ned
```

```
  cgm(i1)=DCMPLX(0.0d0,0.0d0)
```

```
  wr(i1)=0.0d0
```

```
  wi(i1)=0.0d0
```

```
  fv1(i1)=0.0d0
```

```
  fv2(i1)=0.0d0
```

```
  fv3(i1)=0.0d0
```

```
  clam(i1)=DCMPLX(0.0d0,0.0d0)
```

```
  DO i2=1,ned
```

```
    dar(i1,i2)=0.0d0
```

```
    dai(i1,i2)=0.0d0
```

```
    zr(i1,i2)=0.0d0
```

```
    zi(i1,i2)=0.0d0
```

```
    cx(i1,i2)=DCMPLX(0.0d0,0.0d0)
```

```
  ENDDO
```

```
ENDDO
```

```
RETURN
```

```
END
```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

**SUBROUTINE DIFTRA(dd,ned,cgm,dcose,cb,dftr2,dftr1,dftr0,
1 dftrN1,dftrN2,deftot,dfrf,dftr)**

INTEGER j1,ned
COMPLEX*16 cb(4*ned,1),cgm(ned),cfac(ned)
DOUBLE PRECISION dcose, dtmp1,dtmp2,dtmp3,dtmp4,defref
DOUBLE PRECISION deftra,deftot,dftr2,dftr1,dftr0,dftrN1
DOUBLE PRECISION dftrN2,dfrf,dftr,drcfac(ned),dicfac(ned)

dtmp1=0.0d0
dtmp2=0.0d0
dtmp3=0.0d0
dtmp4=0.0d0
defref=0.0d0
deftra=0.0d0
deftot=0.0d0
DO j1=1,ned
 cfac(j1)=DCMPLX(0.0d0,0.0d0)
 drcfac(j1)=0.0d0
 dicfac(j1)=0.0d0
ENDDO
DO j1=1,ned
 cfac(j1)=cgm(j1)/dcose
 drcfac(j1)=DREAL(cfac(j1))
 dicfac(j1)=DIMAG(cfac(j1))
ENDDO
DO j1=1,ned
 IF (drcfac(j1) .GT. 0.0d0) THEN
 dtmp1=drcfac(j1)*cb(2*ned+j1,1)*CONJG(cb(2*ned+j1,1))
 dtmp3=drcfac(j1)*cb(3*ned+j1,1)*CONJG(cb(3*ned+j1,1))
 ELSE
 dtmp1=0.0d0
 dtmp3=0.0d0
 ENDIF
 dtmp2=dtmp2+dtmp1
 dtmp4=dtmp4+dtmp3
ENDDO
defref=dtmp2

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

```
deftra=dtmp4
deftot=defref+deftra
```

```
IF (drcfac((ned/2)-2) .GT. 0.0d0) THEN
  dfr2=drcfac(ned/2-2)*
1  cb(3*ned+ned/2-2,1)*CONJG(cb(3*ned+ned/2-2,1))
ELSE
  dfr2=0.0d0
ENDIF
IF (drcfac(ned/2-1) .GT. 0.0d0) THEN
  dfr1=drcfac(ned/2-1)*
1  cb(3*ned+ned/2-1,1)*CONJG(cb(3*ned+ned/2-1,1))
ELSE
  dfr1=0.0d0
ENDIF
IF (drcfac(ned/2) .GT. 0.0d0) THEN
  dfr0=drcfac(ned/2)*
1  cb(3*ned+ned/2,1)*CONJG(cb(3*ned+ned/2,1))
ELSE
  dfr0=0.0d0
ENDIF
IF (drcfac(ned/2+1) .GT. 0.0d0) THEN
  dfrN1=drcfac(ned/2+1)*
1  cb(3*ned+ned/2+1,1)*CONJG(cb(3*ned+ned/2+1,1))
ELSE
  dfrN1=0.0d0
ENDIF
IF (drcfac(ned/2+2) .GT. 0.0d0) THEN
  dfrN2=drcfac(ned/2+2)*
1  cb(3*ned+ned/2+2,1)*CONJG(cb(3*ned+ned/2+2,1))
ELSE
  dfrN2=0.0d0
ENDIF
dfrf=defref
dftr=deftra

RETURN
END
```

SUBROUTINE MATRXP(ned,cx,clam,cgm,dd,dw,dcose,ci,cc,ca,cb,

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

1 deps0,deps1)

DOUBLE PRECISION dd,dw,dcose,dgama(ned),deps1,deps0
INTEGER i1,i2,ned,i3
COMPLEX*16 cx(ned,ned),clam(ned),cgm(ned),ca(4*ned,4*ned)
COMPLEX*16 cb(4*ned,1),ci,cc

DO i1=1,ned
 DO i2=1,2*ned-1,2
 ca(i1,i2)=cx(i1,(i2+1)/2)
ENDDO
 DO i2=2,2*ned,2
 ca(i1,i2)=cx(i1,i2/2)
ENDDO
ENDDO

DO i1=ned+1,2*ned
 DO i2=1,2*ned-1,2
 ca(i1,i2)=cx(i1-ned,(i2+1)/2)*CDEXP(ci*dd*
1 clam((i2+1)/2))
 ENDDO
 DO i2=2,2*ned,2
 ca(i1,i2)=cx(i1-ned,i2/2)*CDEXP(-ci*dd*
1 clam(i2/2))
 ENDDO
ENDDO

DO i1=2*ned+1,3*ned
 DO i2=1,2*ned-1,2
 ca(i1,i2)=cx(i1-2*ned,(i2+1)/2)*clam(
1 (i2+1)/2)*(ci)
 ENDDO
 DO i2=2,2*ned,2
 ca(i1,i2)=cx(i1-2*ned,i2/2)*(-ci)*
1 clam(i2/2)
 ENDDO
ENDDO

DO i1=3*ned+1,4*ned
 DO i2=1,2*ned-1,2

```

      ca(i1,i2)=ci*clam((i2+1)/2)*
1      cx(i1-3*ned,(i2+1)/2)*
2      CDEXP(ci*dd*clam((i2+1)/2))
    ENDDO
  DO i2=2,2*ned,2
    ca(i1,i2)=(-ci)*clam(i2/2)*
1    cx(i1-3*ned,i2/2)*
2    CDEXP(-ci*dd*clam(i2/2))
  ENDDO
ENDDO

DO i1=1,ned
  ca(i1,2*ned+i1)=-1.0d0*cc
ENDDO
DO i1=ned+1,2*ned
  ca(i1,2*ned+i1)=-CDEXP(ci*dd*dw*cgm(i1-ned))
ENDDO

DO i1=2*ned+1,3*ned
  ca(i1,i1)=ci*dw*deps0*cgm(i1-2*ned)
ENDDO
DO i1=2*ned+2,3*ned
  ca(i1-1,i1)=ci*0.5d0*dw*deps1*cgm(i1-2*ned)
ENDDO
DO i1=2*ned+1,3*ned-1
  ca(i1+1,i1)=ci*0.5d0*dw*deps1*cgm(i1-2*ned)
ENDDO

DO i1=3*ned+1,4*ned
  ca(i1,i1)=-ci*dw*deps0*cgm(i1-3*ned)*
1  CDEXP(ci*dw*dd*cgm(i1-3*ned))
ENDDO
DO i1=3*ned+2,4*ned
  ca(i1-1,i1)=-ci*0.5d0*dw*deps1*cgm(i1-3*ned)*
1  CDEXP(ci*dw*dd*cgm(i1-3*ned))
ENDDO
DO i1=3*ned+1,4*ned-1
  ca(i1+1,i1)=-ci*0.5d0*dw*deps1*cgm(i1-3*ned)*
1  CDEXP(ci*dw*dd*cgm(i1-3*ned))
ENDDO

```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

```
cb((ned/2,1)=DCMPLX(1.0d0,0.0d0)
```

```
cb((ned/2)+2*ned,1)=DCMPLX(0.0d0,dw*d cose*deps0)
```

```
cb((ned/2)-1+2*ned,1)=ci*0.5d0*dw*deps1*d cose
```

```
cb((ned/2)+1+2*ned,1)=ci*0.5d0*dw*deps1*d cose
```

```
RETURN
```

```
END
```

```
SUBROUTINE NORMAL(nm,n,zr,zi)
```

```
DOUBLE PRECISION zr(nm,n),zi(nm,n),zlong(nm)
```

```
DOUBLE PRECISION dtemp1,dtemp2
```

```
INTEGER nm,n,j1,j2
```

```
DO j1=1,n
```

```
  dtemp1=0.0d0
```

```
  dtemp2=0.0d0
```

```
  DO j2=1,nm
```

```
    dtemp1=zr(j2,j1)*zr(j2,j1)+zi(j2,j1)*zi(j2,j1)
```

```
    dtemp2=dtemp2+dtemp1
```

```
  ENDDO
```

```
  zlong(j1)=DSQRT(dtemp2)
```

```
  DO j2=1,nm
```

```
    zr(j2,j1)=zr(j2,j1)/zlong(j1)
```

```
    zi(j2,j1)=zi(j2,j1)/zlong(j1)
```

```
  ENDDO
```

```
ENDDO
```

```
RETURN
```

```
END
```

```
SUBROUTINE COMUNO(nm,n,wr,wi,zr,zi,cx,clam)
```

```
DOUBLE PRECISION zr(nm,n),zi(nm,n),wr(n),wi(n)
```

```
INTEGER nm,n,j1,j2
```

```
COMPLEX*16 cx(nm,n),clam(n)
```

```
DO j2=1,n
```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

```

DO j1=1,nm
  cx(j1,j2)=DCMPLX(zr(j1,j2),zi(j1,j2))
ENDDO
clam(j2)=DCMPLX(wr(j2),wi(j2))
ENDDO

RETURN
END

```

D.1. como función de tiempo de retraso de un pulso Gaussiano de polarización s difractado por una rejilla espacio-temporal no-lineal.

PROGRAM primero

* 20.06.02
 Sara Nilsen-Hofseth
 CASO no-lineal incidencia 1.er Bragg

El programa PRIMERO calcula la eficiencia de difracción transmitida como función del tiempo de retraso T , $\eta_+(T)$ (3.12), que resulta cuando un pulso Gaussiano de polarización s (3.1) es difractado por una rejilla espacio-temporal no-lineal modelada por la función dieléctrica (3.53) con los coeficientes dependientes del tiempo dados por las expresiones (3.42) - (3.44). El programa aplica para un número par de ecuaciones diferenciales acopladas (ned) (3.54). El pulso incide con ángulo θ y frecuencia central $\bar{\omega}$ relacionados por la relación de Bragg (2.80) con $n = 1$.

PARAMETER ned=24

ned = el número de ecuaciones diferenciales acopladas (3.54) tomadas en consideración.

PARAMETER num=5000

num = el número de componentes monocromáticas en que son divididos los paquetes de onda en frecuencia.

TESIS CON
 FALLA DE ORIGEN

PARAMETER ntiem=2048

ntiem = el número de instantes del tiempo de retraso T.

PARAMETER nord=4

nord = el número de órdenes de difracción transmitidos cuya eficiencia de difracción se calcula también por separado.

IMPLICIT DOUBLE PRECISION (d)

IMPLICIT COMPLEX*16 (c)

IMPLICIT INTEGER (i,n)

DIMENSION IPIV(4*ned)

DIMENSION dfv1(ned),dfv2(ned),dfv3(ned)

DIMENSION dwr(ned),dwi(ned)

DIMENSION dar(ned,ned),dai(ned,ned),dzc(ned,ned),dzc(ned,ned)

DIMENSION drlam(ned)

DIMENSION clam(ned),cgm(ned),cx(ned,ned),ca(4*ned,4*ned)

DIMENSION cb(4*ned,1)

DIMENSION cgx(ned)

DIMENSION dintty(ned)

DIMENSION dintnordX1(nord+2),dareaX2(nord+2,num)

DIMENSION iareaX1(nord+2),dareatotX2(nord+3,ntiem)

DIMENSION darea(num)

ci=DCMPLX(0.0d0,1.0d0)

cc=DCMPLX(1.0d0,0.0d0)

deps0=5.4756d0

deps1in=0.465d0

deps13in=0.000061d0

deps2in=0.00116d0

deps3in=0.00017d0

dgretheta=3.0d0

dd=55.0d0

dtau=1.62d0

domegarej=1.64061d0

domega=(126.0d0/810.0d0)

```

dscale=domegarej/domega
domegaK=dscale*domega
domega2K=dscale*(239.0d0/810.0d0)
domega3K=dscale*(289.0d0/810.0d0)
domegashift=domegaK*0.000157d0

```

Los valores de los variables son: $deps0$ = la constante dieléctrica del fondo. $deps1in$ y $deps13in$ son los coeficientes no-dependientes del tiempo en (3.42). $deps2in$ y $deps3in$ son los coeficientes no-dependientes del tiempo en (3.43) y (3.44), respectivamente. $dgretheta$ es el ángulo de incidencia del pulso (3.1), d el espesor de la muestra, $d\tau$ la duración del pulso, $domegaK$ la frecuencia de oscilación fundamental de la rejilla, $domega2K$ y $domega3K$ son las frecuencia relacionadas con las contribuciones anarmónicas. $domegashift$ es el pequeño desplazamiento en frecuencia desde la frecuencia fundamental causada por la anarmonicidad. Los parámetros son reesacuados en el vector de onda K de la rejilla.

