



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

CALCULO DEL CAMPO ELECTROMAGNETICO
CERCA DE SUPERFICIES RUGOSAS:
EFECTOS DE LA DISPERSION ESPACIAL

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)

P R E S E N T A

S H U W A N G

México, D. F.

Septiembre de 1989



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.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

CALCULO DEL CAMPO ELECTROMAGNETICO
CERCA DE SUPERFICIES RUGOSAS:
EFECTOS DE LA DISPERSION ESPACIAL

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)

P R E S E N T A

S H U W A N G L I N

México, D. F.

Septiembre de 1989

Quisiera agradecer al Dr. Rubén Barrera y al Dr. Luis Mochán el apoyo que me han brindado.

Además quisiera agradecer el apoyo financiero que me ha proporcionado la Secretaría de Educación de la República Popular China, la Dirección General de Asuntos del Personal Académico de la Universidad Nacional Autónoma de México y el Centro de Investigación en Física de la Universidad de Sonora, a través de sus Comités de Becas u otras formas.

RESUMEN

Se desarrolla un método perturbativo para obtener los campos electromagnéticos en la cercanía de superficies rugosas, tomando en cuenta la dispersión espacial y usando un modelo hidrodinámico para describir al gas de electrones. Se obtiene la solución general en términos de una serie de potencias de la amplitud de la rugosidad. Los efectos de la no localidad se obtienen comparando el modelo hidrodinámico con un modelo local. Se interpretan los resultados en términos del acoplamiento resonante entre el campo electromagnético dispersado y los modos colectivos del metal. A la teoría se aplica al cálculo de la anisotropía en la reflexión de luz sobre una superficie reconstruida de oro.

I N D I C E S

Introducción	1
Capitulo 1 Teoría General del Electromagnetismo en Medios Materiales	6
1.1 Vector de Inducción Eléctrica Generalizada	6
1.2 Funciones Respuesta	8
1.3 La Dispersión Espacial	10
1.4 Modelo Hidrodinámico	12
1.5 Modos de Oscilación del Sistema	15
1.6 Modos Electromagnéticos en un Medio Semi-infinito Isotrópico y Local	17
1.7 Modos Electromagnéticos en un Medio Semi-infinito Nolocal	19
Capitulo 2 Teoría Perturbativa de la Dispersión de Luz por una Superficie Rugosa en Ausencia de Transiciones Interbanda	21
2.1 Introducción	21
2.2 Desarrollo del Cálculo Perturbativo para un Modelo de Gas de Electrones	24
2.3 Resultados para Dispersión con Polarizaciones	35
Capitulo 3 Formalismo General para los Casos No local y Local Incluyendo el Efecto de Transición Interbanda	40
3.1 Cálculo para el caso no local	41
3.2 El limite local	53
Capitulo 4 Interpretación de los Efectos Resonantes entre el Campo Dispersado y los Modos Colectivos del Metal	54
Conclusiones	61
Apéndices y Tablas	65
Bibliografía	80
Pies de Figura	86
Figuras	90

INTRODUCCION

En años recientes se empezó a desarrollar una variedad de teorías y técnicas experimentales para el estudio de la física de superficies. Esto se debió, en parte, a las múltiples aplicaciones tecnológicas relacionadas con los fenómenos de superficie tales como son los fenómenos de fisisorción y quimisorción, así como la oxidación y el desarrollo de reacciones químicas en superficies. Las rejillas (superficies con rugosidad periódica) han sido utilizadas en aplicaciones diversas, por ejemplo las espectroscopías ópticas,^[1] en la holografía,^[2] en la energía solar,^[3] y en la óptica espacial.^[4]

Entre las técnicas que existen para el estudio de superficies se encuentran las espectroscopías ópticas que consisten en iluminar la superficie con luz (cuya frecuencia se encuentra típicamente entre el infrarrojo y el ultravioleta), y observar la intensidad, la polarización y la fase de la luz dispersada como función de la frecuencia y del ángulo de incidencia. Las espectroscopías ópticas tienen las siguientes ventajas con respecto a otras técnicas: en primer lugar interactúan con la superficie en forma no destructiva y en segundo lugar no requieren sistemas de alto vacío. Entre las desventajas se encuentra que la longitud de onda es mucho mayor que la distancia típica entre átomos y la gran distancia de penetración de la luz (del orden de la longitud de la onda) en la materia; por lo tanto, es difícil extraer información sobre la superficie. Sin embargo esta dificultad se ha superado usando las técnicas diferenciales o aquellas que exciten modos

electromagnéticos sensibles al estado de superficie, tales como los plasmones-polaritones de superficie.^[5,6] Para interpretar experimentos relacionados con las espectroscopías ópticas, es necesario contar con una teoría sobre las propiedades ópticas del sistema.

En muchos problemas físicos se aproxima tomando la superficie real de un sólido por una superficie lisa; sin embargo, esta idealización no es válida con frecuencia. En superficies no idealmente planas la reflexión de las ondas electromagnéticas produce ondas dispersadas además de la onda reflejada especularmente, que es la única producida por superficies estrictamente planas. Algunos ejemplos de estos fenómenos son las ondas de radio dispersadas por la superficie del mar, la luz reflejada en una superficie metálica reconstruida. Las ondas no especulares son determinantes en la dispersión Raman gigante por moléculas adsorbidas en una superficie de metal.^[5]

La difracción por superficies rugosas ha sido estudiada en la ingeniería de radiofrecuencia,^[7,8] la geofísica,^[9] la astronomía,^[10] la óptica, y la física del estado sólido. Fraunhofer construyó la primera rejilla de difracción óptica en 1821.^[11] Más tarde, en 1902, Wood^[12,13] observó cambios abruptos en el espectro de reflectancia de rejillas metálicas. Según Fano,^[14] esta anomalía se debe a la excitación de modos electromagnético en superficie.

El acoplamiento de fotones con los modos de plasmones de superficie en superficies metálicas rugosas, ha atraído mucho interés recientemente. Dicho fenómeno es permitido al desaparecer la simetría translacional en de la superficie. La excitación de plasmones de superficie ha sido utilizada para la medición precisa

de los parámetros ópticos de muchos materiales,^[15-17] para la determinación de la anisotropía óptica,^[17] y tiene efectos en la radiación de juntas tunel,^[18-21] en la amplificación superficial de la dispersión Raman,^[22-28] y en la amplificación de la generación del segundo armónico.^[29-32] Existe también un gran número de trabajos sobre la emisión de luz por plasmones que se propagan a lo largo de superficies rugosas, la presencia de mínimos en la intensidad en la luz reflejada por superficies rugosas debido a la excitación de plasmones de superficie, y el cambio de la relación de dispersión del plasmon de superficie debido a la rugosidad.^[33-40]

La mayoría de los cálculos anteriormente mencionados se han realizado para sistemas descritos mediante una respuesta dieléctrica local. Por respuesta local entendemos aquélla en que el desplazamiento eléctrico en un punto dado del medio depende sólo del campo eléctrico en ese punto exclusivamente. Sin embargo, los metales son sistemas no locales, es decir, un electrón en un metal que interacciona con un campo eléctrico al tiempo t' en el punto r' , puede contribuir a la corriente eléctrica a un tiempo posterior t y en un punto r cercano, debido a la correlación electrónica. En este caso la relación entre el desplazamiento $D(r,t)$ y el campo $E(r,t)$ es, por lo tanto, una integral sobre el tiempo y el espacio.

En los sistemas con respuesta no local^[41-50] las ondas dispersadas (reflejadas y transmitidas) pueden tener modos longitudinales además de los modos transversales. Para obtener las amplitudes de las ondas es necesario utilizar las condiciones de contorno en la interface. Estas condiciones son obtenidas de las ecuaciones de Maxwell en un sistema con respuesta local. Sin embargo, para los sistemas con respuesta no local las ecuaciones de

Maxwell no bastan para determinar todas las amplitudes. Por lo tanto se recurre al uso de las llamadas condiciones adicionales a la frontera (ABC's).^[51-54]

Nuestro objetivo es desarrollar un formalismo general para calcular las propiedades ópticas de un metal con superficie rugosa, caracterizado por una función dieléctrica no local, utilizando el modelo hidrodinámico^[55-57] para la descripción de la respuesta de los electrones, e imponiendo condiciones adicionales en la frontera.

El presente trabajo está organizado de la siguiente forma: En el Capítulo 1 se desarrolla una teoría general sobre el comportamiento de los campos electromagnéticos en medios infinitos y en presencia de interfaces planas. Se introduce el modelo hidrodinámico de la función dieléctrica no local del metal y se obtienen los modos propios del sistema.

En el capítulo 2 desarrollamos un cálculo perturbativo para una rejilla metálica. En este cálculo se desprecian las transiciones electrónicas interbanda debidas al potencial periódico de la red iónica y se supone que la condición de frontera adicional es la continuidad de la corriente perpendicular a la interface.

En el Cap.3 el formalismo se extiende para considerar los efectos de las transiciones electrónicas interbandas, las cuales dan una contribución local a la función dieléctrica. Esto conduce a condiciones de frontera distintas a las utilizadas en el Capítulo 2. Sin embargo, los resultados de ese capítulo pueden ser obtenidos fácilmente como un caso límite de las expresiones deducidas en este capítulo. Nuestros resultados se pueden entender en base al acoplamiento resonante entre los campos electromagnéticos dispersados y los modos propios de la superficie metálica.

El Capítulo 4 discute la posición de los picos de resonancia de los factores de amplificación del campo electromagnético como función de la frecuencia y del período de la rejilla con la relación de dispersión de los modos de una superficie plana. En nuestro trabajo se muestran, por primera vez, las circunstancias bajo las cuales los efectos no locales son importantes en el cálculo de los campos electromagnéticos cerca de superficies rugosas.

Encontramos que hay regiones de frecuencia en donde se observa una gran diferencia entre el cálculo local y el no local. Como una extensión de este trabajo, presentamos también el cálculo de la anisotropía en la reflectancia a incidencia normal para una cara reconstruida de oro, modelando esta reconstrucción por una rejilla microscópica.

Al final del trabajo presentamos las conclusiones generales del trabajo y una serie de apéndices en donde se incluyen los detalles de algunos de los cálculos realizados.

TEORIA GENERAL DEL ELECTROMAGNETISMO EN MEDIOS MATERIALES

1.1 Vector de inducción eléctrica generalizada

La electrodinámica de los medios materiales está basada en las ecuaciones de Maxwell macroscópicas que se pueden escribir como

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (1.1-1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (1.1-2)$$

$$\nabla \cdot \mathcal{D} = 4\pi \rho_{\text{ext}}, \quad (1.1-3)$$

y

$$\nabla \times \mathbf{B} = +\frac{1}{c} \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_{\text{ext}}, \quad (1.1-4)$$

donde \mathbf{E} es la intensidad del campo eléctrico, \mathbf{B} es la inducción magnética, ρ_{ext} , \mathbf{j}_{ext} son las densidades de carga y de corriente externas, respectivamente y \mathcal{D} es el vector de inducción eléctrica generalizado definido por

$$\mathcal{D}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + 4\pi \int_{-\infty}^t \mathbf{j}(\mathbf{r}, t') dt', \quad (1.1-5)$$

donde \mathbf{j} es la densidad de corriente inducida total. Podemos identificar a la integral en la Ec.(1.1-5) con el vector de polarización generalizado \mathcal{P} . Por lo tanto

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}(\mathbf{r}, t), \quad (1.1-6)$$

y utilizando la ecuación de continuidad, la densidad de carga inducida total está dada por

$$\rho(\mathbf{r}, t) = -\int_{-\infty}^t \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t') dt' = -\nabla \cdot \mathcal{P}. \quad (1.1-7)$$

Observamos que el vector \mathcal{P} puede tener distintas interpretaciones físicas dependiendo de la naturaleza de \mathbf{j} . Por

ejemplo,

1) cuando \mathbf{j} es la corriente producida por dipolos inducidos, \mathcal{P} es la densidad de momento dipolar por unidad de volumen;

2) cuando \mathbf{j} es la corriente de conducción de los electrones libres, lo que tiene una interpretación física es

$$\partial\mathcal{P}/\partial t = \mathbf{j};$$

3) cuando \mathbf{j} es la corriente ligada, \mathcal{P} estará relacionado con las propiedades magnéticas del material. Por esta razón, con la definición (1.1-5), no es necesario introducir otro campo \mathbf{H} como se hace usualmente.

Para resolver el problema de los campos en medios materiales, es necesario que exista una relación entre \mathcal{D} , \mathbf{E} y \mathbf{B} . Supongamos que esta relación es una dependencia lineal de la siguiente forma: ^[58]

$$\mathcal{D} = \hat{\alpha}\mathbf{E} + \hat{\beta}\mathbf{B}, \quad (1.1-8)$$

Por otro lado, de la Ec.(1.1-1) podemos escribir la inducción magnética \mathbf{B} como:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = -\int_{-\infty}^t \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t') dt' \quad (1.1-9)$$

Por lo tanto podemos excluir la \mathbf{B} de la Ec.(1.1-8), y se obtiene

$$\mathcal{D} = \hat{\alpha}\mathbf{E} + \hat{\beta} \int_{-\infty}^t \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t') dt' = \hat{\epsilon} \mathbf{E}, \quad (1.1-10)$$

donde $\hat{\epsilon}$ es un operador que contiene toda la información del medio.

De esta manera se vuelve innecesario introducir \mathbf{H} en las ecuaciones de Maxwell y se elimina la ecuación material $\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}$.

1.2 Funciones respuesta

El efecto de un campo electromagnético en un material es cambiar el estado de movimiento de sus partículas cargadas. La respuesta del material, desde el punto de vista macroscópico, está dada por cambios en cantidades como las densidades de carga ρ , la corriente eléctrica \mathbf{j} y el vector de polarización generalizado \mathcal{P} . Las ecuaciones de Maxwell nos permiten calcular el campo eléctrico \mathbf{E} y el campo magnético inducido \mathbf{B} para \mathbf{j} y \mathcal{P} dados. Las ecuaciones materiales, las cuales relacionan \mathbf{j} , \mathcal{P} con el campo \mathbf{E} , son ecuaciones complementarias a las ecuaciones de Maxwell y se denominan ecuaciones constitutivas. Estas ecuaciones están dadas por un conjunto de operadores que al actuar sobre el campo \mathbf{E} , determinan la ρ , \mathbf{j} , ó \mathcal{P} inducidas en el material. El conocimiento explícito de estos operadores es indispensable para poder resolver las ecuaciones de Maxwell en los materiales.

Las relaciones lineales entre \mathcal{P} , \mathbf{j} , \mathcal{D} y \mathbf{E} definen funciones respuesta, por ejemplo, los operadores función dieléctrica $\hat{\epsilon}$, conductividad $\hat{\sigma}$ y susceptibilidad $\hat{\chi}$ se definen de la siguiente manera:

$$\mathcal{P} = \hat{\chi} \mathbf{E}, \quad (1.2-1)$$

$$\mathbf{j} = \hat{\sigma} \mathbf{E}, \quad (1.2-2)$$

$$\mathcal{D} = \hat{\epsilon} \mathbf{E}. \quad (1.2-3)$$

Cuando el campo \mathbf{E} es muy pequeño con respecto al campo interno, la respuesta a éste es, con muy buena aproximación, lineal para un gran número de materiales. Por lo pronto vamos a considerar las relaciones lineales más simples, en el caso de campos monocromáticos de frecuencia ω ,

$$\mathcal{D}_{\alpha}(\omega) = \epsilon_{\alpha\beta}(\omega) E_{\beta}(\omega) , \quad (1.2-4)$$

donde $\epsilon_{\alpha\beta}(\omega)$ es el tensor función dieléctrica.

El carácter tensorial de la función respuesta refleja la anisotropía de las propiedades del medio. En los medios anisotrópicos las direcciones de los campos vectoriales \mathcal{D} y E no coinciden. En los medios isotrópicos estos campos vectoriales son colineales, por lo tanto, las funciones de respuesta son proporcionales a un tensor unitario $\delta_{\alpha\beta}$.

Los campos no monocromáticos $\mathcal{D}(t)$ y $E(t)$ se pueden expresar como una superposición lineal de campos monocromáticos a través de la transformada de Fourier

$$E(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} E(\omega) e^{-i\omega t} , \quad (1.2-5)$$

$$\mathcal{D}(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{D}(\omega) e^{-i\omega t} . \quad (1.2-6)$$

Por lo tanto

$$\mathcal{D}_{\alpha}(t) = \int_{-\infty}^t dt' \epsilon_{\alpha\beta}(t-t') E_{\beta}(t') , \quad (1.2-7)$$

donde hemos utilizado el teorema de convolución^[59] y la expresión

$$\epsilon_{\alpha\beta}(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \epsilon_{\alpha\beta}(\omega) e^{-i\omega t} . \quad (1.2-8)$$

La función $\epsilon_{\alpha\beta}(t-t')$ describe la respuesta del material al tiempo t a un campo eléctrico aplicado al tiempo t' . Si $\epsilon_{\alpha\beta}(t-t')$ es distinto de cero cuando $t-t' > 0$, el sistema tarda cierto tiempo en responder. A este efecto se le llama dispersión temporal.

La ecuación material (1.2-7) representa un sistema con homogeneidad temporal. Si cambiáramos $\epsilon_{\alpha\beta}(t-t')$ por una función $\epsilon_{\alpha\beta}(t, t')$ que dependiera por separado de t y de t' , tendríamos

$$\mathcal{D}_{\alpha}(t) = \int dt' \epsilon_{\alpha\beta}(t, t') E_{\beta}(t') . \quad (1.2-9)$$

En este caso, el sistema no tendría invariancia frente a translaciones en el tiempo.

1.3 La dispersión espacial

Si la respuesta de una material en un punto depende, no sólo del campo en ese punto, sino también depende del campo en puntos vecinos, a este efecto se le llama dispersión espacial ó no localidad; en este caso, la respuesta estaría dada por

$$\mathcal{D}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \int dt' \int d^3\mathbf{r}' \epsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t-t') E_\beta(\mathbf{r}', t') , \quad (1.3-1)$$

que es la relación lineal más general posible para un sistema con invariancia temporal. La función $\epsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t-t')$ determina el campo \mathcal{D}_α en el punto \mathbf{r} y al tiempo t debido a un campo eléctrico unitario (de tipo función delta) en el punto \mathbf{r}' al tiempo t' .

Si el sistema tiene simetría translacional, la función respuesta depende exclusivamente de la posición relativa $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$, y la ecuación material es entonces

$$\mathcal{D}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \int dt' \int d^3\mathbf{r}' \epsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}'; t-t') E_\beta(\mathbf{r}', t') . \quad (1.3-2)$$

Si tomamos la transformada temporal de Fourier de esta ecuación, obtenemos

$$\mathcal{D}_\alpha(\mathbf{r}, \omega) = \int \epsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}', \omega) E_\beta(\mathbf{r}', \omega) d^3\mathbf{r}' , \quad (1.3-3)$$

donde

$$\epsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}', \omega) = \int dt \epsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}', t) e^{-i\omega t} , \quad (1.3-4)$$

$$E_\beta(\mathbf{r}', \omega) = \int dt E_\beta(\mathbf{r}', t) e^{-i\omega t} . \quad (1.3-5)$$

De manera similar, las otras ecuaciones constitutivas se pueden escribir como

$$\mathcal{P}_\alpha(\mathbf{r}, \omega) = \int \chi_{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}', \omega) E_\beta(\mathbf{r}, \omega) d^3\mathbf{r}' , \quad (1.3-6)$$

$$\mathbf{j}_\alpha(\mathbf{r}, \omega) = \int \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}', \omega) E_\beta(\mathbf{r}, \omega) d^3\mathbf{r}' \quad (1.3-7)$$

Si además de tomar la transformada de Fourier temporal, también tomamos la transformada espacial, podemos reescribir la Ec.(1.3-2)

como

$$\mathcal{D}_\alpha(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) E_\beta(\mathbf{k}, \omega) , \quad (1.3-8)$$

donde

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \int dt \int d^3r \varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} , \quad (1.3-9)$$

$$E_\beta(\mathbf{k}, \omega) = \int dt \int d^3r E_\beta(\mathbf{r}, t) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} . \quad (1.3-10)$$

La función $\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega)$ es la respuesta a un campo eléctrico con vector de onda \mathbf{k} y frecuencia ω . De manera similar,

$$\mathcal{P}_\alpha(\mathbf{k}, \omega) = \chi_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) E_\beta(\mathbf{k}, \omega) , \quad (1.3-11)$$

$$\mathbf{j}_\alpha(\mathbf{k}, \omega) = \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) E_\beta(\mathbf{k}, \omega) . \quad (1.3-12)$$

Las Ecs.(1.3-8), (1.3-11) y (1.3-12) implican que un medio tiene dispersión espacial (no local) cuando las funciones respuestas $\chi_{\alpha\beta}$, $\sigma_{\alpha\beta}$ y $\varepsilon_{\alpha\beta}$ dependen de \mathbf{k} . El límite local de estas funciones respuestas se obtiene haciendo $\mathbf{k}=0$.

Además como ρ , \mathbf{j} y \mathcal{P} no son campos independientes, existe una relación entre las funciones respuesta anteriores dada por

$$\varepsilon(\mathbf{k}, \omega) = 1 + 4\pi i \sigma(\mathbf{k}, \omega) / \omega = 1 + 4\pi \chi(\mathbf{k}, \omega) . \quad (1.3-13)$$

Por lo tanto, es suficiente determinar sólo una de ellas.

Para poder calcular las funciones respuestas de un medio específico hay que usar modelos sobre la dinámica microscópica del material en cuestión. En la siguiente sección introducimos un modelo hidrodinámico que describe un gas de electrones sometido a un campo eléctrico que varía en el espacio. La gran ventaja de este modelo es su simplicidad, ya que incluye modos longitudinales y proporciona resultados analíticos para el sistema de interés.

1.4 Modelo hidrodinámico

El modelo hidrodinámico ha sido utilizado frecuentemente para estudiar diversas propiedades físicas de los sistemas conductores, tales como la no localidad de la respuesta electromagnética de un gas de electrones,^[57] el acoplamiento de los plasmones con las ondas transversales en sistemas no homogéneos,^[60] etc. Aunque este modelo no toma en cuenta las excitaciones de pares de electrón-hueco, describe adecuadamente la excitación de ondas electromagnéticas longitudinales (plasmones). El modelo hidrodinámico toma en cuenta el efecto no local, por lo tanto, el uso de este modelo es un paso importante para entender el comportamiento de las ondas en medios con dispersión espacial.

La función dieléctrica hidrodinámica se puede deducir fácilmente para un modelo del gas de electrones. Supongamos que la corriente total promedio en el sistema del gas de electrones está dada por

$$\mathbf{j} \equiv \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = nev, \quad (1.4-1)$$

donde e es la carga del electrón, n es la densidad de número de electrones y \mathbf{v} es la velocidad promedio de los electrones. Por lo tanto la ecuación del movimiento de un electrón en un campo eléctrico \mathbf{E} se puede escribir como

$$m \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \frac{m}{ne} \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} = e\mathbf{E}, \quad (1.4-2)$$

donde m es la masa del electrón. Si añadimos la contribución promedio de las colisiones electrónicas en la aproximación del tiempo de relajación, tenemos

$$\frac{m}{ne} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{j} = e\mathbf{E} - \frac{m}{\tau ne} \mathbf{j} , \quad (1.4-3)$$

donde a τ se le denomina el tiempo de relajación. Multiplicando la Ec.(1.4-3) por ne/m , y resulta

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathcal{P} = f \mathbf{E} - \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P} , \quad (1.4-4)$$

donde $f = ne^2/m$.

Nos interesan los sistemas en donde los campos varían en el espacio, entonces la densidad electrónica también varía. Dado que al variar la densidad, el sistema sufre compresiones y rarefacciones, es necesario entonces tomar en cuenta la compresibilidad del sistema, i.e., tenemos que añadir una fuerza que relaciona la presión del gas de electrones con la variación espacial de \mathcal{P} . Debido a que esta fuerza es débil comparada con los primeros términos de la Ec.(1.4-4), podemos tomar solamente los primeros términos del desarrollo de \mathcal{P} en derivadas espaciales.

Las derivadas de \mathcal{P} a primero y segundo orden son

$$\nabla \mathcal{P}, \nabla(\nabla \cdot \mathcal{P}), \nabla^2 \mathcal{P}, \nabla \times (\nabla \times \mathcal{P}), \dots$$

Sin embargo, para un medio isotrópico, el primer término se elimina por ser un pseudovector.^[61] El cuarto término se puede expresar como una combinación del segundo y el tercero. Entonces, la Ec.(1.4-4) toma la siguiente forma

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathcal{P} = f \mathbf{E} - \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P} + \alpha \nabla^2 \mathcal{P} + \beta^2 \nabla(\nabla \cdot \mathcal{P}) , \quad (1.4-5)$$

donde α y β son parámetros de dispersión espacial. El β está relacionado con la compresibilidad del sistema.

Tomando la transformada de Fourier en el espacio y en el tiempo de la Ec.(1.4-5), obtenemos

$$-\omega^2 \mathcal{P} = f \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) + \frac{1}{\tau} i\omega \mathcal{P} - \alpha k^2 \mathcal{P} - \beta^2 k^2 \mathcal{P}^L . \quad (1.4-6)$$

donde \mathcal{P} y \mathcal{P}^L son las polarizaciones generalizadas total y

longitudinal respectivamente. Por lo tanto, despejando \mathcal{P} obtenemos la susceptibilidad para el campo transversal la cual resulta ser

$$\chi_t(\mathbf{k}, \omega) = \frac{f}{\alpha k^2 - \omega^2 - i\omega/\tau}, \quad (1.4-7)$$

y para el campo longitudinal queda dada por

$$\chi_l(\mathbf{k}, \omega) = \frac{f}{(\alpha + \beta^2)k^2 - \omega^2 - i\omega/\tau}. \quad (1.4-8)$$

El término $\nabla^2 \mathcal{P}$ en la Ec. (1.4-5) está asociado a la fuerza cortante restitutiva de un elemento ejercida sobre otro elemento en el espacio. Dado que en un fluido este tipo de fuerza suele ser menor que la fuerza de origen compresional, ignoramos este término^[61] y utilizamos $f = \omega_p^2 / 4\pi$ para obtener

$$\epsilon_t(\mathbf{k}, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau}, \quad (1.4-9)$$

$$\epsilon_l(\mathbf{k}, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau - \beta^2 k^2}, \quad (1.4-10)$$

donde ω_p es la frecuencia de plasma.