```

dpi=DACOS(-1.0d0)
dtheta=(dgretheta*dpi)/180.0d0
dsen=DSIN(dtheta)
dcose=DCOS(dtheta)

```

```

dbragg=1.0d0
domegal=1.0d0/(2.0d0*dsen)
domegapul=dbragg*domegal

```

El pulso incidente es centrado en la frecuencia dada por la relación de Bragg (2.80) con $n = 1$.

```

dfact2=(domega2K*domega2K)/
1      ( (4.0d0*domegaK*domegaK)-
2      (domega2K*domega2K) )

```

dfact2 es el factor independiente del tiempo en (3.43).

```

dfact3a=(3.0d0*domegaK*domega3K)/
1      ( (9.0d0*domegaK*domegaK)-
2      (domega3K*domega3K) )

```

```

dfact3b=(domega3K*domega3K)/
1      ( (9.0d0*domegaK*domegaK)-
2      (domega3K*domega3K) )

```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN


```
dfact3c=(3.0d0*domega3K*domega3K)/
1      ( (domegaK*domegaK)-
2      (domega3K*domega3K) )
```

```
dfact3d=(3.0d0*domegaK*domega3K)/
1      ( (domegaK*domegaK)-
2      (domega3K*domega3K) )
```

dfact3a, dfact3b, dfact3c, dfact3d son los factores independientes del tiempo en (3.44).

```
dwmin=domegapul-3.0d0
dwmax=domegapul+3.0d0
dwstep=(dwmax-dwmin)/DBLE(num)
```

El intervalo en frecuencia alrededor de la frecuencia central del pulso y la precisión en frecuencia.

```
OPEN(UNIT=11,file='dt1.primer0',status='REPLACE')
OPEN(UNIT=12,file='dt0.primer0',status='REPLACE')
OPEN(UNIT=13,file='dtN1.primer0',status='REPLACE')
OPEN(UNIT=14,file='dtN2.primer0',status='REPLACE')
OPEN(UNIT=15,file='dref.primer0',status='REPLACE')
OPEN(UNIT=16,file='dtra.primer0',status='REPLACE')
OPEN(UNIT=17,file='dtot.primer0',status='REPLACE')
```

```
dtretmin=0.0d0
dtretmax=(2.0d0*dpi/domegaK)
dtretstep=(dtretmax-dtretmin)/DBLE(ntiem)
dtmax=dtretmax-dtretstep
```

El intervalo y la precisión en el tiempo de retraso.

```
DO i1=1,nord+3
  DO i2=1,ntiem
    dareatotX2(i1,i2)=0.0d0
  ENDDO
ENDDO
```

Los elementos del arreglo dareatotX2(nord+3,ntiem) son iniciados a cero.

TELSON
FALLA DE ORIGEN

```

ictret=0
DO 71 dtret=dtretmin,dtmax,dtretstep
  ictret=ictret+1

      DO i1=1,nord+2
iareaX1(i1)=0
      DO i2=1,num
dareaX2(i1,i2)=0.0d0
darea(i2)=0.0d0
      ENDDO
ENDDO

```

Para cada instante temporal, los arreglos iareaX1(nord+2), dareaX2(nord+2,num) y darea(num) son iniciados a cero.

```

      depl1=depl1in*
1      DSIN( (domegaK+domegashift)*dtret ) -
2      depl13in*( DSIN(3.0d0*domegaK*dtret) +
3      9.0d0*DSIN(domegaK*dtret) )

      depl2=depl2in*( 1.0d0-
1      DCOS(domega2K*dtret)+
2      dfact2*( DCOS(2.0d0*domegaK*dtret)-
3      DCOS(domega2K*dtret) ) )

      depl3=depl3in*depl3in*(
1      dfact3a*DSIN(domega3K*dtret)-
2      dfact3b*DSIN(3.0d0*domegaK*dtret)+
3      dfact3c*DSIN(domegaK*dtret)-
4      dfact3d*DSIN(domega3K*dtret) )

```

Los factores de la expansión (3.53) dependientes del tiempo.

```

      dwc=0.0d0
iw=0
DO 70 dw=dwmin,dwmax,dwstep
  iw=iw+1
  dwc=dw+0.5d0*dwstep

```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

1 CALL RESET2(ned,cgm,dwr,dwi,dfv1,dfv2,dfv3,clam,
dar,dai,dzr,dzi,cx,cgx)

Ver el programa en el apéndice D.1 para la descripción de esta subrutina.

1 CALL ALFASEANH(dar,ned,dwc,deps0,deps1,deps2,
deps3,dsen)

La subrutina ALFASEANH contiene los elementos de la matriz (3.56) truncada a la dimensión $ned \times ned$.

1 CALL cg(ned,ned,dar,dai,dwr,dwi,1,dzr,dzi,dfv1,
dfv2,dfv3,ierr)

Ver el programa en el apéndice D.1 para la descripción de esta subrutina.

CALL NORMAL(ned,ned,dzr,dzi)

Ver el programa en el apéndice D.1 para la descripción de esta subrutina.

CALL COMUNO(ned,ned,dwr,dwi,dzr,dzi,cx,clam)

Ver el programa en el apéndice D.1 para la descripción de esta subrutina.

CALL GAMASE(ned,cgm,ci,cc,dwc,dsen,cgx)

Ver el programa en el apéndice D.1 para la descripción de esta subrutina.

CALL RAIZ(ned,clam,ci,cc)

Ver el programa en el apéndice D.1 para la descripción de esta subrutina.

CALL RESET3m(ned,ca,cb)

Ver el programa en el apéndice D.1 para la descripción de esta subrutina.

1 CALL MATRIXSPUL(ned,cx,clam,cgm,dd,dwc,dcose,
ci,cc,ca,cb,dtau,domegapul,dpi)

La subrutina *MATRIXSPUL* escribe en el arreglo complejo $ca(4*ned,4*ned)$ los valores de los elementos de la matriz **A** explícitamente visualizados en (B.2) y (B.3) y en $cb(4*ned,1)$ los elementos del vector \vec{b} (B.4) realizada la sustitución propicio de un pulso Gaussiano: $E_0 \rightarrow E_0 e^{-\frac{(\omega-\omega_0)^2 \tau^2}{2}}$.

CALL ZGESV(4*ned,1,ca,4*ned,IPIV,cb,4*ned,INFO)

Ver el programa en el apéndice D.1 para la descripción de esta subrutina.

```

2      CALL FUNCS(ned,cb,cgx,cgm,dtau,dpi,dsen,dcose,
3      dintgrry,dintgrty,dintty,
      dwc)

```

La subrutina *FUNCS* calcula la eficiencia de difracción reflejada y transmitida para el componente frecuencial y el tiempo de retraso en turno. La eficiencia de difracción transmitida correspondiente los órdenes de difracción l por separado se encuentra de salida en el arreglo $dintty(ned)$. La eficiencia de difracción reflejada total (3.11) y transmitida total (3.12) están de salida en $dintgrry$ y $dintgrty$, respectivamente.

```

1      dintnordX1(1:nord)=dintty((ned/2)-(nord/2)+1:
      (ned/2)+(nord/2))
      dintnordX1(nord+1)=dintgrry
      dintnordX1(nord+2)=dintgrty

```

Se coloca en los $nord$ primeros ubicaciones del arreglo $dintnordX1(nord+2)$ las componentes del arreglo $dintty(ned)$ correspondientes a los órdenes de difracción cuyo eficiencia de difracción transmitida se desea visualizar. En la ubicación $nord+1$ se ubica la eficiencia de difracción reflejada total, y en la ubicación $nord+2$ la eficiencia de difracción transmitida total.

```

DO i1=1,nord+2
  darea(iw)=dareaX2(i1,iw)
  CALL AREA(dintnordX1(i1),dwstep,darea,num,iareaX1(i1))
  dareaX2(i1,iw)=darea(iw)
ENDDO

```

La subrutina *AREA* calcula el área del rectángulo dada por el valor de la eficiencia de difracción correspondiente al componente frecuencial en turno dw multiplicada con el intervalo en frecuencia $dwstep$ y lo escribe en la ubicación del arreglo $darea(num)$ correcto. Se llama

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

la subrutina *AREA* para los *nord* órdenes *l* cuya eficiencia de difracción transmitida se desea calcular por separado, asimismo como para la eficiencia de difracción reflejada total y transmitida total. Al terminar el bucle sobre las componentes de frecuencia, el arreglo *dareaX2(nord+2,num)* contiene el valor del area del rectangulo formado por la eficiencia de difracción y el intervalo en frecuencia *dwestep* para cada componente frecuencial, correspondiente a las partes de la señal que acompaña los órdenes *nord* por separado y el señal total reflejado y transmitido para el tiempo de retraso *dtret* en cuestión.

70 ENDDO

```

      DO i1=1,nord+2
      darea(:)=dareaX2(i1,:)
      dareatot=dareatotX2(i1,ictret)
      CALL AREATOT(darea,num,dareatot)
      dareatotX2(i1,ictret)=dareatot
      dareaX2(i1,:)=darea
    ENDDO

```

La subrutina *AREATOT* suma los pequeños rectangulos contenidos en *dareaX2(nord+2,num)*, asi que el arreglo *dareatotX2(nord+3,ntiem)* contiene para cada tiempo de retraso *dtret* el area total bajo la curva formada por la eficiencia de difracción transmitida correspondiente a los órdenes *nord* por separado, el area total bajo la curva formada por la eficiencia de difracción reflejada total y el area total bajo la curva formada por la eficiencia de difracción transmitida total.

```

      dareatotX2(nord+3,ictret)=
1      dareatotX2(nord+1,ictret)+dareatotX2(nord+2,ictret)

```

Para verificar que son correctos los resultados, se calcula la eficiencia de difracción total para comprobar que es igual a 1. La eficiencia de difracción total se coloca en el elemento número *nord + 3* del arreglo *dareatotX2(nord+3,ntiem)*.

```

      DO i1=1,nord+3
      WRITE(10+i1,*)dtret,dareatotX2(i1,ictret)
    ENDDO

```

71 ENDDO

END

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

TERMINA PROGRAMA PRINCIPAL

```

SUBROUTINE FUNCS(ned,cb,cgx,cgm,dtau,dpi,dscn,dcose,
2      dintegrty,dintegrty,dintty,dw

```

```

IMPLICIT DOUBLE PRECISION (d)
IMPLICIT COMPLEX*16 (c)
IMPLICIT INTEGER (n,i)

```

```

DIMENSION cb(4*ned,1),cgx(ned),cgm(ned)
DIMENSION dintry(ned),dintty(ned)
DIMENSION dintx(ned),dinttx(ned)

```

```
dfacy=1.0d0/(DSQRT(dpi)*dtau*dcose)
```

```

DO il=1,ned
  IF (DREAL(cgm(il)) .NE. 0.0d0) THEN
    dintry(il)=dfacy*DREAL( cb(2*ned+il,1)*
1      CONJG(cb(2*ned+il,1))*cgm(il) )
    dintty(il)=dfacy*DREAL( cb(3*ned+il,1)*
1      CONJG(cb(3*ned+il,1))*cgm(il) )
  ELSE
    dintry(il)=0.0d0
    dintty(il)=0.0d0
  ENDIF
ENDDO

```

```

dsumry=0.0d0
dsumty=0.0d0

```

```

DO il=1,ned
  dsumry=dsumry+dintry(il)
  dsumty=dsumty+dintty(il)
ENDDO

```

```
dintegrty=dsumry
```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

dintegrty=dsumty

RETURN
END

SUBROUTINE AREA(dinter,dwstep,darea,num,iarea)

IMPLICIT DOUBLE PRECISION (d)
IMPLICIT INTEGER (n,i)

DIMENSION darea(num)

iarea=iarea+1
darea(iarea)=dinter*dwstep

RETURN
END

SUBROUTINE AREATOT(darea,num,dareatot)

IMPLICIT DOUBLE PRECISION (d)
IMPLICIT INTEGER (n,i)

DIMENSION darea(num)

dsum=0.0d0
dsumneg=0.0d0
dsumpos=0.0d0

DO i2=1,num
 IF (darea(i2) .GT. 0.0d0) THEN
 dsumpos=darea(i2)
 ELSE
 dsumneg=-darea(i2)
 ENDIF
 dsum=dsum+(dsumpos+dsumneg)
ENDDO
dareatot=dsum

RETURN

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

138

END

SUBROUTINE RESET3m(ned,ca,cb)

IMPLICIT INTEGER (i,n)

IMPLICIT COMPLEX*16 (c)

DIMENSION ca(4*ned,4*ned),cb(4*ned,1)

DO i1=1,4*ned

 cb(i1,1)=DCMPLX(0.0d0,0.0d0)

 DO i2=1,4*ned

 ca(i1,i2)=DCMPLX(0.0d0,0.0d0)

 ENDDO

ENDDO

RETURN

END

SUBROUTINE RAIZ(ned,clam,ci,cc)

IMPLICIT INTEGER (i,n)

IMPLICIT COMPLEX*16 (c)

DIMENSION clam(ned)

DO i1=1,ned

 IF (DREAL(clam(i1)) .LE. 0.0d0) THEN

 clam(i1)= ci*DSQRT(-DREAL(clam(i1)))

 ELSE

 clam(i1)= cc*DSQRT(DREAL(clam(i1)))

 ENDIF

ENDDO

RETURN

END

SUBROUTINE GAMASE(ned,cgm,ci,cc,dw,dsen,cgx)

IMPLICIT INTEGER (i,n)

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

IMPLICIT DOUBLE PRECISION (d)
 IMPLICIT COMPLEX*16 (c)

dgama(i3)=1.0d0-(dsen+i3*(1.0d0/dw))*(dsen+i3*(1.0d0/dw))
 dksi(i3)=dsen+(DBLE(i3)/dw)

DIMENSION cgm(ned),cgx(ned)

i2=0
 DO i1=(ned/2)-1,(-ned/2),-1
 i2=1+i2
 IF (dgama(i1) .LE. 0.0d0) THEN
 cgm(i2)=ci*DSQRT(-dgama(i1))
 cgx(i2)=DCMPLX(0.0d0,0.0d0)
 ELSE
 cgm(i2)=cc*DSQRT(dgama(i1))
 cgx(i2)=cc*dksi(i1)
 ENDIF
ENDDO

RETURN
 END

SUBROUTINE ALFASEANH(dar,ned,dw,deps0,deps1,
 1 deps2,deps3,dsen)

IMPLICIT INTEGER (i,n)
 IMPLICIT DOUBLE PRECISION (d)

dalfa(i3)=dw*dw*(deps0-(dsen+i3*(1.0d0/dw))*(dsen+i3*(1.0d0/dw)))

DIMENSION dar(ned,ned)

dbeta1=dw*dw*(deps1/2.0d0)
 dbeta2=dw*dw*(deps2/2.0d0)
 dbeta3=dw*dw*(deps3/2.0d0)

DO i1=1,ned
 dar(i1,i1)=dalfa((ned/2)-i1)
ENDDO

TESIS CON
 FALLA DE ORIGEN

```

DO i1=1,ned-1
  dar(i1,i1+1)=dbeta1
  dar(i1+1,i1)=dbeta1
ENDDO
DO i1=1,ned-2
  dar(i1,i1+2)=dbeta2
  dar(i1+2,i1)=dbeta2
ENDDO
DO i1=1,ned-3
  dar(i1,i1+3)=dbeta3
  dar(i1+3,i1)=dbeta3
ENDDO

RETURN
END

```

```

SUBROUTINE RESET2(ned,cgm,wr,wi,fv1,fv2,fv3,clam,
1  dar,dai,zr,zi,cx,cgx)

```

```

IMPLICIT INTEGER (i,n)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (d,w,f,z)
IMPLICIT COMPLEX*16 (c)

```

```

DIMENSION cgm(ned),wr(ned),wi(ned),fv1(ned),fv2(ned)
DIMENSION fv3(ned),clam(ned),dar(ned,ned),dai(ned,ned)
DIMENSION zr(ned,ned),zi(ned,ned),cx(ned,ned),cgx(ned)

```

```

DO i1=1,ned
  cgm(i1)=DCMPLX(0.0d0,0.0d0)
  cgx(i1)=DCMPLX(0.0d0,0.0d0)
  wr(i1)=0.0d0
  wi(i1)=0.0d0
  fv1(i1)=0.0d0
  fv2(i1)=0.0d0
  fv3(i1)=0.0d0
  clam(i1)=DCMPLX(0.0d0,0.0d0)
  DO i2=1,ned
    dar(i1,i2)=0.0d0
    dai(i1,i2)=0.0d0

```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

```

      zr(i1,i2)=0.0d0
      zi(i1,i2)=0.0d0
      cx(i1,i2)=DCMPLX(0.0d0,0.0d0)

```

```

ENDDO

```

```

ENDDO

```

```

RETURN

```

```

END

```

```

SUBROUTINE MATRIXSPUL(ned,cx,clam,cgm,dd,dw,dcose,
1      ci,cc,ca,cb,dtau,domega,dpi)

```

```

DOUBLE PRECISION dd,dw,dcose,dgama(ned),dtau,domega,dpi
INTEGER i1,i2,ned,i3
COMPLEX*16 cx(ned,ned),clam(ned),cgm(ned),ca(4*ned,4*ned)
COMPLEX*16 cb(4*ned,1),ci,cc

```

```

DO i1=1,ned
  DO i2=1,2*ned-1,2
    ca(i1,i2)=cx(i1,(i2+1)/2)
  ENDDO
  DO i2=2,2*ned,2
    ca(i1,i2)=cx(i1,i2/2)
  ENDDO
ENDDO

```

```

DO i1=ned+1,2*ned
  DO i2=1,2*ned-1,2
    ca(i1,i2)=cx(i1-ned,(i2+1)/2)*CDEXP(ci*dd*
1      clam((i2+1)/2))
  ENDDO
  DO i2=2,2*ned,2
    ca(i1,i2)=cx(i1-ned,i2/2)*CDEXP(-ci*dd*
1      clam(i2/2))
  ENDDO
ENDDO

```

```

DO i1=2*ned+1,3*ned
  DO i2=1,2*ned-1,2
    ca(i1,i2)=cx(i1-2*ned,(i2+1)/2)*clam(

```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

```

1      (i2+1)/2)*(ci)
  ENDDO
DO i2=2,2*ned,2
  ca(i1,i2)=cx(i1-2*ned,i2/2)*(-ci)*
1      clam(i2/2)
  ENDDO
ENDDO

```

```

DO i1=3*ned+1,4*ned
  DO i2=1,2*ned-1,2
    ca(i1,i2)=ci*clam((i2+1)/2)*
1      cx(i1-3*ned,(i2+1)/2)*
2      CDEXP(ci*dd*clam((i2+1)/2))
  ENDDO
  DO i2=2,2*ned,2
    ca(i1,i2)=(-ci)*clam(i2/2)*
1      cx(i1-3*ned,i2/2)*
2      CDEXP(-ci*dd*clam(i2/2))
  ENDDO
ENDDO

```

```

DO i1=1,ned
  ca(i1,2*ned+i1)=-1.0d0*cc
ENDDO
DO i1=ned+1,2*ned
  ca(i1,2*ned+i1)=-CDEXP(ci*dd*dw*cgm(i1-ned))
ENDDO
DO i1=2*ned+1,3*ned
  ca(i1,i1)=ci*dw*cgm(i1-2*ned)
ENDDO
DO i1=3*ned+1,4*ned
  ca(i1,i1)=-ci*dw*cgm(i1-3*ned)*CDEXP(ci*dw*cgm(i1-3*ned)*dd)
ENDDO

```

```

dpulw=dtau*
1      DEXP(-0.5d0*(domega-dw)*(domega-dw)*dtau*dtau)

```

```

cb(ned/2,1)=DCMPLX(1.0d0*dpulw,0.0d0)
cb((ned/2)+2*ned,1)=DCMPLX(0.0d0,dw*d cose*dpulw)

```

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

RETURN
END

SUBROUTINE NORMAL(nm,n,zr,zi)

DOUBLE PRECISION zr(nm,n),zi(nm,n),zlong(nm)
DOUBLE PRECISION dtemp1,dtemp2
INTEGER nm,n,j1,j2

DO j1=1,n
 dtemp1=0.0d0
 dtemp2=0.0d0
 DO j2=1,nm
 dtemp1=zr(j2,j1)*zr(j2,j1)+zi(j2,j1)*zi(j2,j1)
 dtemp2=dtemp2+dtemp1
 ENDDO
 zlong(j1)=DSQRT(dtemp2) DO j2=1,nm
 zr(j2,j1)=zr(j2,j1)/zlong(j1)
 zi(j2,j1)=zi(j2,j1)/zlong(j1)
 ENDDO
ENDDO

RETURN
END

SUBROUTINE COMUNO(nm,n,wr,wi,zr,zi,cx,clam)

DOUBLE PRECISION zr(nm,n),zi(nm,n),wr(n),wi(n)
INTEGER nm,n,j1,j2
COMPLEX*16 cx(nm,n),clam(n)

DO j2=1,n
 DO j1=1,nm
 cx(j1,j2)=DCMPLX(zr(j1,j2),zi(j1,j2))
 ENDDO
 clam(j2)=DCMPLX(wr(j2),wi(j2))
ENDDO

RETURN
END

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

D.2. Los "headings" de las subrutinas de paquetería que emplean mis programas

subroutine cg(nm,n,ar,ai,wr,wi,matz,zr,zi,fv1,fv2,fv3,ierr)

c

integer n,nm,is1,is2,ierr,matz

double precision ar(nm,n),ai(nm,n),wr(n),wi(n),zr(nm,n),zi(nm,n),

x fv1(n),fv2(n),fv3(n)

c

c this subroutine calls the recommended sequence of

c subroutines from the eigensystem subroutine package (eispack)

c to find the eigenvalues and eigenvectors (if desired)

c of a complex general matrix.

c

c on input

c

c nm must be set to the row dimension of the two-dimensional

c array parameters as declared in the calling program

c dimension statement.

c

c n is the order of the matrix $a=(ar,ai)$.

c

c ar and ai contain the real and imaginary parts,

c respectively, of the complex general matrix.

c

c matz is an integer variable set equal to zero if

c only eigenvalues are desired. otherwise it is set to

c any non-zero integer for both eigenvalues and eigenvectors.

c

c on output

c

c wr and wi contain the real and imaginary parts,

c respectively, of the eigenvalues.

c

c zr and zi contain the real and imaginary parts,

c respectively, of the eigenvectors if matz is not zero.

c

c ierr is an integer output variable set equal to an error
 c completion code described in the documentation for comqr
 c and comqr2. the normal completion code is zero.
 c
 c fv1, fv2, and fv3 are temporary storage arrays.
 c
 c questions and comments should be directed to burton s. garbow,
 c mathematics and computer science div, argonne national laboratory
 c
 c this version dated august 1983.

SUBROUTINE ZGESV(N, NRHS, A, LDA, IPIV, B, LDB, INFO)

c - LAPACK driver routine (version 3.0) -
 c Univ. of Tennessee, Univ. of California Berkeley, NAG Ltd.,
 c Courant Institute, Argonne National Lab, and Rice University
 c March 31, 1993
 c
 c .. Scalar Arguments ..
 INTEGER INFO, LDA, LDB, N, NRHS
 c ..
 c .. Array Arguments ..
 INTEGER IPIV(*)
 COMPLEX*16 A(LDA, *), B(LDB, *)
 c ..
 c
 c Purpose
 c =====
 c
 c ZGESV computes the solution to a complex system of linear equations
 c $A * X = B$,
 c where A is an N-by-N matrix and X and B are N-by-NRHS matrices.
 c
 c The LU decomposition with partial pivoting and row interchanges is
 c used to factor A as
 c $A = P * L * U$,
 c where P is a permutation matrix, L is unit lower triangular, and U is
 c upper triangular. The factored form of A is then used to solve the
 c system of equations $A * X = B$.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