En una teoría microscópica^[62] para el gas de electrones basada en la aproximación de la fase aleatoria (RPA) se obtienen las ecuaciones (1.4-9) y (1.4-10) en el límite de vectores de onda pequeños, donde $\beta^2 = \frac{3}{5} v_F^2$, y v_F es la velocidad de Fermi.

En el límite local se obtiene cuando tomamos el límite $k \rightarrow 0$ en las Ecs. (1.4-9) y (1.4-10), i.e.,

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau}, \quad (1.4-11)$$

que se conoce como la función dieléctrica de Drude.

En la siguiente sección discutiremos los modos electromagnéticos en un medio homogéneo isotrópico caracterizado por estas funciones respuesta.

1.5 Modos de oscilación del sistema

Para obtener los modos propios del sistema electromagnético, se usan las ecuaciones de Maxwell macroscópicas (1.1-1)→(1.1-4) en ausencia de cargas y corrientes externas. Si tomamos el rotacional de la Ec.(1.1-1) tenemos

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{B}) \quad (1.5-1)$$

Utilizando la Ec.(1.1-4), en la ausencia de corriente externa, reescribimos la Ec.(1.5-1) como

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathcal{D} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \hat{\epsilon} \mathbf{E} \quad (1.5-2)$$

A partir de esta última ecuación podemos obtener los modos transversales y longitudinales de un medio homogéneo e isotrópico. Por definición, el campo longitudinal \mathbf{E}_l y el campo transversal \mathbf{E}_t cumplen

$$\nabla \times \mathbf{E}_l = 0 \quad (1.5-3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_t = 0 \quad (1.5-4)$$

Por lo tanto, si sustituimos $\mathbf{E} = \mathbf{E}_l + \mathbf{E}_t$ en la Ec.(1.5-2) obtenemos dos ecuaciones desacopladas

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}_t) = -\nabla^2 \mathbf{E}_t = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \hat{\epsilon}_t \mathbf{E}_t \quad (1.5-5)$$

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}_l) = 0 = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \hat{\epsilon}_l \mathbf{E}_l \quad (1.5-6)$$

donde $\hat{\epsilon}_l$ y $\hat{\epsilon}_t$ son la parte transversal y la parte longitudinal del tensor $\hat{\epsilon}$. Estas dos ecuaciones nos proporcionan dos tipos de modos independientes. Consideremos que en el medio se propaga una onda plana

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (1.5-7)$$

Los operadores ∇ y $\partial/\partial t$ actuando sobre ondas planas equivalen a

$$\nabla = i\mathbf{k} , \quad (1.5-8)$$

$$\partial/\partial t = -i\omega . \quad (1.5-9)$$

Entonces, las Ecs. (1.5-5) y (1.5-6) se pueden escribir como

$$\left(k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \hat{\epsilon}_t\right) \mathbf{E}_t = 0 , \quad (1.5-10)$$

$$\hat{\epsilon}_l \mathbf{E}_l = 0 . \quad (1.5-11)$$

De la Ec. (1.5-10) vemos que para que existan ondas transversales, es necesario que

$$\left(k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \hat{\epsilon}_t\right) = 0 . \quad (1.5-12)$$

Esta ecuación nos proporciona una relación entre \mathbf{k} y ω que cumplen las ondas transversales y es llamada la relación de dispersión de los modos transversales. De la Ec. (1.5-11) vemos que para que existan ondas longitudinales es necesario que

$$\hat{\epsilon}_l(\mathbf{k}, \omega) = 0 . \quad (1.5-13)$$

Esta ecuación nos proporciona una relación entre \mathbf{k} y ω que cumplen las ondas longitudinales y es llamada la relación de dispersión de los modos longitudinales.

Vemos que para las ondas longitudinales tenemos que \mathbf{E}_l es distinto de cero en el interior del sistema aunque $\mathcal{D}_l = 0$. Dado que \mathcal{D}_l se puede identificar con el campo externo longitudinal, el origen físico de \mathbf{E}_l se debe a las excitaciones propias del sistema provenientes de oscilaciones colectivas de carga, llamadas también oscilaciones de plasma y cuyos cuantos son llamados plasmones.

1.6 Modos electromagnéticos en un medio semi-infinito isotrópico y local

En la sección anterior hemos discutido el comportamiento del campo electromagnético y de los modos de oscilación en un medio infinito. En esta sección nos interesan las ondas que se propagan entre dos medios con diferente respuesta dieléctrica local separados por una interfaz plana sobre la que incide una onda electromagnética plana monocromática.

Al plano que forma el vector de onda de la onda incidente con el vector normal a la interfaz (ó superficie) lo llamamos plano de incidencia y al ángulo θ entre ambos vectores, ángulo de incidencia. Debido a la presencia de la superficie, parte de la onda incidente se refleja y parte se transmite al otro medio. Todas las ondas planas linealmente polarizadas se pueden descomponer en dos tipos: la onda polarizada p (parallel) y la onda polarizada s (senkrecht). La onda que tiene polarización p es aquella cuyo vector de campo eléctrico es paralelo al plano de incidencia y la onda que tiene polarización s es aquella cuyo vector de campo eléctrico es perpendicular al plano de incidencia. Estas dos polarizaciones son linealmente independientes y cualquier campo electromagnético se puede expresar como una combinación lineal de éstas.

Al coeficiente de reflexión define como la amplitud del campo reflejado dividido sobre la amplitud del campo incidente y se puede calcular fácilmente para los dos tipos de polarizaciones. Para el caso en que la incidencia de la luz provenga del vacío se puede mostrar^[62] que

$$r_p = \frac{\epsilon_t q - k}{\epsilon_t q + k} \quad , \quad (1.6-1)$$

$$r_s = \frac{q - k}{q + k} \quad , \quad (1.6-2)$$

donde q es la componente z del vector de onda en el vacío y k es la componente z del vector de onda en el medio, y hemos tomado al plano XZ como el plano de incidencia y al plano XY como interface.

En caso de que exista un campo reflejado sin tener campo incidente, tendremos los modos propios de la superficie. (De aquí en adelante usaremos los términos superficie o interfaz indistintamente). Estos son modos que se propagan a lo largo de la superficie pero cuya amplitud decae con la distancia a la superficie.^[63] A estos modos se les llama también plasmones de superficie.

La relación de dispersión del plasmon de superficie para la interfaz del vacío y un medio con respuesta dieléctrica transversal ϵ_t se obtiene al igualar el denominador de la Ec.(1.6-1) a cero, y resulta

$$Q = \frac{\omega}{c} \left[\frac{\epsilon_t}{1+\epsilon_t} \right]^{1/2} \quad (1.6-3)$$

donde Q es la magnitud de la proyección del vector de onda q sobre la superficie. Esta relación de dispersión se muestra en la Fig.1.

En este sistema hemos tomado un modelo local en ambos medios de la interface. Para medios semi-infinitos con dispersión espacial es necesario utilizar condiciones adicionales de frontera, las cuales discutiremos en la siguiente sección.

1.7 Modos electromagnéticos en un medio semi-infinito no local

A partir de las ecuaciones de Maxwell se pueden deducir 2 condiciones de frontera independientes, por ejemplo, que las componentes de E y B paralelas a la superficie sean continuas. Esto nos permite encontrar los campos reflejados y transmitidos transversales. Sin embargo, en un sistema con respuesta no local, en el cual existen modos longitudinales, tenemos que anexar condiciones adicionales para poder obtener todas las amplitudes de los campos dispersados.

Para el modelo de gas de electrones se puede suponer que la componente de E perpendicular a la superficie es continua, ya que en un sistema real la densidad de carga de la superficie no es singular. Este es el caso más simple ya que todos los campos son continuos en el perfil.

Existen casos en donde no podemos suponer que todos los campos son continuos en la superficie. Por ejemplo, en el modelo local la componente de E normal a la superficie es discontinua. También aparecen discontinuidades en la superficie de metales no locales cuando se aproxima el efecto de transiciones electrónicas interbanda mediante una contribución local adicional ϵ_b a la función dieléctrica. En este caso $\epsilon_b E$ es continua en la superficie,^[52] lo cual corresponde a una singularidad en la densidad de carga de polarización con un perfil suave para la densidad de carga de conducción.

El coeficiente de reflexión para la onda incidente con polarización p para el caso no local es

$$r_p = \frac{\epsilon_t q - k - Q^2(1 - \epsilon_t)/l}{\epsilon_t q + k + Q^2(1 - \epsilon_t)/l} \quad , \quad (1.7-1)$$

donde l es la componente z del vector de onda longitudinal en el medio. La relacion de dispersión de los plasmones de superficie del caso no local también se muestra en la Fig.1.

CAPITULO 2

TEORIA PERTURBATIVA DE LA DISPERSION DE LUZ

POR UNA SUPERFICIE RUGOSA EN AUSENCIA DE TRANSICION INTERBANDA

2.1 Introducci3n

La reflexi3n de luz en una superficie plana es siempre en la direcci3n especular, i.e., el 3ngulo de incidencia es igual al 3ngulo de reflexi3n. Sin embargo, la dispersi3n en una superficie rugosa puede ser muy complicada, ya que la luz se dispersa en muchas direcciones. En el caso especial de una rejilla peri3dica, si la onda incidente tiene un vector de onda cuya proyecci3n en la superficie es Q_1 , la onda dispersada puede tener varios vectores $Q_1 \pm ng$, donde n es un n3mero entero y g es un vector cuya magnitud g es proporcional al inverso del peri3do d de la rejilla.

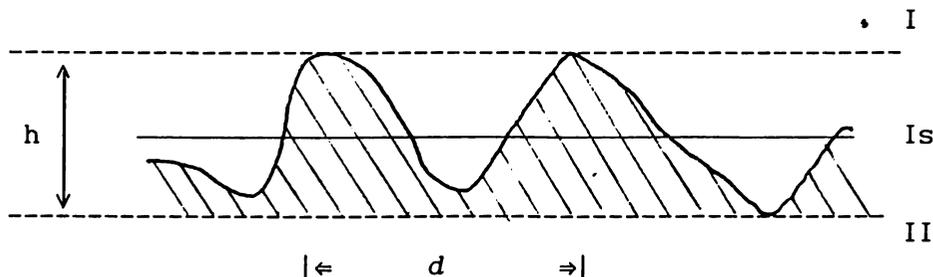
Para una interfaz entre dos medios caracterizados por funciones diel3ctricas ϵ_α ($\alpha=1,2$), si $(Q_1 + ng)^2 > \epsilon_\alpha \omega^2 / c^2$ la onda dispersada decae exponencialmente a ambos lados de la interface. En este caso es posible excitar resonantemente los modos de interface cuyos campos tambi3n decaen en la misma forma. En este trabajo nos interesa el estudio de este acoplamiento resonante con el fin de obtener informaci3n sobre la influencia de la dispersi3n espacial en el campo electromagn3tico cercano a la superficie.

Dado que la dispersi3n espacial comienza a ser importante para frecuencias del orden de ω_p y vectores de onda del orden de ω/β (ver la Ec.(1.4-10)), para tener un acoplamiento resonante con modos de interfaz en esta regi3n se requiere entonces una rugosidad con vector g de orden de ω_p/v_F . Para $\hbar\omega_p=10\text{eV}$, esto implica que d debe ser del orden de 4Å . A este tipo de rugosidad la llamamos rugosidad

microscópica. Por lo tanto, la dispersión espacial juega un papel importante en la excitación de modos de superficie en superficies con rugosidad periódica típica del orden de Å. Esto puede realizarse, por ejemplo, en caras cristalinas reconstruidas.^[64,65]

El cálculo del campo electromagnético en presencia de una superficie rugosa es en general muy complejo, pues la serie del desarrollo del campo electromagnético en ondas planas diverge para ciertos límites en la cercanía de la superficie.

Sin embargo, para el caso de una rugosidad "suave", es decir cuando la altura típica de la rugosidad es muy pequeña comparada con el período típico ($h/d \ll 1$), se puede utilizar la hipótesis de Rayleigh-Fano,^[66-69] Esta hipótesis supone que el desarrollo en ondas planas de las ondas dispersadas en las regiones lejanas I y II (ver la ilustración) se puede continuar hasta la región de la superficie I_s . Esta suposición nos permite escribir el desarrollo de los campos electromagnéticos con los mismos coeficientes tanto en las regiones cercanas como en las lejanas a la superficie.



Bajo las suposiciones anteriores, los campos dispersados cerca de la superficie se pueden descomponer en ondas planas salientes, en la región I, de la siguiente forma,

$$E_I = \sum_Q E_I(Q) e^{i(Q \cdot \rho - qz - \omega t)}, \quad (2.1-1)$$

y en la región II,

$$E_{II} = \sum_Q E_{II}(Q) e^{i(Q \cdot \rho + kz - \omega t)}, \quad (2.1-2)$$

donde $q=(Q, q)$ y $k=(Q, k)$ son los vectores de onda en la región I y en la región II respectivamente, $r=(\rho, z)$ es el vector de posición.

Se ha mostrado que el método Rayleigh-Fano para una superficie senoidal y para condiciones de frontera tipo Dirichlet, converge cuando $2\pi h/d < 0.448$. Sin embargo, se pueden obtener resultados asintóticos aunque se pase de este límite.^[70-72]

Existen otros métodos para resolver los campos electromagnéticos cerca de una superficie rugosa, los cuales no contiene una condición de validez. Por ejemplo, el del teorema de extinción, este método se basa en obtener ecuaciones integrales que incluyan solamente los campos en la superficie. Se ha demostrado que este método es equivalente al método de Rayleigh,^[70] sin embargo, el método Rayleigh es ampliamente aceptado para calcular superficies con la altura h mucho menor que la longitud de onda de la onda incidente.

Dado que la hipótesis de Rayleigh-Fano es válida para rugosidades pequeñas, hemos utilizado en este trabajo un método perturbativo para encontrar los campos electromagnéticos cerca de la superficie rugosa. Este método consiste en descomponer al sistema real en un sistema semi-infinito con interfaz plana más la rugosidad como una corrección pequeña. Este tratamiento tiene la ventaja de que se pueden obtener las propiedades ópticas de un sistema rugoso a partir de las de un sistema con interfaz plana.

2.2 Desarrollo del cálculo perturbativo para un modelo de gas de electrones

En este capítulo introducimos el formalismo perturbativo para calcular los campos difractados por una superficie rugosa en un sistema con dispersión espacial, sobre la que incide una onda plana. Tomamos el caso de un gas de electrones dentro del modelo hidrodinámico para representar a un metal con dispersión espacial, pero se ignora la contribución local a la función dieléctrica debida a las transiciones electrónicas interbanda. En este caso, la condición adicional de contorno que seleccionamos es la continuidad de la componente normal de \mathbf{E} , ya que en un metal real la densidad de carga superficial no es singular. Esto, junto con las ecuaciones de Maxwell, implica que todas las componentes de los campos son continuas en la superficie. En el siguiente capítulo veremos un formalismo más general en el cuál se toma una superficie arbitraria, tomando en cuenta la contribución local de las transiciones interbandas que implican una discontinuidad en E_{\perp} . Además se encuentra la solución general a orden arbitrario en la perturbación. Los resultados del presente capítulo servirán para ilustrar la esencia del método de solución y para poder corroborar, en un cierto límite, los resultados del capítulo 3. Esto es útil debido a que ambos procedimientos requieren de condiciones de contorno distintas y por tanto utilizan un desarrollo matemático diferente.

El sistema a considerar es una interfaz entre el vacío y un medio semi-infinito con una superficie rugosa. El medio está descrito por una función dieléctrica no local dentro de la

aproximación hidrodinámica.

Primeramente seleccionamos al plano X-Y como plano nominal definido como

$$\int \xi(x,y) dx dy = 0,$$

donde $z = \xi(x,y)$ es la función del perfil y el eje z apunta hacia afuera del metal.

Denotamos a los vectores de onda de las ondas incidente, reflejadas y transmitidas como

$$\mathbf{q}_1 = (Q_{x1}, Q_{y1}, q_1), \quad (2.2-1)$$

$$\mathbf{q} = (Q_x, Q_y, -q), \quad (2.2-2)$$

$$\mathbf{k} = (Q_x, Q_y, k), \quad (2.2-3)$$

en donde $\mathbf{Q} = (Q_x, Q_y, 0)$ es la proyección del vector de onda en el plano X-Y.

Escogemos al plano X-Z como plano de incidencia, i.e., $\mathbf{q}_1 = (Q_1, 0, q_1)$ y $\mathbf{Q}_1 = (Q_1, 0, 0)$, descomponemos los campos electromagnéticos en términos de ondas planas con polarización s, p y longitudinal, de tal manera que para las ondas incidentes

$$\mathbf{E}_{s1}(\mathbf{Q}) = S_1(0, Q_1, 0) e^{i(Q_1 x + q_1 z)}, \quad (2.2-4)$$

$$\mathbf{B}_{s1}(\mathbf{Q}) = (c/\omega) S_1(-q_1 Q_1, 0, Q_1^2) e^{i(Q_1 x + q_1 z)}, \quad (2.2-5)$$

$$\mathbf{E}_{p1}(\mathbf{Q}) = (c/\omega) P_1(q_1 Q_1, 0, -Q_1^2) e^{i(Q_1 x + q_1 z)}, \quad (2.2-6)$$

$$\mathbf{B}_{p1}(\mathbf{Q}) = P_1(0, Q_1, 0) e^{i(Q_1 x + q_1 z)}, \quad (2.2-7)$$

y para las ondas reflejadas

$$\mathbf{E}_{sr}(\mathbf{Q}) = S_r(-Q_y, Q_x, 0) e^{i(Q_x x + Q_y y - qz)}, \quad (2.2-8)$$

$$\mathbf{B}_{sr}(\mathbf{Q}) = (c/\omega) S_r(+qQ_x, +qQ_y, Q^2) e^{i(Q_x x + Q_y y - qz)}, \quad (2.2-9)$$

$$\mathbf{E}_{pr}(\mathbf{Q}) = (c/\omega) P_r(-qQ_x, -qQ_y, -Q^2) e^{i(Q_x x + Q_y y - qz)}, \quad (2.2-10)$$

y

$$\mathbf{B}_{pr}(\mathbf{Q}) = P_r(-Q_y, Q_x, 0) e^{i(Q_x x + Q_y y - qz)}. \quad (2.2-11)$$

Como tenemos un metal espacialmente dispersivo descrito por una función dieléctrica en la aproximación hidrodinámica, existen también ondas longitudinales (dentro del medio metálico exclusivamente) que se deben incluir en las ondas transmitidas y cuyos campos eléctricos y magnéticos están dados por

$$E_1(Q) = L(Q_x, Q_y, l) e^{i(Q_x x + Q_y y + lz)}, \quad (2.2-12)$$

$$B_1(Q) = 0. \quad (2.2-13)$$

Aquí $l = (Q_x, Q_y, l)$ satisface la relación de dispersión dada por Ec.(1.5-13) y $L = L(Q, \omega)$ es la función de amplitud longitudinal. Las ondas transmitidas transversales se escriben como

$$E_{st}(Q) = S_t(-Q_y, Q_x, 0) e^{i(Q_x x + Q_y y + kz)}, \quad (2.2-14)$$

$$B_{st}(Q) = (c/\omega) S_t(-kQ_x, -kQ_y, Q^2) e^{i(Q_x x + Q_y y + kz)}, \quad (2.2-15)$$

$$E_{pt}(Q) = (c/(\epsilon_t \omega)) P_t(kQ_x, kQ_y, -Q^2) e^{i(Q_x x + Q_y y + kz)}, \quad (2.2-16)$$

$$B_{pt}(Q) = P_t(-Q_y, Q_x, 0) e^{i(Q_x x + Q_y y + kz)}. \quad (2.2-17)$$

Llamamos a $S_\alpha = S_\alpha(Q, \omega)$ y $P_\alpha = P_\alpha(Q, \omega)$, $\alpha = i, r, t$, las funciones de amplitud. De aquí en adelante omitimos la dependencia explícita en Q, ω , en las coordenadas espaciales y en otras cantidades a menos que esto cause confusión. Las Ecs.(2.2-4)→(2.2-17) garantizan que cada onda cumpla las ecuaciones de Maxwell y tenga la polarización adecuada, cuando $z \neq \xi(x, y)$.

Usando las expresiones (2.2-4)→(2.2-17), el campo incidente total se puede escribir como

$$E_i = E_{si}(Q_i) + E_{pi}(Q_i), \quad (2.2-18)$$

$$= \left[S_i(0, Q_i, 0) + (c/\omega) P_i(q_i Q_i, 0, -Q_i^2) \right] e^{i(Q_i x + q_i z)},$$

$$B_i = B_{si}(Q_i) + B_{pi}(Q_i), \quad (2.2-19)$$

$$= \left[(c/\omega) S_i(-q_i Q_i, 0, Q_i^2) + P_i(0, Q_i, 0) \right] e^{i(Q_i x + q_i z)}, \quad (2.2-20)$$

el campo reflejado como

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_r &= \sum_{Q'} [\mathbf{E}_{sr}(Q') + \mathbf{E}_{pr}(Q')] \\
&= \sum_{Q'} \left[S_r(-Q'_y, Q'_x, 0) - (c/\omega) P_r(q'Q'_x, q'Q'_y, Q'^2) \right] e^{i(Q'_x x + Q'_y y - q'z)}
\end{aligned} \tag{2.2-21}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}_r &= \sum_{Q'} [\mathbf{B}_{sr}(Q') + \mathbf{B}_{pr}(Q')] \\
&= \sum_{Q'} \left[(c/\omega) S_1(q'Q'_x, q'Q'_y, Q'^2) + P_r(-Q'_y, Q'_x, 0) \right] e^{i(Q'_x x + Q'_y y - q'z)},
\end{aligned} \tag{2.2-22}$$

y el campo transmitido como

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_t &= \sum_{Q'} [\mathbf{E}_{st}(Q') + \mathbf{E}_{pt}(Q') + \mathbf{E}_{lt}(Q')] \\
&= \sum_{Q'} \left[S_t(-Q'_y, Q'_x, 0) + (c/\epsilon_t \omega) P_t(k'Q'_x, k'Q'_y, -Q'^2) \right] e^{i(Q'_x x + Q'_y y + k'z)} \\
&+ \sum_{Q'} L(Q'_x, Q'_y, l') e^{i(Q'_x x + Q'_y y + l'z)},
\end{aligned} \tag{2.2-23}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}_t &= \sum_{Q'} [\mathbf{B}_{st}(Q') + \mathbf{B}_{pt}(Q')] \\
&= \sum_{Q'} \left[(c/\omega) S_t(-k'Q'_x, -k'Q'_y, Q'^2) + P_t(-Q'_y, Q'_x, 0) \right] e^{i(Q'_x x + Q'_y y + k'z)}.
\end{aligned} \tag{2.2-24}$$

En estas expresiones vemos que para cada vector de onda Q' existen 5 incógnitas que calcular:

$$S_r(Q'), S_t(Q'), P_r(Q'), P_t(Q') \text{ y } L(Q'),$$

las cuales estarán determinadas al imponer adecuadamente las condiciones de frontera.

Las condiciones de frontera que usamos son la continuidad E_{\parallel} , B_{\parallel} , E_{\perp} y B_{\perp} a través de $z=\xi$; pero de las 6 ecuaciones resultantes sólo 5 son independientes. Escogemos estas de la siguiente manera:

$$(i) \quad E_y \text{ continua, i.e. } E_{iy} = -E_{ry} + E_{ty}, \tag{2.2-25}$$

$$(ii) \quad B_x \text{ continua, i.e. } B_{ix} = -B_{rx} + B_{tx}, \quad (2.2-26)$$

$$(iii) \quad E_x \text{ continua, i.e. } E_{ix} = -E_{rx} + E_{tx}, \quad (2.2-27)$$

$$(iv) \quad B_y \text{ continua, i.e. } B_{iy} = -B_{ry} + B_{ty}, \quad (2.2-28)$$

$$(v) \quad E_z \text{ continua, i.e. } E_{iz} = -E_{rz} + E_{tz}, \quad (2.2-29)$$

las cuales dan lugar a las siguientes 5 ecuaciones para cada punto

$\rho=(x,y)$:

$$S_1 Q_1 e^{i(Q_1 x + q_1 \xi)} = \sum_{Q'} \left[(-S_r Q'_x + (c/\omega) P_r q' Q'_y) e^{-iq' \xi} + (S_t Q'_x + P_t (c/\epsilon_t \omega) k' Q'_y) e^{ik' \xi} + L Q'_y e^{il' \xi} \right] e^{i(Q'_x x + Q'_y y)}, \quad (2.2-30)$$

$$-S_1 (c/\omega) q_1 Q_1 e^{i(Q_1 x + q_1 \xi)} = \sum_{Q'} \left[(-S_r (c/\omega) q' Q'_x + P_r Q'_y) e^{-iq' \xi} - (P_t Q'_y + S_t (c/\omega) k' Q'_x) e^{ik' \xi} \right] e^{i(Q'_x x + Q'_y y)}, \quad (2.2-31)$$

$$P_1 (c/\omega) q_1 Q_1 e^{i(Q_1 x + q_1 \xi)} = \sum_{Q'} \left[(S_r Q'_y + P_r (c/\omega) q' Q'_x) e^{-iq' \xi} + (-S_t Q'_y + P_t (c/\epsilon_t \omega) k' Q'_x) e^{ik' \xi} + L Q'_x e^{il' \xi} \right] e^{i(Q'_x x + Q'_y y)}, \quad (2.2-32)$$

$$P_1 Q_1 e^{i(Q_1 x + q_1 \xi)} = \sum_{Q'} \left[-(S_r (c/\omega) q' Q'_y + P_r Q'_x) e^{-iq' \xi} + (-S_t (c/\omega) k' Q'_y + P_t Q'_x) e^{ik' \xi} \right] e^{i(Q'_x x + Q'_y y)}, \quad (2.2-33)$$

$$-P_1 (c/\omega) Q_1^2 e^{i(Q_1 x + q_1 \xi)} = \sum_{Q'} \left[(c/\omega) P_r Q'^2 e^{-iq' \xi} \right]$$

$$-P_t (c/\epsilon_t \omega) Q'^2 e^{ik' \xi} + L l' e^{il' \xi} \left. \vphantom{P_t} \right\} e^{i(Q'_x x + Q'_y y)} \quad (2.2-34)$$

Todas estas ecuaciones se pueden resumir en forma matricial como:

$$\sum_{Q'} R(Q') S(Q_1, Q', \xi(\rho)) e^{iQ' \cdot \rho} A(Q') = B(Q_1) e^{iQ_1 \cdot \rho}, \quad (2.2-35)$$

donde las incógnitas son las amplitudes de los campos reflejados y transmitidos

$$A(Q) = \begin{bmatrix} S_r(Q) \\ S_t(Q) \\ P_r(Q) \\ P_t(Q) \\ L(Q) \end{bmatrix} \quad (2.2-36)$$

Aquí el vector $B(Q_1)$ caracteriza los campos incidentes, la matriz $R(Q')$ es independiente de la fase de los campos y la matriz $S(Q_1, Q', \xi(\rho))$ contiene exclusivamente la información sobre el perfil $\xi(\rho)$ de la superficie. Las expresiones explícitas de R , S y B son

$$R(Q') =$$

$$\begin{bmatrix} -Q'_x & Q'_x & (c/\omega)Q'_y q' & (c/\omega)Q'_y k'/\epsilon_t & Q'_y \\ (c/\omega)Q'_x q' & (c/\omega)Q'_x k' & -Q'_y & Q'_y & 0 \\ Q'_y & -Q'_y & (c/\omega)Q'_x q' & (c/\omega)Q'_x k'/\epsilon_t & Q'_x \\ -(c/\omega)Q'_y q' & -(c/\omega)Q'_y k' & -Q'_x & Q'_x & 0 \\ 0 & 0 & -(c/\omega)Q'^2 & (c/\omega)Q'^2/\epsilon_t & -1' \end{bmatrix}, \quad (2.2-37)$$

$$S(Q_1, Q', \xi(\rho)) =$$

$$\begin{bmatrix} e^{-i(q'+q_1)\xi} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i(k'-q_1)\xi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i(q'+q_1)\xi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i(k'-q_1)\xi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{i(l'-q_1)\xi} \end{bmatrix},$$

(2.2-38)

$$B(Q_1) = Q_1 \begin{bmatrix} S_1 \\ (c/\omega)q_1 S_1 \\ (c/\omega)q_1 P_1 \\ P_1 \\ (c/\omega)Q_1 P_1 \end{bmatrix}$$

(2.2-39)

Dado que el ansatz de Rayleigh-Fano sólo nos permite resolver este problema para $h/d \ll 1$; en este límite, un método perturbativo puede ser adecuado para encontrar el vector A . Por esto hacemos una expansión de S en potencias de $\xi(x,y)$, y obtenemos

$$S(Q_1, Q', \xi) = S^{(0)}(Q_1, Q') + \xi(x,y) S^{(1)}(Q_1, Q') + \xi^2(x,y) S^{(2)}(Q_1, Q') + \dots, \quad (2.2-40)$$

donde

$$S^{(0)}(Q_1, Q') = \mathbb{I} \text{ (la matriz unitaria),} \quad (2.2-41)$$

$$s^{(1)}(Q_1, Q') = \begin{bmatrix} -i(q'+q_1) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i(k'-q_1) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i(q'+q_1) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i(k'-q_1) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & i(l'-q_1) \end{bmatrix},$$

(2.2-42)

$$s^{(2)}(Q_1, Q') = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}(q'+q_1)^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}(k'-q_1)^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}(q'+q_1)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2}(k'-q_1)^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2}(l'-q_1)^2 \end{bmatrix},$$

(2.2-43)

y notamos que en general $s^{(n)}(Q_1, Q')$ es independiente del perfil de la superficie.

Ahora descomponemos A en potencias de ξ ,

$$A(Q') = A^{(0)}(Q') + A^{(1)}(Q') + A^{(2)}(Q') + \dots, \quad (2.2-44)$$

sustituimos las Ecs. (2.2-40) → (2.2-44) en la Ec. (2.2-35) y tomamos la transformada de Fourier en $\rho(x, y)$ de la ecuación resultante obteniendo

$$\sum_{Q'} R(Q') \left[\delta_{Q'', Q'} + \xi(Q'' - Q') s^{(1)}(Q_1, Q') + \xi^2(Q'' - Q') s^{(2)}(Q_1, Q') + \dots \right] \cdot [A^{(0)}(Q') + A^{(1)}(Q') + A^{(2)}(Q') + \dots] = B(Q_1) \delta_{Q'', Q_1}, \quad (2.2-45)$$

donde hemos definido para toda función $F(\rho)$ la transformada

$$F(Q) \equiv 1/A \int F(\rho) e^{-iQ \cdot \rho} d^2\rho, \quad (2.2-46)$$

con A el area de la superficie nominal ($z=0$). La presencia de $\delta_{Q'', Q'}$ en el término de orden cero corresponde a la conservación de la proyección paralela del momento en una superficie plana.

Usando la serie perturbativa e igualando los términos del mismo orden en ξ , tenemos que a orden cero

$$\sum_{Q'} R(Q') \left[\delta_{Q'', Q'} A^{(0)}(Q') \right] = B(Q_1) \delta_{Q'', Q_1}, \quad (2.2-47)$$

y por lo tanto

$$A^{(0)}(Q'') = R(Q'')^{-1} B(Q_1) \delta_{Q'', Q_1}. \quad (2.2-48)$$

Análogamente, a primer orden:

$$\sum_{Q'} R(Q') \left[\delta_{Q'', Q'} A^{(1)}(Q') + \xi(Q''-Q') S^{(1)}(Q_1, Q') A^{(0)}(Q') \right] = 0, \quad (2.2-49)$$

y por lo tanto

$$A^{(1)}(Q'') = -R(Q'')^{-1} \sum_{Q'} R(Q') \xi(Q''-Q') S^{(1)}(Q_1, Q') A^{(0)}(Q'). \quad (2.2-50)$$

Sustituyendo ahora la Ec.(2.2-48) en la Ec.(2.2-50), resulta que

$$\begin{aligned} A^{(1)}(Q'') &= -R(Q'')^{-1} R(Q_1) \xi(Q''-Q_1) S^{(1)}(Q_1, Q_1) R(Q_1)^{-1} B(Q_1) \\ &= -R(Q'')^{-1} R(Q_1) \xi(Q''-Q_1) S^{(1)}(Q_1, Q_1) A^{(0)}(Q_1) \end{aligned} \quad (2.2-51)$$

A segundo orden:

$$\begin{aligned} \sum_{Q'} R(Q') \left[\delta_{Q'', Q'} A^{(2)}(Q') + \xi(Q''-Q') S^{(1)}(Q_1, Q') A^{(1)}(Q') \right. \\ \left. + \xi^2(Q''-Q') S^{(2)}(Q_1, Q') A^{(0)}(Q') \right] = 0, \end{aligned} \quad (2.2-52)$$

de donde

$$\begin{aligned}
A^{(2)}(Q'') &= -R(Q'')^{-1} \sum_{Q'} R(Q') \left[\xi(Q''-Q') S^{(1)}(Q_1, Q') A^{(1)}(Q') \right. \\
&\quad \left. + \xi^2(Q''-Q') S^{(2)}(Q_1, Q') A^{(0)}(Q') \right] \\
&= -R(Q'')^{-1} \left[\sum_{Q'} R(Q') \xi(Q''-Q') S^{(1)}(Q_1, Q') A^{(1)}(Q') \right. \\
&\quad \left. + R(Q_1) \xi^2(Q''-Q_1) S^{(2)}(Q_1, Q_1) A^{(0)}(Q_1) \right].
\end{aligned}
\tag{2.2-53}$$

De esta manera se pueden obtener todas las expresiones para las amplitudes de los campos difractados a todos los ordenes en la rugosidad.

Las soluciones (2.2-48), (2.2-51) y (2.2-53) son generales para cualquier tipo de rugosidad. Para ilustrar nuestro procedimiento, escogemos una superficie simple cuya rugosidad es del tipo rejilla senoidal:

$$\xi(\rho) = h \cos(g \cdot \rho), \tag{2.2-54}$$

donde h es la altura de la rejilla. Además, escogemos $g \parallel Q_1 \parallel \hat{x}$, lo que corresponde al caso en el que las polarizaciones s y p no se mezclan.

* Las expresiones para las transformadas de Fourier de $\xi(\rho)$ y $\xi^2(\rho)$ son las siguientes:

$$\begin{aligned}
\xi(Q) &= \frac{1}{A} \int dy dx h \cos(gx) e^{-iQ \cdot \rho} \\
&= \frac{h}{2} (\delta_{Q, g} + \delta_{Q, -g}),
\end{aligned}
\tag{2.2-55}$$

$$\begin{aligned}
\xi^2(Q) &= \frac{1}{A} \int dy dx h^2 \cos^2(gx) e^{-iQ \cdot \rho} \\
&= \frac{h}{2} (\delta_{Q, 2g} + \delta_{Q, 0} + \delta_{Q, -2g}),
\end{aligned}
\tag{2.2-56}$$

por lo tanto ,

$$\xi(Q''-Q') = \frac{h}{2} (\delta_{Q'', Q'+g} + \delta_{Q'', Q'-g}), \tag{2.2-57}$$

$$\xi^2(Q''-Q') = \frac{\hbar^2}{4} (\delta_{Q'', Q'+2g} + 2\delta_{Q'', Q'} + \delta_{Q'', Q'-2g}) \quad (2.2-58)$$

Sustituyendo las Ecs.(2.2-57) y (2.2-58) en las Ecs.(2.2-51) y (2.2-53) obtenemos a primer orden,

$$A^{(1)}(Q'') = -\frac{\hbar}{2} R(Q'')^{-1} R(Q_1) S^{(1)}(Q_1, Q_1) A^{(0)}(Q_1) (\delta_{Q'', Q_1+g} + \delta_{Q'', Q_1-g}) \quad (2.2-59)$$

o en forma equivalente,

$$A^{(1)}(Q_1 \pm g) = -\frac{\hbar}{2} R(Q_1 \pm g)^{-1} R(Q_1) S^{(1)}(Q_1, Q_1) A^{(0)}(Q_1) \quad (2.2-60)$$

A segundo orden,

$$A^{(2)}(Q'') = -R(Q'')^{-1} \left[\sum_{Q'=Q_1 \pm g} R(Q') S^{(1)}(Q_1, Q') A^{(1)}(Q') \frac{\hbar}{2} (\delta_{Q'', Q'+g} + \delta_{Q'', Q'-g}) + R(Q_1) S^{(2)}(Q_1, Q_1) A^{(0)}(Q_1) \frac{\hbar^2}{4} (\delta_{Q'', Q_1+2g} + 2\delta_{Q'', Q_1} + \delta_{Q'', Q_1-2g}) \right] \quad (2.2-61)$$

En particular, la onda es dispersada en la dirección especular $Q_r = Q_t = Q_1$, donde Q_r y Q_t son las componentes paralelas a la superficie de los vectores de onda de las ondas reflejada y transmitida respectivamente. El resultado a segundo orden para la onda especular se escribe como

$$A^{(2)}(Q_1) = -\frac{\hbar}{2} R(Q_1)^{-1} R(Q_1+g) S^{(1)}(Q_1, Q_1+g) A^{(1)}(Q_1+g) - \frac{\hbar}{2} R(Q_1)^{-1} R(Q_1-g) S^{(1)}(Q_1, Q_1-g) A^{(1)}(Q_1-g) - \frac{\hbar^2}{2} S^{(2)}(Q_1, Q_1) A^{(0)}(Q_1) \quad (2.2-62)$$

En las siguientes secciones obtendremos explícitamente las amplitudes para las ondas de polarización p y polarización s.

2.3 Resultados para la dispersión de ondas polarizadas

Observamos en el cálculo de la sección anterior que a distintos ordenes de perturbación, la única matriz que es necesario invertir es la matriz $R(Q)$ de 5×5 . Esto es equivalente a resolver el problema de la dispersión de luz incidiendo con un vector de onda q sobre una superficie plana. Debido a que las ondas de polarización p y s están desacopladas en superficies planas, $R(Q)$ es reducible siempre a dos matrices, una matriz de 3×3 y otra de 2×2 , mediante una rotación. Lo mismo para las demás matrices de 5×5 . De igual manera, podemos descomponer los vectores de 5×1 en dos partes, i.e., una de 3×1 y otra de 2×1 . Observamos que las matrices de 3×3 y 3×1 corresponden a las ondas de polarización p y longitudinal y las matrices de 2×2 y 2×1 corresponden a las ondas de polarización s exclusivamente.

En esta sección vamos a ilustrar las soluciones explícitas de la sección anterior descomponiendo la matriz de 5×5 en submatrices que corresponden a las polarizaciones de p y s para nuestro sistema de rejilla. Las amplitudes de las ondas dispersadas se obtienen por medio de las operaciones matriciales simples.

Resultados para la dispersión con polarización p

Las matrices de la polarización p de distintos ordenes tienen la siguiente forma:

$$R_p(Q') = \begin{bmatrix} c Q'_x q' / \omega & c Q'_x k' / (\omega \epsilon_t) & Q'_x \\ -Q'_x & Q'_x & 0 \\ -c Q_x'^2 / \omega & c Q_x'^2 / (\omega \epsilon_t) & -1' \end{bmatrix}, \quad (2.3-1)$$

$$S_p^{(0)}(Q_1, Q') = \mathbb{I}, \quad (2.3-2)$$

$$S_p^{(1)}(Q_1, Q') = \begin{bmatrix} -i(q' + q_1) & 0 & 0 \\ 0 & i(k' - q_1) & 0 \\ & & i(1' - q_1) \end{bmatrix}, \quad (2.3-3)$$

$$S_p^{(2)}(Q_1, Q') = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}(q' + q_1)^2 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}(k' - q_1)^2 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}(1' - q_1)^2 \end{bmatrix}, \quad (2.3-4)$$

$$B_p(Q_1) = Q_1 \begin{bmatrix} c q_1 P_1 / \omega \\ P_1 \\ c Q_1 p_1 / \omega \end{bmatrix}, \quad (2.3-5)$$

$$R_p^{-1}(Q') = P_{fac} \begin{bmatrix} -1' \omega / c & (k' 1' Q'^2) / \epsilon_t & -Q' \omega / c \\ -1' \omega / c & -q' 1' Q'^2 & -Q' \omega / c \\ (1 - 1 / \epsilon_t) Q'^2 & -(q' + k') Q'^2 c / (\omega \epsilon_t) & (\epsilon_t q' + k') Q' \epsilon_t \end{bmatrix}, \quad (2.3-6)$$

donde $P_{fac} = -1' Q' (q' + k' \epsilon_t) + Q'^3 (1 - 1 / \epsilon_t)$.

Utilizando estas matrices se puede obtener las amplitudes $A(Q')$. A orden cero en la dirección especular tenemos

$$\frac{P_t^{(0)}(Q_1)}{P_i(Q_1)} = \frac{\epsilon_t q(Q_1) - k(Q_1) - Q_1^2 (1 - \epsilon_t) / l(Q_1)}{\epsilon_t q(Q_1) + k(Q_1) + Q_1^2 (1 - \epsilon_t) / l(Q_1)}, \quad (2.3-7)$$

$$\frac{P_t^{(0)}(Q_1)}{P_i(Q_1)} = \frac{2 \epsilon_t q(Q_1)}{\epsilon_t q(Q_1) + k(Q_1) + Q_1^2 (1 - \epsilon_t) / l(Q_1)}, \quad (2.3-8)$$

$$\frac{L^{(0)}(Q_1)}{P_i(Q_1)} = \frac{c Q_1^2 (1 - \epsilon_t) P_t^{(0)}(Q_1)}{\omega l(Q_1) \epsilon_t P_i(Q_1)}. \quad (2.3-9)$$

La Ec.(2.3-7) coincide con la Ec.(1.7-1).

Análogamente, se puede obtener las amplitudes para orden uno, orden dos,...etc., pero las expresiones analíticas son complicadas. Los resultados numéricos se muestran en el capítulo 4.

Resultados para la dispersión con polarización s

Siguiendo el mismo argumento de la sección anterior, podemos calcular las amplitudes dispersadas para el caso de una onda con polarización s. Las matrices, en este caso, son de 2×2 .

Las matrices de la polarización s, de distintos órdenes, están dadas por las expresiones siguientes:

$$R_s(Q') = \begin{bmatrix} -Q'_x & Q'_x \\ (c/\omega)Q'_x q' & (c/\omega)Q'_x k' \end{bmatrix}, \quad (2.3-10)$$

$$S_s^{(0)}(Q_1, Q') = \mathbb{I}, \quad (2.3-11)$$

$$S_s^{(1)}(Q_1, Q') = \begin{bmatrix} -i(q'+q_1) & 0 \\ 0 & i(k'-q_1) \end{bmatrix}, \quad (2.3-12)$$

$$S_s^{(2)}(Q_1, Q') = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}(q'+q_1)^2 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}(k'-q_1)^2 \end{bmatrix}, \quad (2.3-13)$$

$$B_s(Q_1) = Q_1 \begin{bmatrix} s_1 \\ (c/\omega)q_1 s_1 \end{bmatrix}, \quad (2.3-14)$$

$$R_s^{-1}(Q') = S_{fac} \begin{bmatrix} -k & \omega/c \\ q & \omega/c \end{bmatrix}, \quad (2.3-15)$$

donde $S_{fac} = 1/Q'(k'+q')$. Por lo tanto

$$\begin{aligned} A^{(0)}(Q_1) &= R(Q_1)^{-1} B(Q_1) \\ &= \begin{bmatrix} s_1 (q_1 - k_1)/(q_1 + k_1) \\ s_1 2q_1/(q_1 + k_1) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.3-16)$$

Este resultado es un resultado conocido^[73] y que corresponde a la reflexión por una superficie plana.

La expresión analítica a primer orden, para polarización s, es fácil de obtener en este caso:

$$\begin{aligned}
A^{(1)}(Q_1 \pm g) &= -\frac{\hbar}{2} R(Q_1 \pm g)^{-1} R(Q_1) S^{(1)}(Q_1, Q_1) A^{(0)}(Q_1) \\
&= -\frac{\hbar}{2} R(Q_1 \pm g)^{-1} R(Q_1) \begin{bmatrix} -2iq_1 s_1 (q_1 - k_1)/(q_1 + k_1) \\ -2iq_1 s_1 (q_1 - k_1)/(q_1 + k_1) \\ 0 \\ -2iq_1 s_1 (c/\omega)(q_1 - k_1) \end{bmatrix} \\
&= -\frac{\hbar}{2} R(Q_1 \pm g)^{-1} Q_1 \begin{bmatrix} 0 \\ -2iq_1 s_1 (c/\omega)(q_1 - k_1) \end{bmatrix} \\
&= -\frac{\hbar}{2} Q_1 \begin{bmatrix} \frac{-2i q_1 s_1 (c/\omega)(q_1 - k_1)}{Q^\pm (k^\pm + q^\pm)} \\ -2iq_1 s_1 (c/\omega)(q_1 - k_1) \\ \frac{-2iq_1 s_1 (c/\omega)(q_1 - k_1)}{Q^\pm (k^\pm + q^\pm)} \end{bmatrix}, \tag{2.3-17}
\end{aligned}$$

donde $q^{\pm 2} = \omega^2/c^2 - Q^{\pm 2}$, $k^{\pm 2} = \epsilon_t (\omega^2/c^2) - Q^{\pm 2}$ y $Q^\pm = Q_1 \pm g$.

Es interesante notar que las amplitudes reflejadas y transmitidas a primer orden son iguales.

Los resultados para el segundo orden se muestran gráficamente en el Capítulo 4 ya que los resultados analíticos tienen expresiones complicadas.

CAPITULO 3
FORMALISMO GENERAL PARA LOS CASOS NO LOCAL Y LOCAL
INCLUYENDO EL EFECTO DE TRANSICIONES INTERBANDA

En el capítulo 2 hemos obtenido en forma perturbativa los campos transmitidos y reflejados por una rejilla metálica en donde se ignora la contribución local a la función dieléctrica debida a las transiciones electrónicas interbanda. En este caso supusimos como condición de frontera la continuidad de la componente perpendicular a la superficie del campo eléctrico. Sin embargo, para los metales reales (por ejemplo, en el caso del oro) las transiciones interbanda debidas a los electrones ligados dan lugar a una contribución local significativa en a la función dieléctrica. Denotamos esta contribución local con ϵ_b . Entonces, las funciones dieléctricas transversal y longitudinal en este caso son:

$$\epsilon_t(k, \omega) = \epsilon_b - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau} \quad , \quad (3-1)$$

$$\epsilon_l(k, \omega) = \epsilon_b - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau - \beta^2 k^2} \quad . \quad (3-2)$$

Como ϵ_b es discontinua en la superficie, esto implica que E_\perp es también discontinua. Por lo tanto, en este caso, necesitamos una condición de frontera distinta a la utilizada en el capítulo anterior. Es fácil demostrar que la condición de frontera adecuada es la continuidad de $\epsilon_b E_\perp$ [52], partiendo de la continuidad de la corriente de conducción normal a la superficie.

En el cálculo del capítulo 2, supusimos que todos los campos eran continuos en la frontera. Por lo tanto, para describir el

sistema, podíamos escoger el sistema de coordenadas de manera arbitraria. Sin embargo, para tomar en cuenta la discontinuidad del campo debida a las transiciones interbanda, hay que aplicar cuidadosamente las condiciones de frontera en cada punto de la superficie. Esto lo hacemos en la siguiente sección.

3.1 Cálculo para el caso no local

Supongamos una superficie rugosa está caracterizada por una función del perfil $z=h\xi(x,y)$. Esta forma de escribir z nos permite catalogar cada término del desarrollo perturbativo con el parámetro h . Esto no fue necesario en el desarrollo del cap.2 debido a que en ese caso simple no existe ambigüedad en el orden de los términos.

El vector unitario perpendicular a la superficie rugosa $h\xi(x,y)$ es

$$\mathbf{n}(\xi) = \frac{\nabla f}{|\nabla f|} = \frac{(-h\xi_x, -h\xi_y, 1)}{[(h\xi_x)^2 + (h\xi_y)^2 + 1]^{1/2}} \quad (3.1-1)$$

donde

$$f = z - h\xi(x,y) \quad (3.1-2)$$

ξ_x, ξ_y son las derivadas parciales de $\xi(x,y)$ con respecto a x, y respectivamente.

Denotando a los vectores de la onda incidente, reflejada y transmitida como en el capítulo anterior, descomponemos los campos eléctricos y magnéticos transmitidos en ondas con polarización s (E_{st} y B_{st}) y p (E_{pt} y B_{pt}):

$$E_{st}(Q) = S_t(-Q_y, Q_x, 0) e^{i(Q_x x + Q_y y + kz)} \quad , \quad (3.1-3)$$

$$B_{st}(Q) = (c/\omega) S_t(-kQ_x, -kQ_y, Q^2) e^{i(Q_x x + Q_y y + kz)} \quad , \quad (3.1-4)$$

$$E_{pt}(Q) = (c/(\epsilon_t \omega)) P_t(kQ_x, kQ_y, -Q^2) e^{i(Q_x x + Q_y y + kz)} \quad , \quad (3.1-5)$$

y

$$B_{pt}(Q) = P_t(-Q_y, Q_x, 0) e^{i(Q_x x + Q_y y + kz)} \quad . \quad (3.1-6)$$

Los campos incidentes (reflejados) se pueden escribir de una manera similar tomando $\epsilon_t = 1$ y reemplazando k por $q_1(-q)$.

Tomando en cuenta la dispersión espacial, incluimos las ondas longitudinales cuyos campos eléctricos y magnéticos están dados por

$$E_1(Q) = L(Q_x, Q_y, 1) e^{i(Q_x x + Q_y y + lz)} \quad , \quad (3.1-7)$$

$$B_1(Q) = 0 \quad . \quad (3.1-8)$$

Nos interesa encontrar S_r, P_r, S_t, P_t, L , las cuales son funciones de Q' y ω , que corresponden a las funciones de amplitudes de los campos de polarización s y p reflejados, los campos de polarización s y p transmitidos y los campos longitudinales.

De las ecuaciones de los campos electromagnéticos que definimos en (2.2-4) → (2.2-17), los campos incidentes están dados por

$$E_i = E_{si}(Q_i) + E_{pi}(Q_i) \\ = \left[(P_i q_i Q_i c / \omega, S_i Q_i, -P_i Q_i^2 c / \omega) \right] e^{i(Q_i x + q_i z)} \quad , \quad (3.1-9)$$

$$B_i = B_{si}(Q_i) + B_{pi}(Q_i) \\ = \left[-S_i q_i Q_i c / \omega, P_i Q_i, S_i Q_i^2 c / \omega \right] e^{i(Q_i x + q_i z)} \quad , \quad (3.1-10)$$

los reflejados por

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_r &= \sum_{Q'} [\mathbf{E}_{sr}(Q') + \mathbf{E}_{pr}(Q')] \\
&= \sum_{Q'} \left[(-S_r Q'_y - P_r q' Q'_x c/\omega, S_r Q'_x - P_r q' Q'_y c/\omega, -P_r Q'^2 c/\omega) \right] e^{i(Q'_x x + Q'_y y - q' z)},
\end{aligned}
\tag{3.1-11}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}_r &= \sum_{Q'} [\mathbf{B}_{sr}(Q') + \mathbf{B}_{pr}(Q')] \\
&= \sum_{Q'} \left[(S_r q' Q'_x c/\omega - P_r Q'_y, S_r q' Q'_y c/\omega + P_r Q'_x, S_r Q'^2 c/\omega) \right] e^{i(Q'_x x + Q'_y y - q' z)},
\end{aligned}
\tag{3.1-12}$$

y los transmitidos por

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_t &= \sum_{Q'} [\mathbf{E}_{st}(Q') + \mathbf{E}_{pt}(Q') + \mathbf{E}_{lt}(Q')] \\
&= \sum_{Q'} \left[(P_t k' Q'_x c/\epsilon_t \omega - S_t Q'_y, P_t k' Q'_y c/\epsilon_t \omega + S_t Q'_x, -P_t Q'^2 c/\epsilon_t \omega) \right] e^{i(Q'_x x + Q'_y y + k' z)} \\
&+ \sum_{Q'} (LQ'_x, LQ'_y, Ll') e^{i(Q'_x x + Q'_y y + l' z)},
\end{aligned}
\tag{3.1-13}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}_t &= \sum_{Q'} [\mathbf{B}_{st}(Q') + \mathbf{B}_{pt}(Q')] \\
&= \sum_{Q'} \left[(-S_t k' Q'_x c/\omega - P_t Q'_y, -S_t k' Q'_y c/\omega + P_t Q'_x, S_t Q'^2 c/\omega) \right] e^{i(Q'_x x + Q'_y y + k' z)}.
\end{aligned}
\tag{3.1-14}$$

Las ecuaciones de Maxwell proporcionan dos condiciones de frontera independiendes: La continuidad de la proyección tangencial del campo eléctrico \mathbf{E} ,

$$\mathbf{F} = \mathbf{E} - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{E}) \mathbf{n}, \tag{3.1-15}$$

y la continuidad de la proyección tangencial del campo magnético \mathbf{B} ,

$$\mathbf{K} = \mathbf{B} - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{B}) \mathbf{n}, \tag{3.1-16}$$

en la interface.