```

c
c Arguments
c =====
c
c N (input) INTEGER
c The number of linear equations, i.e., the order of the
c matrix A.  $N \geq 0$ .
c
c NRHS (input) INTEGER
c The number of right hand sides, i.e., the number of columns
c of the matrix B.  $NRHS \geq 0$ .
c
c A (input/output) COMPLEX*16 array, dimension (LDA,N)
c On entry, the N-by-N coefficient matrix A.
c On exit, the factors L and U from the factorization
c  $A = P*L*U$ ; the unit diagonal elements of L are not stored.
c
c LDA (input) INTEGER
c The leading dimension of the array A.  $LDA \geq \max(1,N)$ .
c
c IPIV (output) INTEGER array, dimension (N)
c The pivot indices that define the permutation matrix P;
c row i of the matrix was interchanged with row IPIV(i).
c
c B (input/output) COMPLEX*16 array, dimension (LDB, NRHS)
c On entry, the N-by-NRHS matrix of right hand side matrix B.
c On exit, if  $INFO = 0$ , the N-by-NRHS solution matrix X.
c
c LDB (input) INTEGER
c The leading dimension of the array B.  $LDB \geq \max(1,N)$ .
c
c INFO (output) INTEGER
c = 0: successful exit
c  $\neq 0$ : if  $INFO = -i$ , the i-th argument had an illegal value
c  $\neq 0$ : if  $INFO = i$ ,  $U(i,i)$  is exactly zero. The factorization
c has been completed, but the factor U is exactly
c singular, so the solution could not be computed.
c
c =====
c
c .. External Subroutines ..

```


EXTERNAL XERBLA, ZGETRF, ZGETRS

c ..

c .. Intrinsic Functions ..

INTRINSIC MAX

c ..

c .. Executable Statements ..

c

c Test the input parameters.

c

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

148

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Apéndice E

Publicaciones

En este apéndice se incluye la publicación que se originó de esta tesis.

Sara Nilsen-Hofseth and Víctor Romero-Rochín.

Dispersion relation of guided-mode resonances and Bragg peaks in dielectric diffraction gratings

Physical Review E **64**, 036614 (2001).

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Dispersion relation of guided-mode resonances and Bragg peaks in dielectric diffraction gratings

Sara Nilsen-Hofseth and Víctor Romero-Rochín*

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, 01000 México, Distrito Federal, Mexico

(Received 8 March 2001; published 29 August 2001)

We present the dispersion relation of guided-mode resonances in non-dissipative dielectric diffraction gratings, both for s -polarized (TE mode) and p -polarized (TM mode) incident waves. We present a simple approximate theory as well as a rigorous calculation within the so-called coupled-wave theory. We discuss the dependence of the positions and the lifetimes of the resonances on the thickness of the gratings and on the strength of its modulation. We find that the diffraction efficiency of the different orders show peaks at different Bragg orders.

DOI: 10.1103/PhysRevE.64.036614

PACS number(s): 42.25.Fx, 42.25.Bs

I. INTRODUCTION

Simple diffraction gratings offer a very rich variety of optical phenomena not only from a fundamental point of view but also from their enormous potential for applications. In particular, modulated dielectric diffraction gratings have been a focus of attention for some time. Modulated diffraction gratings give rise to such interesting phenomena as guided-mode resonances [1–4], Bragg diffraction [5–7], diffraction of pulses [8–10], and diffraction through heterostructures [11–15]. Among the most widely implemented applications is the design of gratings as optical filters [16–27]. A motivation for our study is the understanding of the diffraction of ultrashort light pulses by spatiotemporal gratings [28,29].

The theoretical understanding of the diffraction through modulated gratings is, in principle, given by the so-called coupled-wave theory introduced by Moharam and Gaylord [30–33], which is an ansatz solution of Maxwell equations for this class of problems. Nonetheless, such a solution has not been found in an analytical closed form, and the problem is so rich that there are still many questions to be resolved.

The purpose of this article is to provide a concise summary of the diffraction of an electromagnetic wave through a sinusoidally modulated grating by means of dispersion relations of the guided-mode resonances [1–4]. From the corresponding graphical representations of the dispersion relations one can obtain a clear physical picture of the behavior of the diffraction efficiencies, as functions of frequency and angle of incidence, information on the material eigenmodes and diffraction orders, the positions of guided-mode resonances, and the appearance of Bragg peaks.

We proceed by presenting results from an exact numerical analysis of the coupled-wave theory and from simple approximate theoretical arguments. We treat both TE and TM modes (i.e., electric field polarization perpendicular or parallel to the plane of incidence). Section II presents a quick review of the coupled-wave theory. We emphasize the fact that the coupled-wave equations give rise to material eigenmodes that can be classified according to their dependence

on the electromagnetic and grating wave vectors and in their propagating or evanescent character. This yields a clear physical picture of the origin of the guided-mode resonances. In our opinion, these aspects have not yet been thoroughly analyzed in the current literature. Section III is the main contribution of this article and is devoted to the dispersion relations of the waveguide resonances for both types of polarizations. In that section we also make a brief description of the dependence of the resonances on the dielectric grating modulation and on the geometric thickness of the grating. Next, in Sec. IV, we show the appearance of the Bragg peaks and point out that higher diffraction orders have peaks at higher order Bragg angles; this has not been appreciated previously. We provide a nonrigorous explanation for this interesting and potentially useful phenomenon. We conclude this paper in Sec. V.

II. COUPLED-WAVE THEORY AND DIFFRACTION EFFICIENCIES

The simplest way to pose the problem is to consider a dielectric slab in vacuum, infinite in the x - z plane and of thickness d in the y direction. The diffraction grating is described by a dielectric function spatially modulated in the x direction, namely,

$$\epsilon(x) = \epsilon_0 + \epsilon_1 \cos(Kx), \quad (1)$$

where ϵ_0 is the average background dielectric constant and ϵ_1 is the strength of the modulation. This is the problem as originally considered by Born and Wolf [34], where diffraction of light by ultrasonic waves is studied. One can consider more complicated dielectric gratings, with several different periodic functions, or placed between different dielectric media, or with a slanted wavevector K dependence [33]. These may be needed in order to describe a particular experimental situation, but as we shall see, the qualitative phenomenon is clearly independent of those details. Although ϵ_0 and ϵ_1 may have arbitrary values, waveguide resonances can be easily explained if one considers $\epsilon_0 \gg \epsilon_1$. We shall later on describe the differences when these dielectric constants are of the same order of magnitude.

An s - or p -polarized em wave of frequency ω is incident on the grating at an angle θ with the y direction, and the

*Corresponding author. FAX: (52) 5622 5015. Email address: romero@fisica.unam.mx

TESIS CON
 FALLA DE ORIGEN

150

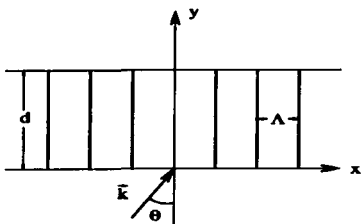


FIG. 1. The system setup. The system is infinite in the z direction. The dielectric function is given by $\epsilon(x) = \epsilon_0 + \epsilon_1 \cos(Kx)$, with $K = 2\pi/\Lambda$.

problem consists in finding the fields inside the grating as well as the reflected and transmitted ones; see Fig. 1. We shall call TE the case of s -polarized waves and TM the case of p -polarized waves since in the former the fields inside the grating are similar to TE modes and in the latter to TM modes in a waveguide. The incident TE electric field is

$$\vec{E}_{inc}(x, y, t) = \hat{z} E_0 e^{ik_x x} e^{-i\omega t} \quad (\text{TE}) \quad (2)$$

and the incident TM magnetic field is

$$\vec{B}_{inc}(x, y, t) = \hat{z} B_0 e^{ik_x x} e^{-i\omega t}, \quad (\text{TM}) \quad (3)$$

where the incident wave vector is given by $\vec{k} = (k_x, k_y)$ with $k_x = k \sin \theta$. The ensuing reflected and transmitted fields are expressed as

$$\vec{E}_{out}^{\pm}(x, y, t) = \hat{z} \sum_l A_l^{\pm} e^{\pm ik_{ly} y} e^{i(k_x + lK)x} e^{-i\omega t} \quad (\text{TE}) \quad (4)$$

and

$$\vec{B}_{out}^{\pm}(x, y, t) = \hat{z} \sum_l C_l^{\pm} e^{\pm ik_{ly} y} e^{i(k_x + lK)x} e^{-i\omega t} \quad (\text{TM}) \quad (5)$$

where the superindex (+) refers to $y \geq d$ (transmitted) and (-) to $y \leq 0$ (reflected). The wave vector component k_{ly} is given by ($c = 1$, so that $k = \omega$)

$$k_{ly} = \sqrt{\omega^2 - (k_x + lK)^2}. \quad (6)$$

The different values of l of the field outside the grating are called the *diffraction orders*, which can be either propagating or evanescent depending on whether the component k_{ly} is real or imaginary. The amplitudes A_l^{\pm} and C_l^{\pm} are found by matching boundary values with the fields inside the grating.

The solutions inside the gratings follow from applying Maxwell equations to the ansatz known as coupled-wave theory [30–33]. That is, the fields inside are assumed to be a sum of coupled waves,

$$\vec{E}_{in}(x, y, t) = \hat{z} \sum_l V_l(y) e^{i(k_x + lK)x} e^{-i\omega t} \quad (\text{TE}) \quad (7)$$

and

$$\vec{B}_{in}(x, y, t) = \hat{z} \sum_l U_l(y) e^{i(k_x + lK)x} e^{-i\omega t} \quad (\text{TM}) \quad (8)$$

with $l = \dots, -1, 0, 1, \dots$. Due to the x dependence of the dielectric function $\epsilon(x)$, the amplitudes $V_l(x)$ and $U_l(x)$ are coupled for all values of l through the set of equations (that follow from direct application of Maxwell equations).

$$\begin{aligned} \frac{d^2 V_l(y)}{dy^2} + [\epsilon_0 \omega^2 - (k_x + lK)^2] V_l(y) \\ + \frac{1}{2} \epsilon_1 \omega^2 [V_{l-1}(y) + V_{l+1}(y)] = 0 \quad (\text{TE}) \quad (9) \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} \epsilon_0 \frac{d^2 U_l(y)}{dy^2} + \frac{1}{2} \epsilon_1 \frac{d^2 U_{l-1}(y)}{dy^2} + \frac{1}{2} \epsilon_1 \frac{d^2 U_{l+1}(y)}{dy^2} \\ + \left[\left(\epsilon_0 + \frac{\epsilon_1^2}{2\epsilon_0} \right) \omega^2 - (k_x + lK)^2 \right] \epsilon_0 U_l(y) \\ + \left[\epsilon_1 \epsilon_0 \omega^2 + \frac{1}{2} \epsilon_1 \omega (k_x + (l-1)K) \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \epsilon_1 [k_x + (l-1)K]^2 \right] \\ \times U_{l-1}(y) + \left(\epsilon_1 \epsilon_0 \omega^2 - \frac{1}{2} \epsilon_1 \omega [k_x + (l+1)K] \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \epsilon_1 [k_x + (l+1)K]^2 \right) U_{l+1}(y) \\ + \frac{1}{4} \epsilon_1^2 \omega^2 U_{l-2}(y) + \frac{1}{4} \epsilon_1^2 \omega^2 U_{l+2}(y) = 0 \quad (\text{TM}). \quad (10) \end{aligned}$$