La condición adicional de frontera es la continuidad de la componente perpendicular de $\epsilon_b \mathbf{E}$. Es decir que

$$\mathbf{G} = (\mathbf{n} \cdot \epsilon_b \mathbf{E}) \mathbf{n}, \tag{3.1-17}$$

sea continua.^[51]

De las condiciones de continuidad de las componentes del campo sólo cinco son independientes. Escogemos las componentes x , y de F y K , y la componente z de G :

$$\begin{aligned} F_x &= E_x - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{E}) n_x \\ &= (1 - n_x^2) E_x - n_x n_y E_y - n_x n_z E_z, \end{aligned} \quad (3.1-18)$$

$$\begin{aligned} F_y &= E_y - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{E}) n_y \\ &= (-n_x n_y) E_x + (1 - n_y^2) E_y - n_y n_z E_z, \end{aligned} \quad (3.1-19)$$

$$\begin{aligned} K_x &= B_x - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{B}) n_x \\ &= (1 - n_x^2) B_x - n_x n_y B_y - n_x n_z B_z, \end{aligned} \quad (3.1-20)$$

$$\begin{aligned} K_y &= B_y - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{B}) n_y \\ &= (-n_x n_y) B_x + (1 - n_y^2) B_y - n_y n_z B_z, \end{aligned} \quad (3.1-21)$$

$$\begin{aligned} G_z &= \epsilon_b (\mathbf{n} \cdot \mathbf{E}) n_z \\ &= n_x n_z \epsilon_b E_x + n_y n_z \epsilon_b E_y + n_z^2 \epsilon_b E_z. \end{aligned} \quad (3.1-22)$$

Desarrollando las 5 condiciones de frontera

$$F_{1y}|_{z=h\xi} = - F_{ry}|_{z=h\xi} + F_{ty}|_{z=h\xi}, \quad (3.1-23)$$

$$K_{1x}|_{z=h\xi} = - K_{rx}|_{z=h\xi} + K_{tx}|_{z=h\xi}, \quad (3.1-24)$$

$$F_{1x}|_{z=h\xi} = - F_{rx}|_{z=h\xi} + F_{tx}|_{z=h\xi}, \quad (3.1-25)$$

$$K_{1y}|_{z=h\xi} = - K_{ry}|_{z=h\xi} + K_{ty}|_{z=h\xi}, \quad (3.1-26)$$

$$G_{1z}|_{z=h\xi} = - G_{rz}|_{z=h\xi} + G_{tz}|_{z=h\xi}, \quad (3.1-27)$$

obtenemos las Ecs. (3.1-23)→(3.1-27) explícitamente:

$$\begin{aligned} & (-n_x n_y) E_{ix} + (1-n_y^2) E_{iy} - n_z n_y E_{iz} \\ & = \left[(n_x n_y) E_{rx} - (1-n_y^2) E_{ry} + n_z n_y E_{rz} \right. \\ & \left. + (-n_x n_y) E_{tx} + (1-n_y^2) E_{ty} - n_z n_y E_{tz} \right] , \end{aligned} \quad (3.1-28)$$

$$\begin{aligned} & (1-n_x^2) B_{ix} - n_y n_x B_{iy} - n_z n_x B_{iz} \\ & = \left[-(1-n_x^2) B_{rx} + n_y n_x B_{ry} + n_z n_x B_{rz} \right. \\ & \left. + (1-n_x^2) B_{tx} - n_y n_x B_{ty} - n_z n_x B_{tz} \right] , \end{aligned} \quad (3.1-29)$$

$$\begin{aligned} & (1-n_x^2) E_{ix} - n_y n_x E_{iy} - n_z n_x E_{iz} \\ & = \left[-(1-n_x^2) E_{rx} + n_y n_x E_{ry} + n_z n_x E_{rz} \right. \\ & \left. + (1-n_x^2) E_{tx} - n_y n_x E_{ty} - n_z n_x E_{tz} \right] , \end{aligned} \quad (3.1-30)$$

$$\begin{aligned} & (-n_x n_y) B_{ix} + (1-n_y^2) B_{iy} - n_z n_y B_{iz} \\ & = \left[(n_x n_y) B_{rx} - (1-n_y^2) B_{ry} + n_z n_y B_{rz} \right. \\ & \left. + (-n_x n_y) B_{tx} + (1-n_y^2) B_{ty} - n_z n_y B_{tz} \right] , \end{aligned} \quad (3.1-31)$$

$$\begin{aligned} & n_x n_z \epsilon_b E_{ix} + n_y n_z \epsilon_b E_{iy} + n_z^2 \epsilon_b E_{iz} \\ & = \left[-n_x n_z \epsilon_b E_{rx} - n_y n_z \epsilon_b E_{ry} - n_z^2 \epsilon_b E_{rz} \right. \\ & \left. + n_x n_z \epsilon_b E_{tx} + n_y n_z \epsilon_b E_{ty} + n_z^2 \epsilon_b E_{tz} \right] , \end{aligned} \quad (3.1-32)$$

donde

$$E_{ix} = p_1 q_1 Q_1 c / \omega e^{i(Q_1 x + q_1 \xi)} , \quad (3.1-33)$$

$$E_{iy} = S_1 Q_1 e^{i(Q_1 x + q_1 \xi)} , \quad (3.1-34)$$

$$E_{iz} = -P_1 Q_1^2 c / \omega e^{i(Q_1 x + q_1 \xi)} , \quad (3.1-35)$$

$$E_{rx} = \sum_{Q'} (-S_r Q'_y - P_r q' Q'_x c/\omega) e^{i(Q'_x x + Q'_y y - q' \xi)}, \quad (3.1-36)$$

$$E_{ry} = \sum_{Q'} (+S_r Q'_x - P_r q' Q'_y c/\omega) e^{i(Q'_x x + Q'_y y - q' \xi)}, \quad (3.1-37)$$

$$E_{rz} = \sum_{Q'} (-P_r Q'^2 c/\omega) e^{i(Q'_x x + Q'_y y - q' \xi)}, \quad (3.1-38)$$

$$E_{tx} = \sum_{Q'} \left[(-S_t Q'_y + P_t k' Q'_x c/\epsilon_t \omega) e^{ik' \xi} + L Q'_x e^{il' \xi} \right] e^{i(Q'_x x + Q'_y y)}, \quad (3.1-39)$$

$$E_{ty} = \sum_{Q'} \left[(S_t Q'_x + P_t k' Q'_y c/\epsilon_t \omega) e^{ik' \xi} + L Q'_y e^{il' \xi} \right] e^{i(Q'_x x + Q'_y y)}, \quad (3.1-40)$$

$$E_{tz} = \sum_{Q'} \left[-P_t Q'^2 c/\epsilon_t \omega e^{ik' \xi} + L l' e^{il' \xi} \right] e^{i(Q'_x x + Q'_y y)}, \quad (3.1-41)$$

$$B_{ix} = -S_1 q_1 Q_1 c/\omega e^{i(Q_1 x + q_1 \xi)}, \quad (3.1-42)$$

$$B_{iy} = P_1 Q_1 e^{i(Q_1 x + q_1 \xi)}, \quad (3.1-43)$$

$$B_{iz} = (c/\omega) S_1 Q_1^2 e^{i(Q_1 x + q_1 \xi)}, \quad (3.1-44)$$

$$B_{rx} = \sum_{Q'} (+S_r q' Q'_x c/\omega - P_r Q'_y) e^{i(Q'_x x + Q'_y y - q' \xi)}, \quad (3.1-45)$$

$$B_{ry} = \sum_{Q'} (S_r q' Q'_y c/\omega + P_r Q'_x) e^{i(Q'_x x + Q'_y y - q' \xi)}, \quad (3.1-46)$$

$$B_{rz} = \sum_{Q'} S_r Q'^2 c/\omega e^{i(Q'_x x + Q'_y y - q' \xi)}, \quad (3.1-47)$$

$$B_{tx} = \sum_{Q'} (-P_t Q'_y - S_t k' Q'_x c/\omega) e^{i(Q'_x x + Q'_y y + k' \xi)}, \quad (3.1-48)$$

$$B_{ty} = \sum_{Q'} (-S_t k' Q'_y c/\omega + P_t Q'_x) e^{i(Q'_x x + Q'_y y + k' \xi)}, \quad (3.1-49)$$

$$B_{tz} = \sum_{Q'} S_t Q'^2 c/\omega e^{i(Q'_x x + Q'_y y + k' \xi)}. \quad (3.1-50)$$

Ahora, resumimos las ecuaciones anteriores en forma de matriz, tal como lo hicimos en el capítulo anterior,

$$\sum_{Q'} R(Q', \rho) S(Q_1, Q', \rho) e^{iQ' \rho} A(Q') = B(Q_1, \rho) e^{iQ_1 \rho}, \quad (3.1-51)$$

donde

$$A(Q') = \begin{bmatrix} S_r(Q') \\ S_t(Q') \\ P_r(Q') \\ P_t(Q') \\ L(Q') \end{bmatrix} \quad (3.1-52)$$

En la Ec.(3.1-51) la matriz $R(Q', \rho)$ depende de la orientación \mathbf{n} de la superficie, la matriz $S(Q_1, Q', \rho)$ tiene la información sobre la perfil $h\xi(\rho)$ exclusivamente y el vector $B(Q_1, \rho)$ caracteriza los campos incidentes que también dependen de la orientación de la superficie. Las expresiones explícitas de R , S , B están dadas en el Apéndice A1.

Hay que hacer notar que el vector \mathbf{n} depende de $\xi(\rho)$, y sus derivadas parciales $\xi_x(\rho)$ y $\xi_y(\rho)$. Para realizar el cálculo perturbativo, desarrollamos todas estas cantidades en potencias de h ,

$$\mathbf{n} = \mathbf{n}^{(0)} h^0 + \mathbf{n}^{(1)} h^1 + \mathbf{n}^{(2)} h^2 + \dots \quad (3.1-53)$$

Usando la Ec.(3.1-2) tenemos

$$\begin{aligned} \mathbf{n} &= (-h\xi_x, -h\xi_y, 1) [(h\xi_x)^2 + (h\xi_y)^2 + 1]^{-1/2} \\ &\cong (-h\xi_x, -h\xi_y, 1) \left[1 - \frac{1}{2}(h\xi_x)^2 - \frac{1}{2}(h\xi_y)^2 + \dots \right] \end{aligned}$$

$$\cong \left(-h\xi_x + \frac{1}{2}h^3\xi_x^3 + \frac{1}{2}h^3\xi_x\xi_y^2 + \dots, -h\xi_y + \frac{1}{2}h^3\xi_y^3 + \frac{1}{2}h^3\xi_y\xi_x^2 + \dots, \right. \\ \left. 1 - \frac{1}{2}h^2\xi_x^2 - \frac{1}{2}h^2\xi_y^2 + \dots \right), \quad (3.1-54)$$

por lo tanto,

$$\mathbf{n}^{(0)} = (0, 0, 1), \quad (3.1-55)$$

$$\mathbf{n}^{(1)} = (-\xi_x, -\xi_y, 0), \quad (3.1-56)$$

$$\mathbf{n}^{(2)} = \left(0, 0, -\frac{1}{2}\xi_x^2 - \frac{1}{2}\xi_y^2 \right), \quad (3.1-57)$$

...

Con ayuda de las Ecs. (3.1-55)→(3.1-57) y la Tabla 1 (Pag.79), podemos desarrollar todas las cantidades en la Ec.(3.1-51) en potencias de h:

$$R(Q', \rho) = \sum_{j,k} R^{(jk)}(Q') \xi_x^j(\rho) \xi_y^k(\rho) h^{j+k}, \quad (3.1-58)$$

$$S(Q_1, Q', \rho) = \sum_1 S^{(1)}(Q_1, Q') \xi^1(\rho) h^1, \quad (3.1-59)$$

$$B(Q_1, \rho) = \sum_{j,k} B^{(jk)}(Q_1) \xi_x^j(\rho) \xi_y^k(\rho) h^{j+k}, \quad (3.1-60)$$

$$A(Q') = \sum_m A^{(m)}(Q') h^m. \quad (3.1-61)$$

Las expresiones explícitas de los coeficientes de h^n de estas cantidades, hasta segundo orden, se muestran en el Apéndice A2. Nótese que hemos extraído de $R(Q', \rho)$, $S(Q_1, Q', \rho)$ y $B(Q_1, \rho)$ toda la información que depende del perfil de la superficie. Por lo tanto $R^{(jk)}(Q')$, $S^{(1)}(Q_1, Q')$ y $B^{(jk)}(Q_1)$ son independientes de la estructura geométrica de la superficie.

Sustituyendo las Ecs.(3.1-58)→(3.1-61) en la Ec.(3.1-51) y tomando la transformada de Fourier, obtenemos

$$\sum_{Q'} \sum_{j,k,l,m \geq 0} \zeta^{(jkl)}(Q-Q') R^{(jk)}(Q') S^{(l)}(Q') A^{(m)}(Q') h^{j+k+l+m} = \\ \sum_{j,k} \zeta^{(jko)}(Q-Q_1) B^{(jk)} h^{j+k}, \quad (3.1-62)$$

donde $\zeta^{(jkl)}(\mathbf{Q})$ es la transformada de Fourier de

$$\zeta^{(jkl)}(\rho) \equiv \xi_x^j(\rho) \xi_y^k(\rho) \xi_z^l(\rho) . \quad (3.1-63)$$

Igualemos los coeficientes de la misma potencia de h en ambos lados de la Ec.(3.1-62) y haciendo notar que $S^{(0)}(\mathbf{Q}')=0$ y $\zeta^{(000)}(\mathbf{Q}-\mathbf{Q}')=\delta_{\mathbf{Q},\mathbf{Q}'}$, que corresponde a la conservación de la proyección del momento paralelo a la superficie plana, resolvemos la Ec.(3.1-62) para $A(\mathbf{Q})$ iterativamente:

$$A^{(n)}(\mathbf{Q}) = \left[R^{(00)}(\mathbf{Q}) \right]^{-1} \left[\sum_{0 \leq j \leq n} \zeta^{(j \ n-j \ 0)}(\mathbf{Q}-\mathbf{Q}_1) B^{(j \ n-j)}(\mathbf{Q}_1) \right. \\ \left. - \sum_{\substack{Q' \ j, k, l \geq 0 \\ n \geq j+k+l > 0}} \zeta^{(jkl)}(\mathbf{Q}-\mathbf{Q}') R^{(jkl)}(\mathbf{Q}') S^{(1)}(\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}') A^{(n-j-k-l)}(\mathbf{Q}') \right]. \quad (3.1-64)$$

Nótese que la única matriz que tenemos que invertir es la matriz $R^{(00)}(\mathbf{Q}')$ de 5×5 . Esto es equivalente a resolver el problema de dispersión de luz incidiendo sobre una superficie plana, como ya mencionamos en el capítulo anterior. Por lo tanto $R^{(00)}(\mathbf{Q}')$ es reducible siempre a dos matrices, una matriz de 3×3 y otra de 2×2 , mediante una rotación. La expresión explícita de $\left[R^{(00)}(\mathbf{Q}') \right]^{-1}$ cuando $\mathbf{Q}' \parallel \hat{x}$ se muestra en el Apéndice A3. Tomando el último caso y usando la Ec.(3.1-64), los campos difractados están dados a orden cero por

$$A^{(0)}(\mathbf{Q}) = R^{(00)}(\mathbf{Q})^{-1} B^{(00)}(\mathbf{Q}_1) \delta_{\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_1} , \quad (3.1-65)$$

a primer orden por

$$A^{(1)}(\mathbf{Q}) = R^{(00)}(\mathbf{Q})^{-1} \left\{ \left[B^{(10)}(\mathbf{Q}_1) - R^{(10)}(\mathbf{Q}_1) A^{(0)}(\mathbf{Q}_1) \right] \xi_x(\mathbf{Q}-\mathbf{Q}_1) \right. \\ \left. - R^{(00)}(\mathbf{Q}_1) S^{(1)}(\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_1) A^{(0)}(\mathbf{Q}_1) \xi(\mathbf{Q}-\mathbf{Q}_1) \right\} , \quad (3.1-66)$$

a segundo orden por

$$\begin{aligned}
A^{(2)}(Q) = & R^{(00)}(Q)^{-1} \left\{ [B^{(20)}(Q_1) - R^{(20)}(Q_1) A^{(0)}(Q_1)] \xi_x^2(Q-Q_1) \right. \\
& - R^{(00)}(Q_1) S^{(2)}(Q_1, Q_1) A^{(0)}(Q_1) \xi^2(Q-Q_1) \\
& - R^{(10)}(Q_1) S^{(1)}(Q_1, Q_1) A^{(0)}(Q_1) \xi_x \xi(Q-Q_1) \\
& - \sum_{Q'} R^{(10)}(Q') A^{(1)}(Q') \xi_x(Q-Q') \\
& \left. - \sum_{Q'} R^{(00)}(Q') S^{(1)}(Q_1, Q') A^{(1)}(Q') \xi(Q-Q') \right\} \dots
\end{aligned} \tag{3.1-67}$$

Ahora vamos a ilustrar el método de solución escogiendo, como ejemplo, el perfil de una rejilla. Además, escogiendo $g=(g,0,0) \parallel Q_1$, i.e.,

$$z = h \xi(x, y) = h \cos(gx) . \tag{3.1-68}$$

Entonces

$$\begin{aligned}
\xi_x(Q-Q') &= \frac{1}{2} ig(\delta_{Q-Q', g} - \delta_{Q-Q', -g}) \\
&= \frac{1}{2} ig(\delta_{Q', Q-g} - \delta_{Q', Q+g}),
\end{aligned} \tag{3.1-69}$$

$$\xi_x^2(Q-Q') = -\frac{1}{4} g^2(\delta_{Q, Q'+2g} - 2\delta_{Q, Q'} + \delta_{Q, Q'-2g}), \tag{3.1-70}$$

$$\xi_x \xi(Q-Q') = \frac{1}{4} ig(\delta_{Q, Q'+2g} - \delta_{Q, Q'-2g}) . \tag{3.1-71}$$

Sustituimos estos resultados y las Ecs.(2.2-57) y (2.2-58) en las Ecs.(3.1-66)→(3.1-67) encontramos finalmente que las amplitudes de los campos difractados están dadas a primer orden por

$$A^{(1)}(Q) = \frac{1}{2} R^{(00)}(Q)^{-1} \left\{ ig[B^{(10)}(Q_1) - R^{(10)}(Q_1) A^{(0)}(Q_1)](\delta_{Q, Q_1+g} - \delta_{Q, Q_1-g}) \right.$$

$$-R^{(00)}(Q_1)S^{(1)}(Q_1, Q_1)A^{(0)}(Q_1)(\delta_{Q, Q_1+g} + \delta_{Q, Q_1-g}) \Big\},$$

(3.1-72)

y a segundo orden por

$$A^{(2)}(Q) = \frac{1}{4} R^{(00)}(Q)^{-1} \left\{ -g^2 [B^{(20)}(Q_1) - R^{(20)}(Q_1)A^{(0)}(Q_1)] (\delta_{Q, Q_1+2g} - 2\delta_{Q, Q_1} + \delta_{Q, Q_1-2g}) \right. \\ -R^{(00)}(Q_1)S^{(2)}(Q_1, Q_1)A^{(0)}(Q_1) (\delta_{Q, Q_1+2g} + 2\delta_{Q, Q_1} + \delta_{Q, Q_1-2g}) \\ -igR^{(10)}(Q_1)S^{(1)}(Q_1, Q_1)A^{(0)}(Q_1)(\delta_{Q, Q_1+2g} - \delta_{Q, Q_1-2g}) \\ -2igR^{(10)}(Q-g)A^{(1)}(Q-g) + 2igR^{(10)}(Q+g)A^{(1)}(Q+g) \\ \left. -2R^{(00)}(Q-g)S^{(1)}(Q_1, Q-g)A^{(1)}(Q-g) - 2R^{(00)}(Q+g)S^{(1)}(Q_1, Q+g)A^{(1)}(Q+g) \right\}.$$

(3.1-73)

Las expresiones explícitas para $R^{(n0)}(Q')$, $S^{(n)}(Q_1, Q')$ y $B^{(n0)}(Q_1)$ con $Q'=(Q', 0, 0)$ están dadas en el Apéndice A4 para $n=0, 1, 2$.

La solución a orden cero corresponde a la dispersión por una superficie plana. Observamos que las singularidades de $R^{(00)}(Q)$ (ver la Ec. (A3-2)) satisfacen la relación de dispersión de plasmon-polaritón de superficie (sigla en inglés es SPP) de una superficie plana

$$\epsilon_t q(Q) + k(Q) + \frac{Q^2}{l(Q)} \left(1 - \frac{\epsilon_t}{\epsilon_b} \right) = 0 \quad (3.1-74)$$

Entonces de la Ec. (3.1-72) podemos ver que la solución a primer orden tiene estructuras resonantes en las frecuencias donde $Q_1 \approx g$ satisfacen la Ec. (3.1-74). Estas soluciones resonantes a primer orden están fuera del cono de luz, por lo tanto son no radiativas y no contribuyen a la luz reflejada directamente. Pero podemos detectarlas, por ejemplo, a través de los campos radiados por moléculas adsorbidas en la superficie.^[74] Por otro lado, podemos ver de la Ec. (3.1-73) que existe una contribución a segundo orden en la

luz reflejada especular ($Q = Q_1$) la cual se puede detectar experimentalmente. Estos experimentos^[75-80] usualmente son analizados en términos de la reflectancia diferencial definida como

$$\frac{\Delta R}{R^{(0)}} \equiv \frac{R - R^{(0)}}{R^{(0)}}, \quad (3.1-75)$$

donde R es la reflectancia de la superficie rugosa, y $R^{(0)}$ es la de la superficie plana tomada como referencia.

En nuestro caso solamente tomamos en cuenta la contribución hasta segundo orden y obtenemos, por ejemplo, para la onda con polarización p

$$\frac{\Delta R_p}{R_p^{(0)}} = 2h^2 \operatorname{Re} \left(\frac{P_r^{(2)}}{P_r^{(0)}} \right). \quad (3.1-76)$$

El resultado de este cálculo es más general que el del Capítulo 2, ya que se toma en cuenta el efecto de la contribución local debida a las transiciones electrónicas interbanda. El resultado se reduce al del Capítulo 2 si tomamos $\epsilon_p = 1$.

Es fácil extender nuestro cálculo a superficies no senoidales. La Ec.(3.1-64) es una solución general para cualquier tipo de perfil, siempre y cuando cumpla la condición de Rayleigh. En este caso, el único problema es encontrar la transformada de Fourier del perfil. En particular, si la superficie tiene simetría translacional en una dirección y el plano incidente es perpendicular a esta dirección, uno puede aplicar directamente las formulas (3.1-65)→(3.1-67).

3.2 El límite local

El límite local es el caso cuando no existe el campo longitudinal. Este límite no se puede tomar directamente de nuestro cálculo no local (haciendo $l \rightarrow i\infty$, de tal manera que se eliminara E_l (ver la Ec.(2.2-12))), porque en nuestro cálculo perturbativo hemos expandido los campos en potencias de $l\xi$ (Ver la Ec.(A2-5) y (A2-6)) y esto causa problemas de convergencia cuando se toma el límite mencionado.^[81] Por lo tanto, en el caso local repetimos el cálculo, siguiendo el mismo procedimiento que antes, pero sin incluir las ondas longitudinales. En este caso resolvemos solamente las ecuaciones determinadas por matrices de 4×4 . (En el Apéndice A5 mostramos los elementos de estas matrices). Las incógnitas son las amplitudes de los campos y forman el vector

$$A(Q') = \begin{bmatrix} S_r(Q') \\ S_t(Q') \\ P_r(Q') \\ P_t(Q') \end{bmatrix} \quad (3.2-1)$$

La solución tiene la misma estructura que las Ecs.(3.1-65), (3.1-72) y (3.1-73). Como los detalles de los cálculos locales han sido reportados,^[5] sólo vamos a mostrar los resultados numéricos, en el siguiente capítulo, cuando los comparemos con los de la teoría no local.

CAPITULO 4

INTERPRETACION DE LOS EFECTOS RESONANTES ENTRE EL CAMPO DISPERSADO Y LOS MODOS COLECTIVOS DEL METAL

En este capítulo presentamos los resultados numéricos para una rejilla metálica senoidal usando las fórmulas deducidas en el capítulo anterior.

De las Ecs.(3.1-72) y (3.1-73) podemos ver que a primer orden no existe la onda especular ($Q=Q_1$) y las dispersiones ocurren en $Q = Q_1 \pm g$. A segundo orden existe un haz especular y dos no-especulares con $Q = Q_1$, $Q_1 \pm 2g$. Nótese que las resonancias aparecen cuando el vector de onda Q ó cualquiera de los vectores de onda intermediarios Q' (ver la Ec.(3.1-64)) satisface la relación de dispersión de los plasmones-polaritones de superficie (Ec.(3.1-74)) mostrada en la Fig.1. Esta figura se obtiene dando un valor real a ω , resolviendo la Ec.(3.1-74) para Q y graficando su parte real. Aquí y en adelante utilizamos las respuestas dieléctricas dadas por las Ecs.(3-1) y (3-2) con $\omega_p \tau = 100$ y $\beta = 0.00361c$ (que corresponde a la velocidad de Fermi del oro), y tomamos $\epsilon_b = 1$ (por simplicidad en la discusión de los resultados)). En este caso, las funciones de amplitud que encontramos en el capítulo 3 coinciden con las del capítulo 2. Para Q 's pequeñas ($Q \ll \omega_p / \beta$) no existen diferencias apreciables con el caso local, el cual corresponde a $\beta = 0$. El efecto de la no-localidad en la relación de dispersión de plasmones de superficie se manifiesta para valores grandes de Q , donde aparecen desviaciones significativas cuando se compara con los resultados locales. Usaremos la Fig.1 para interpretar la estructura de las curvas que se describen adelante.

Con el fin de analizar nuestros resultados para las dispersiones resonantes, definimos un factor de amplificación del campo dado por

$$\begin{aligned}
 r_1 &= \frac{1}{gh} \frac{|hE_{pr}^{(1)}(Q_1+g)|}{|E_{pi}^{(0)}(Q_1)|} \\
 &= \frac{|P_r^{(1)}(Q_1+g)|}{g |P_i^{(0)}(Q_1)|} \cdot \frac{[|q(Q_1+g)|^2(Q_1+g)^2+(Q_1+g)^4]^{1/2}}{(|q(Q_1)|^2 Q_1^2 + Q_1^4)^{1/2}}
 \end{aligned}
 \tag{4-1}$$

para el campo a primer orden y

$$r_2 = \frac{1}{(gh)^2} \frac{|h^2 E_{pr}^{(2)}(Q_1)|}{|E_{pi}^{(0)}(Q_1)|} = \frac{|P_r^{(2)}(Q_1)|}{(g)^2 |P_i^{(0)}(Q_1)|}
 \tag{4-2}$$

para el campo especular a segundo orden. Aquí $|q(Q_1+g)|^2$ significa $q(Q_1+g) \cdot q^*(Q_1+g)$. Hemos introducido el desarrollo $E = \sum_n h^n E^{(n)}$ y utilizado la Ec.(3.1-5) para expresar E_{pr} en función de P_r . Nótese que hay que tener cuidado cuando se calculan los valores absolutos en la Ec.(4-1) dado que el campo eléctrico $E_{pr}^{(1)}(Q_1+g)$ es un vector complejo y no tiene una dirección real cuando Q_1+g está fuera del cono de luz. La dependencia en h del campo a primero y a segundo orden se ha eliminado en la definición de r_1 y r_2 , y la magnitud del vector de onda g se usa solamente para construir cantidades adimensionales. Nótese que r_1 está definido para las dispersiones en Q_1+g ; para las dispersiones en Q_1-g , la expresión es similar:

$$\begin{aligned}
 r_1^- &= \frac{1}{gh} \frac{|hE_{pr}^{(1)}(Q_1-g)|}{|E_{pi}^{(0)}(Q_1)|} \\
 &= \frac{|P_r^{(1)}(Q_1-g)|}{g |P_i^{(0)}(Q_1)|} \cdot \frac{[|q(Q_1-g)|^2(Q_1-g)^2+(Q_1-g)^4]^{1/2}}{(|q(Q_1)|^2 Q_1^2 + Q_1^4)^{1/2}}
 \end{aligned}$$

En las Figs.2 , 3 y 4 mostramos r_1 y r_2 como función de g para los casos local y no local, cuando la luz con polarización p incide sobre la superficie con un ángulo $\theta=30^\circ$ para tres frecuencias diferentes: $\omega/\omega_p = 0.4, 0.5$ y 0.8 . En la Fig.2 el cálculo no local a primer orden muestra un mínimo profundo en R^+ para un valor de g que corresponde a una raíz de r_1 . No es estrictamente un cero por lo que las raíces son complejas debido al valor finito de τ . En el caso local estos mínimos obedecen la relación

$$\epsilon_t Q_1(Q_1+g)k(Q_1)k(Q_1+g) = 0 , \quad (4-4)$$

la cual se puede resolver analíticamente y se muestra en el recuadro de la Fig.2, junto con las raíces que corresponden al cálculo no local las cuales han sido obtenidas numéricamente. Nótese que cuando $g \rightarrow \infty$ el cálculo local se aproxima asintóticamente a una frecuencia dada por la más pequeña de las raíces de la ecuación

$$\left(\frac{\omega}{\omega_p}\right)^4 - (2\sin^2\theta + 1)\left(\frac{\omega}{\omega_p}\right)^2 + 1 = 0 \quad (4-5)$$

(despreciando la disipación); esta asíntota no existe en el cálculo no local. Se puede ver en el recuadro de la Fig.2 que para $\omega < 0.44\omega_p$ existen raíces tanto en el caso local (línea punteada) como en el caso no local (línea continua), pero para $\omega > 0.44\omega_p$ sólo existe una raíz para el caso no local y para un valor grande de g . Este comportamiento también aparece en las Figs.3 and 4, donde los resultados no locales muestran mínimos profundos que están ausentes en el caso local.

Una de las características predominantes de las Figs.2 y 3 es el pico de r_1 debido a la excitación de SPP en Q_1+g (SPP^+) y dos picos en r_2 debido a la excitación en $Q_1 \pm g$ (SPP^+ y SPP^-). Los

procesos de excitación se muestran en los recuadros de las Figs.3 y 4. En estos recuadros señalamos la relación de dispersión de plasmón de superficie (SPP), el cono de luz (LC), y la componente paralela Q_1 del vector de onda de la luz incidente. Para un valor de ω fijo, la excitación ocurre cuando los vectores de onda se intersectan con los modos de SPP. Como vemos en las Figs.2 y 3, existe una diferencia notable entre los resultados de los cálculos local y no local para valores grandes de g . Para frecuencias pequeñas, esta diferencia es despreciable cerca de la resonancia de SPP. Por otro lado, para $\omega/\omega_p > 1/\sqrt{2}$ (Fig.4) no existen picos de SPP en el caso local, mientras que se observan resonancias de SPP en el caso no local para valores grandes de g . Como en este caso $Q_1 \ll g$, los dos picos de segundo orden en $Q_1 \pm g$ (SPP^\pm) se acercan tanto el uno al otro que no podemos distinguirlos en la figura 4. (El acercamiento de estos dos picos puede ser utilizado para cuantificar la curvatura en la relación de dispersión de SPP, i.e., los valores de las dos frecuencias resonantes se aproximan cuando la pendiente de la curva disminuye).

En las figuras 2, 3 y 4 podemos también observar que existen una y dos discontinuidades en la pendiente de las curvas de r_1 y r_2 respectivamente. Ellas corresponden a la intersección de $Q_1 \pm g$ con la superficie del cono de luz (LC^+ y LC^-).

En las Figs.5 y 6 mostramos los resultados local y no local para r_1 and r_2 como una función de ω , cuando la luz con polarización p incide sobre la superficie con el mismo ángulo de las figuras anteriores, pero ahora con vectores de ondas $gc/\omega_p = 0.5$ y 100. Las estructuras de estas dos figuras corresponden a las características de las Figs.2-4: resonancias cuando los vectores dispersados $Q_1 \pm g$

satisfacen la relación de dispersión de SPP, las discontinuidades de pendiente de las curvas cuando $Q_1 \pm g$ intersectan al cono de luz, y mínimos profundos en el cálculo a primer orden. Para $Q_1 \ll g$ ($gc/\omega_p = 100$) las curvas correspondientes a los cálculos local y no local difieren notablemente, pero para $gc/\omega_p = 0.5$ estos dos casos se acercan tanto el uno al otro que no podemos distinguir la diferencia en la figura 5.

Los procesos de excitación de SPP se muestran en los recuadros de las Figs.5 y 6. Al igual que los recuadros de las Figs.3 y 4, estos recuadros señalamos la relación de dispersión de plasmon de superficie (SPP) y el cono de luz (LC), y Q_1 corresponde al haz incidente. Para un valor fijo de g , la luz dispersada a primer orden corresponde a los vectores $Q_1 \pm g$, los cuales intersectan con las curvas de la relación de dispersión del SPP en dos valores de la frecuencia de ω . Estos dos valores de ω se acercan entre sí al incrementar el valor de g .

Existen también discontinuidades en las curvas de las Figs.5 y 6, en aquellas frecuencias (señaladas por T^+ , T^- y T^1) para las cuales las ondas reflejadas se propagan al ángulo crítico $\theta_c = \arcsin \sqrt{\epsilon}$, en el cual la onda transmitida correspondiente cambia de evanescente a propagante. Estas discontinuidades no aparecen en las Figs.2-4 porque en ese caso teníamos $\omega < \omega_p$ y todas las ondas transmitidas eran evanescentes.

En la Fig.7 (8) graficamos r_1 y r_2 vs. gc/ω_p (ω/ω_p) para valores fijos de $\omega/\omega_p = 0.5$ ($gc/\omega_p = 0.5$) para luz de polarización s con el campo eléctrico a lo largo de las rejillas. Como hemos escogido $Q_1 \parallel g$ y no existen mezclas entre las ondas de polarización s, p y las ondas longitudinales, los resultados local e hidrodinámico son

idénticos, no existen resonancias de SPP y no hay ceros en el factor de amplificación a primer orden. La única estructura visible en estas curvas son las discontinuidades de la pendiente cuyo origen hemos discutido anteriormente.

En la Fig.9 señalamos los cambios normalizados en la reflectancia $\frac{\Delta R}{R}$ vs. $\frac{\omega}{\omega_p}$ (Ec.(3.1-75)) de una superficie con una rugosidad a escala microscópica ($gc/\omega_p=100$, i.e. $d \approx 10 \text{Å}$ para $\hbar\omega_p=10\text{eV}$), sobre la cual iluminamos con luz de polarización p ((Ec.3.1-75)) a un ángulo $\theta=30^\circ$. Nótese que hemos escalado el resultado con el parámetro del desarrollo perturbativo gh . La estructura que revela esta figura está muy relacionada con la de la Fig.6 excepto por un pico en la frecuencia de Brewster $\omega_B = \omega_p / (1 - \tan^2 \theta) \cong 1.2\omega_p$ el cual es debido al cero de $R^{(0)}$. El otro pico tiene su origen en la resonancia de SPP cuya posición difiere notablemente entre el cálculo local ($\cong 0.71\omega_p$) y no local ($\cong 0.9\omega_p$). Nótese que este pico no es sensible a g para el caso local pero resulta ser casi lineal con g para el caso no local.

Los efectos de la dispersión espacial (caso no local) son mayores cuando menor es la periodicidad espacial de la rejilla. Hemos aplicado nuestra teoría al cálculo de la reflexión de luz a incidencia normal sobre una superficie cristalina reconstruida de oro (la cara (110)). Esta reconstrucción se caracteriza por la ausencia de hileras completas de átomos en la dirección $[\bar{1}\bar{1}0]$ en la superficie, lo que le da a la cara la apariencia de una rejilla a nivel microscópico con un periodo $\lambda=(n+1)a$, donde n es la cantidad de hileras consecutivas que se desaparecen y $a=4.08 \text{Å}$ es la constante de la red del oro. (Cuando $n=1$, tenemos $g=\pi/a \approx 165\omega_p/c$ y $h=a/2\sqrt{2} \approx 0.00667c/\omega_p$, donde $\hbar\omega_p=9.2\text{eV}$).

En la Fig.10 se muestra la diferencia de la reflectancia $\Delta R/R$ cuando el vector de polarización de la luz incidente está a lo largo de las hileras ausentes y cuando está en la dirección perpendicular. Esto da lugar a una anisotropía en la reflexión la cual, convenientemente normalizada, es presentada como función de la frecuencia para una rejilla con período fijo ($g=10\omega_p/c$) y la altura fija ($h=0.00667c/\omega_p$). Hemos tomado $V_F=1.4 \times 10^8 \text{ cm/sec}^{[50]}$ y $\tau=9.3 \times 10^{-15} \text{ sec.}^{[80]}$ Los valores de ϵ_b se obtienen sustituyendo los valores experimentales^[80] de las respuestas dieléctricas de oro en la Ec.(3-1) y despejando ϵ_b . Observamos que g en este caso es pequeño, por lo tanto los calculos locales y no locales se difieren muy poco. .

Cuando el valor de g se incrementa (manteniendo la misma h fija), la diferencia entre el caso local y el caso no local empieza ser más notable. En la Fig.11 se muestra la diferencia de la reflectancia $\Delta R/R$ con los mismos parámetros que en la figura anterior, pero en este caso $g=250\omega_p/c$. Nótese que la estructura para los resultados locales no son afectados por la variación en g . Sin embargo, la influencia de g sobre los resultados no locales es muy significativa.

Las curvas en la Fig.12 corresponden a los resultados no locales para la anisotropía en la reflectancia sobre la superficie reconstruida de oro, caracterizada por la ausencia de una, dos o tres hileras consecutivas de átomos. Estos tres casos corresponden a $g=165\omega_p/c$, $110\omega_p/c$, y $82\omega_p/c$ respectivamente.

CONCLUSIONES

En este trabajo hemos extendido el método de Rayleigh-Fano para calcular los campos electromagnéticos dispersados por una superficie metálica rugosa. El metal está caracterizado por una función dieléctrica transversal, dada por el modelo de Drude con correcciones debidas a las transiciones interbanda y una función dieléctrica longitudinal no local en la aproximación hidrodinámica. El cálculo se ha realizado tanto para ondas incidentes con polarización p como con polarización s .

Hemos obtenido la solución formal del problema en términos de una serie de potencias de la altura del perfil de la rugosidad. Se propone un método de cálculo para determinar los coeficientes de la serie a orden arbitrario. Para ilustrar el uso del método, éste se aplica al caso de una rejilla periódica y se presentan resultados numéricos a primero y segundo ordenes.

Este problema ha sido estudiado exhaustivamente para el caso de un metal descrito por una función dieléctrica local. En este trabajo se resuelve, por primera vez, el problema de una superficie rugosa, cuando el metal es capaz de sustentar también modos longitudinales.^[86] Hemos utilizado el modelo hidrodinámico para incluir modos longitudinales. La simplicidad de este modelo permite una visualización clara de los procesos físicos fundamentales del sistema real, además puede usarse con éxito en la descripción de sistemas más complicados, tales como los no homogéneos.

Dentro de la aproximación hidrodinámica o también llamada de un sólo polo, además de los modos electromagnéticos transversales, existe también un modo longitudinal. Por lo tanto, para considerar

los tres tipos de modos (dos transversales y uno longitudinal) dentro del metal se requiere el uso de una condición de contorno adicional al caso de los dos modos transversales en el vacío. La dificultad esencial del problema reside en poder satisfacer estas condiciones de contorno sobre una superficie no-plana.

La condición adicional de frontera para un gas de electrones es diferente de la de un sólido con una red periódica, ya que la red da lugar a contribuciones locales adicionales ϵ_b a la función dieléctrica debidas a las transiciones interbanda. En el primer caso el campo eléctrico es continuo a través de la superficie y en el segundo es discontinuo. Se ha resuelto el problema para ambos casos y dado que el primero es relativamente simple, esto nos ha ayudado a corroborar la validez de nuestras expresiones cuando en el segundo tomamos $\epsilon_b=1$. Ambas soluciones se presentan en este trabajo y son idénticos.

La presencia de la rugosidad destruye la simetría translacional a lo largo de la superficie y esto hace posible que el campo electromagnético externo pueda excitar plasmones-polaritones de superficie (SPP). Nuestros resultados muestran claramente la amplificación del campo electromagnético cerca de la superficie debido al acoplamiento resonante con los plasmones-polaritones de superficie. Presentamos curvas de estos factores de amplificación a primero y segundo ordenes como función de la frecuencia y del vector de onda que caracteriza la periodicidad de la rejilla. Estas curvas muestran una estructura muy rica y son analizadas en términos de los distintos procesos de excitación de los modos de superficie y de bulto correspondientes al sistema con una superficie plana.

Como ya hemos mencionado, la parte más notable de la estructura

del factor de amplificación corresponde a la excitación resonante de los SPP. A bajas frecuencias la estructura en el caso no local difiere de la correspondiente a la del caso local; A altas frecuencias esta resonancia ya no aparece en el caso local y sólo aparece en el caso no-local.

Dado que los efectos de la dispersión espacial (caso no local) son mayores cuando menor es la periodicidad espacial de la rejilla, hemos aplicado nuestra teoría al cálculo de la reflexión de luz sobre la superficie reconstruida de la cara (110) de un cristal de oro. Esta reconstrucción se caracteriza por la ausencia, en la superficie, de hileras completas de átomos, lo que le da a la cara la apariencia de una rejilla a nivel microscópico. Hemos calculado la reflexión a incidencia normal cuando el vector de polarización de la luz incidente está a lo largo de la hileras ausentes y cuando está en la dirección perpendicular. Esto da lugar a una anisotropía en la reflexión la cual, convenientemente normalizada, es presentada como función de la frecuencia para distintos periodos de la rejilla correspondientes a la ausencia de una, dos o tres hileras consecutivas de átomos. Se encuentran diferencias claras entre estos tres tipos de reconstrucción, así como con los cálculos correspondientes a un modelo local para la función dieléctrica del oro.

La espectroscopía de la anisotropía óptica es muy útil para estudiar problemas de superficies^[81-83], ya que el bulbo cristalino se puede considerar isotrópico, por lo tanto cualquier anisotropía en la propiedad óptica proviene de la simetría en la superficie. Dichas anisotropías han sido medidas en semiconductores.^[84-85] Dado que estos espectros de anisotropía no han sido determinados

experimentalmente para superficie reconstruida de oro, nuestros resultados representan una predicci3n para los distintos tipos de reconstrucci3n mencionados anteriormente.

APENDICE A1

En este apéndice proporcionamos las expresiones explícitas de los elementos de las matrices $R(Q', \rho)$, $S(Q_1, Q', \rho)$ y $B(Q_1, \rho)$ (donde Q' es arbitrario y $Q_1 = (Q_1, 0, 0)$) las cuales aparecieron en la Ec. (3.1-51):

$$R_{11}(Q', \rho) = -n_x n_y Q'_y - (1 - n_y^2) Q'_x,$$

$$R_{12}(Q', \rho) = (n_x n_y) Q'_y + (1 - n_y^2) Q'_x,$$

$$R_{13}(Q', \rho) = [-n_x n_y q' Q'_x + (1 - n_y^2) q' Q'_y - n_z n_y Q'^2] c / \omega,$$

$$R_{14}(Q', \rho) = [-n_y n_x Q'_x (k' / \epsilon_t) + (1 - n_y^2) Q'_y (k' / \epsilon_t) + n_z n_y Q'^2 / \epsilon_t] c / \omega,$$

$$R_{15}(Q', \rho) = -n_x n_y Q'_x + (1 - n_y^2) Q'_y - n_z n_y l',$$

$$R_{21}(Q', \rho) = [-(1 - n_x^2) q' Q'_x + n_y n_x q' Q'_y + n_z n_x Q'^2] c / \omega,$$

$$R_{22}(Q', \rho) = [-(1 - n_x^2) k' Q'_x + n_y n_x k' Q'_y - n_z n_x Q'^2] c / \omega,$$

$$R_{23}(Q', \rho) = (1 - n_x^2) Q'_y + n_y n_x Q'_x,$$

$$R_{24}(Q', \rho) = -(1 - n_x^2) Q'_y - n_y n_x Q'_x,$$

$$R_{25}(Q', \rho) = 0,$$

$$R_{31}(Q', \rho) = (1 - n_x^2) Q'_y + n_y n_x Q'_x,$$

$$R_{32}(Q', \rho) = -(1 - n_x^2) Q'_y - n_y n_x Q'_x,$$

$$R_{33}(Q', \rho) = [(1 - n_x^2) q' Q'_x - n_y n_x q' Q'_y - n_z n_x Q'^2] c / \omega,$$

$$R_{34}(Q', \rho) = [(1 - n_x^2) k' Q'_x / \epsilon_t - n_y n_x k' Q'_y / \epsilon_t + n_z n_x Q'^2 / \epsilon_t] c / \omega,$$

$$R_{35}(Q', \rho) = (1 - n_x^2) Q'_x - n_y n_x Q'_y - n_z n_x l',$$

$$R_{41}(Q', \rho) = [(n_x n_y) q' Q'_x - (1 - n_y^2) q' Q'_y + n_z n_y Q'^2] c / \omega,$$

$$R_{42}(Q', \rho) = [n_x n_y k' Q'_x - (1 - n_y^2) k' Q'_y - n_z n_y Q'^2] c / \omega,$$

$$R_{43}(Q', \rho) = -n_x n_y Q'_y - (1 - n_y^2) Q'_x,$$

$$R_{44}(Q', \rho) = (n_x n_y) Q'_y + (1 - n_y^2) Q'_x,$$

$$R_{45}(Q', \rho) = 0 ,$$

$$R_{51}(Q', \rho) = n_x n_z Q'_y - n_y n_z Q'_x ,$$

$$R_{52}(Q', \rho) = -n_x n_z \varepsilon_b Q'_y + n_y n_z \varepsilon_b Q'_x ,$$

$$R_{53}(Q', \rho) = [n_x n_z q'_x Q'_x + n_y n_z q'_y Q'_y + n_z^2 Q'^2] c / \omega ,$$

$$R_{54}(Q', \rho) = [n_x n_z k'_x Q'_x \varepsilon_b / \varepsilon_t + n_y n_z k'_y Q'_y \varepsilon_b / \varepsilon_t - n_z^2 Q'^2 \varepsilon_b / \varepsilon_t] c / \omega ,$$

$$R_{55}(Q', \rho) = [n_x n_z Q'_x + n_y n_z Q'_y + n_z^2 l'] \varepsilon_b ,$$

(A1-1)

$$S(Q_1, Q', \rho) = \text{diag} (e^{-i(q'+q_1)h\xi}, e^{i(k'-q_1)h\xi}, e^{-i(q'+q_1)h\xi}, \\ e^{i(k'-q_1)h\xi}, e^{i(l'-q_1)h\xi}) ,$$

(A1-2)

y

$$B(Q_1, \rho) = \begin{bmatrix} (1-n_y^2)Q_1 S_1 + [(-n_x n_y)q_1 Q_1 c/\omega + n_z n_y Q_1^2 c/\omega] P_1 \\ [(1-n_x^2)(-q_1 Q_1 c/\omega) - n_z n_x Q_1^2 c/\omega] S_1 + (-n_y n_x Q_1) P_1 \\ (-n_y n_x Q_1) S_1 + [(1-n_x^2)q_1 Q_1 c/\omega + n_z n_x Q_1^2 c/\omega] P_1 \\ [(-n_x n_y)(-q_1 Q_1 c/\omega) - n_z n_y Q_1^2 c/\omega] S_1 + [(1-n_y^2)Q_1] P_1 \\ (n_y n_z Q_1) S_1 + [n_x n_z q_1 Q_1 c/\omega - n_z^2 Q_1^2 c/\omega] P_1 \end{bmatrix}$$

(A1-3)

APENDICE A2

En este apéndice proporcionamos las expresiones explícitas para los coeficientes de la potencia h^n ($n=0,1,2$) de los desarrollo perturbativos de $R(Q',\rho)$, $S(Q_1,Q',\rho)$ y $B(Q_1,\rho)$ (donde Q' es arbitrario y $Q_1=(Q_1,0,0)$) los cuales aparecieron en las Ecs. (3.1-58)→(3.1-60):

El coeficiente de h^0 de $R(Q',\rho)$ es

$$R^{(00)}(Q') = \begin{bmatrix} -Q'_x & Q'_x & q'Q'_y c/\omega & k'Q'_y c/(\epsilon_t \omega) & Q'_y \\ -q'Q'_x c/\omega & -k'Q'_x c/\omega & Q'_y & -Q'_y & 0 \\ Q'_y & -Q'_y & q'Q'_x c/\omega & k'Q'_x c/(\epsilon_t \omega) & Q'_x \\ -q'Q'_y c/\omega & -k'Q'_y c/\omega & -Q'_x & Q'_x & 0 \\ 0 & 0 & Q'^2 c/\omega & -\epsilon_b Q'^2 c/(\epsilon_t \omega) & l' \epsilon_b \end{bmatrix}, \quad (A2-1)$$

el coeficiente de h^1 de $R(Q',\rho)$ es

$$R^{(10)}(Q',\rho) + R^{(01)}(Q',\rho) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \xi_y Q'^2 c/\omega & -\xi_y Q'^2 c/(\epsilon_t \omega) & \xi_y l' \\ -\xi_x Q'^2 c/\omega & \xi_x Q'^2 c/\omega & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi_x Q'^2 c/\omega & -\xi_x Q'^2 c/(\epsilon_t \omega) & \xi_x l' \\ -\xi_y Q'^2 c/\omega & \xi_y Q'^2 c/\omega & 0 & 0 & 0 \\ -\xi_x Q'_y + \xi_y Q'_x & (\xi_x Q'_y - \xi_y Q'_x) \epsilon_b & -(\xi_x Q'_x + \xi_y Q'_y) q'/\omega & -(\xi_x Q'_x + \xi_y Q'_y) \epsilon_b k c/\epsilon_t \omega & -(\xi_x Q'_x + \xi_y Q'_y) \epsilon_b \end{bmatrix}, \quad (A2-2)$$

el coeficiente de h^2 de $R(Q',\rho)$ es

$$R^{(20)}(Q',\rho) + R^{(11)}(Q',\rho) + R^{(02)}(Q',\rho) =$$

$$\begin{bmatrix}
-\xi_x^2 Q'_y + \xi_x \xi_y Q'_x & \xi_x^2 Q'_y - \xi_x \xi_y Q'_x & -(\xi_x^2 Q'_x + \xi_x \xi_y Q'_y) q' / \omega & -(\xi_x^2 Q'_x + \xi_x \xi_y Q'_y) kc / \epsilon_t \omega & -\xi_x^2 Q'_x \xi_x \xi_y Q'_y \\
-\xi_x \xi_y Q'_y + \xi_y^2 Q'_x & \xi_x \xi_y Q'_y - \xi_y^2 Q'_x & -(\xi_x \xi_y Q'_x + \xi_y^2 Q'_y) qc / \omega & -(\xi_x \xi_y Q'_x + \xi_y^2 Q'_y) kc / \epsilon_t \omega & -\xi_x \xi_y Q'_x \xi_y^2 Q'_y \\
(\xi_x^2 Q'_x + \xi_x \xi_y Q'_y) qc / \omega & (\xi_x^2 Q'_y - \xi_x \xi_y Q'_x) kc / \omega & -\xi_x^2 Q'_y + \xi_x \xi_y Q'_x & \xi_x^2 Q'_y - \xi_x \xi_y Q'_x & 0 \\
(\xi_x \xi_y Q'_x + \xi_y^2 Q'_y) qc / \omega & (\xi_x \xi_y Q'_x + \xi_y^2 Q'_y) kc / \omega & -\xi_x \xi_y Q'_x + \xi_y^2 Q'_y & \xi_x \xi_y Q'_y - \xi_y^2 Q'_x & 0 \\
0 & 0 & -(\xi_x^2 + \xi_y^2) Q'^2 c / \omega & (\xi_x^2 + \xi_y^2) \epsilon_b Q'^2 c / (\epsilon_t \omega) & -(\xi_x^2 + \xi_y^2) l' \epsilon_b
\end{bmatrix}$$

, (A2-3)

$$s^{(0)}(Q_1, Q') = \mathbb{I} ,$$

(A2-4)

$$s^{(1)}(Q_1, Q') = \text{diag}[-i(q' + q_1), i(k' - q_1), -i(q' + q_1), \\
i(k' - q_1), i(l' - q_1)] ,$$