These sets of equations can be cast into eigenvalue problems in which the matrices to be diagonalized are orthogonal with real elements. Hence, the corresponding eigenvalues, denoted as $\kappa_n^+ = \kappa_n^-(K, \omega, k_x)$, are real but they can be either positive or negative [35]. The functions $V_l(y)$ and $U_l(y)$ can therefore be expressed as (infinite) sums of eigenmodes of the material, namely,

$$V_l(y) = \sum_n [A_n a_n e^{i\kappa_n y} + B_n a_n e^{-i\kappa_n y}], \quad (11)$$

and with an analogous expression for $U_l(y)$. The eigenmodes a_n correspond to the eigenvalues κ_n^{\pm} of the above-mentioned matrix. We note that the solutions $V_l(y)$ and $U_l(y)$ are expressed in terms of the wave vectors κ_n that are the square roots of the eigenvalues. Therefore, the wave vectors κ_n are purely real or purely imaginary; they have a very

important physical meaning and, accordingly, we shall call them propagating or evanescent *eigenmodes* of the material, depending on whether they are real or imaginary. One must keep in mind that these are electromagnetic eigenmodes of a material with a dielectric function given by $\epsilon(x)$, Eq. (1); that is, they are independent of the thickness d of the grating. Clearly, if $\epsilon_1 \ll \epsilon_0$, from Eqs. (9) and (10) one finds that the eigenmodes are approximately given by

$$\kappa_n \approx [\omega^2 \epsilon_0 - (k_x + nK)^2]^{1/2}. \quad (12)$$

As we shall see in Sec. III, the guided-mode resonances appear when the number of propagating eigenmodes is larger than the number of propagating diffraction orders.

The measurable quantities to be calculated are the reflected and transmitted diffraction efficiencies [33]. These are defined as the ratio of the y components of the reflected or transmitted Poynting vectors to the incident one, averaged over one grating wave length $2\pi/K$ in the x direction and over one period $2\pi/\omega$. These efficiencies are a measure of the energy transmitted and reflected by the grating, and can be calculated order by order,

$$\eta_{l\pm} = \pm \frac{\overline{S_{l\pm}^y}}{S_0^y}, \quad (13)$$

with an obvious notation, and where the overbar represents the averages mentioned above. $S_{l\pm}^y = (1/8\pi) E_{l\pm}^* B_{l\pm}^{**}$ for the TE case and an analogous expression for the TM case. The sum of all efficiencies adds up to one, due to energy conservation [33]. In our numerical calculations this property is used to verify the correctness of the results. For given values of the incident frequency and angle, we can know in advance how many real eigenmodes of the system and how many propagating diffraction orders exist (the rest being imaginary, see below). Thus, we truncate the matrix generated by Eq. (9) or (10) so as to obtain energy conservation up to ten significant digits.

In Fig. 2(a) we show an example of the transmitted diffraction efficiency as a function of frequency ω of the incident TE wave, for a slab of $d = 10K^{-1}$, $\epsilon_0 = 3$, $\epsilon_1 = 0.121$, and at an incident angle of $\theta = 28^\circ$; in the inset, the first resonance peak is shown at an enlarged scale. In Fig. 2(b) we show the TM case for the same parameters. The important feature we want to highlight is that, besides the expected wide undulations of the transmitted diffraction efficiency due to the finite thickness of the slab, there appear at irregular intervals very sharp peaks of large transmission or reflection. These are the guided-mode resonances that we explain in the next section.

III. GUIDED-MODE RESONANCES

A guided mode is a solution of Maxwell equations in all space, the absence of the incident wave ($E_0 = 0$ for TE and $B_0 = 0$ for TM), and in the form of propagating waves in the x direction. In the y direction we search for solutions propagating through the grating but evanescent outside it. These

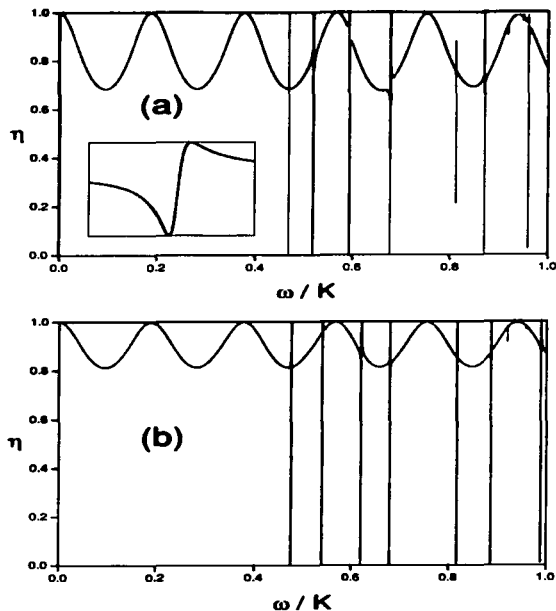


FIG. 2. Transmitted diffraction efficiency η as a function of frequency ω of the incident monochromatic wave, incident at an angle $\theta = 28^\circ$. The thickness of the diffraction grating is $d = 10K^{-1}$ with $\epsilon_0 = 3$ and $\epsilon_1 = 0.121$. (a) TE mode. In the inset, the first resonance is shown in the frequency interval from $\omega = 0.470751K^{-1}$ to $\omega = 0.470752K^{-1}$. (b) TM mode.

solutions are the analogs of guided modes in actual waveguides.

A. Dispersion relations

From the equations (9) and (10) we can find numerically the dispersion relation ω vs k_x by searching for the solutions mentioned above. We have performed such a procedure, as we show below, but first we want to sketch a simple analytical calculation of the dispersion relation that is valid in the limit $\epsilon_1 \ll \epsilon_0$. The reason for this approximation is that in this limit the modes inside the slab with different values of l are weakly coupled, see Eqs. (9) and (10). This way, for TE waves, we assume that we can set $\epsilon_1 = 0$ in Eq. (9), so that the eigenmodes are now approximately given by $a_{nl} \sim \delta_{nl}$ and the wave vectors κ_l by Eq. (12), i.e., the solution (11) has one term only. Therefore, we can search for propagating solutions inside the grating by considering only *one* mode at a time as if in a waveguide. Outside the grating we assume

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

the fields are evanescent and their y dependence is therefore given by $\exp(-|k_{ly}||y|)$, where $|k_{ly}| = [(k_x + lK)^2 - \omega^2]^{1/2}$ [see Eq. (6)]. Clearly, k_x , ω , and K are such that κ_l and $|k_{ly}|$ are real. It is a simple exercise to show that these solutions exist if one of the following conditions are satisfied (cf. Refs. [2,3]):

$$\tan\left(\frac{1}{2}\kappa_l d\right) = \begin{cases} |k_{ly}|/\kappa_l \\ -\kappa_l/|k_{ly}| \end{cases} \quad \text{TE} \quad (14)$$

$$\tan\left(\frac{1}{2}\kappa_l d\right) = \begin{cases} \epsilon_0|k_{ly}|/\kappa_l \\ -\kappa_l/\epsilon_0|k_{ly}| \end{cases} \quad \text{TM.} \quad (15)$$

For a given value of d , the above conditions are the dispersion relations ω vs k_x of the guided modes in the limit $\epsilon_1 \ll \epsilon_0$. In Fig. 3 we show the first Brillouin zone of the guided-mode dispersion relation ω vs k_x for different values of d for the TE case.

Figure 3(a) shows generic features of the dispersion relation for the TE case while Figs. 3(b) and 3(c) are particular examples for $d = 1.0K^{-1}$ and $d = 10.0K^{-1}$, respectively. In particular, in Fig. 3(b) we also show the dispersion relation obtained from the exact equations (9) for $\epsilon_1 = 0.121$ and $\epsilon_0 = 3.0$; the actual branches for these values are essentially identical to the approximate solutions (14), except at the Brillouin zone edges where the actual branches split; see the inset of Fig. 3(b).

The general features of the dispersion relation shown in Fig. 3(a) are the following. First, we can distinguish a region formed by the areas bounded from above by the solid lines defined by the change of the diffraction orders k_{ly} from real to imaginary [see Eq. (6)] and from below by the dashed lines defined by the first time an eigenmode $\kappa_n(K, \omega, k_x)$ becomes propagating [for small ϵ_1 this is approximately given by the change of the corresponding κ_n from imaginary to real, see Eq. (12)]. We find, both from the exact and the approximate calculations, that for any value of the thickness d of the grating all the guided-mode branches of the dispersion relation are contained within such a region; let us call it the "resonance region." Of course, the location of the branches of the guided-mode dispersion relation depend explicitly on the given value of d , see Figs. 3(b) and 3(c). Second, from the numerical analysis of the structure of the eigenmodes of the exact equations (9) and (10), which are independent of d , one finds that below the lowest dashed line of the resonance region there are no propagating eigenmodes; between the first and the second dashed lines there is one; between the second and the third there are two, and so on. In a similar fashion, from the expression for k_{ly} , Eq. (6), one can see that below the lowest solid line there are no propagating diffraction orders outside the grating; between the first and second solid lines only the order $l=0$ propagates; between the second and the third, both the $l=0$ and the $l=-1$ orders propagate, and so on. Hence, we conclude that within the resonance region the number of propagating eigenmodes is always greater than the number of propagating diffraction orders. Outside the resonance region these numbers are equal and there are no guided modes. Since

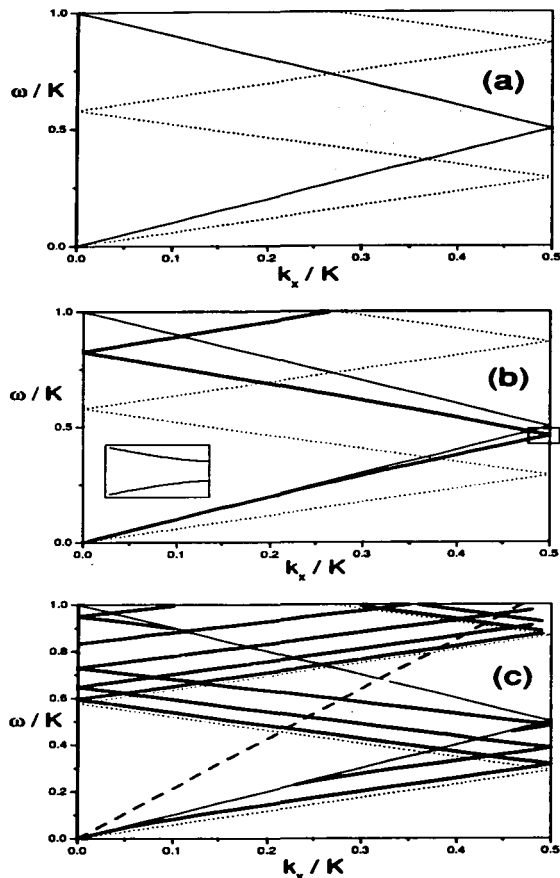


FIG. 3. (a) Generic features of the dispersion relation for s -polarized propagation, with $\epsilon_0 = 3$ and $\epsilon_1 = 0.121$. See text. (b) The thick solid line is the dispersion relation for a grating of thickness $d = 1K^{-1}$. The inset shows the band gap at the Brillouin zone edge. (c) The thick solid lines is the dispersion relation for a grating of thickness $d = 10K^{-1}$. The dotted line represents the incident wave vector at an angle of $\theta = 28^\circ$.

each of the fields *outside* the grating couple to all the eigenmodes, this gives the known additional result that the guided modes cannot be strictly evanescent outside the grating since, in general, there are a finite number of propagating

diffraction orders. This in turn indicates that the branches of the dispersion relation in Figs. 3(b) and 3(c), have a *finite* width. In other words, the guided modes have a finite lifetime. On the other hand, it is this coupling that allows the guided modes to be excited. As an aside point we recall that the lines defined by $k_{ly}=0$ are the places where the so-called Wood anomalies [36] should appear. We have not found any peculiar behavior along these lines, other than being the place where the corresponding diffraction order emerges.

From the dispersion relation one can find the origin of the peaks of the diffraction efficiencies. Consider the case of the diffraction efficiency of the grating of thickness $d = 10.0K^{-1}$ for the TE mode shown in Fig. 2(a). In Fig. 3(c) we show the dispersion relation for this case together with a dashed line that represents the frequency of the incident wave, as a function of k_x , for an incident angle of $\theta = 28^\circ$. The peaks of the corresponding diffraction efficiency [see Fig. 2(a)] appear at the frequencies where the dashed line crosses the dispersion relation of the guided modes. We point out that, by inspection of diffraction efficiencies for several different cases, one finds that as frequency is increased, the peaks of the guided-mode resonances tend to be diminished, and in some cases, they disappear altogether. We believe this is a consequence of the fact that as ω is increased, the number of propagating eigenmodes also increases, giving rise to a distribution of the incident energy among many modes, resulting in a poor excitation of the corresponding guided modes. We found that the resonances always are present when the incident wave vector is of the order of the grating wave vector.

B. Physical origin of the resonances

The fact that inside the resonance region the number of propagating eigenmodes is larger than the number of propagating diffraction orders suggests a simple physical explanation for the resonance phenomenon. For this, we refer to Fig. 4 where we show the transmitted diffraction efficiency as a function of the thickness d of the diffraction slab, and for a fixed value of the incident wave vector k_x and frequency ω , for the TE case. An experiment of this sort would certainly be difficult to perform but it can be theoretically analyzed. The values of k_x and ω were chosen within the resonance region where there are two propagating modes inside, κ_0 and κ_1 , and only one diffraction order ($l=0$) outside the grating. The mode κ_0 and the order $l=0$ are very strongly coupled giving rise to the smooth oscillations of the transmission efficiency. The mode κ_1 is mostly coupled to the evanescent order $l=-1$. However, due to finite size of ϵ_1 all the modes are coupled. Notice that the resonance peaks in Fig. 4 appear *periodically*. As we show below, the resonances are found to be separated by $\Delta d = \pi/\kappa_1$. The separation of the resonances may be expected but what is not so obvious is the position of the first resonance. Since $\epsilon_1 \ll \epsilon_0$ we can proceed in a perturbationlike fashion. To the very lowest order, one can consider that the propagating diffraction order $l=0$ couples only to the propagating mode κ_0 and as said above, the result of this analysis fits very well the smooth oscillations of the efficiencies but shows no resonance peaks. To the next order,

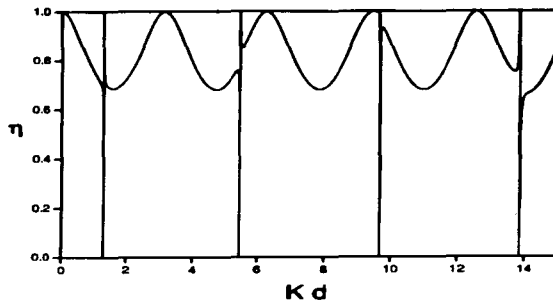


FIG. 4. Transmitted diffraction efficiency η as a function of grating thickness d for incident s-polarized light at a frequency $\omega = 0.6K^{-1}$ and at an angle $\theta = 28^\circ$. $\epsilon_0 = 3$ and $\epsilon_1 = 0.121$. For these parameters there are two propagating modes within the slab and one propagating diffraction order outside of it. The resonances appear periodically due to the condition $\epsilon_1 \ll \epsilon_0$.

the effect of the coupling between the modes within the grating gives rise to the other propagating mode, κ_1 . Consider now the propagation of a front of the latter mode starting at an arbitrary position x in one of the inside walls of the grating. When it reaches and bounces off the opposite wall, it acquires a phase $2\kappa_1 - 2\phi$. When it returns to the original wall, it acquires an additional phase -2ϕ . Thus, the total phase difference between these two fronts is $2\kappa_1 - 4\phi$. When this phase equals $2m\pi$ the fields add up in phase yielding the resonance. That is,

$$\kappa_1 d - 2\phi = m\pi. \quad (16)$$

The phase ϕ can easily be calculated by assuming that this mode only couples to the evanescent order $l=-1$ outside the grating. One finds,

$$\tan \phi = \frac{|k_{-1y}|}{\kappa_1}. \quad (17)$$

For even values of m the equations (16) and (17) can be combined and the result can be cast as the positive solution of Eq. (14) for $l=-1$. An analogous procedure for the odd values of m yields the corresponding negative solution. We can repeat the analysis for each new excited mode κ_n assuming that it couples only to the corresponding l th evanescent order; the result is the same as that given by the equations above. Thus, the resonance conditions given by the generalization of Eqs. (16) and (17) for all l , are equivalent to the guided-mode dispersion relation given by Eq. (14). An analogous description exists for the TM case.

C. Dependence on ϵ_1

The positions of the resonances in the diffraction efficiencies, which were calculated with the exact equations, are

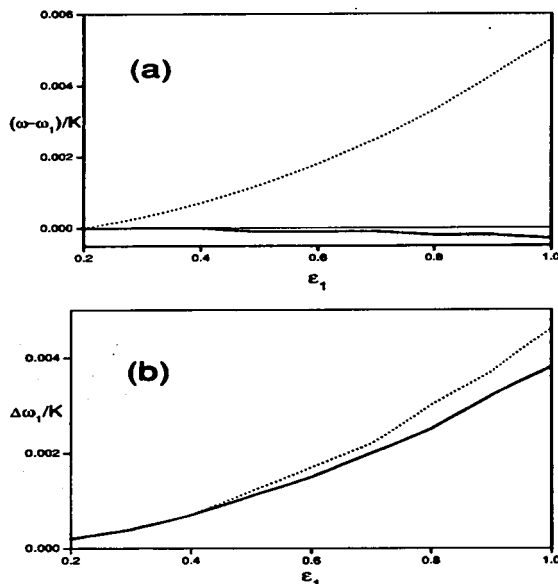


FIG. 5. (a) Shift $(\omega - \omega_1)$ of the first resonance for a grating of thickness $d = 1K^{-1}$ (solid line) and $d = 5K^{-1}$ (dotted line) as a function of ϵ_1 . (b) Width $\Delta\omega_1$ of the same resonance for the same set of parameters.

very accurately described by the approximate dispersion relations (14) and (15) that neglect the finiteness of the grating modulation ϵ_1 . This is a consequence of the fact that the values $\epsilon_1 = 0.121$ and $\epsilon_0 = 3.0$ agree very well with the requirement $\epsilon_1 \ll \epsilon_0$. But, the coupling between different modes inside the grating makes the guided modes, as called in the literature, "leaky." In other words the grating guided modes have a finite lifetime. Obviously, the lifetime is longer the smaller ϵ_1 is, compared with ϵ_0 . Besides becoming wider as ϵ_1 is increased, the positions of the resonances are shifted from their predicted value at $\epsilon_1 = 0$. In Fig. 5(a) we show the shift $(\omega - \omega_1)$ of the position of the first resonance for $d = 1.0K^{-1}$ and for $d = 5.0K^{-1}$ as a function of ϵ_1 ; in the former case, the resonance is centered at $\omega_1 \approx 0.62K^{-1}$ for $\epsilon_1 = 0$ and at $\omega_1 \approx 0.5K^{-1}$ in the latter case. In Fig. 5(b) we show the width $\Delta\omega_1$ of the same resonances as a function of ϵ_1 . These figures exemplify the generic behavior that the peaks become wider as ϵ_1 is increased and that their positions shift in frequency, though the direction of the shift may be positive or negative. We find that these effects are more prominent for larger values of d .

Clearly, if ϵ_1 becomes of the order of ϵ_0 the resonance "lines" are so wide that the concept of "guided mode" may no longer be meaningful. However, we point out that no matter how large ϵ_1 is, i.e., even larger than ϵ_0 , solutions to the Maxwell equations exist [that is, of Eqs. (9) and (10)] with the expected result that the different propagating diffraction orders are more intense than for smaller values of ϵ_1 . We find it interesting that even though the dielectric function $\epsilon(x)$ becomes negative in some *spatial* regions, energy is still conserved. That is, the diffraction efficiencies add up to one. It is not very clear how one could prepare a diffraction grating with these characteristics.

IV. BRAGG PEAKS

Due to the periodicity of the dielectric grating in the x direction, it is expected that there exist peaks in the diffraction efficiencies at incident angles given by the Bragg condition,

$$2k \sin \theta = nK, \quad (18)$$

with n a positive integer. Indeed, it is known that these peaks appear in the transmitted fields of the first diffraction order ($l = -1$ in our notation) at the Bragg angle with $n = 1$, for "thick" diffraction gratings. There have been several approximate analysis of these peaks (both from the coupled-wave theory and from the treatment of light diffracted by ultrasonic waves) [5-7], but they are valid only in a reduced range of parameters. Here, we report this case as well as higher order Bragg peaks, i.e., $n > 1$.

From the dispersion relation, or from Eq. (6) for k_{ly} , the y component of the l th diffraction order, we know how many diffraction orders propagate at a given incident frequency and angle of incidence. For instance, for $0 \leq \omega \leq K$ there are at most two diffraction orders, $l = 0$ and $l = -1$. As the frequency is increased there appear higher orders, and they do so in pairs, $l = m - 1$ and $l = -m$ with m a positive integer. The main result we want to report here is that, in general, the diffraction orders $l = -m$ show peaks at angles given by $n = m$ in the Bragg condition (18). Although the following is not a rigorous analysis, it appears that at the different Bragg angles (i.e., at the different values of n) the corresponding diffraction order, $l = -m$, is diffracted in the same direction as the $l = 0$ transmitted order. This can be seen from the expression for the y component of the diffracted wave vector, which can be rewritten as

$$k_{ly} = [\omega^2 - (2\omega \sin \theta + lK - k_x)^2]^{1/2}, \quad (19)$$

where we have used the fact that $k_x = \omega \sin \theta$. When the angle of incidence obeys the Bragg condition for $n = -l$, Eq. (18), we see that propagation of the $l = -n$ order, $k_{ly} = k_y = \omega \cos \theta$, is in the direction of the incident wave. Thus, the transmission efficiency is enhanced. For positive values of l the above expression cannot be satisfied at any angle (smaller than 90°). To the best of our knowledge the correlation between higher diffraction orders and higher order Bragg peaks has not been reported before.

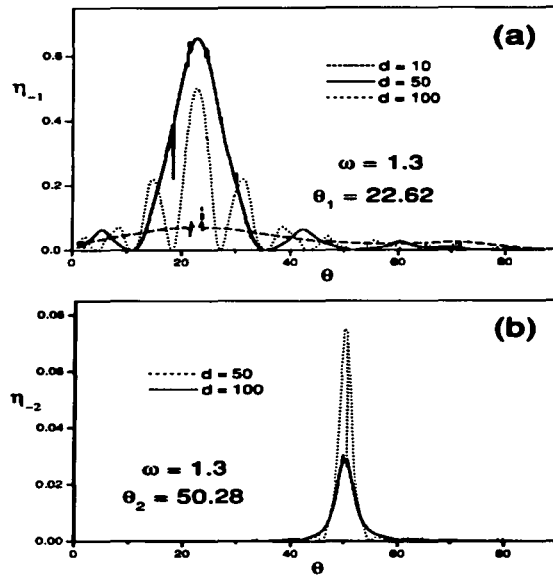


FIG. 6. Transmitted diffraction efficiency η as a function of the angle of incidence θ (deg) for a frequency $\omega = 1.3K^{-1}$, for different grating thickness. (a) $l = -1$ diffraction order; the maximum appears at the Bragg angle with $n = 1$, Eq. (18). (b) $l = -2$ diffraction order; the maximum appears at the Bragg angle with $n = 2$, Eq. (18).

Figures 6 and 7 show examples of this behavior for different thickness d of the diffraction gratings. We highlight two features of these figures. First, one finds that the peaks are more pronounced as d is increased, however, this behavior is not monotonic. For instance, one sees from Fig. 6 that for the order $l = -1$ at the Bragg angle $n = 1$, the peak is greater for $d = 50K^{-1}$ than for $d = 100K^{-1}$, while from Fig. 7 we find that the opposite is true for $l = -2$ at the Bragg angle $n = 2$. Second, besides the main peaks there exist secondary peaks that appear to be Fabry-Perot-like interferences due to the finite size of the grating. These secondary peaks (especially for $d = 100K^{-1}$) may become even greater than the Bragg peak and in some cases this peak is completely masked by the secondary ones [see Fig. 7(a)]. The diffraction orders with $l > 0$ do not show any appreciable peak at any Bragg angle. Their behavior appears to be dominated mainly by the Fabry-Perot-like interferences.