(A2-5)

$$s^{(2)}(Q_1, Q') = \text{diag}[-\frac{1}{2}(q' + q_1)^2, -\frac{1}{2}(k' - q_1)^2, \\
-\frac{1}{2}(q' + q_1)^2, -\frac{1}{2}(k' - q_1)^2, -\frac{1}{2}(l' - q_1)^2],$$

(A2-6)

$$B^{(00)}(Q_1) = \begin{bmatrix} Q_1 S_1 \\ -cq_1 Q_1 S_1 / \omega \\ cq_1 Q_1 P_1 / \omega \\ Q_1 P_1 \\ -cQ_1^2 P_1 / \omega \end{bmatrix} ,$$

(A2-7)

$$B^{(10)}(Q_1, \rho) + B^{(01)}(Q_1, \rho) = \begin{bmatrix} -\xi_y c Q_1^2 P_1 / \omega \\ +\xi_x c Q_1^2 P_1 / \omega \\ -\xi_x c Q_1^2 P_1 / \omega \\ +\xi_y c Q_1^2 P_1 / \omega \\ -\xi_y Q_1 S_1 - \xi_x c q_1 Q_1 P_1 / \omega \end{bmatrix}, \quad (A2-8)$$

y

$$B^{(20)}(Q_1, \rho) + B^{(11)}(Q_1, \rho) + B^{(02)}(Q_1, \rho) = \begin{bmatrix} -\xi_y^2 Q_1 S_1 - \xi_x \xi_y c q_1 Q_1 P_1 / \omega \\ +\xi_x^2 c Q_1 S_1 / \omega - \xi_y \xi_x Q_1 P_1 \\ -\xi_y \xi_x Q_1 S_1 - \xi_x^2 c q_1 Q_1 P_1 / \omega \\ +\xi_x \xi_y c q_1 Q_1 S_1 / \omega - \xi_y^2 Q_1 P_1 \\ -(\xi_x^2 + \xi_y^2) c Q_1^2 P_1 / \omega \end{bmatrix} \quad (A2-9)$$

APENDICE A3

En este apéndice proporcionamos las expresiones explícitas de los elementos de la matriz inversa de $R^{(00)}(Q')$ la cual apareció en la Ec. (3.1-65), donde $Q'=(Q',0,0)$:

$$\left[R_{13}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = \left[R_{14}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = \left[R_{15}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = \left[R_{23}^{(00)}(Q') \right]^{-1} =$$

$$\left[R_{24}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = \left[R_{25}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = \left[R_{31}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = \left[R_{32}^{(00)}(Q') \right]^{-1} =$$

$$\left[R_{41}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = \left[R_{42}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = \left[R_{51}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = \left[R_{52}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = 0,$$

$$\left| R^{(00)}(Q') \right| \left[R_{11}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = (c/\omega) (-Q'^3 q' l' \epsilon_b - Q'^3 k' l' \epsilon_b / \epsilon_t - Q'^5 \epsilon_b / \epsilon_t + Q'^5),$$

$$\left| R^{(00)}(Q') \right| \left[R_{12}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = (c/\omega)^2 (-Q'^3 q' k' l' \epsilon_b - Q'^3 k' l' \epsilon_b / \epsilon_t - Q'^5 k' \epsilon_b / \epsilon_t + Q'^5 k'),$$

$$\left| R^{(00)}(Q') \right| \left[R_{21}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = (c/\omega) (-Q'^3 q l \epsilon_b - Q'^3 k' l' \epsilon_b / \epsilon_t - Q'^5 \epsilon_b / \epsilon_t + Q'^5),$$

$$\left| R^{(00)}(Q') \right| \left[R_{22}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = (c/\omega)^2 (+Q'^3 q' l' \epsilon_b + Q'^3 q' k' l' \epsilon_b / \epsilon_t + Q'^5 q' \epsilon_b / \epsilon_t - Q'^5 q'),$$

$$\left| R^{(00)}(Q') \right| \left[R_{33}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = (c/\omega) (+Q'^3 k' l' \epsilon_b + Q'^3 q' l' \epsilon_b),$$

$$\left| R^{(00)}(Q') \right| \left[R_{34}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = (c/\omega)^2 (-Q'^3 k' l' \epsilon_b / \epsilon_t - Q'^3 q' k' l' \epsilon_b / \epsilon_t - Q'^5 k' \epsilon_b / \epsilon_t - Q'^5 q' \epsilon_b / \epsilon_t),$$

$$\left| R^{(00)}(Q') \right| \left[R_{35}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = (c/\omega)(-Q'^4 k' - Q'^4 q'),$$

$$\left| R^{(00)}(Q') \right| \left[R_{43}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = (c/\omega)(+Q'^3 k' l' \epsilon_b + Q'^3 q' l' \epsilon_b),$$

$$\left| R^{(00)}(Q') \right| \left[R_{44}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = (c/\omega)^2(+Q'^3 q' k' l' \epsilon_b + Q'^3 q'^2 l' \epsilon_b - Q'^5 k' - Q'^5 q'),$$

$$\left| R^{(00)}(Q') \right| \left[R_{45}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = (c/\omega)(-Q'^4 k' - Q'^4 q'),$$

$$\left| R^{(00)}(Q') \right| \left[R_{53}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = (c/\omega)^2(+Q'^5 k' \epsilon_b / \epsilon_t - Q'^5 k' + Q'^5 q' \epsilon_b / \epsilon_t - Q'^5 q'),$$

$$\left| R^{(00)}(Q') \right| \left[R_{54}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = (c/\omega)^3(+Q'^5 q' k' \epsilon_b / \epsilon_t + Q'^5 q'^2 \epsilon_b / \epsilon_t \\ + Q'^5 k'^2 / \epsilon_t + Q'^5 q' k' / \epsilon_t),$$

$$\left| R^{(00)}(Q') \right| \left[R_{55}^{(00)}(Q') \right]^{-1} = (c/\omega)^2(+Q'^4 q' k' + Q'^4 q'^2 + Q'^4 k'^2 / \epsilon_t + Q'^4 q' k' / \epsilon_t),$$

(A3-1)

$$\text{donde } \left| R^{(00)}(Q') \right| = Q'^4 (\epsilon_b / \epsilon_t) (c/\omega)^2 (k' + q') l' \left(\epsilon_t q' + k' + \frac{Q'^2}{l'} \left(1 - \frac{\epsilon_t}{\epsilon_b} \right) \right),$$

(A3-2)

APENDICE A4

En este apéndice proporcionamos las expresiones explícitas para las matrices $R^{(n0)}(Q')$, $S^{(n)}(Q')$ y $B^{(n0)}(Q_1)$ las cuales aparecieron en las Ecs. (3.1-65), (3.1-72) y (3.1-73) donde $n=0,1,2$, $Q_1=(Q_1,0,0)$ y $Q'=(Q',0,0)$.

$$R^{(00)}(Q') = \begin{bmatrix} -Q' & Q' & 0 & 0 & 0 \\ -cQ'q'/\omega & -cQ'k'/\omega & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & cQ'q'/\omega & cQ'k'/(\omega\epsilon_t) & Q' \\ 0 & 0 & -Q' & Q' & 0 \\ 0 & 0 & cQ'^2/\omega & -cQ'^2\epsilon_b/(\omega\epsilon_t) & 1'\epsilon_b \end{bmatrix}, \quad (A4-1)$$

$$R^{(10)}(Q') = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -cQ'^2/\omega & cQ'^2/\omega & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & cQ'^2/\omega & -cQ'^2/(\omega\epsilon_t) & 1' \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -q'cQ'/\omega & -ck'Q'\epsilon_b/(\omega\epsilon_t) & -Q'\epsilon_b \end{bmatrix}, \quad (A4-2)$$

$$R^{(20)}(Q') = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ q'cQ'/\omega & k'cQ'/\omega & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -q'cQ'/\omega & -ck'Q'/(\omega\epsilon_t) & -Q' \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -Q'^2c/\omega & cQ'^2\epsilon_b/(\omega\epsilon_t) & -1'\epsilon_b \end{bmatrix} \quad (A4-3)$$

$$S^{(0)}(Q_1, Q') = I, \quad (A4-4)$$

$$S^{(1)}(Q_1, Q') = \text{diag}[-i(q'+q_1), i(k'-q_1), -i(q'+q_1), \\ i(k'-q_1), i(1'-q_1)] \quad , \quad (A4-5)$$

$$S^{(2)}(Q_1, Q') = \text{diag}[-\frac{1}{2}(q'+q_1)^2, -\frac{1}{2}(k'-q_1)^2, \\ -\frac{1}{2}(q'+q_1)^2, -\frac{1}{2}(k'-q_1)^2, -\frac{1}{2}(1'-q_1^2)] \quad , \quad (A4-6)$$

$$B^{(00)}(Q_1) = \begin{bmatrix} Q_1 S_1 \\ -cq_1 Q_1 S_1/\omega \\ cq_1 Q_1 P_1/\omega \\ Q_1 P_1 \\ -cQ_1^2 P_1/\omega \end{bmatrix} \quad , \quad (A4-7)$$

$$B^{(10)}(Q_1) = \begin{bmatrix} 0 \\ cQ_1^2 S_1 / \omega \\ -cQ_1^2 P_1 / \omega \\ 0 \\ -cq_1 Q_1 P_1 / \omega \end{bmatrix}, \quad (A4-8)$$

$$y \quad B^{(20)}(Q_1) = \begin{bmatrix} 0 \\ cq_1 Q_1 S_1 / \omega \\ -cq_1 Q_1 P_1 / \omega \\ 0 \\ cQ_1^2 P_1 / \omega \end{bmatrix} \quad (A4-9)$$

APENDICE A5

En este apéndice proporcionamos las expresiones explícitas para las matrices de 4x4 de los cálculos locales $R(Q', \rho)$, $S(Q_1, Q', \rho)$ y $B(Q_1, \rho)$, donde Q' es arbitrario y $Q_1 = (Q_1, 0, 0)$, y para $R^{(n0)}(Q')$, $S^{(n)}(Q')$, $B^{(n0)}(Q_1)$ y $[R^{(00)}(Q')]^{-1}$ donde $Q_1 = (Q_1, 0, 0)$, $Q' = (Q', 0, 0)$ y $n=0, 1, 2$:

$$R_{11}(Q', \rho) = -n_x n_y Q'_y - (1 - n_y^2) Q'_x,$$

$$R_{12}(Q', \rho) = (n_x n_y) Q'_y + (1 - n_y^2) Q'_x,$$

$$R_{13}(Q', \rho) = [-n_x n_y q'_x Q'_x + (1 - n_y^2) q'_y Q'_y - n_z n_y Q'^2] c / \omega,$$

$$R_{14}(Q', \rho) = [-n_y n_x Q'_x (k' / \epsilon_t) + (1 - n_y^2) Q'_y (k' / \epsilon_t) + n_z n_y Q'^2 / \epsilon_t] c / \omega,$$

$$R_{21}(Q', \rho) = [-(1 - n_x^2) q'_x Q'_x + n_y n_x q'_y Q'_y + n_z n_x Q'^2] c / \omega,$$

$$R_{22}(Q', \rho) = [-(1 - n_x^2) k'_x Q'_x + n_y n_x k'_y Q'_y - n_z n_x Q'^2] c / \omega,$$

$$R_{23}(Q', \rho) = (1 - n_x^2) Q'_y + n_y n_x Q'_x,$$

$$R_{24}(Q', \rho) = -(1 - n_x^2) Q'_y - n_y n_x Q'_x,$$

$$R_{31}(Q', \rho) = (1 - n_x^2) Q'_y + n_y n_x Q'_x,$$

$$R_{32}(Q', \rho) = -(1 - n_x^2) Q'_y - n_y n_x Q'_x,$$

$$R_{33}(Q', \rho) = [(1 - n_x^2) q'_x Q'_x - n_y n_x q'_y Q'_y - n_z n_x Q'^2] c / \omega,$$

$$R_{34}(Q', \rho) = [(1 - n_x^2) k'_x Q'_x / \epsilon_t - n_y n_x k'_y Q'_y / \epsilon_t + n_z n_x Q'^2 / \epsilon_t] c / \omega,$$

$$R_{41}(Q', \rho) = [(n_x n_y) q'_x Q'_x - (1 - n_y^2) q'_y Q'_y + n_z n_y Q'^2] c / \omega,$$

$$R_{42}(Q', \rho) = [n_x n_y k'_x Q'_x - (1 - n_y^2) k'_y Q'_y - n_z n_y Q'^2] c / \omega,$$

$$R_{43}(Q', \rho) = -n_x n_y Q'_y - (1 - n_y^2) Q'_x,$$

$$R_{44}(Q', \rho) = (n_x n_y) Q'_y + (1 - n_y^2) Q'_x,$$

(A5-1)

$$S(Q_1, Q', \rho) = \text{diag}(e^{-i(q'+q_1)h\xi}, e^{i(k'-q_1)h\xi}, e^{-i(q'+q_1)h\xi}, e^{i(k'-q_1)h\xi}) ,$$

(A5-2)

y

$$B(Q_1, \rho) = \begin{bmatrix} (1-n_y^2)Q_1 S_1 + [(-n_x n_y)q_1 Q_1 c/\omega + n_z n_y Q_1^2 c/\omega]P_1 \\ [(1-n_x^2)(-q_1 Q_1 c/\omega) - n_z n_x Q_1^2 c/\omega]S_1 + (-n_y n_x Q_1)P_1 \\ (-n_y n_x Q_1)S_1 + [(1-n_x^2)q_1 Q_1 c/\omega + n_z n_x Q_1^2 c/\omega]P_1 \\ [(-n_x n_y)(-q_1 Q_1 c/\omega) - n_z n_y Q_1^2 c/\omega]S_1 + [(1-n_y^2)Q_1]P_1 \end{bmatrix}$$

(A5-3)

$$R^{(10)}(Q') = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -cQ'^2/\omega & cQ'^2/\omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & cQ'^2/\omega & -cQ'^2/(\omega\epsilon_t) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

(A5-4)

$$R^{(20)}(Q') = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ q'cQ'/\omega & k'cQ'/\omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -q'cQ'/\omega & -ck'Q'/(\omega\epsilon_t) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

(A5-5)

$$s^{(0)}(Q_1, Q') = I, \quad (A5-6)$$

$$s^{(1)}(Q_1, Q') = \text{diag}[-1(q'+q_1), 1(k'-q_1), -1(q'+q_1), 1(k'-q_1)], \quad (A5-7)$$

$$s^{(2)}(Q_1, Q') = \text{diag}[-\frac{1}{2}(q'+q_1)^2, -\frac{1}{2}(k'-q_1)^2, -\frac{1}{2}(q'+q_1)^2, -\frac{1}{2}(k'-q_1)^2], \quad (A5-8)$$

$$B^{(00)}(Q_1) = \begin{bmatrix} Q_1 S_1 \\ -cq_1 Q_1 S_1 / \omega \\ cq_1 Q_1 P_1 / \omega \\ Q_1 P_1 \end{bmatrix}, \quad (A5-9)$$

$$B^{(10)}(Q_1) = \begin{bmatrix} 0 \\ cQ_1^2 S_1 / \omega \\ -cQ_1^2 P_1 / \omega \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (A5-10)$$

$$\mathbb{B}^{(20)}(Q_1) = \begin{bmatrix} 0 \\ cq_1 Q_1 S_1 / \omega \\ -cq_1 Q_1 P_1 / \omega \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A5-11})$$

y

$$\left[\mathbb{R}^{(00)}(Q') \right]^{-1} =$$

$$\begin{bmatrix} \frac{-ck'}{cq'Q' + ck'Q'} & \frac{-\omega}{cq'Q' + ck'Q'} & 0 & 0 \\ \frac{cq'}{cq'Q' + ck'Q'} & \frac{-\omega}{cq'Q' + ck'Q'} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\omega \varepsilon_t}{cq'Q' \varepsilon_t + ck'Q'} & \frac{-k'}{q'Q' \varepsilon_t + k'Q'} \\ 0 & 0 & \frac{\omega \varepsilon_t}{cq'Q' \varepsilon_t + ck'Q'} & \frac{\varepsilon_t q'}{q'Q' \varepsilon_t + k'Q'} \end{bmatrix},$$

(A5-12)

TABLA 1

Multiplicaciones de las componentes del vector unitario normal a la superficie rugosa $\xi(x,y)$ a orden cero, uno y dos, las cuales aparecen en las Ecs. (A3-1)→(A3-3).

	$\begin{matrix} n_x n_y \\ n_x n_y \end{matrix}$	$\begin{matrix} n_x n_z \\ n_x n_z \end{matrix}$	$\begin{matrix} n_y n_z \\ n_y n_z \end{matrix}$	$\begin{matrix} n_x^2 \\ n_x^2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} n_y^2 \\ n_y^2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} n_z^2 \\ n_z^2 \end{matrix}$
orden 0	$\begin{matrix} (0)(0) \\ n_x n_y \\ =0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} (0)(0) \\ n_x n_z \\ =0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} (0)(0) \\ n_y n_z \\ =0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} (0)(0) \\ n_x n_x \\ =0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} (0)(0) \\ n_y n_y \\ =0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} (0)(0) \\ n_z n_z \\ =1 \end{matrix}$
orden 1	$\begin{matrix} (0)(1) \\ n_x n_y \\ + \\ (1)(0) \\ n_x n_y \\ =0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} (0)(1) \\ n_x n_z \\ + \\ (1)(0) \\ n_x n_z \\ =-\xi_x \end{matrix}$	$\begin{matrix} (0)(1) \\ n_y n_z \\ + \\ (1)(0) \\ n_y n_z \\ =-\xi_y \end{matrix}$	$\begin{matrix} (0)(1) \\ n_x n_x \\ + \\ (1)(0) \\ n_x n_x \\ =0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} (0)(1) \\ n_y n_y \\ + \\ (1)(0) \\ n_y n_y \\ =0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} (0)(1) \\ n_z n_z \\ + \\ (1)(0) \\ n_z n_z \\ =0 \end{matrix}$
orden 2	$\begin{matrix} (0)(2) \\ n_x n_y \\ + \\ (1)(1) \\ n_x n_y \\ + \\ (2)(0) \\ n_x n_y \\ =\xi_x \xi_y \end{matrix}$	$\begin{matrix} (0)(2) \\ n_x n_z \\ + \\ (1)(1) \\ n_x n_z \\ + \\ (2)(0) \\ n_x n_z \\ =0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} (0)(2) \\ n_y n_z \\ + \\ (1)(1) \\ n_y n_z \\ + \\ (2)(0) \\ n_y n_z \\ =0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} (0)(2) \\ n_x n_x \\ + \\ (1)(1) \\ n_x n_x \\ + \\ (2)(0) \\ n_x n_x \\ =\xi_x^2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} (0)(2) \\ n_y n_y \\ + \\ (1)(1) \\ n_y n_y \\ + \\ (2)(0) \\ n_y n_y \\ =\xi_y^2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} (0)(2) \\ n_z n_z \\ + \\ (1)(1) \\ n_z n_z \\ + \\ (2)(0) \\ n_z n_z \\ =-(\xi_x^2 + \xi_y^2) \end{matrix}$

BIBLIOGRAFIA

1. G.W.Stroke, *Handbuch der Physik* (Springer-Verlag, Berlin, 1967), Vol.29.
2. S.Johansson, L.E.Nilsson, K.Biedermann, y K.Kleveby, en *Applications of Holography and Optical Data Processing*, ed. por E.Marom, A.A.Friesen, y A.Wiener-Avnear (Pergamon, Oxford, 1977).
3. R.Petit, *J.Phys.(Paris) Colloq.*42, Suppl.1, C1-43(1981).
4. D.Maystre y R.Petit, *Nouv.Rev.Opt.*7, 165(1976).
5. A.A.Maradudin, en *Surface Polaritons*, ed. por V.M.Agranovich y D.L.Mills (North-Holland, Amsterdam,1982).
6. H.Reather, *Excitation of Plasmons and Interband Transitions by Electrons*, Springer Tracts in Modern Physics, Vol.88 (Springer Verlag, Berlin 1980).
7. P.Bliek, R.Deleuil, M.Breidne, y D.Maystre, *Appl.Phys.*24, 147(1981).
8. Gary Brown, *IEEE Trans. Antennas Propag.* AP-26, 472(1978).
9. Maurice Long, *Radar Reflectivity of Land and Sea*, (Lexington Books, Toronto-London, 1975).
10. F.G.Bass y M.Fuks, *Wave Scattering From Statistically Rough Surfaces* Vol.93 of *International Series in Natural Philosophy* (Pergamon, New York, 1979).
11. O.Mata-Méndez y P.Halevi, *Phys.Rev.*B36, 1007(1987).

12. R.W.Wood, *Philos.Mag.* 14, 70(1907).
13. M.Neviere, en *Electromagnetic Theory of Gratings*, Vol.22 de *Topic in Current Physics*, ed. por R.Petit (Springer-Verlag, Berlin, 1980), p.123.
14. U.Fano, *J.Opt.Soc.Am.* 31, 213(1941).
15. *Optical Properties and Electronic Structure of Metals and Alloys*, ed. por F.Abeles (North-Holland, Amsterdam, 1966).
16. G.N.Zhizhin, M.Moskalova, E.Shomima, y A.Yakovlev, Ref.5, p.93.
17. W.H.Weber y S.L.McCarthy, *Phys.Rev.* B12, 5643(1975).
18. John Lambe y S.L.McCarthy, *Phys.Rev.Lett.* 37, 923(1976)
19. J.R.Kirtley, T.N.Theis, y J.C.Tsang, *Appl.Phys.Lett.* 37, 435(1980).
20. B.N.Kurdi y D.G.Hall, *Opt. Commun.* 51, 303(1984).
21. N.E.Glass, D.L.Mills, y M.G.Weber, *Phys.Rev.* B32, 4919(1985).
22. D.J.Evan, S.Ushioda, y J.McMullen, *Phys.Rev.Lett.* 31, 369(1973).
23. M.Neviere y R.Reinisch, *Phys.Rev.* B26, 5403(1982).
24. D.L.Mills y M.Weber, *Phys.Rev.* B26, 1075(1982).
25. R.M.Pierce y S.Ushioda, *J.Phys. (Paris) Colloq.* 45, Suppl.4, C5-230(1984).
26. C.Y.Chen y E.Burstein, *Phys.Rev.Lett.* 45, 1287(1980).
27. S.S.Jha, J.R.Kirtley, y J.C.Tsang, *Phys.Rev.* B22, 3973(1980).

28. G.S. Agarwal, Sudhanshu S. Jha, y J.C. Tsang, Phys. Rev. B25, 2089(1982).
29. G.S. Agarwal y S.S. Jha, Phys. Rev. B26, 482(1982).
30. C.K. Chen, A.R.B. de Castro, y Y.R. Shen, Phys. Rev. Lett. 46, 145(1981).
31. A. Wokaun, J.G. Bergman, J.P. Heritage, A.M. Glass, P.F. Liao, y D.H. Olson, Phys. Rev. B24, 849(1981).
32. G.A. Farias y A.A. Maradudin. Phys. Rev. B30, 3002(1984).
33. N.E. Glass, M. Weber, y D.L. Mills, Phys. Rev. B29, 6548(1984).
34. G.A. Farias, A.A. Maradudin, y V. Celli, Surface Sci. 129, 9(1983).
35. E. Kröger y E. Kretschmann, Phys. Status Solidi B76, 515(1976).
36. E. Kretschmann, T.L. Ferrel, y J.C. Ashley, Phys. Rev. Lett. 42, 1312(1979).
37. Talat S. Rahman y A.A. Maradudin, Phys. Rev. B21, 2137(1980).
38. R. Kötz, H.J. Lewerenz, y E. Kretschmann, Phys. Lett. 70A, 452(1979)
39. K.J. Krane y H. Raether, Phys. Rev. Lett. 37, 1355(1976).
40. W.L. Barnes y J.R. Sambles, Solid State Commun. 55, 921(1985).
41. K.L. Kliewer, Surface Sci. 101, 57(1980).
42. G.S. Agarwal, Solid State Commun. 43, 99(1982).
43. W.L. Mochán y Rubén G. Barrera, Phys. Rev. B23, 5707(1981).

44. W.L.Mochán, R.Fuchs, y Rubén G.Barrera, Phys.Rev.B27, 771(1983).
45. W.L.Mochán, Rubén G.Barrera, y Ronald Fuchs, Phys.Rev.B33, 5350(1986).
46. G.S.Agarwal, D.N.Pattanayak, y E.Wolf, Phys.Rev.B11, 1342(1975).
47. W.L.Schaich, Phys.Rev.B31, 3409(1985).
48. Dengping Xue y Chien-hua Tsai, Solid State Commun.56, 651(1985).
49. G.Barton, J.Phys.C19, 975(1986).
50. G.Eliasson, G.F.Giuliani, J.J.Quinn, y R.F.Wallis, Phys.Rev.B33, 1406(1986).
51. R.Kötz, D.M.Kolb, y F.Forstmann, Surface Sci.91, 489(1980).
52. A.D.Boardman y R.Ruppin, Surface Sci.112, 153(1981).
53. F.Forstmann y H.Stenschke, Phys.Rev.Lett.38, 1365(1977).
54. P.Halevi y R.Fuchs, J.Phys.C: Solid State Phys.17, 3869(1984).
55. L.Kleinman, Phys.Rev.B7, 2288(1973).
56. F.Forstmann y H.Stenschke, Phys.Rev.B17, 1489(1978).
57. A.D.Boardman, *Electromagnetic Surface Modes*, ed. por A.D.Boardman, (John Wiley & Sons, New York, 1982), P.1.
58. M.Brédov, V.Rumiántsev y I.Toptiquin, *Electrodinámica clásica* (Mir, Moscú, 1986).
59. G.Arffen, *Mathematical Methods for Physicists*, 2a.ed., (Academic Press International Edition, New York, 1970), P.682.