We would like to point out that from equation (18) that the higher order Bragg peaks can also be understood in a different way. That is, as if they are the Bragg peaks of the overtones of the grating wave vector K , i.e., of nK . This

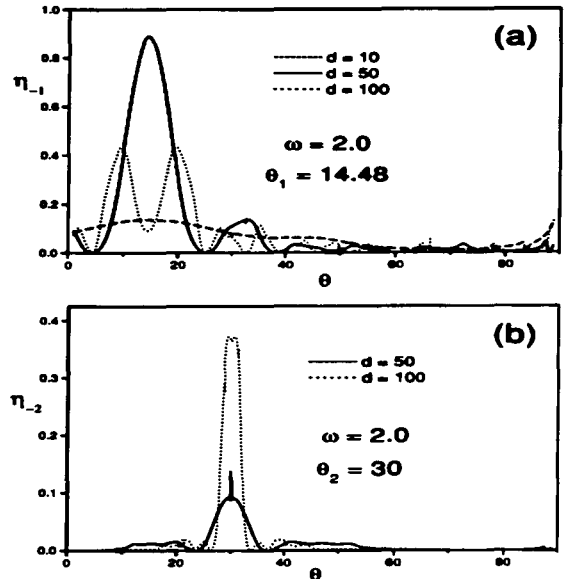


FIG. 7. Transmitted diffraction efficiency η as a function of the angle of incidence θ (deg) for a frequency $\omega = 2.0K^{-1}$, for different grating thickness. (a) $l = -1$ diffraction order; the maximum appears at the Bragg angle with $n = 1$, Eq. (18). (b) $l = -2$ diffraction order; the maximum appears at the Bragg angle with $n = 2$, Eq. (18).

interpretation may be relevant to the experiments performed by Nelson and coworkers [28,29], in spatiotemporal gratings created in ferroelectric crystals by two crossed ultrashort laser pulses. They find responses of diffracted pulses not only at the Bragg angle of the grating wave vector but at its overtones as well. Their interpretation is that the grating also has those wave vector components due to nonlinear excitations in the crystal. It may be relevant to include in such an analysis the possibility that a grating with only one wave vector component can give rise to responses at its overtones as well.

V. CONCLUSIONS AND FINAL REMARKS

We have presented and analyzed the dispersion relation of the guided-mode resonances that appear in sinusoidally modulated dielectric diffraction gratings. The approximate theory, based on assuming only one propagating eigenmode inside the grating and one evanescent wave outside of it, gives a very accurate description of the dispersion relation in the limit in which the modulation ϵ_1 is much smaller than the

background mean dielectric constant ϵ_0 . As expected, the number of branches of the dispersion relation increases as the thickness d of the grating is increased. The gaps of the branches at the band edges of the first Brillouin zone can only be described through the exact theory. The dispersion relation allows for an overall understanding of the behavior of the diffraction efficiencies, for the different orders, as a function of frequency and angle of incidence. We have found that a necessary condition for the resonances to appear is that the number of propagating material eigenmodes must be larger than the number of propagating diffraction orders. This indicates the physical origin of the resonances: first, those extra modes are excited through the coupling with the diffracted orders, and when the inside multiple reflections are in phase, the resonance occurs. In the regions where the number of propagating modes inside the grating are equal to the propagating diffraction orders outside of it, there are no resonances. Although the dispersion relation predicts the location of the resonances, we found that these are more clearly seen for values of the incident frequency of the order of the wave vector grating (divided by c). For higher values of the frequency, the amplitudes of the resonances tend to be diminished and in some cases completely suppressed. As the modulation ϵ_1 is increased relative to ϵ_0 , the coupling among the modes is also increased, giving rise to shifts in the positions of the resonances as well as a reduction in their lifetimes. We found that this behavior depends strongly on the thickness d of the grating; for instance, for $d = 10.0K^{-1}$, the lowest resonance is so shifted that for $\epsilon_1 \approx 1$ it completely

disappears. We were not able to find an analytical description for the shifts and the widening of the resonances. We emphasize that, in principle, any question regarding these systems can be answered through the exact coupled-wave theory [33]; with the current available computer capabilities one can achieve the necessary numerical accuracy.

Finally, it is very interesting and relevant to point out the result that the locations of the Bragg peaks at different orders are correlated with the different propagating diffraction orders. We showed that this correlation occurs at the angle where the corresponding diffraction orders propagate in the same direction as the incident wave. In the several approximate theories that deal with the Bragg diffraction [5–7], only the first Bragg peak is analyzed and it is found that this effect is more pronounced for “thicker” gratings (say, $d > 10K^{-1}$). We have found that, although the effect is better seen for thicker gratings, the behavior is not monotonic and, depending on the incident frequency and the thickness d of the grating, the background Fabry-Perot-like interference peaks may be of the order of, or even larger than the Bragg peak itself. The full understanding of this complicated behavior deserves further theoretical analysis.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported by CONACyT (Mexico) through Grant No. 32634-E. S.N.-H. acknowledges support from DGEP, UNAM, Mexico.

- [1] A. Hessel and A.A. Oliner, *Appl. Opt.* **4**, 1275 (1965).
 [2] S.S. Wang, R. Magnusson, J.S. Bagby, and M.G. Moharam, *J. Opt. Soc. Am. A* **7**, 1470 (1990).
 [3] S.S. Wang and R. Magnusson, *Appl. Opt.* **32**, 2606 (1993).
 [4] T. Peter, R. Brüer, and O. Bryngdahl, *Opt. Commun.* **139**, 177 (1997).
 [5] C.B. Burckhardt, *J. Opt. Soc. Am. A* **56**, 1502 (1966).
 [6] M.G. Moharam, T.K. Gaylord, and R. Magnusson, *J. Opt. Soc. Am.* **70**, 300 (1980).
 [7] M.G. Moharam, T.K. Gaylord, and R. Magnusson, *Opt. Commun.* **32**, 14 (1980).
 [8] F. Schreier, M. Schmitz, and O. Bryngdahl, *Opt. Lett.* **23**, 576 (1998).
 [9] F. Schreier, M. Schmitz, and O. Bryngdahl, *Opt. Lett.* **23**, 1337 (1998).
 [10] F. Schreier and O. Bryngdahl, *J. Opt. Soc. Am. A* **17**, 68 (2000).
 [11] E.N. Glytis and T.K. Gaylord, *Appl. Opt.* **28**, 2401 (1989).
 [12] J.C.W.A. Costa and A.J. Giarola, *IEEE Trans. Antennas Propag.* **43**, 529 (1995).
 [13] D. Rosenblatt, A. Sharon, and A.A. Friesem, *IEEE J. Quantum Electron.* **33**, 2038 (1997).
 [14] T. Tamir and S. Zhang, *J. Opt. Soc. Am. A* **14**, 1607 (1997).
 [15] G. Levy-Yurista and A.A. Friesem, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 1596 (2000).
 [16] S.S. Wang and R. Magnusson, *Opt. Lett.* **19**, 919 (1994).
 [17] J. Saarinen, E. Noponen, and J. Turunen, *Opt. Eng.* **34**, 2560 (1995).
 [18] P. Rochon, A. Natansohn, C.L. Callender, and L. Robitaille, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 1008 (1997).
 [19] S.M. Norton, T. Erdogan, and G.M. Morris, *J. Opt. Soc. Am. A* **14**, 629 (1997).
 [20] D. Shin, S. Tibuleac, T.A. Maldonado, and R. Magnusson, *Opt. Eng.* **37**, 2634 (1998).
 [21] R. Magnusson, D. Shin, and Z.S. Liu, *Opt. Lett.* **23**, 612 (1998).
 [22] D.L. Brundrett, E.N. Glytis, and T.K. Gaylord, *Opt. Lett.* **23**, 700 (1998).
 [23] Z.S. Liu, S. Tibuleac, D. Shin, P.P. Young, and R. Magnusson, *Opt. Lett.* **23**, 1556 (1998).
 [24] F. Lemarchand, A. Sentenac, E. Cambil, and H. Giovannini, *J. Opt. A. Pure Appl. Opt.* **1**, 545 (1999).
 [25] R.J. Stockermans and P.L. Rochon, *Appl. Opt.* **38**, 3714 (1999).
 [26] R.R. Boye and R.K. Kostuk, *Appl. Opt.* **39**, 3649 (2000).
 [27] Z. Hegedus and R. Netterfield, *Appl. Opt.* **39**, 1469 (2000).
 [28] C.J. Brennan and K.A. Nelson, *J. Chem. Phys.* **107**, 9691 (1997).
 [29] K.A. Nelson and coworkers, *J. Chem. Phys.* **114**, 1443 (2001).
 [30] M.G. Moharam and T.K. Gaylord, *J. Opt. Soc. Am.* **71**, 811 (1981).
 [31] M.G. Moharam and T.K. Gaylord, *J. Opt. Soc. Am.* **73**, 451 (1983).

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

- [32] M.G. Moharam and T.K. Gaylord, *J. Opt. Soc. Am.* **73**, 1105 (1983).
- [33] T.K. Gaylord and M.G. Moharam, *Proc. IEEE* **73**, 894 (1985). This is a very comprehensive review of this theory as well as comparisons with other approximated schemes.
- [34] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*,

1st ed. (Editorial, Country, 1959).

- [35] The technique proposed by Moharam and Gaylord, Refs. [30–33], to solve the eigenvalue problem of the fields inside the gratings does not lead to an orthogonal matrix and, therefore, the property that the corresponding eigenvalues must be real does not hold.
- [36] R.W. Wood, *Philos. Mag.* **4**, 396 (1902).

Bibliografía

- [1] Víctor Romero-Rochín y Jeffery A. Cina. *Aspects of impulsive stimulated scattering in molecular systems.*
Phys. Rev. A **50**, 765 (1994).
- [2] Yong-Xin Yan, Edward B. Gamble, Jr., and Keith A. Nelson. *Impulsive stimulated scattering: General importance in femtosecond laser pulse interactions with matter, and spectroscopic applications.*
J. Chem. Phys. **83** (11), 5391 (1985).
- [3] H. J. Bakker, S. Hunsche, and H. Kurz. *Investigation of anharmonic lattice vibrations with coherent phonon polaritons.*
Phys. Rev. B. **50** (2), 914 (1994).
- [4] Thomas P. Dougherty, Gary P. Wiederrecht, Keith A. Nelson, Mark H. Garrett, Hans P. Jenssen, y Cardinal Warde. *Femtosecond time-resolved spectroscopy of soft modes in structural phase transitions of perovskites.*
Phys. Rev. B. **50** (13), 8996 (1994).
- [5] S. de Silvestri, J. G. Fujimoto, E. P. Ippen, Edward B. Gamble Jr., Leah Ruby Williams, y Keith A. Nelson. *Femtosecond time-resolved measurements of optic phonon dephasing by Impulsive Stimulated Raman Scattering in α -perylene crystal from 20 to 300 K.*
Chem. Phys. Lett. **116** (2,3), 146 (1985).
- [6] P. C. M. Planken, L. D. Noordam, J. T. M. Kennis, and A. Lagendijk. *Femtosecond time-resolved study of the generation and propagation of phonon polaritons in LiNbO_3 .*
Phys. Rev. B. **45** (13), 7106 (1991).
- [7] Gary P. Wiederrecht, Thomas P. Dougherty, Lisa Dhar, Keith A. Nelson, D. E. Leaird and A. M. Weiner. *Explanation of anomalous polariton dynamics in LiTaO_3 .*
Phys. Rev. B **51** (2), 916 (1995).

- [8] Ciaran J. Brennan y Keith A. Nelson. *Direct time-resolved measurements of anharmonic lattice vibrations in ferroelectric crystals*.
J. Chem. Phys. **107**(22), 9691 (1997).
- [9] Ciaran Joseph Brennan. *Femtosecond Wavevector Overtone Spectroscopy of Anharmonic Lattice Dynamics in Ferroelectric Crystals*.