60. A.D.Boardman, B.V.Paranjape, y Y.O.Nakamura, Phys.Status Solidi B75, 347(1976).
61. F.Forstmann, Z.Physik B32, 385(1979).
62. A.R.Melnyk y M.J.Harrison, Phys.Rev.B2, 835(1970).
63. M.Cardona, Amer.J.Phys.39, 1277(1971).
64. F.Ercolessi, E.Tosatti, y M.Parinello, Phys.Rev.Lett.37, 719(1986).
65. M.Copel y T.Gustafsson, Phys.Rev.Lett.157, 723(1986).
66. J.W.S.Rayleigh, Proc.R.Soc.London, Ser.A 79, 399(1907); Philos. Mag.14,70 (1907); *Theory of Sound*, 2a. ed. (Dover, New York, 1945), Vol. II, p.89.
67. N.E.Glass y A.A.Maradudin, Phys.Rev.B24, 595(1981).
68. N.E.Glass , A.A.Maradudin, y V.Celli, Phys.Rev.B26, 5357(1982).
69. N.E.Glass y A.A.Maradudin, Surface Sci.114, 240(1982).
70. F.Toigo, A.Marvin, V.Celli, y N.R.Hill, Phys.Rev.B15, 5618(1977).
71. B.Laks, D.L.Mills, y A.A.Maradudin, Phys.Rev.B23, 4965(1981).
72. N.R.Hill y V.Celli, Phys.Rev.B17, 2478(1978).
73. E.Hedit y A.Zajac, *optics*, 4a. ed., (Addison-Wesley Publishing Company, 1974), P.682.

74. G.S. Agarwal y C.V. Kunasz, Phys.Rev.B26, 5832(1982).
75. J.Anderson, G.W.Rubloff, y P.J.Stiles, Solid State Commun.12, 825(1973);
76. G.W.Rubloff, J.Anderson, y P.J.Stiles, Surface Sci.37, 75(1973).
77. J.Anderson, G.W.Rubloff, M.A.Passler, y P.J.Stiles, Phys.Rev.B10, 2401(1974).
78. U.Gerhardt y G.W.Rubloff, Appl.Opt.8, 305(1969).
79. G.S.Agarwal, R.G.Barrera, y R.Fuchs, en *Proceedings of the International Workshop on the Electromagnetic Response of Surfaces*, ed. por R.G.Barrera y W.Luis Mochán (IFUNAM, México, 1984).
80. P.B.Johnson y R.W.Christy, Phys.Rev.B6, 4370(1972).
81. D.E.Aspnes y A.A.Studna, Phys.Rev.Lett.54, 1956(1985).
82. W.Luis Mochán y Rubén G.Barrera, Phys.Rev.Lett.55, 1192(1985).
83. S.E.Acosta-Ortiz y A.Lastras-Martinez, to be published in Solid State Commun.
84. P.Chiaradia, A.Cricenti, S.Selci, y G.Chiarotti, Phys.Rev.Lett.52, 1145(1984).
85. R.Del Sole y A.Selloni, Phys.Rev.B30, 883(1984).
86. Shu Wang, Rubén G.Barrera y W.Luis Mochán, Phys.Rev.B40, 1571(1989).

PIES DE FIGURA

Fig.1. Relación de dispersión ω vs. $\text{Re}(Q)$ del plasmón polaritón de superficie (SPP) de una superficie metálica plana, calculada con un modelo hidrodinámico (línea continua) y un modelo local (línea punteada). La región retardada se amplificó en el recuadro. La línea quebrada-punteada representa el cono de luz y la región sombreada corresponde a la región en donde el metal se convierte en transparente.

Fig.2. Factor de amplificación r_1 (línea quebrada) y r_2 (línea continua) para luz con polarización p , como función de gc/ω_p para una frecuencia fija $\omega/\omega_p=0.4$ y un ángulo de incidencia de 30° . Los cálculos locales correspondientes se muestran con líneas quebrada-punteadas y punteadas. Se indican también los vectores g para los cuales $Q_1^\pm g$ intersecta la relación de dispersión del SPP $^\pm$, con el cono de luz (LC $^\pm$), y con la raíz (R^\pm) del campo dispersado a primer orden. En el recuadro mostramos una figura esquemática de la parte real de las raíces de r_1 como una función de ω ; la línea continua representa el caso no local y la línea punteada representa el caso local.

Fig.3. Factor de amplificación r_1 (línea quebrada) y r_2 (línea continua) como función de gc/ω_p para una frecuencia fija $\omega/\omega_p=0.5$. Los cálculos locales correspondientes se muestran con curvas quebrada-punteadas y punteadas. La notación es la misma que en la Fig.2. En el recuadro mostramos el proceso de la excitación de SPP en Q_1+g y Q_1-g . La proyección Q_1 del vector de onda incidente está

representada por una curva con línea quebrada a través del origen dentro del cono de luz (LC) y la superficie no-plana proporciona el momento adicional $\pm g$.

Fig.4. Factor de amplificación r_1 (línea quebrada) y r_2 (línea continua) como función de gc/ω_p para una frecuencia fija $\omega/\omega_p=0.8$ y un ángulo de incidencia de 30° . Los cálculos locales correspondientes se muestran con curvas quebrada-punteadas y punteadas. La notación es la misma que en la Fig.2. En el recuadro mostramos los procesos de excitación de SPP en Q_1+g ó Q_1-g los cuales sólo son posibles en el caso no local. La línea punteada corresponde al caso local.

Fig.5. Factor de amplificación r_1 (línea quebrada) y r_2 (línea continua) como función de ω/ω_p para un vector de onda fijo de rejilla $gc/\omega_p=0.5$ y un ángulo de incidencia de 30° . Las frecuencias a las cuales el metal se vuelve al transparente están indicadas por T^+, T^-, T^i . Los subíndices i y \pm corresponden a vectores de onda Q_1 y $Q_1 \pm g$. La notación es la misma que en la Fig.2. En el recuadro mostramos esquemáticamente los procesos de excitación de SPP para Q_1+g ó Q_1-g los cuales corresponden a dos valores diferentes de ω .

Fig.6. Factor de amplificación r_1 (línea quebrada) y r_2 (línea continua) como función de ω/ω_p para un vector de onda de rejilla fijo $gc/\omega_p=100$ y un ángulo de incidencia de 30° . Los cálculos locales correspondientes se muestran con líneas quebrada-punteadas y punteadas. La notación es la misma que en la Fig.5. En el recuadro mostramos los procesos de excitación de SPP en Q_1+g ó Q_1-g las

cuales corresponden a dos valores de ω muy cercanos.

Fig.7. Factor de amplificación r_1 (línea quebrada) y r_2 (línea continua) para luz con polarización s, como función de gc/ω_p para una frecuencia fija $\omega/\omega_p=0.5$ y un ángulo de incidencia de 30° . En este caso no existe diferencia entre el caso local y no local.

Fig.8. Factor de amplificación r_1 (línea quebrada) y r_2 (línea continua) para luz con polarización s, como función de ω/ω_p para un vector de onda de rejilla fijo $gc/\omega_p=0.5$. En este caso no existe diferencia entre el caso local y no local.

Fig.9. Reflectancia diferencial para luz con polarización p como una función de frecuencia ω/ω_p para un vector de onda de rejilla fijo $gc/\omega_p=0.5$ y un ángulo de incidencia de 30° calculada a segundo orden. La línea quebrada corresponde al caso local y la línea continua al no local. Se indican la posición de la resonancia de SPP y la condición de Brewster (B).

Fig.10. Anisotropía en la reflectancia a incidencia normal para una superficie de Au(110). La superficie se modeló por una rejilla con vector de onda $gc/\omega_p=10$ y una altura $h\omega_p/c=0.00667$. Los cálculos no locales se muestran con líneas continuas, mientras que los cálculos locales correspondientes se muestran con las líneas punteadas.

Fig.11. Anisotropía en la reflexión a incidencia normal para una superficie Au(110) en un sistema con respuesta no local. La superficie se modeló por una rejilla con vector de onda $gc/\omega_p=250$ y

una altura $h\omega_p/c=0.00667$. Los cálculos locales correspondientes se muestran con las líneas punteadas.

Fig.12. Anisotropía en la reflexión a incidencia normal por una superficie Au(110) en el sistema no local para vectores de onda de rejilla $gc/\omega_p=165$ (línea continua), 110 (línea quebrada-punteada), y 82 (línea quebrada) con $gh=1.1$ fija. El significado de los números 1, 2, y 3 aparece en el texto.

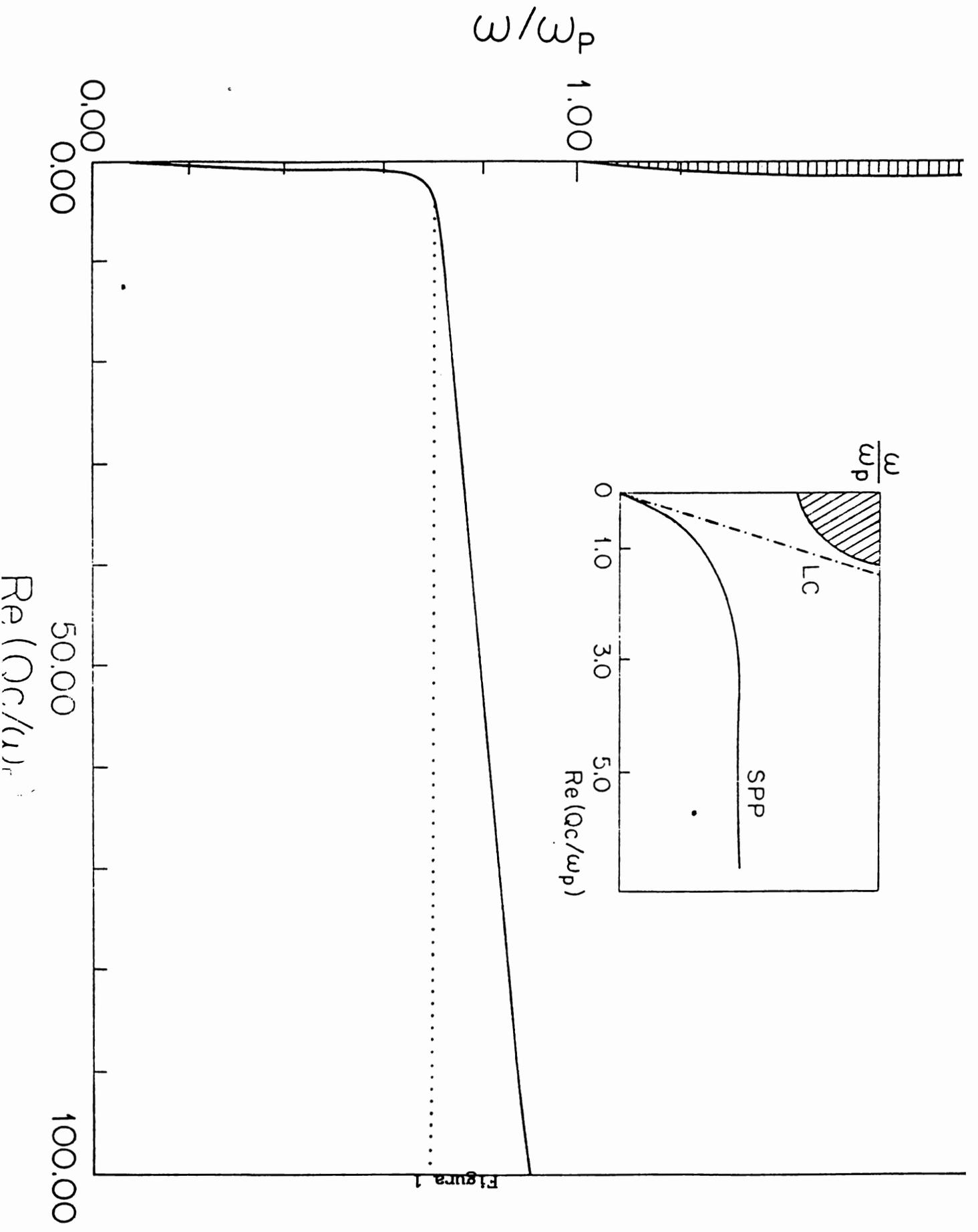


Figura 1

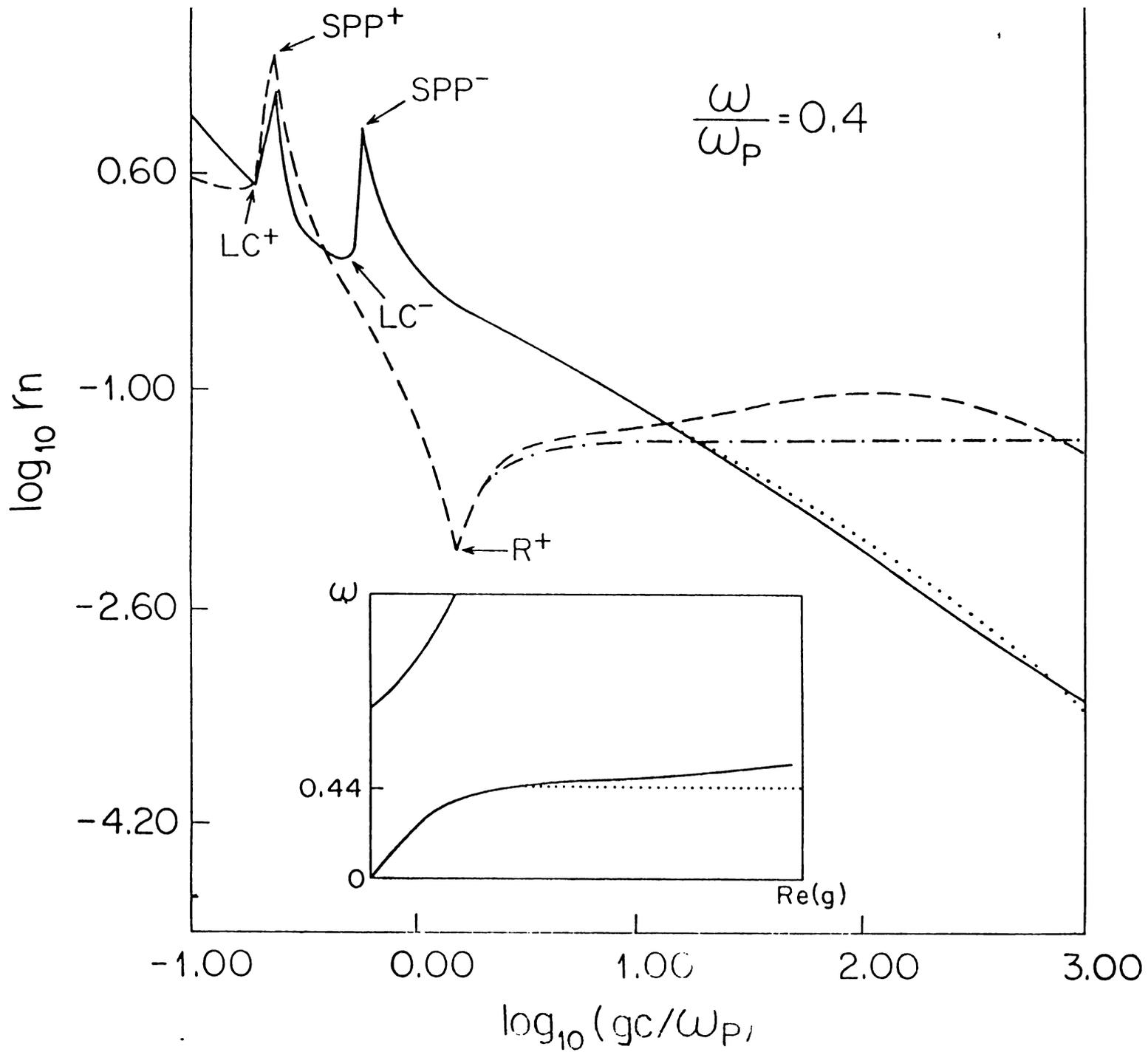


Figura 2

Figura 3

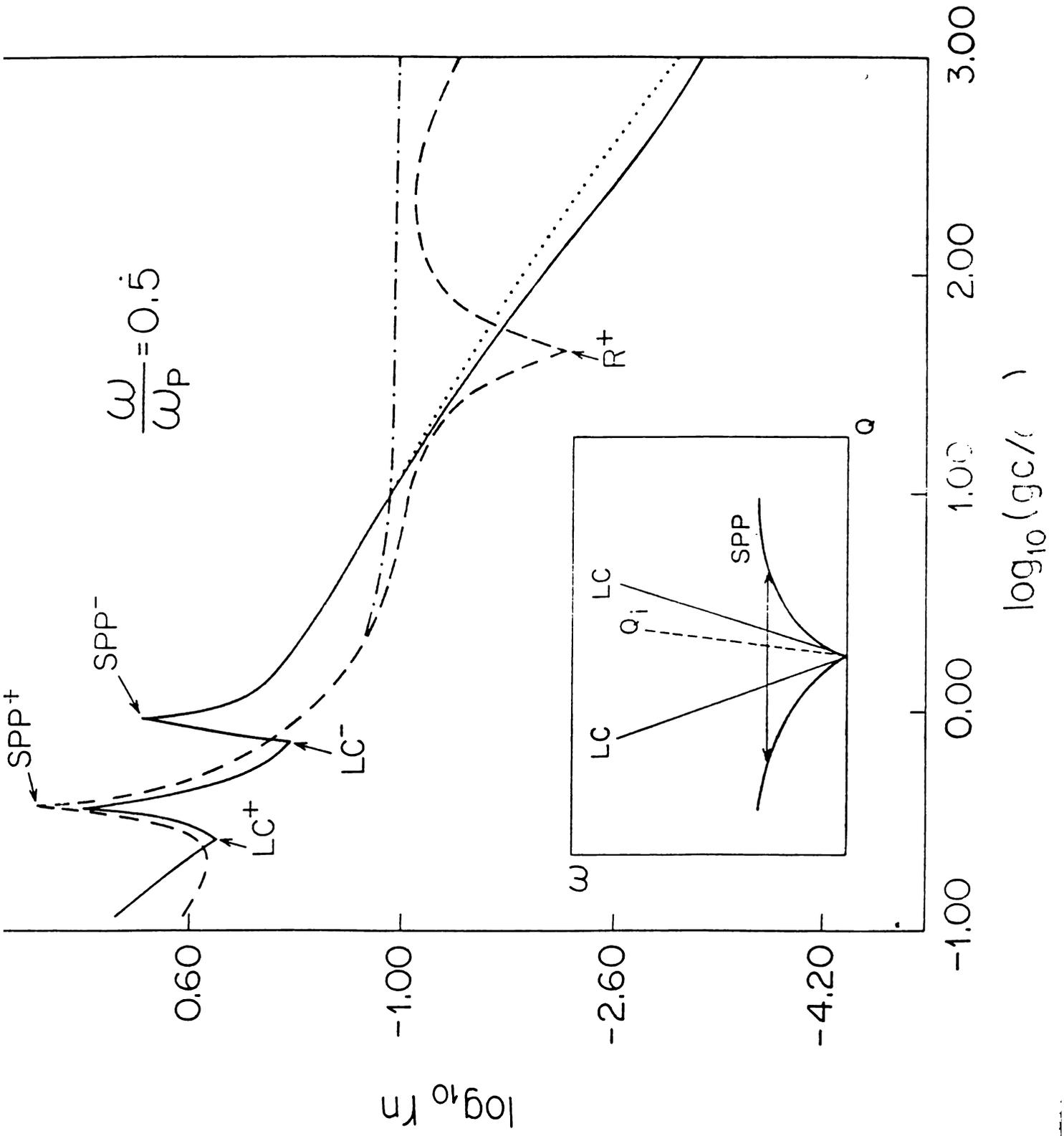


Figura 4

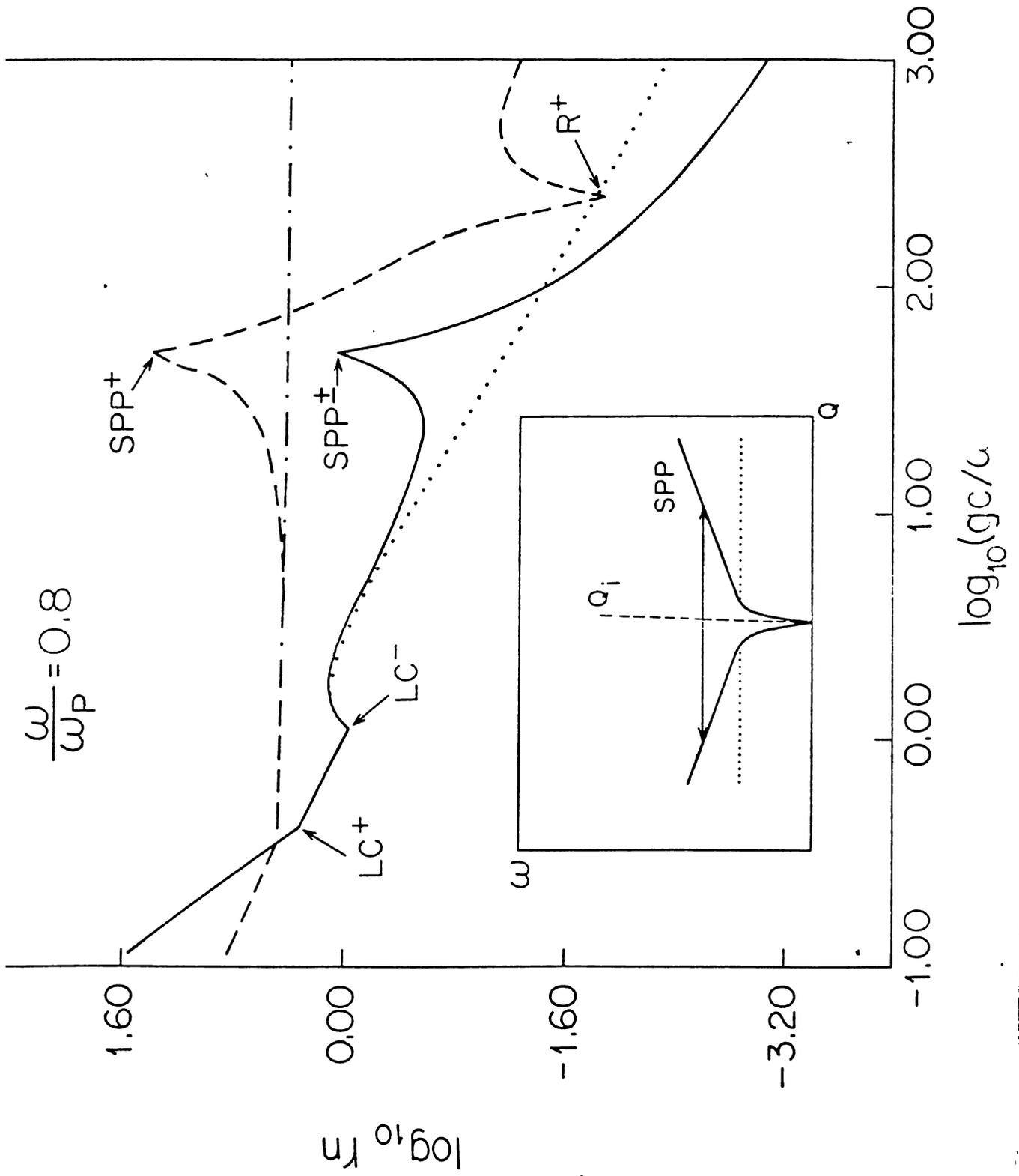


Figura 5

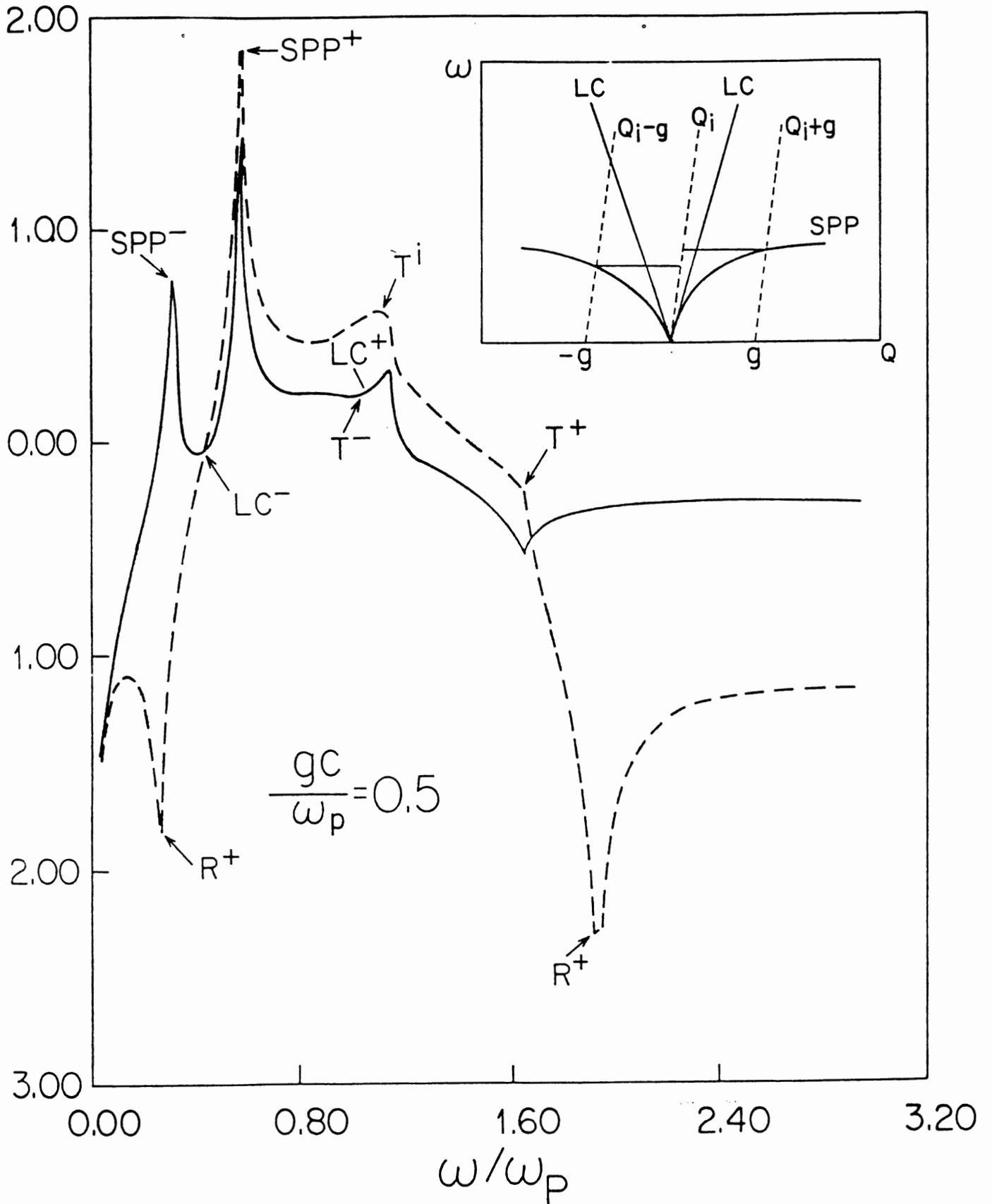


Figura 6

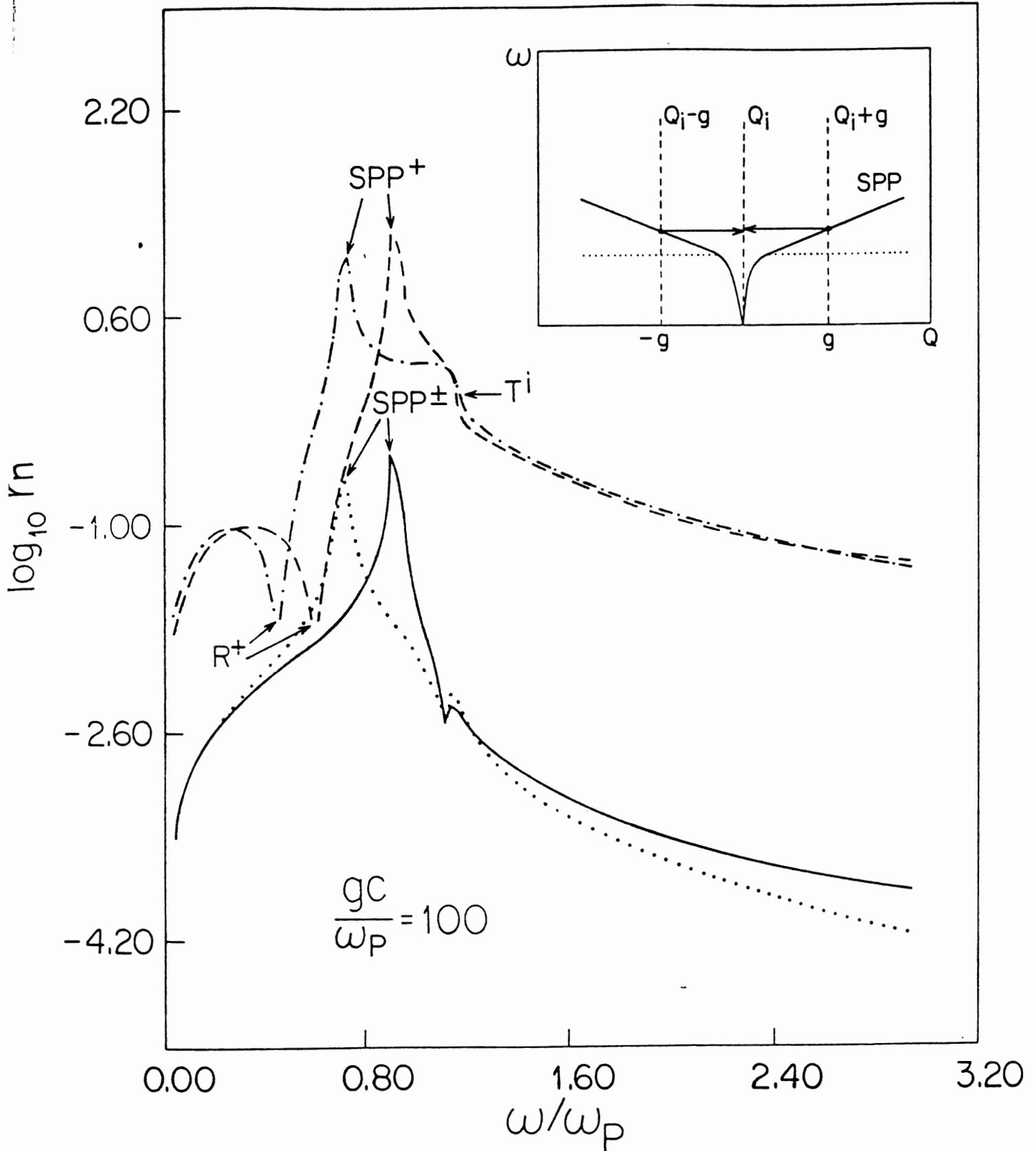


Figura 7

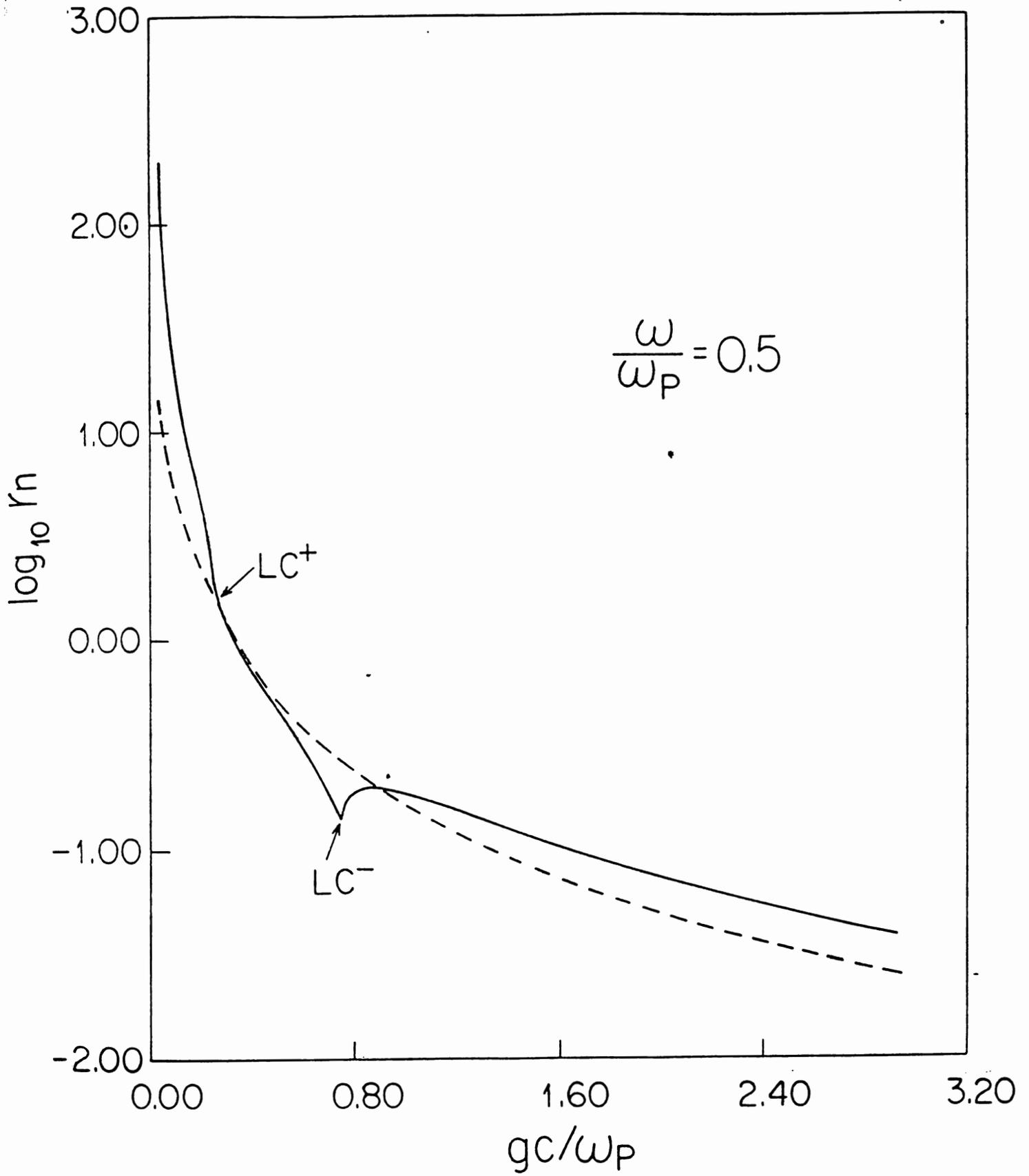


Figura 8

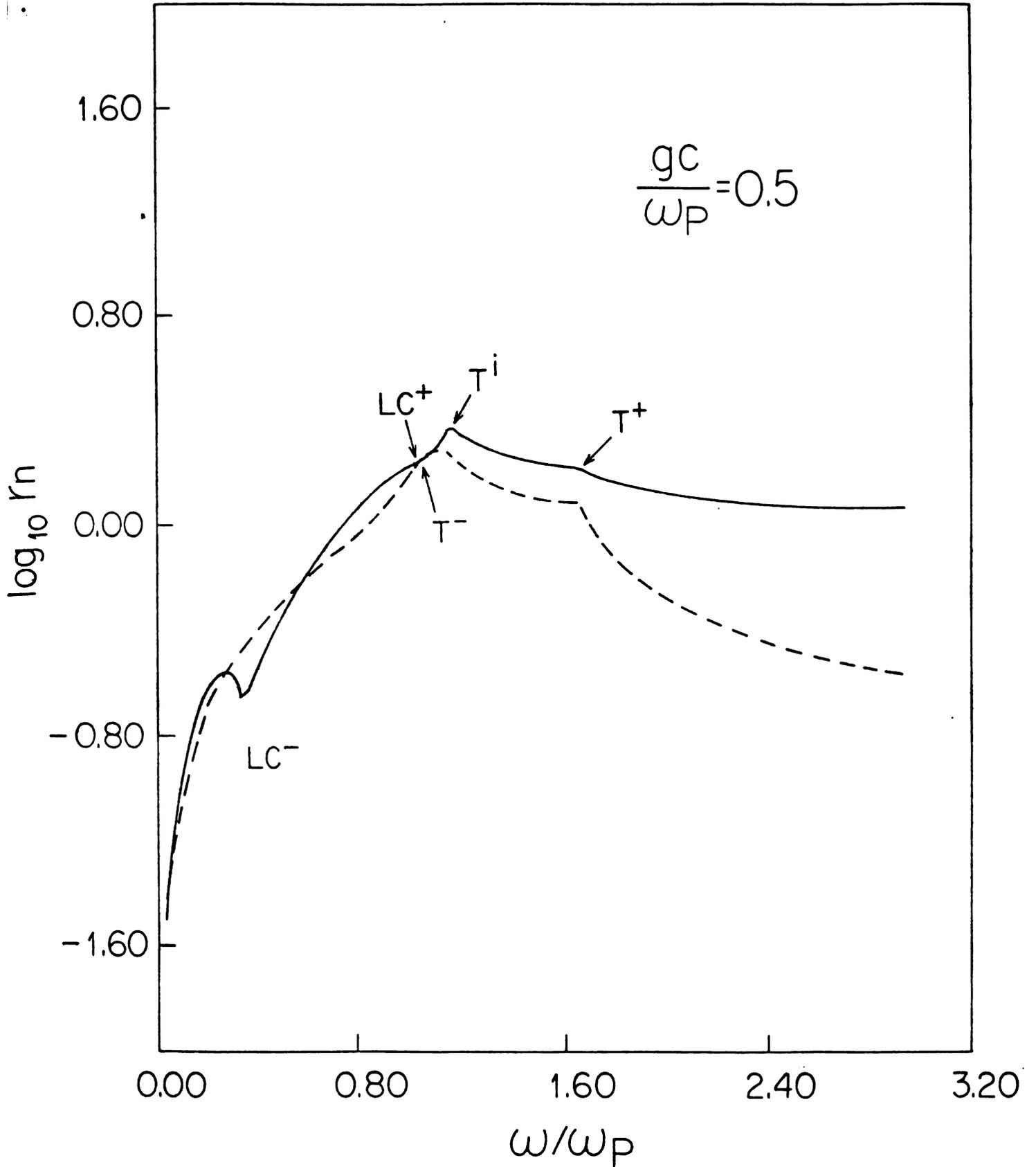
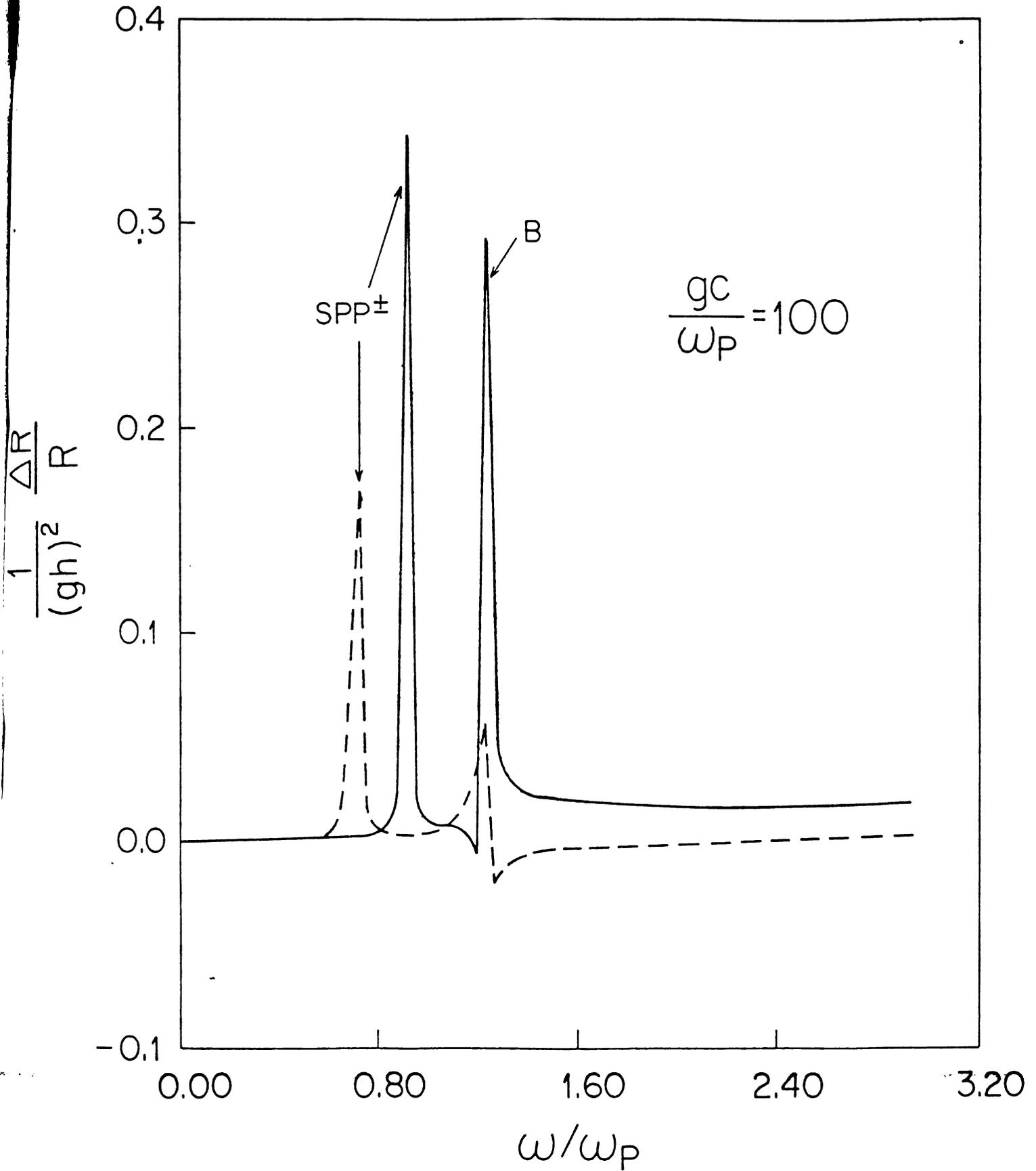


Figura 9



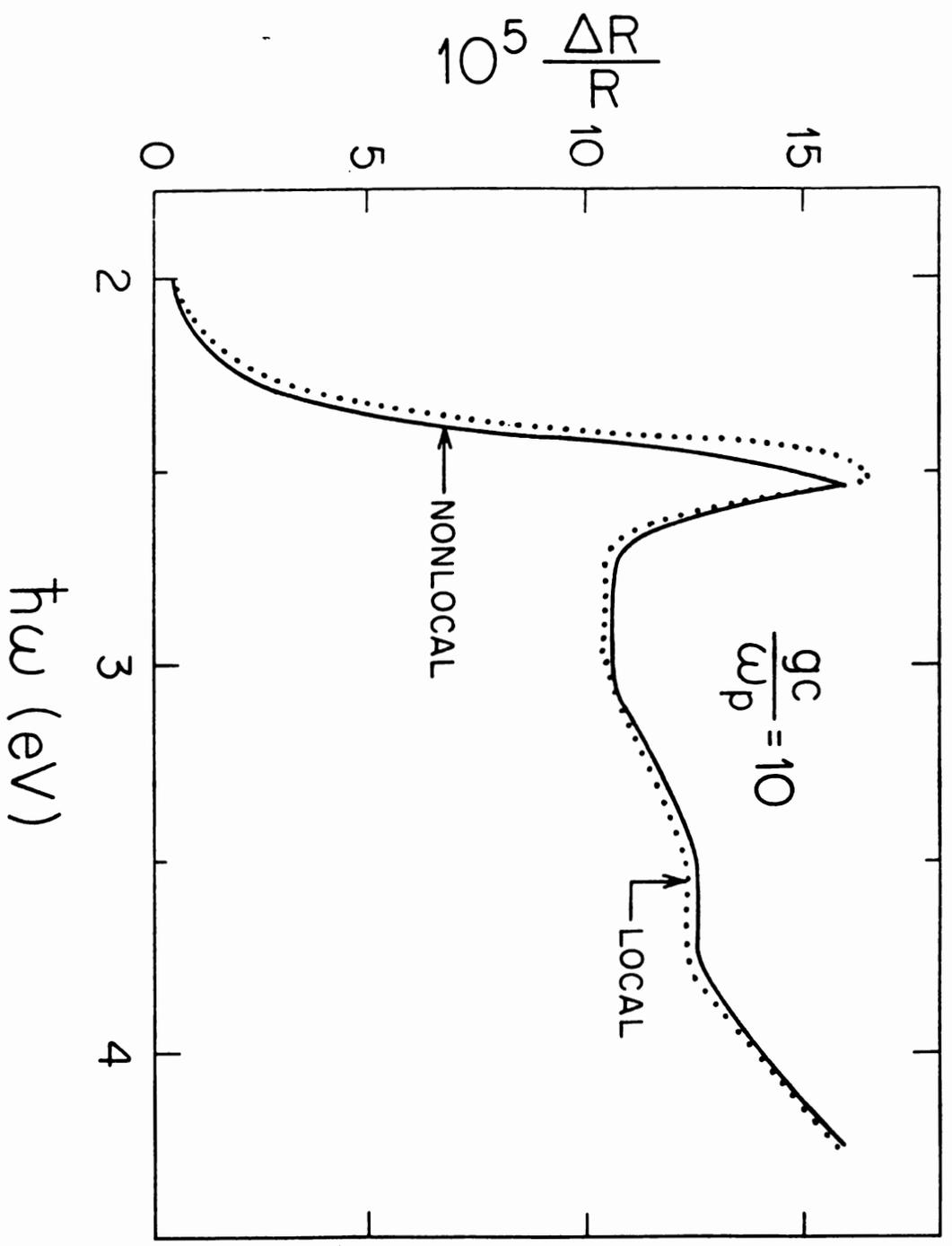


Figura 10

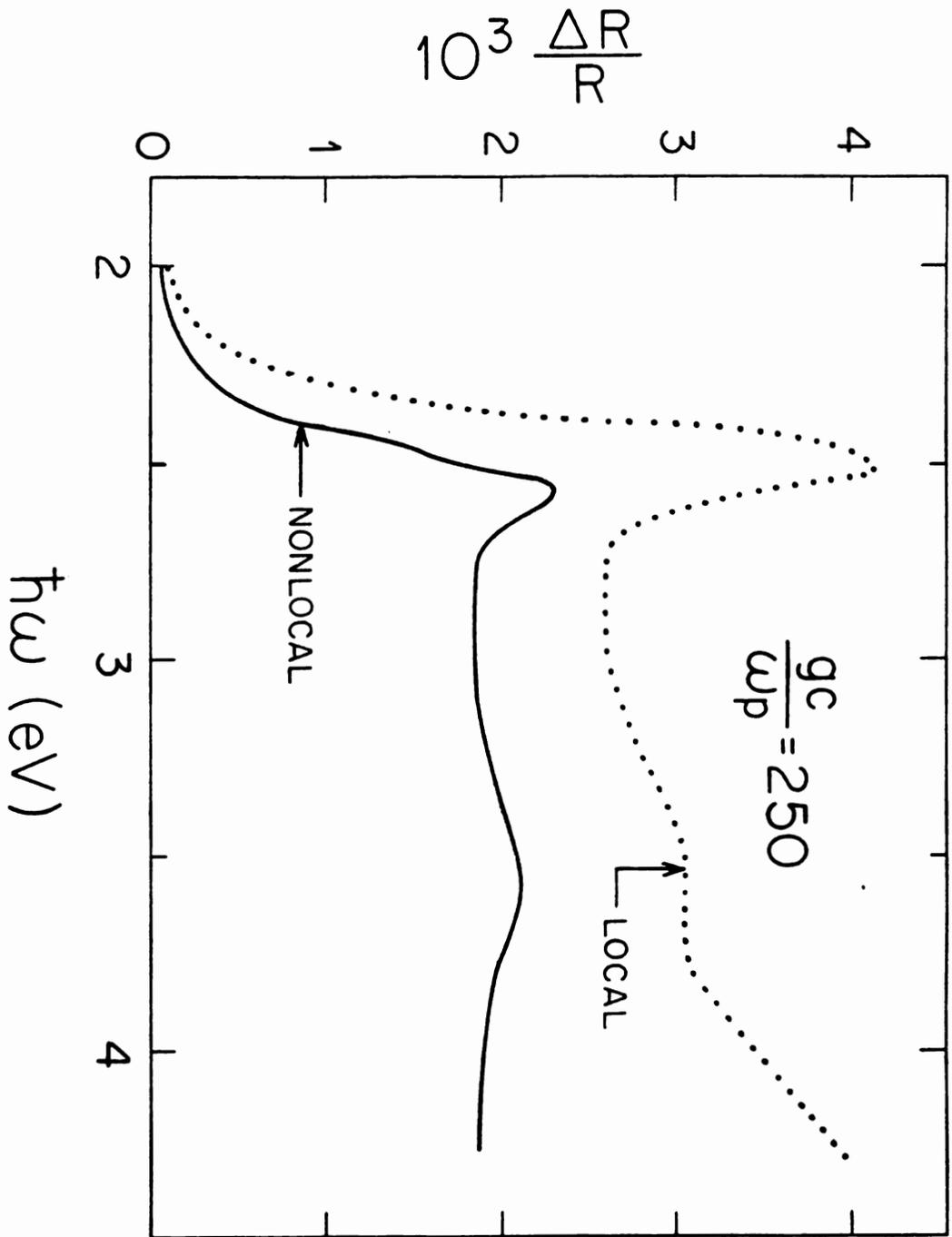
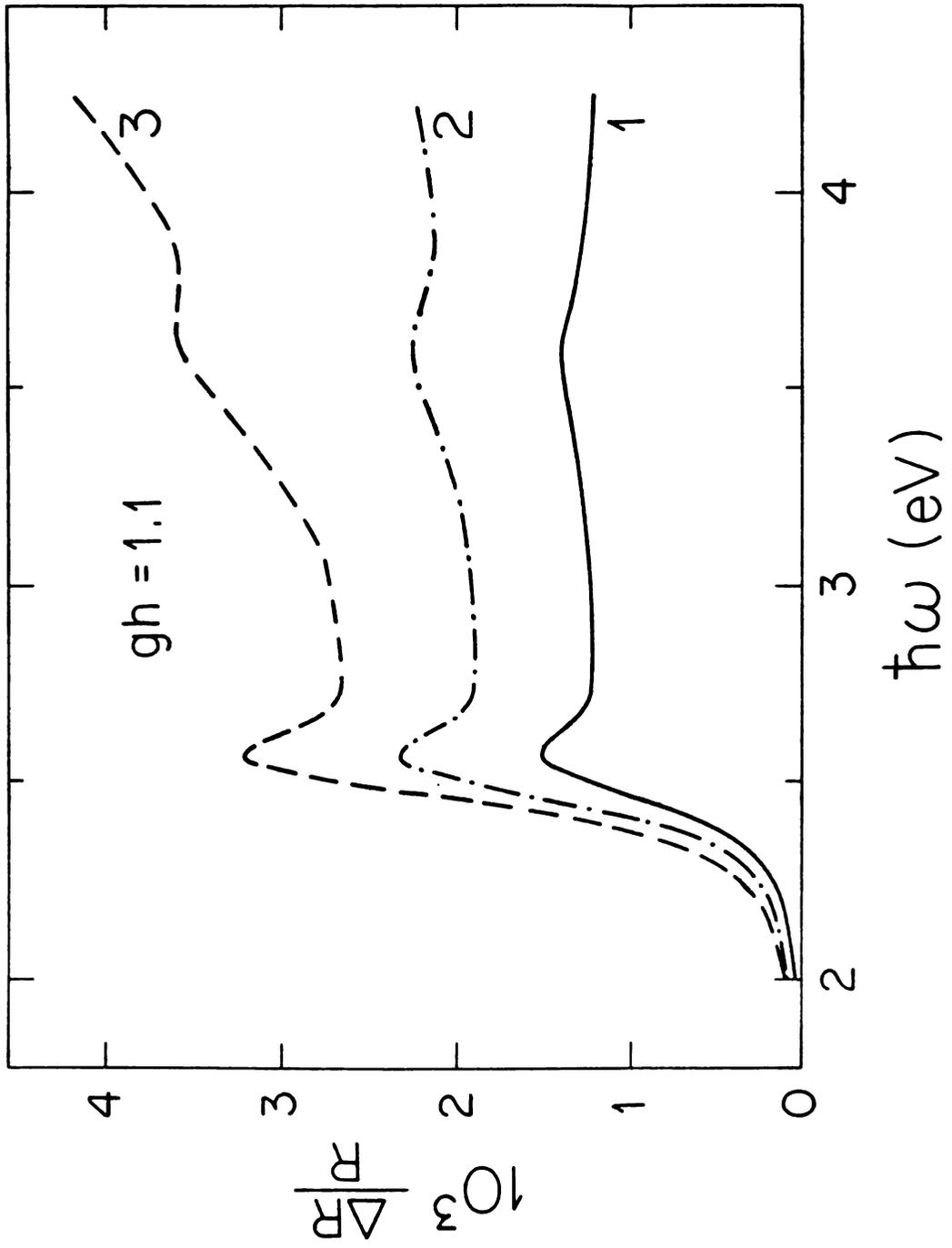


Figura 11

Figura 12



BIBLIOTECA FACULTAD DE CIENCIAS UNAM

400282



61060

**FCF
WAN
C1989**