Ph. D. tesis Massachusetts Institute of Technology, Boston, 1997.
- [10] Richard M. Koehl and Keith A. Nelson. *Coherent optical control over collective vibrations traveling at lightlike speeds*.
J. Chem. Phys. **114** (4), 1443 (2001).
- [11] Víctor Romero-Rochín, Richard M. Koehl, Ciaran J. Brennan, and Keith A. Nelson. *Anharmonic phonon-polariton excitation through impulsive stimulated Raman scattering and detection through wave vector overtone spectroscopy: Theory and comparison to experiments on lithium tantalate*.
J. Chem. Phys. **111** (8), 3559 (1999).
- [12] Iris Inbar y R. E. Cohen. *Comparison of the electronic structures and energetics of ferroelectric $LiNbO_3$ y $LiTaO_3$* .
Phys. Rev. B. **53** (3), 1193 (1995).
- [13] P. Greiner, D. Houde, S. Jandl y L. A. Boatner. *Measurement of the soft polariton in $KTa_{0,93}Nb_{0,07}O_3$ by time-resolved four-wave mixing*.
Phys. Rev. B. **50** (22), 16 295 (1994).
- [14] J. Etchepare, G. Grillon, A. Antonetti, J. C. Loulergue, M. D. Fontana and G. E. Kugel. *Third-order nonlinear susceptibilities and polariton modes in $PbTiO_3$ obtained by temporal measurements*.
Phys. Rev. B. **41** (17), 12 362 (1990).
- [15] S. Fahy y R. Merlin. *Reversal of Ferroelectric Domains by Ultrashort Optical Pulses*.
Phys. Rev. Lett. **73** (8), 1122 (1994).
- [16] Jorge V. José y Eugene J. Salatan. *Classical Dynamics. A contemporary approach*.
Cambridge university Press. 1998.
- [17] Sara Nilsen-Hofseth y Víctor Romero-Rochín. *Dispersion relation of guided-mode resonances and Bragg peaks in dielectric diffraction gratings*.
Phys. Rev. E **64**, 036614 (2001).

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

- [18] R. W. Wood. *A suspected case of the Electrical Resonance of Minute Metal Particles for Light Waves. A New Type of Absorption.*
Phil. Mag. **4**, 396 (1902).
- [19] R. W. Wood. *Anomalous Diffraction Gratings.*
Phys. Rev. **48**, 928 (1935).
- [20] A. Hessel y A. A. Oliner. *A New Theory of Wood's Anomalies on Optical Gratings.*
Appl. Opt. **10** (4), 1275 (1965).
- [21] M. G. Moharam y T. K. Gaylord. *Rigorous coupled-wave analysis of metallic surface-relief grating.*
J. Opt. Soc. Am. A **3** (11), 1780 (1986)
- [22] S. S. Wang, R. Magnusson, J. S. Bagby and M. G. Moharam. *Guided-mode resonances in planar dielectric-layer diffraction gratings.*
J. Opt. Soc. Am. A **7** (8), 1470 (1990).
- [23] S. S. Wang and R. Magnusson. *Theory and applications of guided-mode resonance filters.*
Appl. Opt. **32** (14), 2606 (1993).
- [24] Ricardo A. Depine y Diana C. Skigin. *Resonant modes of a bottle-shaped cavity and their effects in the response of finite and infinite gratings.*
Phys. Rev. E **61** (4), 4479 (1999).
- [25] Ricardo A. Watts, Trevor W. Preist y J. Roy Sambles. *Sharp surface-plasmon resonances on deep diffraction gratings.*
Phys. Rev. Lett. **79** (20), 3978 (1997).
- [26] W. C-. Tan, T. W. Preist, J. R. Sambles, y N. P. Wanstall. *Flat surface-plasmon-polariton bands and resonant absorption on short-pitch metal gratings.*
Phys. Rev. B **59** (19), 12 661 (1999).
- [27] M. B. Sobnack, W. C. Tan, N. P. Wanstall, T. W. Preist, J. R. Sambles. *Stationary surface plasmons on a zero-order metal grating.*
Phys. Rev. Lett. **80** (25), 5667 (1998).

- [28] A. Sharon, S. Glasberg, D. Rosenblatt, y A. A. Friesem. *Metal-based resonant grating waveguide structures*.
J. Opt. Soc. Am. A **14** (3), 588 (1997).
- [29] S. Glasberg, A. Sharon, D. Rosenblatt, y A. A. Friesem. *Long-range surface plasmon resonances in grating-waveguide structures*.
Appl. Phys. Lett. **70** (10), 1210 (1997).
- [30] T. López-Ríos, D. Mendoza, F. J. García-Vidal, J. Sánchez-Dehesa, y B. Pannetier. *Surface Shape Resonances in Lamellar Metallic Gratings*.
Phys. Rev. Lett. **81** (3), 665 (1998).
- [31] J. A. Porto, F. J. García-Vidal, y J. B. Pendry. *Transmission resonances on metallic gratings with very narrow slits*.
Phys. Rev. Lett. **83** (14), 2845 (1999).
- [32] Frank Schreier y Olof Bryngdahl. *Confined wave packets in the domain of Rayleigh-Wood anomalies*.
J. Opt. Soc. Am. A **17** (1), 68 (2000).
- [33] D. Chauvat, O. Emile, F. Bretenaker, y A. Le Floch. *Direct measurement of the Wigner delay associated with the Goos-Hänchen effect*.
Phys. Rev. Lett. **83** (14), 2845 (1999).
- [34] Max Born y Emil Wolf. *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*.
1er ed. 1959
- [35] M. G. Moharam, T. K. Gaylord, y R. Magnusson. *Bragg diffraction of finite beams by thick gratings*.
J. Opt. Soc. Am. **70** (3), 300 (1980).
- [36] M. G. Moharam, T. K. Gaylord, y R. Magnusson. *Criteria for Bragg regime diffraction by phase gratings*.
Opt. Commun. **32** (1), 14 (1980).
- [37] T. K. Gaylord y M. G. Moharam. *Analysis and applications of Optical Diffraction by Gratings*.
Proc. IEEE **73** (5), 894 (1985).

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

- [38] T. K. Gaylord y M. G. Moharam. *Symbols Units Nomenclature. Thin and thick gratings: terminology clarification.*
Appl. Opt. **20** (19), 3271 (1981).
- [39] M. G. Moharam y T. K. Gaylord. *Rigorous coupled-wave analysis of grating diffraction - E-mode polarization and losses.*
J. Opt. Soc. Am. **73** (4), 451 (1982).
- [40] M. G. Moharam y T. K. Gaylord. *Three-dimensional vector coupled-wave analysis of planar-grating diffraction.*
J. Opt. Soc. Am. **73** (9), 1105 (1983).
- [41] M. G. Moharam y T. K. Gaylord. *Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction.*
J. Opt. Soc. Am. **71** (7), 811 (1981).
- [42] W. E. Baird, M. G. Moharam, y T. K. Gaylord. *Diffraction Characteristics of Planar Absorption Gratings.*
Appl. Phys. B **32**, 15 (1983).
- [43] Thomas K. Gaylord, W. E. Baird, y M. G. Moharam. *Zero-reflectivity high spatial-frequency rectangular-groove dielectric surface-relief gratings.*
Appl. Opt. **25** (24), 4562 (1986).
- [44] M. G. Moharam, Eric B. Grann, Drew A. Pommet, y T. K. Gaylord. *Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings.*
J. Opt. Soc. Am. A **12** (5), 1068 (1995).
- [45] M. G. Moharam, Drew A. Pommet, Eric. B. Grann y T. K. Gaylord. *Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach.*
J. Opt. Soc. Am. A **12** (5), 1077 (1995).
- [46] Eric. B. Grann, M. G. Moharam, y Drew A. Pommet. *Artificial uniaxial and biaxial dielectrics with use of two-dimensional subwavelength binary gratings.*
J. Opt. Soc. Am. A **11** (10), 2695 (1994).

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

- [47] Eric. B. Grann y M. G. Moharam. *Comparison between continuous and discrete sub-wavelength grating structures for antireflection surfaces.*
J. Opt. Soc. Am. A **13** (5), 988 (1996).
- [48] Eric. B. Grann, M. G. Moharam, y Drew A. Pommet. *Optimal design for antireflective tapered two-dimensional subwavelength grating structures.*
J. Opt. Soc. Am. A **12** (2), 333 (1995).
- [49] Donald K. Jacob, Steven C. Dunn, y M. G. Moharam. *Design considerations for narrow-band dielectric resonant grating reflection filters of finite length.*
J. Opt. Soc. Am. A **17** (7), 1241 (2000).
- [50] E. N. Glytsis y T. K. Gaylord. *High-spatial-frequency binary and multilevel stairstep gratings: polarization-selective mirrors and broadband antireflection surfaces.*
Appl. Opt. **31** (22), 4459 (1992).
- [51] E. N. Glytsis y T. K. Gaylord. *Rigorous three-dimensional coupled-wave diffraction analysis of single and cascaded anisotropic gratings.*
J. Opt. Soc. Am. A **4** (11), 2061 (1987).
- [52] Guy Levy-Yurista y Asher A. Friesem. *Very narrow spectral filters with multilayered grating-waveguide structures.*
Appl. Phys. Lett. **77** (11), 1596 (2000).
- [53] R. Magnusson y S. S. Wang. *New principle for optical filters.*
Appl. Phys. Lett. **61** (9), 1022 (1992).
- [54] S. Tibuleac y R. Magnusson. *Reflection and transmission guided-mode resonance filters.*
J. Opt. Soc. Am. A **14** (7), 1617 (1997).
- [55] R. Magnusson y S. S. Wang. *Transmission bandpass guided-mode resonance filters.*
Appl. Opt. **34** (35), 8106 (1995).
- [56] S. S. Wang y R. Magnusson. *Design of waveguide-grating filters with symmetrical line shapes and low sidebands.*
Opt. Lett. **19** (12), 919 (1994).

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

- [57] Jyrki Saarinen, Eero Nojonen y Jari Turunen. *Guided-mode resonance filters of finite aperture*.
Opt. Eng. **34** (9), 2560 (1995).
- [58] P. Rochon, A. Natansohn, C. L. Callender y L. Robitaille. *Guided mode resonance filters using polymer films*. par Appl. Phys. Lett. **71** (8), 1008 (1997).
- [59] Scott M. Norton, Turan Erdogan, y Michael Morris. *Coupled-mode theory of resonant-grating filters*.
J. Opt. Soc Am. A **14** (3), 629 (1997).
- [60] Dongho Shin, Sorin Tibuleac, Theresa A. Maldonado y Robert Magnusson. *Thin-film optical filters with diffractive elements and waveguides*.
Opt. Eng. **37** (9), 2634 (1998).
- [61] R. Magnusson, D. Shin, y Z. S. Liu. *Guided-mode resonance Brewster filter*.
Opt. Lett. **23** (8), 612 (1998).
- [62] Z. S. Liu, S. Tibuleac, D. Shin, P. P. Young, and R. Magnusson. *High-efficiency guided-mode resonance filter*.
Opt. Lett **23** (19), 1556 (1998).
- [63] F. Lemarchand, A. Sentenac, E. Cambri y H. Giovannini. *Study of the resonant behaviour of waveguide gratings: increasing the angular tolerance of guided-mode filters*.
J. Opt. A: Pure Appl. Opt. **1**, 545 (1999).
- [64] Robert R. Boye y Raymond K. Kostuk. *Investigation of the effect of finite grating size on the performance of guided-mode resonance filters*.
Appl. Opt. **39** (21), 3649 (2000).
- [65] Raymond J. Stockermans y Paul L. Rochon. *Narrow-band resonant grating waveguide filters constructed with azobenzene polymers*.
Appl. Opt. **38** (17), 3714 (1999).
- [66] Zoltan Hegedus y Roger Netterfield. *Low sideband guided-mode resonant filter*.
Appl. Opt. **39** (10), 1469 (2000).
- [67] Scott M. Norton, G. Michael Morris, y Turan Erdogan. *Experimental investigation of resonant-grating filter lineshapes in comparison with theoretical models*.
J. Opt. Soc. Am. A **15** (2), 464 (1998).

- [68] David L. Brundrett, Elias N. Glytsis, y Thomas K. Gaylord. *Normal-incidence guided-mode resonant grating filters: design and experimental demonstration*. Opt. Lett. **23** (9), 700 (1998).
- [69] C. B. Burckhardt. *Diffraction of a Plane Wave at a Sinusoidally Stratified Dielectric Grating*. J. Opt. Soc. Am. **56** (11), 1502 (1966).
- [70] Richard P. Kenan. *Multiwave analysis of grating diffraction at Bragg incidence*. J. Opt. Soc. Am. A **7** (8), 1457 (1990).

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN