

00362

2ej. 1

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE CIENCIAS

EXCITONES Y PROPIEDADES OPTICAS NO-LOCALES
EN SEMICONDUCTORES

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO EN CIENCIAS
EN LA ESPECIALIDAD DE FISICA

P R E S E N T A

GREGORIO HERNANDEZ COCOLETZI

MEXICO, D.F.

1 9 8 0.

EXCITONES Y PROPIEDADES OPTICAS NO-LOCALES
EN SEMICONDUCTORES



Universidad Nacional
Autónoma de México

UNAM



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 está 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.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

CONTENIDO

	Pág.
RESUMEN	
INTRODUCCION	I
CAPITULO 1. POLARITONES-EXCITONES	
1.1 Excitones	1
1.2 Polaritones	2
1.3 Polaritones- excitones	3
CAPITULO 2. EFECTOS NO-LOCALES	
2.1 Introducción	5
2.2 Ecuaciones de Maxwell	7
2.3 Efecto pelicular anómalo (Anomalous Skin Effect)	12
2.4 Efectos no-locales obser- vados en polaritones-exci- tones de superficie	14
2.5 Modelo de la función dieléctrica (de Hopfiel y Thomas)	15
CAPITULO 3.EFECTOS DE SUPERFICIE	
3.1 Introducción	21
3.2 Modelo de los parámetros U_x Y U_z	24
3.3 Condiciones Adicionales a la frontera (ABC)	25
3.4 Reflectividad R_p	27
CAPITULO 4. REFLECTIVIDAD EN LA PRE- SENCIA DE UNA TRANSICION EXCITONICA AISLADA (CON CAPA "MUERTA")	

	Pág.
4.1 Introducción	31
4.2 La capa "muerta" para excitones	32
4.3 Condiciones Adicionales a la Frontera (ABC) en la presencia de una capa "muerta" para excitones	33
4.4 Impedancia de superficie Z_p Reflectividad R_p	38
4.5 Efecto ciclico de la la reflectividad	41
CAPITULO 5. DISCUSION DE LOS RESULTADOS DE LA REFLECTIVIDAD	
5.1 Introducción	42
5.2 ω variable independiente (barrido de frecuencia) U_x Y U_z parámetros variables	43
5.3 θ variable independiente (barrido de ángulo) U_x Y U_z parámetros variables	45
5.4 ω variable independiente (barrido de frecuencia) λ parámetro variable	47
5.5 θ variable independiente (barrido de ángulo) λ parámetro variable	50
5.6 Las ABC "sin nombre"	50
CAPITULO 6. CONCLUSIONES	
6.1 Los parámetros U_x Y U_z	55
6.2 Efecto de la capa "muerta"	55
REFERENCIAS	58
FIGURAS	59

Resumen

El objeto de esta tesis es analizar las diferencias que varias ABC (Additional Boundary Conditions) dan al espectro de reflectividad teórico en materiales donde los efectos no-locales están presentes. La teoría no-local que presentamos es sobre excitones en cristales aislantes. Suponemos la existencia de una capa superficial de unas cuantas decenas de Angstroms donde los excitones no pueden existir. Consideramos la respuesta no-local en el volumen y la respuesta dispersada por la capa "muerta". Introducimos dos parámetros fenomenológicos U_x y U_z que describen cualitativamente esta dispersión.

Hacemos el estudio para el caso de luz incidente de polarización p (el vector eléctrico de la onda está en el plano formado por la normal a la superficie y el vector de onda). Tomamos la relación no-local entre el desplazamiento eléctrico \vec{D} y el campo eléctrico \vec{E} y las ecuaciones de Maxwell para derivar dos condiciones adicionales a la frontera (ABC) generalizadas. Las ABC generalizadas dependen de los parámetros U_x y U_z . Para valores particulares de estos parámetros obtenemos ABC particulares que ya han sido sugeridas antes.

Los casos particulares de ABC que consideramos son los siguientes: Pekar ($U_x = U_z = -1$), Fuchs-Kliwer ($U_x = 1, U_z = -1$), Rimbey-Mahan ($U_x = -1, U_z = 1$), Agarwal-Pattanayak-Wolf ($U_x = U_z = 0$) y el caso donde $U_x = U_z = 1$ ("sin nombre"). El espectro de reflectividad ha sido calculado usando parámetros que corresponden a ZnSe. Obtenemos que los efectos no-locales son más fuertes en el caso de las ABC de Pekar, los menos fuertes corresponden al caso de las ABC de Fuchs-Kliwer y como caso intermedio está el caso de las ABC de Agarwal-Pattanayak-Wolf. Notamos un pico en la reflectividad para las ABC de Pekar y Agarwal-Pattanayak-Wolf cercano a ω_L . Este pico depende de la capa "muerta", de la frecuencia de colisiones γ y del ángulo de incidencia de la luz. La reflectividad en el caso de barrido de ángulo disminuye cuando el espesor de la capa "muerta" crece. Hemos notado que la reflectividad para las ABC de Pekar y Rimbey-Mahan son casi iguales. También, este espectro es casi igual para las ABC de Fuchs-Kliwer y el caso "sin nombre".

Introducción

Es conocido que al hacer incidir luz sobre cristales aislantes es posible crear un par electrón-hoyo. Al par electrón-hoyo así formado se le llama excitón. El excitón es susceptible de movimiento en el cristal y propaga en la dirección del cuasimomento $\vec{p} = \hbar \vec{k}$.

Estudiamos los efectos no-locales en cristales aislantes a frecuencias cercanas a transiciones excitónicas. Los efectos no-locales son introducidos al considerar la función dieléctrica para excitones de Wannier-Mott dependiente de la frecuencia ω y del vector de onda \vec{k} . Tomamos el modelo de oscilador para la función dieléctrica propuesta por Hopfield y Thomas.

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) = \epsilon_0 + \frac{\omega_p^2}{\omega_T^2 + Dk^2 - \omega^2 - i\gamma\omega},$$

donde ω_T es la frecuencia de la transición excitónica ($\hbar\omega_T \sim 2.03 \text{ eV}$). ϵ_0 es la función dieléctrica del fondo dieléctrico, en general es función de la frecuencia, pero aquí es considerada constante. ω_p es una medida de la fuerza de oscilador ($\hbar\omega_p \lesssim 0.5 \text{ eV}$), γ es una frecuencia de colisiones fenomenológica ($\sim 0.1 \text{ meV}$).

Los efectos no-locales son conocidos también con el nombre de dispersión espacial. Consideramos

una relación funcional entre el desplazamiento eléctrico \vec{D} y el campo eléctrico \vec{E} de la forma

$$D_j(\vec{r}, t) = \int d^3\vec{r}' \int dt' \epsilon(\vec{r}, \vec{r}'; t-t') E_j(\vec{r}'; t')$$

donde $\epsilon(\vec{r}, \vec{r}'; t-t')$ es la función dieléctrica. El hecho de que la relación dependa de \vec{r} y \vec{r}' se llama no-localidad en el argumento espacial y que dependa de t y t' se le llama no-localidad en el argumento temporal.

Suponemos que podemos hacer transformadas de Fourier para los campos y para ϵ . Entonces escribimos

$$D_j(\vec{k}, \omega) = \epsilon(\vec{k}, \omega) E_j(\vec{k}, \omega)$$

Suponemos la existencia de una capa superficial en la cual los excitones no existen. Esta se llama capa "muerta" para excitones. En el modelo para la relación entre \vec{D} y \vec{E} se toma en cuenta la capa "muerta". También se incluyen dos parámetros fenomenológicos U_1 y U_2 .

Del modelo de la función dieléctrica $\epsilon(\vec{k}, \omega)$ y de la relación de dispersión para modos transversales

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

tenemos dos soluciones para $\vec{k}(\omega)$, y de la relación de dispersión para modos longitudinales

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) = 0$$

tenemos una solución para $\vec{k}(\omega)$. Por lo tanto, en el me-

dio no-local hay tres ondas que propagan, esto indica que tenemos dos ondas más que en el caso ordinario (local).

Cuando la luz incidente es de polarización p (el vector eléctrico de la onda está en el plano formado por el vector de onda y la normal a la superficie del medio) los tres modos en el medio no-local son excitados. Las condiciones a la frontera de Maxwell no son suficientes para resolver el problema de la reflexión y transmisión de la luz, son necesarias otras condiciones. Del modelo para la relación entre \vec{D} y \vec{E} y de las ecuaciones de Maxwell derivamos dos condiciones adicionales a la frontera (ABC-Additional Boundary Condition) generalizadas para resolver el problema.

La tesis consta de seis capítulos. Los dos primeros capítulos son de introducción. En el capítulo 1 damos una introducción a polaritones excitones. En el capítulo 2 definimos los efectos no-locales, damos dos ejemplos donde han sido observados los efectos no-locales y derivamos la función dieléctrica $\epsilon(\vec{k}, \omega)$. En el capítulo 3 discutimos los efectos de superficie. En este capítulo exponemos el modelo del desplazamiento eléctrico que incluye los parámetros U_x y U_z . Derivamos dos ABC generalizadas, calculamos la impedancia de superficie Z_p y la reflectividad R_p . Este caso corresponde al caso Halevi y Fuchs (no se considera la capa "muerta" para excitones). En el capítulo 4 hacemos un desarrollo similar al del capítulo anterior a diferencia de que incluimos en los cálculos la capa "muerta" para excitones.

IV

En él también discutimos el efecto cíclico de reflectividad. En los dos últimos capítulos describimos los resultados y las conclusiones.

CAPITULO 1.
POLARITONES-EXCITONES.

1.1 EXCITONES

Al incidir luz sobre cristales no metálicos es posible la formación de un par electrón-agujero. Este par electrón-agujero se produce en general cuando la luz absorbida por el cristal es de energía mayor que el gap de energía del cristal. El electrón y el agujero así producidos son libres y pueden propagar casi independientes uno del otro a través del cristal. Sin embargo como un electrón y un agujero tienen cargas opuestas presentan una atracción del tipo coulombiano, pueden producir estados estables ligados de ambas partículas y la energía requerida será menor que la energía del gap. El par electrón-agujero así ligado recibe el nombre de excitón¹. Ver Fig.1.1

Llamaremos excitón al estado ligado neutro excitado y móvil en un cristal. El excitón puede desplazarse a través del cristal transportando energía de excitación, pero no transportando carga. Mediante una recombinación puede ceder su energía de formación. Por ser neutro no contribuye directamente a la conductividad eléctrica. En la actualidad se han dado dos tipos de aproximaciones límites a los excitones¹; las aproximaciones de Frenkel y de Wannier.

El excitón de Frenkel considera al electrón y al agujero

estrechamente ligados y de radio pequeño; el excitón de Wannier considera la distancia de separación entre el electrón y el - hoyo grande comparado con el radio atómico y casi libres. Estas dos situaciones se muestran en la Fig.1.2

1.2 POLARITONES^{1,2}

La absorción de la radiación electromagnética en el sólido significa transferencia de energía del campo electromagnético al sólido , o visto de otra forma, como la absorción de fotones con la creación de excitaciones elementales en el sólido.

El fotón y la excitación elemental pueden existir juntos como una sola cantidad y se interpreta como una nueva excitación elemental en el sólido. Esto se le llama un polaritón. En otras palabras el polaritón es una excitación "mezclada", producida por el acoplamiento de una onda electromagnética con una - excitación elemental en el sólido.

La excitación elemental¹ en el sólido puede ser un excitón, un fonón, un plasmón, un magnón; por lo tanto existen varios - tipos de polaritones. Un polaritón puede ser del tipo excitón, del tipo fonón, del tipo plasmón, del tipo magnón, para abreviar los llamaremos polaritón-excitón, polaritón-fonón, polaritón-plasmón, polaritón-magnón, respectivamente.

Las excitaciones elementales en el sólido pueden ocurrir - en el volumen del sólido o en la superficie del sólido. Debido a esto, existen dos tipos de excitaciones elementales, de volumen y de superficie. Por lo tanto también existen polaritones de volumen y polaritones de superficie.

Las amplitudes de los polaritones de volumen son constantes. Las amplitudes de los polaritones de superficie son maximas en la superficie y decaen exponencialmente desde la superficie hacia el volumen del cristal (no se considera amortiguación). En el presente trabajo enfocaremos nuestra atención en los polaritones de volumen.

1.3 POLARITONES-EXCITONES

Los polaritones-excitones han sido estudiados ampliamente. Los efectos no-locales han sido observados en polaritones-excitones. La teoría desarrollada de los efectos no-locales se deben en gran parte a Pekar⁴ y Hopfield y Thomas⁵.

Debido a la no-localidad, los polaritones-excitones de superficie tienen entre las excitaciones elementales la singular propiedad de coexistir con un modo de volumen en la región entre ω_T y ω_L . Consecuentemente, la transferencia de energía de los modos de superficie a los modos de volumen es posible en esta región de energías.

En la Fig.1.3 se muestra la relación de dispersión para polaritones (frecuencia angular ω contra vector de onda \vec{k}). El primer caso corresponde a polaritones-fonones y el segundo a polaritones-excitones. Los efectos no-locales se han observado únicamente en polaritones-excitones. En el caso de excitones ω_T es la frecuencia de la transición excitónica y ω_L está definida por la relación de Lyddane-Sachs-Teller¹

$$\frac{\omega_L^2}{\omega_T^2} = \frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon(\infty)} .$$

Un método de excitación de los polaritones es el ATR (Attenuated Total Reflection) el cuál fué propuesto por Otto⁹ para la excitación y detección de los polaritones-plasmones de superficie y polaritones-fonones de superficie, en metales y semiconductores respectivamente.

CAPITULO 2.
EFECTOS NO-LOCALES.

2.1 INTRODUCCION

Estudiaremos las propiedades ópticas y dieléctricas de un medio semiinfinito. Consideraremos la superficie del medio en el plano XY de un sistema de coordenadas como se muestra en la Fig. 2.1.

El medio será supuesto a ocupar la parte positiva del eje Z ($Z \geq 0$) y la parte negativa del eje Z está ocupada por el vacío. El medio que estudiaremos lo denominaremos espacialmente dispersivo o medio no-local. Trataremos de explicar lo que significa esto.

En general los vectores \vec{D} y \vec{E} conocidos como desplazamiento eléctrico y campo eléctrico respectivamente tienen una dependencia en la coordenada espacial \vec{r} y en el tiempo t , es decir,

$$\vec{D} = \vec{D}(\vec{r}, t), \quad \vec{E} = \vec{E}(\vec{r}, t). \quad (2.1)$$

Existe una relación funcional entre los vectores \vec{D} y \vec{E} . La relación lineal más general entre estos dos vectores (suponiendo la homogeneidad en el tiempo) es ¹⁰

$$D_j(\vec{r}, t) = \sum_i \int d\vec{r}' \int dt' \epsilon_{ji}(\vec{r}, \vec{r}'; t-t') E_i(\vec{r}'; t'), \quad (2.2)$$

donde ϵ_{ji} es un tensor de segundo orden llamado tenor "dielectrico". La integración se realiza para todos los tiempos t' ta

les que cuando $t' > t$, $\epsilon_{ji} = 0$ (debido al principio de causalidad) y la integración sobre \vec{r}' está restringido por el volumen que ocupa el material. Supongamos que el medio es isotrópico, entonces podemos escribir

$$\epsilon_{ji} = \delta_{ji} \epsilon \quad , \quad (2.3)$$

por lo tanto, la ecuación (2.2) se transforma en

$$\vec{D}_j(\vec{r}, t) = \int d^3\vec{r}' \int dt' \epsilon(\vec{r}, \vec{r}', t-t') E_j(\vec{r}', t'). \quad (2.4)$$

La relación entre \vec{D} y \vec{E} depende de \vec{r} , \vec{r}' , t y t' . El hecho de que la relación entre \vec{D} y \vec{E} dependa de las coordenadas espaciales \vec{r} y \vec{r}' es llamada una relación no-local¹⁰ en el argumento espacial \vec{r} y se interpreta de la siguiente manera; el valor del desplazamiento eléctrico \vec{D} en un punto \vec{r} depende de los valores de \vec{E} no solo en el punto \vec{r} sino también del valor en otro punto \vec{r}' . Análogamente la no-localidad¹⁰ en el argumento temporal t se interpreta de la siguiente forma; el valor del desplazamiento eléctrico \vec{D} en el tiempo t depende de los valores del campo eléctrico \vec{E} en los tiempos t y t' donde $t' < t$.

Hemos escrito a la función dieléctrica en la ecuación (2.4) como una función de las coordenadas \vec{r} y \vec{r}' separadamente. Esto es una consecuencia del hecho de que, aunque en el cristal semiinfinito hay invarianza translacional en las direcciones paralelas a la superficie, se pierde en la dirección normal a ella. Como consecuencia $\epsilon(\vec{r}, \vec{r}', t-t')$ es una función de las coordenadas $x, x'; y, y'$ a través de las diferencias, es decir,

de $x-x'$, $y-y'$, pero depende en z y z' por separado.

Sin embargo, en el caso en que $\epsilon(\vec{r}, \vec{r}'; t-t')$ depende en z y z' a través de su diferencia, como en el caso de un medio infinito podemos escribir^{6,10}

$$D_j(\vec{r}, t) = \int d^3\vec{r}' \int dt' \epsilon(\vec{r}-\vec{r}'; t-t') E_j(\vec{r}', t'). \quad (2.5)$$

En este (y sólo en éste) caso obtenemos al tomar la transformada de Fourier espacial y temporal de (2.5) la siguiente expresión

$$D_j(\vec{k}, \omega) = \epsilon(\vec{k}, \omega) E_j(\vec{k}, \omega), \quad (2.6)$$

donde

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) = \int d\vec{r} \int d^3\vec{r}' \epsilon(\vec{r}, t) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)},$$

$$E_j(\vec{k}, \omega) = \int dt \int d^3\vec{r}' E_j(\vec{r}', t) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}' - \omega t)}. \quad (2.7)$$

\vec{k} y ω deben ser considerados como variables independientes.

Es conocido que un medio exhibe respuesta no-local (espacialmente dispersiva) cuando la frecuencia de la onda electromagnética es escojida cercana a una frecuencia de transición excitónica.⁽¹⁰⁾

2.2 ECUACIONES DE MAXWELL.

Consideramos las ecuaciones de Maxwell (macroscópicas) para medios materiales

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

$$b) \quad \nabla \cdot \vec{B} = 0 ,$$

(2.8)

$$c) \quad \nabla \cdot \vec{D} = 4\pi \rho ,$$

$$d) \quad \nabla \times \vec{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \vec{j} ,$$

donde ρ y \vec{j} son las densidades de carga y corriente libres respectivamente. \vec{B} es llamada la inducción magnética y \vec{H} el campo magnético. \vec{D} es el desplazamiento eléctrico y \vec{E} es el campo eléctrico. Existen relaciones funcionales entre los vectores \vec{B} y \vec{H} , \vec{D} y \vec{E} expresadas en la siguiente forma

$$B_j = \mu_{jk} H_k , \quad D_j = \epsilon_{jk} E_k , \quad \dots , \quad (2.9)$$

donde μ_{jk} y ϵ_{jk} son tensores de segundo orden llamados, tensor permeabilidad magnética y tensor dieléctrico respectivamente. Las ecuaciones (2.9) nos dicen que las componentes de los campos \vec{B} y \vec{H} , y \vec{D} y \vec{E} en general no tienen la misma dirección. En particular cuando el medio es homogéneo e isotrópico los tensores se reducen a escalares, entonces

$$\vec{B} = \mu \vec{H} , \quad \vec{D} = \epsilon \vec{E} . \quad \dots \quad (2.10)$$

Si el medio es no magnético entonces $\mu = 1$. Se toma este caso.

Estudiaremos ahora las soluciones ondulatorias de las

ecuaciones de Maxwell en medios lineales, homogéneos e isotrópicos caracterizados por la función dieléctrica $\epsilon(\vec{k}, \omega)$. Queremos las soluciones a las ecuaciones de Maxwell en la ausencia de cargas y corrientes libres¹⁰. Tomando en cuenta esta restricción, de las ecuaciones (2.8a) y 2.8d) obtenemos

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2} = 0, \quad (2.11)$$

y de la ecuación (2.8c) tenemos

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0, \quad (2.12)$$

consideraremos que la solución a las ecuaciones (2.11) y (2.12) es de la forma

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= \vec{E}(\vec{k}, \omega) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \\ \vec{D}(\vec{r}, t) &= \vec{D}(\vec{k}, \omega) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \end{aligned} \quad (2.13)$$

Si sustituimos esta solución en (2.11) obtenemos (recordando que $\nabla \rightarrow i\vec{k}$ y $\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\omega$ al actuar sobre las ondas planas)

$$\vec{k} \times [\vec{k} \times \vec{E}(\vec{k}, \omega)] + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) = 0. \quad (2.14)$$

y de (2.12) obtenemos

$$[\vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega)] \epsilon(\vec{k}, \omega) = 0, \quad (2.15)$$

donde hemos hecho uso de la ecuación (2.6)

Las posibles soluciones a la ecuación (2.15) son dos,

una cuando $\epsilon \neq 0$ y la otra cuando $\epsilon = 0$

i) Si $\epsilon \neq 0$ debemos tener que

$$\vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega) = 0, \quad (2.16)$$

sustituyendo este resultado en la ecuación (2.14) obtenemos

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\vec{k}, \omega). \quad (2.17)$$

ii) Si $\epsilon = 0$ entonces, de la ecuación (2.14) vemos que esta se satisface sólo si

$$\vec{k} \times \vec{E}(\vec{k}, \omega) = 0. \quad (2.18)$$

En el primero de los dos casos ($\epsilon \neq 0$) se obtuvo la ecuación (2.16); la cuál muestra que las ondas son "transversales" y la ecuación (2.17) es la relación de dispersión para tales ondas. Para un medio ordinario (local) la función dieléctrica es independiente de \vec{k} ($\epsilon = \epsilon(\omega)$) entonces para una frecuencia ω dada, la ecuación (2.17) tiene una solución para $\vec{k}(\omega)$. En un medio no-local la función dieléctrica depende en \vec{k} y ω ($\epsilon = \epsilon(\vec{k}, \omega)$), por lo tanto la ecuación (2.17) puede tener (depende del modelo) más de una solución en $\vec{k}(\omega)$. Entonces más ondas monocromáticas pueden ser generadas en el medio no-local a una frecuencia ω dada.

En el segundo caso ($\epsilon = 0$), vemos de la ecuación (2.18) que las ondas son "longitudinales" y la relación de dispersión de estas ondas es

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) = 0. \quad (2.20)$$

(Para nuestro modelo tenemos una solución para $\vec{h}(\omega)$, por lo tanto se tiene una onda "longitudinal").

En las proximas dos secciones damos dos ejemplos donde los efectos no-locales han sido observados, el primero en metales y el segundo en semiconductores.

2.3 EFECTO PELICULAR ANOMALO

(ANOMALOUS SKIN EFFECT)

El efecto skin clásico es un efecto a bajas frecuencias. Cuando las frecuencias son bajas, el campo eléctrico \vec{E} cambia lentamente, en este caso el análisis local de cualquier fenómeno es suficiente. Sin embargo a altas frecuencias el campo eléctrico \vec{E} tiene variaciones fuertes, en este caso en el análisis de cualquier fenómeno se debe considerar efectos no-locales*. El efecto de altas frecuencias se le conoce con el nombre de efecto pelicular anómalo (Anomalous skin effect).

El efecto pelicular anómalo está asociado esencialmente a los electrones libres. La teoría para la cual el efecto pelicular anómalo fue incorporada a la teoría general de las propiedades ópticas de metales fue desarrollada por Reuter y Sondheimer¹⁴ y Dingle²² para la dispersión especular y difusa de electrones en la superficie metálica. En un trabajo realizado por Kliever y Fuchs²³ utilizando la ecuación de Boltzmann, trataron el caso de una onda plana incidente normalmente sobre la superficie del metal. Un tratamiento cuántico del efecto pelicular anómalo en incidencia normal con reflexión especular fue dada por Mattis y Bardeen.²⁴ Otro estudio de Kliever y Fuchs¹⁶ anterior al mencionado (de estos autores) también sobre propiedades ópticas clásicas de un gas de electrones indicó que una interesante absorción puede ocurrir en ángulos de incidencia no-normal, con una estructura diferente al de incidencia normal. *También bajas temperaturas y metales puros.

mal. Este hecho junto con los resultados notables que aparecen del estudio de Mayer y sus colaboradores en metales alcalinos en ángulos de incidencia grandes sugirieron una reexaminación de la teoría del efecto pelicular anómalo en ángulos de incidencia no-normal.

Aparentemente, hasta antes del trabajo hecho por Kliever y Fuchs¹³ estaban resueltos los problemas acerca de la reflexión especular, sin embargo, había que agregar lo siguiente: primero, cuando se considera $\nabla \cdot \vec{E} = 0$ (donde \vec{E} es el campo eléctrico) en el cálculo de la impedancia de superficie, no hay fluctuaciones de carga en el metal puesto que el campo eléctrico es siempre paralelo a la superficie del metal.** Sin embargo si se toma $\nabla \cdot \vec{E} \neq 0$, entonces existe una componente perpendicular a la superficie del metal de \vec{E} , como será en el caso de incidencia no-normal con campos de polarización P. Puede ocurrir un cambio de equilibrio de la carga dentro del metal. La interacción de los electrones con esta carga fluctuante es un mecanismo adicional de absorción de energía.

Y segundo, ver que sucede con el término de dispersión de la ecuación de Boltzmann¹⁶. Cuando las fluctuaciones de carga están presentes, la relajación tenderá al equilibrio para un estado local de carga no balanceada y no a una distribución uniforme. Esta es una aproximación simple de tiempo de relajación para el término de dispersión que no será adecuada para este problema, de ahí que no traten¹³ la ecuación de Boltzmann en el trabajo con esta aproximación.

**Incidencia normal de la onda.

2.4 EFECTOS NO-LOCALES OBSERVADOS EN POLARITONES-EXCITONES DE SUPERFICIE.

Los efectos de la dispersión espacial en polaritones-excitones de volumen han sido tratados por varios autores. Podemos mencionar a Pekar^{3,4}, como uno de los iniciadores de la formulación de la teoría de la dispersión espacial en el espectro óptico de los polaritones-excitones dados a conocer en una serie de publicaciones en 1957. Posterior a los trabajos de Pekar, existen trabajos publicados por Hopfield y Thomas⁵ donde tratan el mismo tipo de problemas considerando un modelo particular de la función dieléctrica para excitones de Wannier (ver ecuación 2.40). La misma función dieléctrica usaron Maradudin y Mills⁶, y Fischer y Lagois⁷ para estudiar los efectos de la dispersión espacial en polaritones-excitones de superficie. Entre los efectos no-locales observados podemos mencionar el hecho de que la reflectividad r_{es} es menor comparado con el caso local.

Los polaritones-excitones de superficie fueron observados experimentalmente por primera vez por Lagois y Fischer¹⁷. Estos modos fueron excitados en cristales de ZnO. El método usado para la excitación y detección de estos modos es el ATR (Attenuated Total Reflection). Ellos han reportado los resultados obtenidos para ángulos de incidencia donde hay reflexión total atenuada a temperaturas de helio. Los resultados dan la relación de dispersión para los polaritones excitones de su-

perficie. Ellos han encontrado que el ancho de la línea espectral de ATR depende más de los efectos no-locales que de la disipación fenomenológica.

2.5 MODELO DE LA FUNCION DIELECTRICA

En esta sección hacemos un estudio acerca del modelo de la función dieléctrica tomando en cuenta la no-localidad. Hemos mencionado que no-localidad y dispersión espacial tienen el mismo significado. Agregaremos a esto, que, cuando tengamos a la función dieléctrica del medio dependiente del vector de onda \vec{k} además de la dependencia en la frecuencia ω , el medio será llamado no-local.

Consideremos un átomo con electrones ligados al núcleo de la misma forma como una masa pequeña está ligada a una masa grande por medio de un resorte. Este es el modelo de Lorentz.² El movimiento de un electrón está descrito por

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} + m \gamma \frac{d \vec{r}}{dt} + m \omega_0^2 \vec{r} = -e \vec{E}', \quad (2.21)$$

donde m es la masa y e es la carga del electrón. \vec{E}' es el campo eléctrico que actúa sobre el electrón. El término $m \gamma \frac{d \vec{r}}{dt}$ representa la amortiguación fenomenológica y $m \omega_0^2 \vec{r}$ es el correspondiente a la ley de Hooke. Si el campo \vec{E}' varía en el tiempo de la forma $\vec{E}' e^{i \omega t}$ entonces la solución a la ecuación (2.21) es

$$\vec{r} = \frac{-e \vec{E}' / m}{\omega_0^2 - \omega^2 - i \gamma \omega} \quad (2.22)$$

El momento dipolar inducido es

$$\vec{p} = \frac{e^2 \vec{E}'}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (2.23)$$

La polarización está definida por

$$\vec{p} = \alpha(\omega) \vec{E}' \quad (2.24)$$

donde $\alpha(\omega)$ es llamada la polarizabilidad. Por lo tanto la polarizabilidad para un átomo con un electrón es (de 2.23 y 2.24)

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (2.25)$$

Si hay N átomos por unidad de volumen, la polarización macroscópica es

$$\vec{P} = N \langle \vec{p} \rangle = N \alpha \langle \vec{E}' \rangle = \chi_e \vec{E} \quad (2.26)$$

χ_e es la susceptibilidad eléctrica, \vec{E} es el campo eléctrico macroscópico. En general $\langle \vec{E}' \rangle \neq \vec{E}$ puesto que $\langle \vec{E}' \rangle$ es un promedio sobre los sitios atómicos. Pero supondremos que $\langle \vec{E}' \rangle = \vec{E}$, es decir, despreciamos correcciones debidas a campos locales, entonces

$$\vec{P} = N \alpha \vec{E} = \chi_e \vec{E} \quad (2.27)$$

Además sabemos que

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} = \vec{E} + 4\pi \vec{P} \quad (2.28)$$

De las ecuaciones (27) y (28) tenemos

$$\epsilon = 1 + 4\pi N \alpha \quad (2.29)$$

Usando la ecuación (2.25) obtenemos

$$\epsilon = 1 + \frac{4\pi N e^2}{m} \cdot \frac{1}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (2.30)$$

Si consideramos átomos clásicos con más de un electrón por átomo podemos extender el resultado anterior. Sea N_j la densidad de electrones ligados con frecuencia de resonancia ω_j , entonces

$$\epsilon = 1 + \frac{4\pi e^2}{m} \cdot \sum_j \frac{N_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega} \quad (2.31)$$

$$\sum_j N_j = N \quad (2.32)$$

Una ecuación similar obtenida de la mecánica cuántica se escribe de la siguiente forma²,

$$\epsilon = 1 + \frac{4\pi e^2}{m} \sum_j \frac{N f_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega} \quad (2.33)$$

Aunque existe una similitud formal entre las ecuaciones (2.31) y (2.33), los significados de los términos son realmente diferentes. En (2.31), ω_j es la frecuencia de resonancia de un electrón ligado, mientras que en la ecuación (2.33) es la frecuencia de transición de un electrón entre dos estados atómicos separados en la energía por $\hbar\omega_j$.

El parámetro f_j es llamado la intensidad del oscilador, es una medida de la probabilidad relativa de una transición mecánico-cuántica. Para átomos libres se satisface la regla

de suma,

$$\sum_j f_j = 1 \quad (2.34)$$

Consideremos un medio caracterizado por una excitación de polarización transversal, por ejemplo un excitón o un fonón. Para frecuencias ω cercanas a la frecuencia ω_T de excitación, la constante dieléctrica se puede escribir de la siguiente manera⁶

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \frac{\omega_p^2}{\omega_T^2 - \omega^2} = \epsilon_0 \frac{\omega^2 - \omega_L^2}{\omega^2 - \omega_T^2}, \quad (2.35)$$

donde $\omega_L^2 = \omega_T^2 + \omega_p^2/\epsilon_0$.

Se ignoran efectos de amortiguación. El término ϵ_0 es en general complejo y función de la frecuencia, aunque la dependencia en la frecuencia es a menudo ignorada. Si la excitación es un fonón en un cristal iónico, la frecuencia ω_p es la frecuencia de plasma de los iones multiplicada por $\epsilon_0^{1/2}$, si la excitación es un excitón, ω_p es una medida de la intensidad del oscilador del dipolo eléctrico, ω_T es la frecuencia transversal de la excitación y ω_L es llamada frecuencia longitudinal.

La función dieléctrica (2.35) ha sido usada ^(también) para estudiar polaritones-fonones de superficie e interfase²⁰ en aisladores en la región del espectro óptico del infrarrojo.

Si en la ecuación (2.35) hacemos $\omega = \omega_L$, obtenemos

$$\epsilon(\omega_L) = 0$$

esta es la relación de dispersión para modos longitudinales.

Para ω igual a ω_T , en la ecuación (2.35) hay resonancia

$$\epsilon(\omega_T) \rightarrow \infty$$

En las frecuencias cercanas a la frecuencia de resonancia surge una importante dependencia de la constante dieléctrica en el vector de onda \vec{k} . Esto resulta de la dependencia de ω_T en el vector de onda \vec{k} de la excitación en un término de la forma $D \cdot k^2$. Este término resulta del movimiento del centro de masa del excitón cuya energía es

$$E(k) = \hbar \omega_T + \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e + m_h)}, \quad (2.36)$$

donde m_e y m_h son las masas del electrón y el agujero respectivamente. La energía de excitación entonces depende del vector de onda, lo que significa que en un modelo simple de oscilador ω_T debe ser reemplazado por $E(k)/\hbar$. De la ecuación (2.36) tenemos

$$\left| E(k)/\hbar \right|^2 \approx \omega_T^2 + \hbar \omega_T k^2 / (m_e + m_h) \equiv \omega_T^2 + D k^2, \quad (2.37)$$

donde

$$D = \hbar \omega_T / (m_e + m_h) \quad (2.38)$$

En general la corrección que este término introduce en la función dieléctrica es pequeño excepto en la vecindad de ω_T . Sustituyendo la ecuación (2.37) en la ecuación (2.35) tenemos

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) = \epsilon_0 + \frac{\omega_T^2}{\omega_T^2 + D k^2 - \omega^2} \quad (2.39)$$

Ahora, si tomamos en cuenta los efectos de amortiguación en la ecuación (2.39), podemos escribir la expresión más general para la función dieléctrica,

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) = \epsilon_0 + \frac{\omega_p^2}{\omega_r^2 + \gamma k^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} . \quad (2.40)$$

Este modelo de la función dieléctrica fue propuesto por Hopfield y Thomas⁵ para los excitones de Wannier.

i) para modos transversales.

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\vec{k}, \omega), \quad (3.4)$$

ii) para modos longitudinales

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) = 0, \quad (3.5)$$

implican que para una onda plana monocromática a una frecuencia ω , en la vecindad de una frecuencia de resonancia ω_T los valores para q_i^2 (componentes del vector de onda en la dirección z), son:

i) para los modos transversales

$$q_i^2 = \frac{1}{2} \left\{ \left(\Gamma^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_0 - k^2 \right) \pm \left[\left(\Gamma^2 + \Gamma^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_0 \right)^2 + 4 \frac{\omega^2 \omega_T^2}{c^2 D} \right]^{1/2} \right\}, \quad i=1, 2 \quad (3.6)$$

ii) para los modos longitudinales

$$q_3 = \Gamma^2 - \frac{\omega_T^2}{D \epsilon_0}. \quad (3.7)$$

En las ecuaciones (3.3), (3.6) y (3.7), ω_T es la frecuencia transversal de la excitación, que para nuestro trabajo consideraremos al excitón, por lo tanto, ω_p es la medida de la intensidad de oscilador del dipolo eléctrico, γ es la constante fenomenológica de amortiguación, D está dado por la ec.(2.38), ϵ_0 es una constante y Γ está definido por

$$\Gamma^2 = \frac{\omega^2 - \omega_T^2 - D k^2 + i \gamma \omega}{D}. \quad (3.8)$$

Las ecuaciones (3.4) y (3.5) pueden ser escritas como

$$(k^2 + q_i^2) \equiv \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega, q_i), \quad i=1, 2, \quad \epsilon(\omega, q_3) = 0.$$

Consideremos que una onda plana monocromática incide sobre la superficie del medio no-local (plano $x\gamma$) formando un ángulo θ con el eje z (ver Fig.2.1). Tomando en cuenta que los vectores de onda satisfacen las relaciones de dispersión (3.4) y (3.5), vemos que en el medio no-local tenemos tres modos de propagación cuando la frecuencia ω está entre ω_1 y ω_2 . De esto se sigue que las condiciones de contorno (a la frontera) obtenidas directamente de las ecuaciones de Maxwell en una superficie de discontinuidad no determinan la reflectividad y la transmitividad de los campos del conocimiento del campo incidente (ver Fig.3.4). Esto se debe a que tenemos dos amplitudes más, desconocidas. Por esta razón, muchos trabajos anteriores se han encontrado en la necesidad de introducir las condiciones adicionales a la frontera (ABC-additional boundary condition) sugeridos por diversos modelos físicos debido al comportamiento de excitones en el medio espacialmente disper-

sivo.

El problema, de cual es la forma correcta de las ABC ha sido objeto de grandes discusiones y controversias. Es natural esperar que las diferentes condiciones adicionales a la frontera den resultados diferentes en la reflectividad y transmitividad de los campos.

Basados en los trabajos anteriores tratamos las ABC generalizadas, que contemplan como casos particulares las ya estudiadas anteriormente. Para esto se propone un modelo físico para conectar a los vectores \vec{D} y \vec{E} .

3.2 MODELO DE LOS PARAMETROS U_1 Y U_2 .

En este trabajo consideramos un modelo propuesto anteriormente¹⁸, basado en dos parámetros fenomenológicos, U_x y U_z .

Consideremos que las componentes del desplazamiento eléctrico \vec{D} están dadas como

$$D_j(z) = \int_0^{\infty} \epsilon(z-z') E_j(z') dz' + U_j \int_0^{\infty} \epsilon(z+z') E_j(z') dz' \quad (3.9)$$

$$j = x, z.$$

Estas ecuaciones son casos particulares de la ecuación (2.4). Los términos que involucran a $\epsilon(z-z')$ representan la respuesta directa no-local en z debido al campo en z' . Los términos que involucran a $\epsilon(z+z')$ representan la respuesta no-local debido a una excitación la cual ha sido dispersada por la superficie. La representación geométrica está dada en las Figs. 3.2 y 3.3.

3.3 CONDICIONES ADICIONALES A LA FRONTERA (ABC).

Como hemos mencionado anteriormente, el problema de la reflectividad y transmitividad de los campos cuando se estudian medios no-locales, no puede ser resuelta tomando únicamente las condiciones a la frontera que se obtienen directamente de las ecuaciones de Maxwell, de ahí que se busquen las ABC que permitan resolver el problema. En esta sección damos un resumen al cálculo de los ABC generalizados que fue hecho por Halevi y Fuchs¹⁰. En este cálculo se ha tomado un modelo para el desplazamiento eléctrico \vec{D} , el cual ha sido expuesto en la sección anterior.

Consideremos la ecuación de desplazamiento eléctrico (3.9).

Tomemos el caso de ondas de polarización P (el campo \vec{E} de la onda está en el plano formado por el vector de onda y la normal a la superficie) incidentes en la superficie del medio no-local (plano xy). En este caso los tres modos son excitados, dos transversales y uno longitudinal. Entonces debemos escribir el

campo eléctrico como una superposición, es decir,

$$E_x = \sum_{j=1}^3 E_j e^{i q_j z}, \quad E_z = \sum_{j=1}^3 \alpha_j E_j e^{i q_j z}, \quad (3.12)$$

donde hemos usado las siguientes definiciones ^{18a}

$$\alpha_1 = -\frac{\kappa}{q_1}, \quad \alpha_2 = -\frac{\kappa}{q_2}, \quad \alpha_3 = \frac{q_3}{\kappa}. \quad (3.13)$$

Sustituyendo (3.12) en (3.9) y después en (2.11) encontramos las siguientes ecuaciones

$$\sum_{j=1}^3 \left(\frac{1}{q_j - \pi} + \frac{U_x}{q_j + \pi} \right) \bar{E}_j = 0, \quad \sum_{j=1}^3 \left(\frac{1}{q_j - \pi} + \frac{U_z}{q_j + \pi} \right) \alpha_j E_j = 0. \quad (3.14)$$

Estas son las ABC generalizadas¹⁸. Las ecuaciones (3.14) pueden ser escritas en términos de la polarizabilidad excitónica y su derivada en la superficie de discontinuidad. La polarización excitónica está definida como aquella parte de la polarización la cual está asociada con la transición excitónica, excluyendo el efecto del término constante, el "fondo" dieléctrico.

$$\vec{P} = \vec{D} - \frac{\epsilon_0 - 1}{4\pi} \vec{E},$$

de esta fórmula se sigue que ^{18a}

$$(1 + U_j) \frac{dP_j(0)}{dz} + i\pi(1 - U_j) P_j(0) = 0, \quad j = x, z. \quad (3.15)$$

Las ABC de las ecuaciones (3.15), se reducen a cuatro casos particulares bien conocidos para valores particulares de los parámetros U_x y U_z . Estos casos son:

a) Si $U_x = U_z = -1$ entonces

$$P_x(0) = P_z(0) = 0, \quad (3.15a)$$

ABC de Pekar.

b) Si $U_x = 1, U_z = -1$ entonces

$$\frac{dP_x(0)}{dz} = 0, \quad P_z(0) = 0, \quad (3.15b)$$

ABC de Fuchs-Kliewer (FK).

c) Si $U_x = -1, U_z = 1$ entonces

$$P_x(0) = 0, \quad \frac{dP_z(0)}{dz} = 0 \quad (3.15c)$$

ABC de Rimbey-Mahan (RM).

d) Si $U_x = U_z = 0$ entonces

$$\frac{dP_j(0)}{dz} + i \Gamma P_j(0) = 0, \quad j = x, z \quad (3.15d)$$

ABC de Agarwal-Pattanayak-Wolf (APW)

3.4 REFLECTIVIDAD R_p

Calcularemos la reflectividad para el sistema de dos medios semiinfinitos, donde uno de ellos es local y el otro no-local a como se muestra en la Fig.3.4.

Supongamos que una onda monocromática plana (de polarización p) incide sobre un material como lo indica la Fig. 3.4. Calcularemos la reflectividad la cual denotaremos por R_p .

Las componentes de los campos tienen dependencia en \vec{r} y t en la siguiente forma

$$E_j, B_j \propto e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (3.16)$$

Las componentes de los campos \vec{E} y \vec{B} en el medio local son*

$$E_x(z) = \cos \theta [E_o e^{i\theta z} + E_o' e^{-i\theta z}],$$

$$B_y(z) = \frac{\omega \epsilon_o}{c} \cos \theta [E_o e^{i\theta z} - E_o' e^{-i\theta z}]. \quad (3.17)$$

De las ecuaciones (3.17) obtenemos

$$\frac{E_o'}{E_o} = \frac{\frac{E_x(o^+)}{B_y(o^+)} - \cos \theta}{\frac{E_x(o^-)}{B_y(o^-)} + \cos \theta} \quad (3.19)$$

*Si θ es el ángulo de incidencia de la onda entonces

θ es el ángulo de incidencia. De la continuidad de las componentes tangenciales de los campos tenemos

$$\frac{E_x(\sigma)}{B_y(\sigma)} = \frac{E_x(\sigma^+)}{B_y(\sigma^+)} \equiv Z_p(\sigma^+). \quad (3.20)$$

$Z_p(\sigma^+)$ es llamada la impedancia de superficie¹³. Los símbolos σ^- y σ^+ indican que los campos se calculan en el lado negativo y positivo del origen respectivamente.

La fracción de energía reflejada R_p es

$$R_p = \left| \frac{E'_0}{E_0} \right|^2 \quad (3.21)$$

entonces tenemos

$$R_p = \left| \frac{Z_p - \cos \theta}{Z_p + \cos \theta} \right|^2 \quad (3.22)$$

De las ABC (ecuaciones 3.14) podemos demostrar la siguiente fórmula para Z_p

$$Z_p = \frac{c}{\omega} \cdot \frac{(1,2) + (2,3) + (3,1)}{\frac{\epsilon_1}{q_1} (2,3) + \frac{\epsilon_2}{q_2} (3,1)}, \quad (3.23)$$

donde hemos definido

$$(i,j) = \beta_i \gamma_j - \beta_j \gamma_i, \quad i,j=1,2,3 \quad (3.24)$$

$$\beta_j = \frac{1}{q_j - n} + \frac{U_x}{q_j + n}, \quad (3.25)$$

$$\gamma_j = \left[\frac{1}{q_j - n} + \frac{U_z}{q_j + n} \right] \alpha_j.$$

El resultado mostrado en la ecuación (3.23) fué obtenido por P.

HaLevi y R. Fuchs^{18a}

CAPITULO 4.

REFLECTIVIDAD EN LA PRESENCIA DE UNA TRANSICION EXCITONICA AISLADA (CON CAPA "MUERTA")

4.1 INTRODUCCION

Este capítulo es uno de los capítulos más importantes de la Tesis. En este capítulo hacemos una extensión al trabajo realizado recientemente por Halevi y Fuchs¹⁸ sobre excitones y propiedades ópticas no-locales en semiconductores. Ellos han hecho un estudio acerca de los efectos de la dispersión espacial (no-locales) en la vecindad de una transición excitónica para luz de polarización P . Derivaron dos condiciones adicionales a la frontera (ABC) generalizadas pero sin tomar en cuenta la capa "muerta" para los excitones.

En el presente trabajo tomamos en cuenta la capa "muerta" para los excitones de grueso λ y las propiedades ópticas no-locales en semiconductores. Derivamos dos ABC generalizadas y calculamos la reflectividad para luz de polarización P . Para $\lambda = 0$ obtenemos el caso de Halevi y Fuchs¹⁸. Al igual que en el trabajo de Halevi y Fuchs¹⁸ introducimos unos parámetros U_j ($j=x,y$), que describen cualitativamente la dispersión de los excitones en la capa "muerta" (en $z = \lambda$). Para valores particulares de estos parámetros podemos reconstruir las ABC que otros autores han derivado.

4.2 LA CAPA "MUERTA" PARA EXCITONES.

La capa "muerta" para excitones es una capa superficial en la cual los excitones no existen. La existencia de la capa "muerta" se debe a una barrera de potencial cercana a la superficie del cristal la cual repele a los excitones. Los autores que introdujeron el concepto de la capa "muerta" en el cálculo de la reflectividad de la luz fueron Hopfield y Thomas⁵. Estos autores han hecho un estudio teórico y experimental en cristal de CdS para polaritones-excitones. En el cálculo teórico han tomado en cuenta la capa "muerta" para excitones con la función dieléctrica constante. En el volumen del cristal consideran la función dieléctrica para excitones. Esta función dieléctrica depende del vector de onda \vec{k} y de la frecuencia angular ω . Cuando se introduce en la función dieléctrica la dependencia en \vec{k} y ω se dice que se toman en cuenta los efectos no-locales. Debido a la no-localidad en el medio se generan más de una onda. Las condiciones a la frontera de Maxwell no son suficientes para determinar la reflectividad y transmitividad de la luz, son necesarias otras condiciones. Hopfield y Thomas⁵ han escogido las condiciones adicionales a la frontera propuestas por Pekar. Los resultados obtenidos son: la reflectividad muestra inesperadamente un pico donde la reflectividad es pequeña, el mínimo de reflectividad ocurre a una baja energía, el máximo agudo de la reflectividad ocurre cerca de la energía excitónica longitudinal ($\omega \sim \omega_L$)

La concordancia entre el experimento y el cálculo es buena. El máximo adicional es explicado tomando en cuenta los efectos no-locales y la existencia de la capa "muerta".

4.3 CONDICIONES ADICIONALES A LA FRONTERA (ABC) EN LA PRESENCIA DE UNA CAPA "MUERTA".

En esta sección trataremos las ABC generalizadas, basados en un modelo físico para la construcción del desplazamiento eléctrico. El modelo supone la existencia de una barrera de potencial cercana a la superficie del cristal la cual repele a los excitones. A esta región cercana a la superficie del cristal que no permite a los excitones llegar a la superficie se le ha llamado capa "muerta". Esta situación está mostrada esquemáticamente en la Fig.4.1.

En la Fig.4.1 la parte negativa del eje z está ocupada

por el vacío ($\epsilon = 1$). El grueso de la capa "muerta" es l y está caracterizada por la función dieléctrica $\epsilon_0 = \epsilon l$. El medio no-local está en $z > l$. Este medio está caracterizado por la función dieléctrica $\epsilon(\vec{r}, \omega)$. El modelo de la función dieléctrica que usamos es el propuesto por Hopfield y Thomas para excitones de Wannier, ec. (2.40).

Las componentes del desplazamiento eléctrico en el medio no-local tienen la forma¹⁸

$$D_j(z) = \int_l^\infty \epsilon(z-z') E_j(z') dz' + U_j \int_l^\infty \epsilon(z+z'-2l) E_j(z') dz', \quad j = x, z \quad (4.1)$$

donde el primer término representa la respuesta directa no-local en el volumen del cristal y el segundo término representa la respuesta no-local la cual ha sido dispersada por la barrera de potencial. La respuesta en z' se debe a la excitación en z , la distancia recorrida es $(z-l) + (z'-l) = z + z' - 2l$ (hay homogeneidad en el plano xy).

En el caso en que la luz incidente sobre la superficie del cristal (plano xy) es de polarización p , tres modos de propagación son excitados en el medio no-local:

dos modos transversales y uno longitudinal, a como se muestra en la Fig. 4.2. Entonces debemos escribir el campo eléctrico como la superposición de los tres modos; es decir como en la ec. (3.12).

De la ecuación de onda (2.11) se puede obtener la siguiente

$$\nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2} = 0. \quad (4.5)$$

En el caso donde los modos de propagación son transversales entonces

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0, \quad (4.6)$$

por lo tanto, la ecuación (4.5) se reduce a

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2} = 0. \quad (4.7)$$

Esto no sucede siempre sino sólo en el caso donde los modos de propagación son estrictamente transversales. Pero si existen modos longitudinales entonces

$$\nabla \cdot \vec{E} \neq 0 \quad \text{y} \quad \nabla \times \vec{E} = 0. \quad (4.8)$$

Consideraremos el caso donde los modos de propagación son transversales y longitudinales, es decir, tomaremos en cuenta la ecuación (4.8). Tomando las componentes de la ecuación (4.5) tenemos:

Para la componente X

$$\alpha_3 \frac{\partial^2 E_3(x, z)}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 E_3(x, z)}{\partial x^2} - \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) (E_1(x, z) + E_2(x, z) + E_3(x, z)) - \frac{\omega^2}{c^2} D_X(x, z) = 0 \quad (4.9)$$

De la ecuación (4.1) tenemos

$$D_X(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon(z-z') E_X(z') dz' + U_X \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon(z+z'-z) E_X(z') dz' \quad (4.10)$$

La expresión para la función dieléctrica puede escribirse como

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) = \epsilon_0 + \frac{\omega_p^2}{D(q-\pi)(q+\pi)} \quad (4.11)$$

y de aquí se puede obtener que (Γ ha sido definido en (3.8))

$$\epsilon(q, \omega) = \epsilon_0 \delta(q) + \frac{i\omega_p^2}{2D\Gamma} e^{i\pi|q|} \quad (4.12)$$

Sustituyendo la ecuación (4.12) y la primera componente de (4.2) en (4.10) y después evaluando la integral obtenemos $D_X(z)$.

Sustituyendo este resultado en la ecuación (4.9) se obtiene

$$\sum_{j=1}^3 \beta_j E_j e^{i\gamma_j z} = 0 \quad (4.13)$$

donde hemos usado la primera definición de (3.25). La componente Y de la ec. de onda (2.11) es

$$\alpha_3 \frac{\partial^2 E_3(x,z)}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 E_3(x,z)}{\partial z \partial x} - \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) (\alpha_1 E_1 + \alpha_2 E_2 + \alpha_3 E_3) - \frac{\omega^2}{c^2} D_2(x,z) = 0. \quad (4.15)$$

Haciendo el mismo procedimiento que cuando se obtuvo la ecuación (4.13), se puede obtener

$$\sum_{j=1}^3 \gamma_j E_j e^{i\gamma_j z} = 0, \quad (4.16)$$

donde hemos usado la segunda definición de (3.25). Las ecuaciones (4.13) y (4.16) son las ABC generalizadas donde se ha tomado en cuenta la existencia de la capa "muerta" para excitones. Estas son similares a las formulas (3.14).

Las ecuaciones (4.13) y (4.16) pueden ser reescritas en términos de la polarizabilidad excitónica en la siguiente forma^{6,18}

$$(1 + \nu_j) \frac{dP_j(z)}{dz} + i\Gamma(1 - \nu_j) P_j(z) = 0, \quad (4.18)$$

$$j = x, z.$$

Estas ecuaciones son idénticas al caso sin capa "muerta" cuando $\lambda = 0$.

4.4 LA IMPEDANCIA DE SUPERFICIE Z_p , REFLECTIVIDAD R_p y RELACION DE DISPERSION.

En el capítulo anterior demostramos que la impedancia¹³ de superficie Z_p tiene una aplicación en el cálculo de la reflectividad de los campos. Debido a ello calcularemos ahora la impedancia de superficie Z_p

$$Z_p = \frac{E_x(0^+)}{B_y(0^+)} \quad (4.19)$$

Las componentes de los campos en el medio con $\epsilon_0 = cte$ (ver Fig. 4.2) son:

$$E_x(z) = E_x e^{i\eta z} + E'_x e^{-i\eta z}$$

$$B_y(z) = \frac{\omega}{c} \cdot \frac{\epsilon_0}{q} [E_x e^{i\eta z} - E'_x e^{-i\eta z}] \quad (4.20)$$

De (4.20) se sigue que la ecuación (4.19) la podemos escribir como

$$Z_p = \frac{c q}{\omega \epsilon_0} \cdot \frac{1 + \frac{E'_x}{E_x}}{1 - \frac{E'_x}{E_x}} \quad (4.21)$$

De la continuidad de las componentes tangenciales de los campos en $z=l$ tenemos,

$$E_x e^{i\eta l} + E'_x e^{-i\eta l} = E_1 e^{i\eta_1 l} + E_2 e^{i\eta_2 l} + E_3 e^{i\eta_3 l}$$

$$\frac{\epsilon_0}{q} [E_x e^{i\eta l} - E'_x e^{-i\eta l}] = \frac{\epsilon_1}{q_1} E_1 e^{i\eta_1 l} + \frac{\epsilon_2}{q_2} E_2 e^{i\eta_2 l} \quad (4.22)$$

* Si θ es el ángulo de incidencia y θ_r el ángulo de refracción, entonces $\theta_r = \text{sen}^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0}} \text{sen} \theta \right]$ y $q = k' \cos \theta_r$. $k' = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_0}$.

De las ABC generalizadas (ecuaciones (4.13) y (4.16) tenemos que:

$$E_2 e^{i\varphi_2 l} = \frac{(3,1)}{(2,3)} E_1 e^{i\varphi_1 l},$$

$$E_3 e^{i\varphi_3 l} = \frac{(1,2)}{(2,3)} E_1 e^{i\varphi_1 l}. \quad (4.23)$$

Donde hemos usado (3.24).

Sustituyendo las ecuaciones (4.23) en (4.22) podemos obtener una fórmula para $\frac{\bar{E}_x'}{\bar{E}_x}$. Finalmente sustituyendo este resultado en (4.21) obtenemos la expresión para la impedancia de superficie Z_p que es

$$Z_p = \frac{c q}{\omega \epsilon_0} \cdot \frac{\frac{\epsilon_0}{4} [(1,2) + (2,3) + (3,1)] \cos \varphi l - i \left[\frac{\epsilon_1}{4_1} (1,3) + \frac{\epsilon_2}{4_2} (3,1) \right] \operatorname{sen} \varphi l}{\left[\frac{\epsilon_1}{4_1} (2,3) + \frac{\epsilon_2}{4_2} (3,1) \right] \cos \varphi l - i \frac{\epsilon_0}{4} [(1,2) + (2,3) + (3,1)] \operatorname{sen} \varphi l}, \quad (4.25)$$

La expresión para la reflectividad R_p en términos de la impedancia de superficie es¹³

$$R_p = \left| \frac{Z_p - \cos \theta}{Z_p + \cos \theta} \right|^2, \quad (4.26)$$

donde θ es el ángulo de incidencia de la onda.

La ecuación (4.18) de la impedancia de superficie se reduce al caso particular de Halevi-Fuchs¹⁸ cuando $l=0$, es

decir, el caso donde se ignora la capa "muerta" para excitaciones.

Si en la ecuación (4.25) hacemos $l = 0$, obtenemos

$$Z_p = \frac{c}{\omega} \cdot \frac{(1,2) + (2,3) + (3,1)}{\frac{\epsilon_1}{q_1} (2,3) + \frac{\epsilon_2}{q_2} (3,1)}, \quad (4.27)$$

que corresponde al caso Halevi-Fuchs¹⁸.

Ahora tomemos el límite cuando $l \rightarrow \infty$. En este caso tenemos dos medios locales (vacío y un medio con $\epsilon_0 = c\epsilon$). La componente del vector de onda en la dirección de propagación, debe ser considerada compleja $q = q' + i q''$ y $q'' > 0$. Calculemos los siguientes límites

$$\lim_{l \rightarrow \infty} (\cos ql) = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{e^{i q' l - q'' l} + e^{-i q' l - q'' l}}{2} \approx \frac{e^{-i q' l - q'' l}}{2}, \quad (4.28)$$

$$\lim_{l \rightarrow \infty} (\operatorname{sen} ql) = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{e^{i q' l - q'' l} - e^{-i q' l - q'' l}}{2i} \approx -\frac{e^{-i q' l - q'' l}}{2i}. \quad (4.29)$$

Sustituyendo los dos últimos resultados en la ecuación (4.25) obtenemos

$$Z_p = \frac{c q}{\omega \epsilon_0}, \quad (4.30)$$

que corresponde a la impedancia de un medio con constante dieléctrica ϵ_0 .

Otra aplicación importante de la impedancia de superficie Z_p es en el cálculo de la relación de dispersión de polaritones excitones de superficie.

4.5 EFECTO CICLICO DE LA REFLECTIVIDAD.

En la sección 4.3 hemos calculado la impedancia de superficie Z_p (ecuación (4.25)). Esta fórmula la podemos reescribir como

$$Z_p = \frac{c \eta}{\omega \epsilon_0} \cdot \frac{\frac{\epsilon_0}{4} [(1,2) + (2,3) + (3,1)] - i \left[\frac{\epsilon_1}{4_1} (2,3) + \frac{\epsilon_2}{4_2} (3,1) \right] \tan \varphi l}{\left[\frac{\epsilon_1}{4_1} (2,3) + \frac{\epsilon_2}{4_2} (3,1) \right] - i \frac{\epsilon_0}{4} [(1,2) + (2,3) + (3,1)] \tan \varphi l} \quad (4.31)$$

La reflectividad R_p depende de l solo por medio de $\tan \varphi l$.

$\tan \theta'$ es una función periódica con período π ,

$$\tan(\theta' + \pi) = \tan \theta'$$

Si definimos un ángulo de fase

$$\theta' = \varphi l \quad (4.32)$$

entonces, tenemos que para barrido de frecuencia las curvas de reflectividad R_p se repetirán después de un período π , es decir, una capa de espesor $l + \frac{\pi}{\varphi}$ da la misma reflectividad que una capa de espesor l . Este efecto ha sido discutido por Sell²⁰ et al., y Evangelisti²¹ et al.

* Si θ es el ángulo de incidencia y θ_r el ángulo de refracción, entonces $\theta_r = \sin^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0}} \sin \theta \right]$ y $\varphi = k' \cos \theta_r$.

CAPITULO 5.

DISCUSION DE LOS RESULTADOS DE LA REFLECTIVIDAD.

5.1 INTRODUCCION.

Los resultados de los cálculos de la reflectividad para luz de polarización P (R_p) son discutidos en este capítulo. En los cálculos, al igual que en el trabajo anterior de Halevi y Fuchs¹⁸ los parámetros que usamos son los que corresponden a ZnSe. Hemos usado cantidades sin dimensiones, es decir, sin unidades. Hemos normalizado todos los parámetros respecto a ω_T (frecuencia transversal a la excitación).

Las propiedades del semiconductor serán representadas por la función dieléctrica que depende del vector de onda \vec{k} y de la frecuencia ω , $\epsilon(\vec{k}, \omega)$. El modelo de la función dieléctrica que usamos es el modelo propuesto por Hopfield y Thomas para los excitones de Wannier (ver ecuación (2.40).)

Los parámetros que usamos tienen los siguientes valores

$$\frac{D}{c^2} \equiv \Delta = 6.17 \times 10^6 \quad (\text{coeficiente de } k^2)$$

$$\frac{\gamma}{\omega_T} \equiv N = 10^5 \quad (\text{frecuencia de amortiguación})$$

$$\frac{\omega_p}{\omega_T} \equiv \Omega = 0.074 \quad (\text{medida de la fuerza de oscilador})$$

$$\frac{\omega_L}{\omega_T} = 1.00034 \quad (\text{frecuencia longitudinal})$$

Estos parámetros determinados experimentalmente por Hite²⁵ et al. han sido usados por Maradudin y Mills⁶, y Halevi y Fuchs en los cálculos de la reflectividad de la luz.

La discusión de los resultados la dividiremos en partes. En orden, primero tomaremos el caso donde ω la frecuencia de la onda es considerada como variable independiente, U_x y U_z como parámetros variables y como constantes a θ el ángulo de incidencia de la onda y l el grueso de la capa "muerta". Segundo, θ como variable independiente, U_x y U_z como parámetros variables y como constantes a ω y l . Tercero, ω como variable independiente, l como parámetro variable y como constante a U_x , U_z y θ . Cuarto, θ como variable independiente, l como parámetro variable y como constantes U_x , U_z y ω .

5.2 ω VARIABLE INDEPENDIENTE (barrido de frecuencia)

U_x y U_z PARAMETROS VARIABLES

Calculamos R_p en la vecindad de una transición excitónica ($\omega \sim \omega_T$). Describimos primero el caso cuando ω la frecuencia de la onda es considerada como variable independiente, U_x y U_z son considerados como parámetros variables y mantenemos a l el grueso de la capa "muerta" y θ el ángulo de incidencia de la onda constantes.

En la fig.5.1 dibujamos R_p vs ω para diferentes ABC. Las diferentes ABC las podemos obtener de dar diferentes valores a los parámetros U_x y U_z en las fórmulas de las ABC general_i

zadas, ecuaciones (4.5). El ángulo de incidencia es de $\Theta = 5^\circ$, el grueso de la capa "muerta" es de $\lambda = 99\text{\AA}$. Comparamos la reflectividad R_p para tres diferentes ABC con el caso local ($\Delta = \frac{D}{c_1} = 0, \dots$). Puede notarse en la figura 5.1 que para el caso especial de las ABC de Pekar (—) que son obtenidas de las ecuaciones (4.5) con los valores $U_x = U_z = -1$ y de Agarwal-Pattanayak-Wolf (APW -.-) donde $U_x = U_z = 0$ los efectos no-locales son más fuertes que en el caso de las ABC de Fuchs-Kliewer (FK ---), donde $U_x = 1$ y $U_z = -1$. Para el caso de Pekar R_p es aproximadamente constante en $\frac{\omega}{\omega_T} \lesssim 1$, después tiene un mínimo en $\frac{\omega}{\omega_T} \sim 1.00028$ y vuelve a incrementar su valor. En el caso de APW, R_p presenta un máximo para $\frac{\omega}{\omega_T} \sim 1$, después un mínimo para $\frac{\omega}{\omega_T} \sim 1.00028$ y otro máximo para $\frac{\omega}{\omega_T} \sim 1.0003$. El caso de FK es el caso donde los efectos no-locales son menos pronunciados ya que la curva (---) es parecida a la curva (...) que corresponde al caso local ($\Delta = 0$). En esta curva podemos observar un máximo en $\frac{\omega}{\omega_T} \sim 1.00015$. Los mínimos para los casos de Pekar y APW están en la misma frecuencia.

En la Fig.5.2 es un caso similar al de la Fig.5.1, en esta figura hemos escogido al ángulo de incidencia $\Theta = 45^\circ$, el grueso de la capa "muerta" es $\lambda = 149\text{\AA}$. Hacemos las comparaciones de tres curvas de R_p para tres ABC con el caso local ($\Delta = 0, \dots$). Se nota que el caso de Pekar (—) es donde se manifiestan más fuertes los efectos no-locales, podemos ver que

para $\frac{\omega}{\omega_T} \ll 1$, R_p es aproximadamente constante, después tiene un mínimo en $\frac{\omega}{\omega_T} \sim 1.0002$, luego un máximo pequeño, otro mínimo y un máximo pronunciado en $\frac{\omega}{\omega_T} \sim 1.00032$, la curva para $\frac{\omega}{\omega_T} \gg 1.0004$ es aproximadamente constante. La curva de R_p para el caso de APW tiene un máximo en $\frac{\omega}{\omega_T} \sim 1$, después tiene un mínimo en $\frac{\omega}{\omega_T} \sim 1.0002$ y otro máximo más pronunciado que el anterior en $\frac{\omega}{\omega_T} \sim 1.00031$. El tercer caso que dibujamos en la Fig.5.2 es el de FK(---), en esta curva los efectos no-locales son menos fuertes que en los dos casos anteriores, esta curva presenta un máximo en $\frac{\omega}{\omega_T} \sim 1.00031$. Puede notarse que los mínimos para los casos de Pekar y APW suceden a una misma frecuencia y que los máximos para los casos APW, FK y el máximo más pronunciado de Pekar suceden a una misma frecuencia. De las Figs.5.1 y 5.2 vemos que la curva R_p para el caso APW (-.-.-), los primeros y segundos máximos respectivamente suceden a una misma frecuencia, notándose que el primer máximo (en $\frac{\omega}{\omega_T} \sim 1$) disminuye y el segundo se hace más pronunciado a medida que se incrementa el valor de la capa "muerta" l . En el caso de Pekar se ve que cuando l es mayor aparecen dos máximos en la curva de R_p .

5.3 θ VARIABLE INDEPENDIENTE (barrido de ángulo)

U_x y U_z PARAMETROS VARIABLES

La situación que describiremos en esta sección corresponde al caso donde consideramos a θ el ángulo de incidencia de la onda como variable independiente, U_x y U_z como parámetros variables, el grueso de la capa "muerta" l y ω la frecuencia

de la onda como constantes.

En la Fig.5.3 dibujamos R_p vs. θ , para tres ABC diferentes comparados con el caso local ($\Delta=0, \dots$). Hemos escogido a $\lambda = 49\text{\AA}$ y $\frac{\omega}{\omega_T} = 1.0002$. De esta figura vemos que el caso de Pekar (—), donde los parámetros tienen los siguientes valores $U_x = U_z = -1$, es el caso donde los efectos no-locales son más fuertes, después vemos el caso de APW (-.-.-), donde $U_x = U_z = 0$ es donde los efectos no-locales son fuertes. El caso de FK (---), donde $U_x = 1$ y $U_z = -1$, es donde los efectos no-locales son menos fuertes. Podemos observar de la figura que las tres curvas de R_p para las tres ABC diferentes donde se toman en cuenta los efectos no-locales están separados entre ellos y que la curva más cercana a la curva del caso local (...) corresponde al caso FK (---). Las tres curvas R_p , para ángulos $0^\circ \leq \theta \lesssim 60^\circ$ se mantienen aproximadamente constantes, pero para ángulos tales, que $60^\circ \lesssim \theta$ del ángulo de incidencia de la onda, en los casos de Pekar y APW se incrementa bastante rápido R_p comparado con el caso de FK.

En la Fig.5.4 hemos dibujado un caso similar al caso dibujado en la Fig.5.3. En esta figura hemos escogido a $\lambda = 99\text{\AA}$ y $\frac{\omega}{\omega_T} = 1.0002$. Se puede observar que las curvas de R_p para ángulos $0^\circ \leq \theta \lesssim 55^\circ$ son aproximadamente constantes y que el caso FK (---) es donde los efectos no-locales son menos fuertes. Los casos donde los efectos no-locales son más fuertes corresponden a Pekar (—) y APW (-.-.-), en estos dos casos para $60^\circ \lesssim \theta$ del ángulo de incidencia de la onda R_p crece monó

rresponden al caso de las ABC de Pekar, para un ángulo de incidencia de la onda de $\theta = 5^\circ$. En la Fig.5.6, dibujamos

R_p vs ω para el caso de Pekar con diferentes valores de la capa "muerta" para excitones. La curva de R_p para $\lambda = 198\text{\AA}$ (—) tiene un mínimo en $\frac{\omega}{\omega_r} \sim 1.00012$ y después un máximo en $\frac{\omega}{\omega_r} \sim 1.00032$. Cuando $\lambda = 148\text{\AA}$, la curva (-.-.-) tiene un mínimo en $\frac{\omega}{\omega_r} \sim 1.00021$ y después un máximo pequeño en $\frac{\omega}{\omega_r} \sim 1.00032$. La curva (---) es para $\lambda = 99\text{\AA}$, en esta curva podemos notar un mínimo en $\frac{\omega}{\omega_r} \sim 1.00024$ a la derecha de los mínimos de R_p para valores más grandes, el máximo tiende a desaparecer en esta curva. Dibujamos otra curva (...) para $\lambda = 49\text{\AA}$, en esta curva vemos que hay un mínimo en $\frac{\omega}{\omega_r} \sim 1.00031$, tiende a un máximo a la izquierda de este mínimo y el máximo que presentan las curvas para λ más grande ha desaparecido. Por último, dibujamos el caso $\lambda = 0 \text{\AA}$ (-.-.-.-), en esta curva notamos un máximo no muy pronunciado alrededor de $\frac{\omega}{\omega_r} = 1.0001$, después un mínimo en $\frac{\omega}{\omega_r} \sim 1.0003$ a la derecha de los mínimos de las demás curvas. La curva con $\lambda = 0$ es el caso donde no se toma en cuenta la capa "muerta" para excitones. Podemos notar de las cinco curvas dibujadas que las curvas de R_p para $\frac{\omega}{\omega_r} \leq \frac{\omega}{\omega_r}^{\text{min}}$ están colocadas en forma ascendente (una por arriba de la otra) en la misma forma como disminuimos el valor de la capa "muerta". Lo contrario sucede en la región $1.00035 \leq \frac{\omega}{\omega_r}$, es decir, las curvas están colocadas una debajo de otra conforme disminuimos el valor de λ . Se puede "observar" de la figura que cuando $\lambda \rightarrow 0$ el máxi

mo (198, 148, 99Å) tiende a un mínimo.

En la Fig. 5.7 hemos dibujado R_p vs ω para el caso de Pekar en un ángulo de incidencia de la onda de $\theta = 45^\circ$. Hemos escogido cinco valores de λ (198Å ———, 148Å-.-., 99Å ---, 49Å..., 0Å-.-.-). De la figura vemos que las diferencias más grandes de R_p están entre $1.00025 \lesssim \frac{\omega}{\omega_r} \lesssim 1.0004$. Si $\lambda \neq 0$ el espectro tiene máximo.

La curva con $\lambda = 148\text{Å}$ tiene dos máximos, uno pequeño y otro grande. El máximo más pronunciado está en $\frac{\omega}{\omega_r} \sim 1.000325$ y la reflectividad es del orden del 65%. Hemos dibujado otro caso de R_p vs ω para las ABC de Pekar con cinco valores diferentes ---- de λ y $\theta = 85^\circ$ en la Fig. 5.8. Todas las curvas tienen un máximo del mismo orden y un mínimo a la misma frecuencia ($\frac{\omega}{\omega_r} \sim 1.0004$). Podemos "observar" que el mínimo es más profundo para el valor - de λ más grande y el menos profundo para $\lambda = 0\text{Å}$.

Dibujamos en la Fig. 5.9 otro caso de R_p vs ω pero ahora - con $U_1 = U_2 = 0$ que corresponde a las ABC de APW, en un ángulo - de incidencia de la onda de $\theta = 45^\circ$ y con cinco valores diferen- tes de (198Å-, 148Å-.-., 99Å---, 49Å..., 0Å -.-.-). Todas - las curvas tienen un máximo. Se puede "observar" que las cinco curvas en $\frac{\omega}{\omega_r} = 1$ tienen un máximo. Las curvas con $\lambda = 198\text{Å}$, 148Å y 99Å, tiene además otro máximo. El segundo máximo en los casos - con $\lambda = 198\text{Å}$ y 148Å es más pronunciado que el primero. El caso - con $\lambda = 99\text{Å}$ el primer máximo es más pronunciado que el segundo.

5.5 θ VARIABLE INDEPENDIENTE (barrido de ángulo)

λ PARAMETRO VARIABLE

Ahora tenemos el caso donde θ el ángulo de incidencia de la onda es variable independiente, λ el grueso de la capa "muerta" es el parámetro variable y consideremos a U_x , U_z y ω como constantes.

La Fig.5.10 nos muestra las curvas R_p vs θ . En esta figura hemos dibujado a R_p para las ABC de Pekar ($U_x = U_z = -1$), el valor de la frecuencia es $\frac{\omega}{\omega_r} = 1.000$. Escogimos cuatro valores de λ (198\AA —, 99\AA ---, 49\AA ..., 0\AA -.-.-). De la figura vemos que las curvas de R_p para $\theta \leq 70^\circ$ están colocadas en forma ascendente (una sobre otra) a medida que disminuimos el valor de λ . Todas las curvas para $\theta \leq 70^\circ$ decrecen monótonamente y para $70^\circ > \theta$ crecen monótonamente. Hay un punto de intersección de las curvas en $\theta \sim 72^\circ$.

En la Fig.5.11 hemos dibujado R_p vs θ para las ABC de Fuchs-Kliwer (FK), donde $U_x = 1$ y $U_z = -1$.

Hemos escogido cuatro valores de λ (198\AA —, 99\AA ---, 49\AA ..., 0\AA -.-.-) y la frecuencia tiene el siguiente valor $\frac{\omega}{\omega_r} = 1.000$. Todas las curvas decrecen y después crecen monótonamente. Hay un punto de interacción de las curvas en $\theta \sim 72^\circ$. Recordemos las comparaciones que se hicieron de las curvas con las diferentes ABC que el caso FK es donde los efectos no-locales son menos fuertes.

Como otro caso de interés tenemos en la Fig. 5.12 las curvas de R_ρ correspondientes al caso donde $U_x = U_z = 0$ (ABC de APW), el valor de la frecuencia es $\frac{\omega}{\omega_r} = 1.0002$. Las curvas para $\lambda = 198\text{\AA}$ (———) y $\lambda = 99\text{\AA}$ (---) son aproximadamente constantes para $\theta \leq 40^\circ$, después crecen monótonamente. Las curvas para $\lambda = 49\text{\AA}$ (.....) y $\lambda = 0\text{\AA}$ (-.-.-.-) decrecen monótonamente muy suavemente y después crecen monótonamente. También en esta figura podemos ver que las curvas se intersectan en $\theta \sim 72^\circ$. De las tres figuras que hemos descrito en esta sección debemos recordar que los casos de Pekar y APW (Figs. 5.10 y 5.12 respectivamente) son donde los efectos no-locales son más fuertes. En las tres figuras descritas aquí vemos que las curvas de R_ρ vs θ se intersectan en $\theta \sim 72^\circ$ sin depender de las ABC ni la frecuencia ω .

5.6 LAS ABC "SIN NOMBRE"

Hemos discutido tres casos particulares de las ABC generalizadas, ecuaciones (4.5), que corresponden a los siguientes valores de los parámetros: $U_x = U_z = -1$ ABC de Pekar, $U_x = 1, U_z = -1$ ABC de Fuchs-Kliwer y $U_x = U_z = 0$ de Agarwal-Pattanayak-Wolf. Existe otro caso particular, el cual está expuesto en las ecuaciones (4.11), que corresponden a las ABC de Rimbey-Mahan y son obtenidas de las ABC generalizadas haciendo $U_x = -1, U_z = 1$. Haciendo que los parámetros tomen los valores $U_x = U_z = 1$ en las ABC generalizadas se obtienen otras ABC las cuales no tienen nombre en la literatura. Estas ABC han sido consideradas anteriormente en la literatura y que nosotros al igual que en el

trabajo de Halevi y Fuchs¹⁸ tratamos el caso para comparar con los demás resultados.

De las comparaciones que hemos hecho, podemos decir que las ABC que tienen la misma V_x pero diferente V_z sus curvas R_p son bastante semejantes. Por ejemplo, de los casos que estudiamos, mencionamos como semejantes las ABC de Pekar y Rimbey-Mahan, y Fuchs-Kliewer y el caso "sin nombre". Esto indica que el efecto más importante de los efectos no-locales en semiconductores lo da el parámetro V_x .

En la figura 5.13 hemos dibujado R_p vs ω para las ABC de: Pekar (—), Rimbey-Mahan (...), Fuchs-Kliewer (---) y el caso sin nombre (-.-.-). En esta figura mostramos que hemos encontrado una región de frecuencias donde los casos Pekar y Rimbey-Mahan, Fuchs-Kliewer y el caso sin nombre tienen sus curvas una diferencia en los puntos donde suceden los mínimos. En esta figura puede notarse que el mínimo más profundo corresponde al caso sin nombre a una frecuencia $\frac{\omega}{\omega_r} = 1.000395$ y el menos profundo corresponde al caso de Fuchs-Kliewer, en $\frac{\omega}{\omega_r} = 1.000385$. La escala para el eje vertical es igual a la escala de las figuras anteriores. La escala horizontal se ha amplificado para hacer notar la diferencia de las curvas de R_p en esa región de frecuencias.

Por último tenemos en la figura 5.14 un dibujo donde mostramos el efecto cíclico de la reflectividad. Hemos escogido el caso de las ABC de Pekar puesto que sabemos que este efecto es independiente de los parámetros U_x y U_z . Este efecto depende del ángulo de fase que fue definido en el capítulo 4.

CAPITULO 6
CONCLUSIONES

En el presente trabajo hemos presentado una teoría de respuesta no-local. Hemos considerado que el excitón es dispersado por una barrera de potencial cercana a la superficie la cual impide a los excitones llegar a la superficie del medio material. A la región cercana a la superficie donde los excitones no existen se le conoce con el nombre de capa "muerta". Para representar la dispersión de los excitones por la barrera potencial hemos introducido unos parámetros fenomenológicos U_x y U_z . Al tomar en cuenta la respuesta no-local (introduciendo también los parámetros U_x y U_z) y de las ecuaciones de Maxwell hemos obtenido dos condiciones adicionales a la frontera (ABC) generalizadas. Hemos derivado fórmulas compactas para la impedancia de superficie Z_p y para la reflectividad de la luz R_p . Estas fórmulas dependen de los parámetros U_x y U_z .

Para valores particulares de los parámetros U_x y U_z obtenemos casos particulares de ABC tales como las de Pekar, Agarwal-Pattanayak-Wolf (APW), Fuchs-Kliewer (FK) y Rimbey Mahan.

Los parámetros U_x y U_z en general son complejos; es decir de la forma

$$U_x = U_x' + i U_x'' \quad , \quad U_z = U_z' + i U_z''$$

6.1 LOS PARAMETROS U_x Y U_z

Nosotros hemos considerado principalmente valores reales de los parámetros U_x y U_z . Hemos comparado curvas de R_p para diferentes ABC con el caso local. Las ABC que tomamos son: Pekar ($U_x = U_z = -1$), FK ($U_x = 1, U_z = -1$) y APW ($U_x = U_z = 0$). De los dibujos concluimos que: a) las tres curvas de R_p para las tres ABC diferentes consideradas son diferentes. b) Los efectos no-locales son más fuertes en el caso de las ABC de Pekar, los menos fuertes corresponden al caso de las ABC de FK y como caso intermedio está el caso de las ABC de APW. Hemos notado que la curva de R_p es más sensible al cambio de U_x que al cambio de valor de U_z . Esto indica que de las dos componentes de la polarización, la componente en la dirección x es la más importante y la componente en la dirección z es la menos importante (dirección perpendicular a la superficie del material). Las mismas conclusiones son válidas también en el caso sin capa "muerta".

6.2 EFECTO DE LA CAPA "MUERTA"

De las comparaciones que hemos hecho de la reflectividad para barrido de frecuencia y λ el parámetro variable podemos concluir que: el efecto de la capa "muerta" para excitones en la reflectividad es dar origen a picos.

En la figura 5.6 (caso de las ABC de Pekar) notamos que el pico está cercano a ω_1 . En la fig. 5.7 notamos también picos -- en R_p . En esta fig. puede notarse que cuando $\lambda = 148 \text{ \AA}$ el espectro presenta dos picos. Si el ángulo de incidencia crece, el pico -- cercano a ω_1 se desplaza hacia la derecha y para $\theta = 85^\circ$ el pico se convierte en mínimo, como se muestra en la fig. 5.8.

Para el caso de las ABC de APW, también aparece un pico en la reflectividad a frecuencias cercanas a ω_1 como efecto de la capa "muerta". Si el espesor crece el pico tiende a un máximo. La reflectividad en este caso (APW) tiene un máximo en $\frac{\omega}{\omega_1} = 1$ y -- cuando la capa "muerta" crece tiende a un pico a la misma frecuencia.

En el caso de las ABC de FK no aparece ningún pico en la reflectividad. En los tres casos de ABC considerados, la reflectividad decrece para $\frac{\omega}{\omega_1} < 1$ y crece para $\frac{\omega}{\omega_1} > 1.005$.

El efecto de la capa "muerta" en la reflectividad para barrido de ángulo es el de hacer que la reflectividad disminuya -- cuando su valor crece.

Los cambios en la reflectividad R_p cuando la frecuencia de colisiones γ cambia son principalmente en el pico cercano a ω_1 , si el valor de γ crece el pico tiende a desaparecer y cuando disminuye su valor, los picos se hacen más pronunciados. Los mínimos que aparecen a ángulos grandes ($\theta \sim 85^\circ$) se hacen menos pronunciados -- cuando γ crece y se hacen más pronunciados cuando γ decrece.

Se han publicado mediciones experimentales de la reflectividad en diversos materiales en la vecindad de transiciones excitónicas, como se muestra en la tabla 1. La resolución utilizada en estos experimentos es del orden de 10^{-4} - 10^{-5} eV. Esta precisión es la adecuada para verificar experimentalmente nuestros resultados.

En la comparación de los espectros de reflectividad teórico y experimental es posible obtener buena concordancia entre ellos si en el cálculo teórico se varían parámetros del material tales como la frecuencia de colisiones, el espesor de la capa "muerta", la constante dieléctrica del "fondo dieléctrico" u otros. Nuestro método sugiere que solo se varíen los parámetros U_x y U_z y el espesor de la capa "muerta".

Referencia	5	26	27	28	29	21	30	31	32	33	34		
Material	CdS ZnTe	CdS	CdS	CdS	CdS	CdS	CdS	CdSe	ZnO	ZnO	PbI ₂		
Excitón	A ₁ , B ₁ A ₂ , B ₂	A ₁	A ₁	A ₁ , B ₁	A ₁ , B ₁	A ₁							
Incidencia	N	S, P	N	N	N	N	P	N	N, P	N	N		
ABC Pekar	✓	✓	✓		✓	✓	✓		✓	✓	✓		
ABC F-K			✓										
ABC APW			✓								✓		
Capa "muerta"	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓		
R teórico	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓		
R Experimental	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓		
Conclusión	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11		

1. Los resultados concuerdan cualitativamente. 2. Buen acuerdo entre teoría y experimento. 3. Los resultados son mejores con las ABC de Pekar. 4. Buen acuerdo entre teoría y experimento. 5. Igual que en 4. 6. Las ABC de Pekar son las adecuadas. 7. No son muy parecidas las curvas. 8. La comparación cualitativa es buena. 9. Igual que en 8. Las formas de las líneas espectrales son semejantes. 11. Los resultados de la comparación son mejores para las ABC de Pekar.

Tabla 1. Resumen de trabajos publicados donde se trata a la capa "muerta" Teórica y Experimentalmente, tomando diferentes ABC., en los cálculos.

REFERENCIAS.

1. C.Kittel, Introduction to Solid State Physics, 5th Edition, John Wiley, (1976).
2. Frederick Wooten, Optical Properties of Solids, Academic Press (1972).
3. S.I.Pekar, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. 33, 1022 (1957).
(Translation: Soviet Phys. JETP 6, 785 (1958)).
4. S.I.Pekar, Fiz. Tverd. Tela 4, 1301 (1962).
(Translation: Soviet Phys. Solid State 4, 953 (1962)).
5. J.J.Hopfield and D.G.Thomas, Phys. Rev. 132, 563 (1963)).
6. A.A.Maradudin and D.L.Mills, Phys. Rev. B, 7, 2787 (1972).
7. B.Fischer and J.Lagois, Excitons, ed. K. Chō, Topic in Current Physics, Springer Verlag, Heidelberg, 1978.
8. B.Fischer and H.J.Queisser, Solid State Commun. 16, 1125 (1975).
9. A.Otto, Z.Phys. 216, 398 (1968).
10. G.S.Agarwal, D.N.Pattanayak and E.Wolf, Phys. Rev. B, 10, L447 (1974).
11. J.D. Jackson, Electrodinámica Clásica, John Wiley (1966).
12. Roland H.Good, Jr./Terence J.Nelson, Classical Theory of Electric and Magnetic Fields, Academic Press. Inc. (1974).
13. K.L.Kliewer and Ronald Fuchs, Phys. Rev. 172, 607 (1968).
14. G.E.H.Reuter and E.H.Sondheimer, Proc. Roy. Soc. (London) A195, 336 (1948).
15. R.B.Dingle, Physica 19, 311 (1953).
16. K.L.Kliewer and R.Fuchs, Phys. Rev. 153, 498 (1967).
17. J.Lagois and B.Fischer, Phys. Rev. Letters, 36, 680 (1976).
18. a) P.Halevi, R.Fuchs, Ints. Phys. Cont. Ser. 43, 863 (1979).
b) P.Halevi and R.Fuchs, a ser publicado.
19. B.F.Levine, R.C.Miller and W.A.Nordland Jr., Phys. Rev. B, 12, 4512 (1975).
20. D. D. Sell, S. E. Stokowski, R. Dingle and J. V. DiLorenzo Phys. Rev. B, 7, 4568 (1973).
21. F. Evangelisti, A. Frova, and F. Patella, Phys. Rev. B, 10, 4253 (1974).
22. R. B. Dingle, Physica 19, 311 (1953).
23. K. L. Kliewer and R. Fuchs, Phys. Rev. 153, 498 (1967).
24. D. C. Mattis and J. Bardeen, Phys. Rev. 111, 412(1958).
25. G. E. Hite, D. T. F. Marple, M. Aven, and B. Segall, Phys. Rev. 156, 850(1967)

26. I. Broser, Rosenzwieg, R. Broser, M. Richard, and E. Birkicht, phys. stat. sol. (b) 90, 77(1978).
27. F. Patella, F. Evangelisti, and M. Capizzi, Sol. stat. comm., 20, 23(1976).
28. U. Ratsch, phys. stat. sol. (b) 69, 459(1975).
29. G. V. Benemanskaya, B. V. Novikov, and A. E. Cherednichenko, Sov. Phys. Solid State, 19, 806(1977).
21. F. Evangelisti, A. Frova, and F. Patella, Phys rev. B, 10, 4253(1974).
31. S. A. Permogorov, V. V. Travnikov and A. V. Sel^{sk}kin, Soviet Phys. sol. stat. , 14, 3051(1973).
32. V. A. Kiselev, B. S. Rasbirin, and I. N. Uraltsev, phys. stat. sol. (b)72 , 161(1975).
33. K. Hümmer and P. Gebhardt, phys stat. sol. (b) 85, 271(1978).
34. J. Lagois and K. Hümmer, phys. stat. sol. (b) 72, 393(1975).

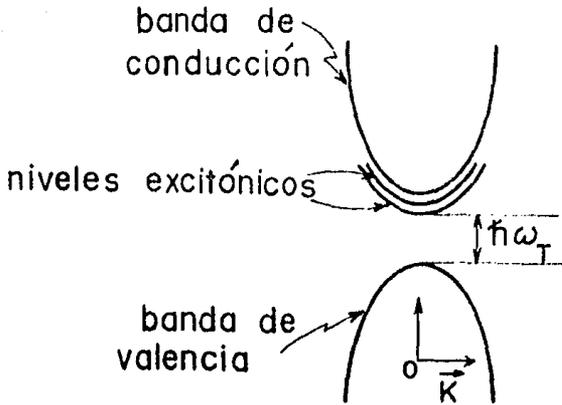


Fig. 1.1 Niveles excitónicos comparados con las bandas de conducción y de valencia.

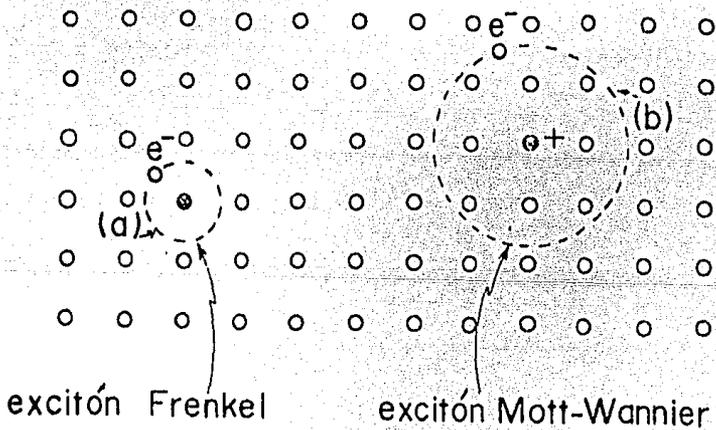


Fig. 1.2 Ilustración de los casos de excitones de radio pequeño (a) y radio grande (b).

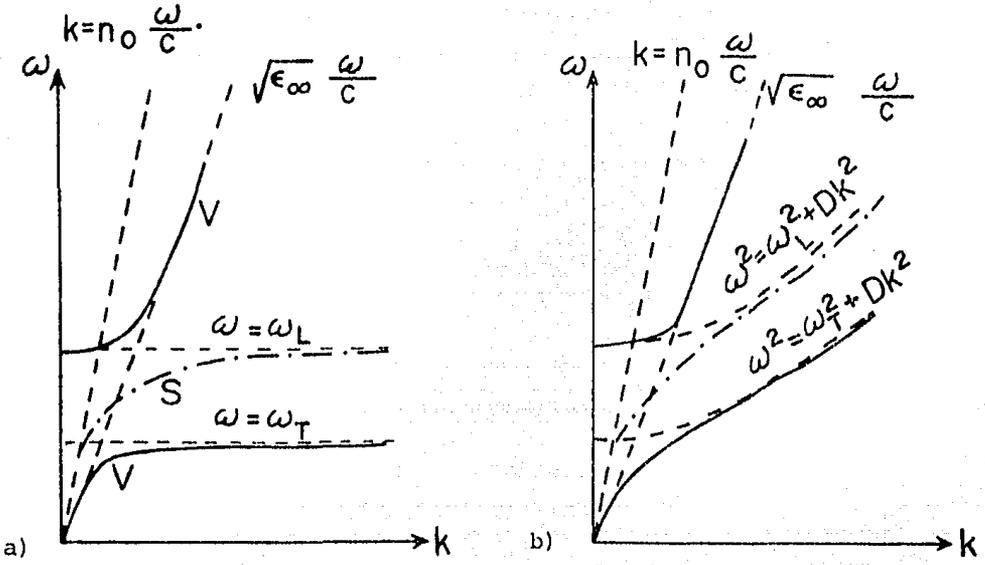


Fig. 1.3 Relaciones de dispersión para fonones a) y excitones b).

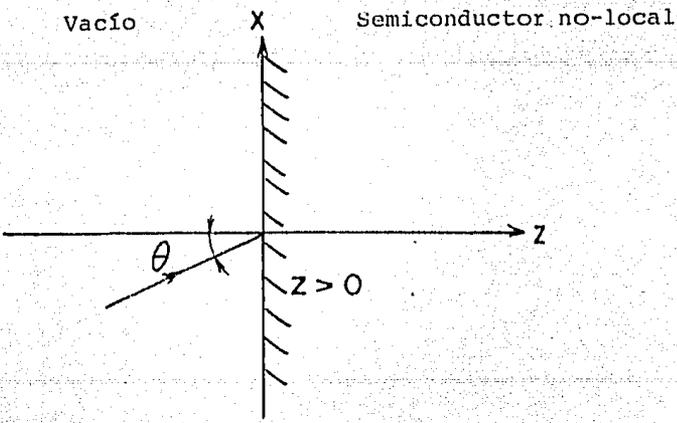


Fig. 2.1 Esta fig. muestra el sistema de coordenadas usado en la interfase vacío semiconductor.

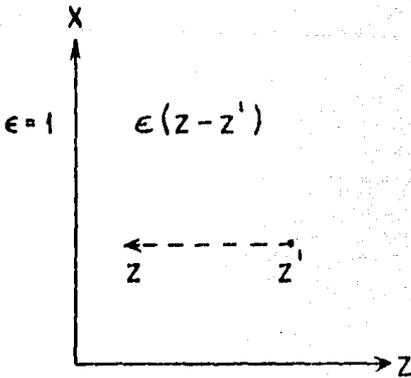


Fig. 3.2 Representa la respuesta directa no-local (en el volumen)

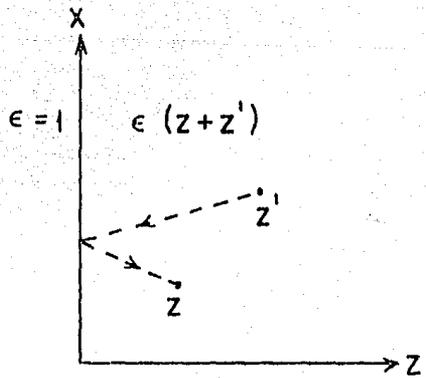


Fig. 3.3 Representa la respuesta no-local dispersada por la superficie.

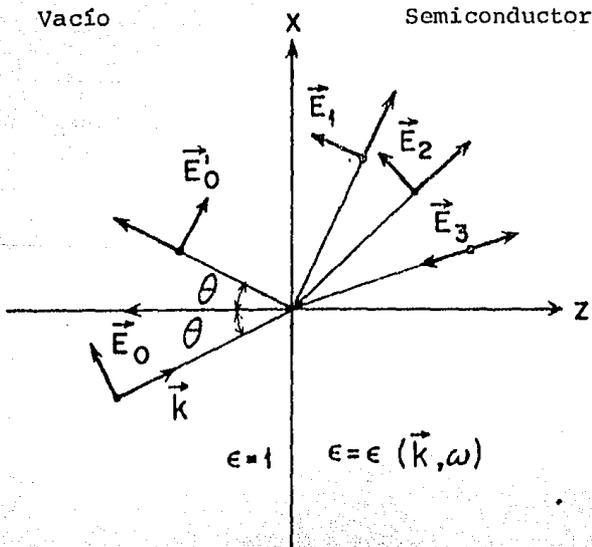


Fig. 3.4 Geometría de los campos para ondas incidentes en un medio no-local. Caso de polarización p

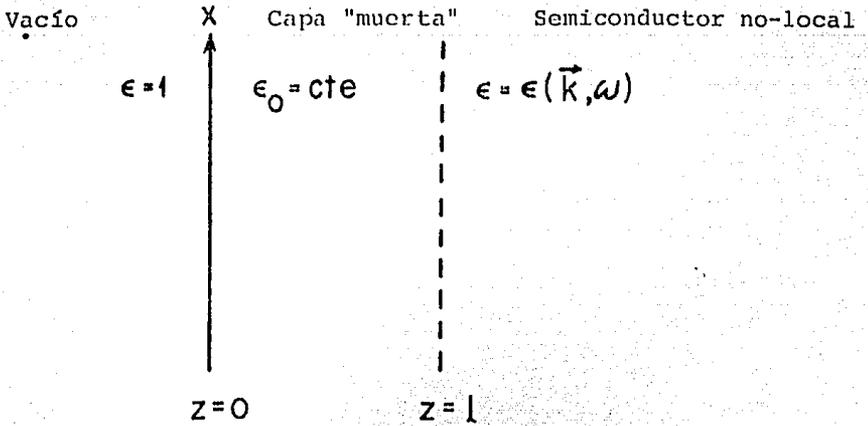


Fig. 4.1 Representa la capa "muerta" para excitones, de grueso λ

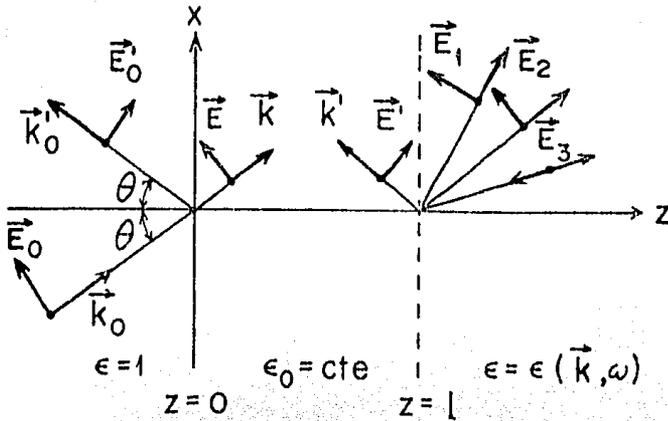


Fig. 4.2 Geometria de los campos en un medio no-local. Ondas de polarización p.

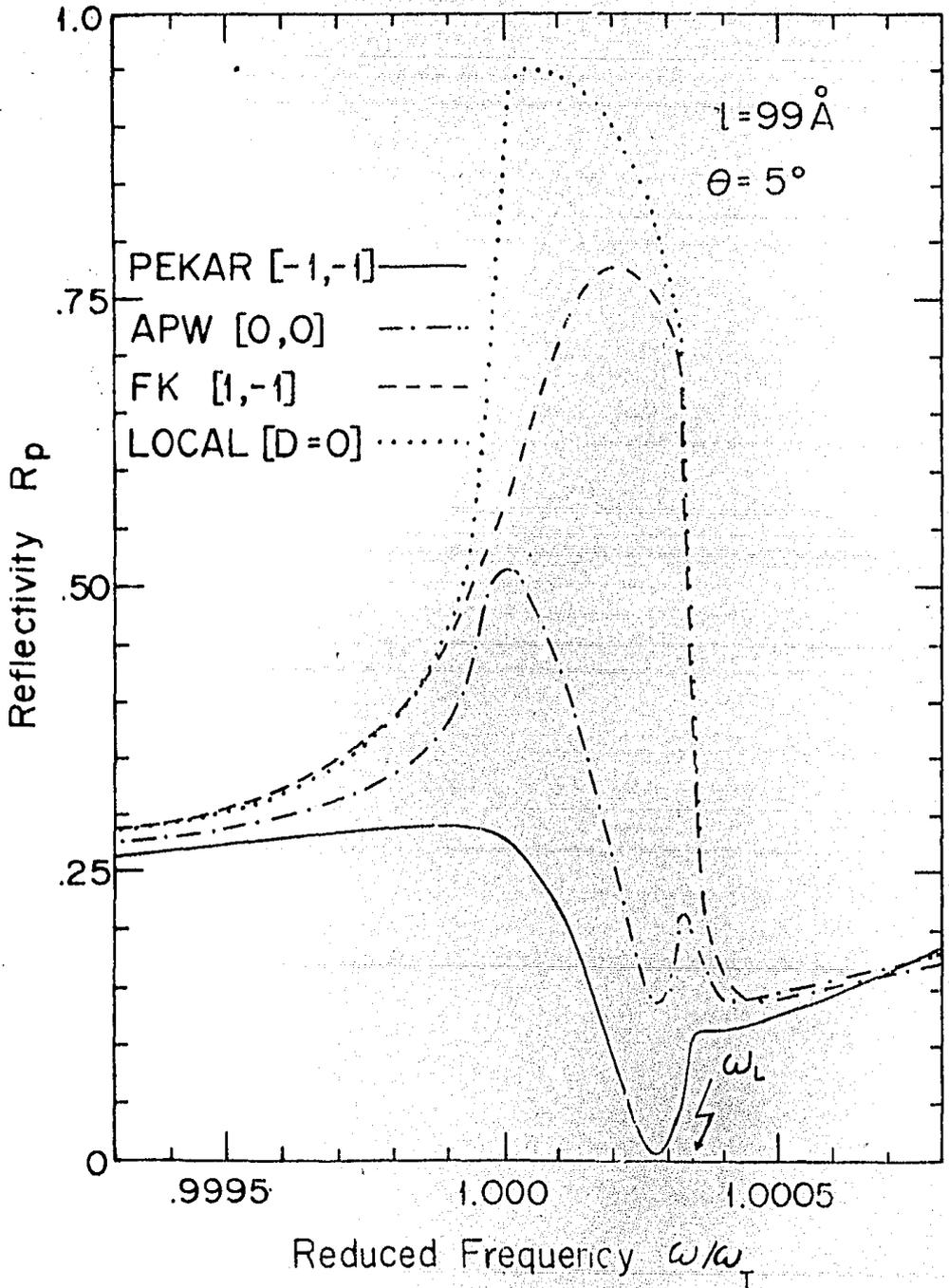


Fig. 5.1

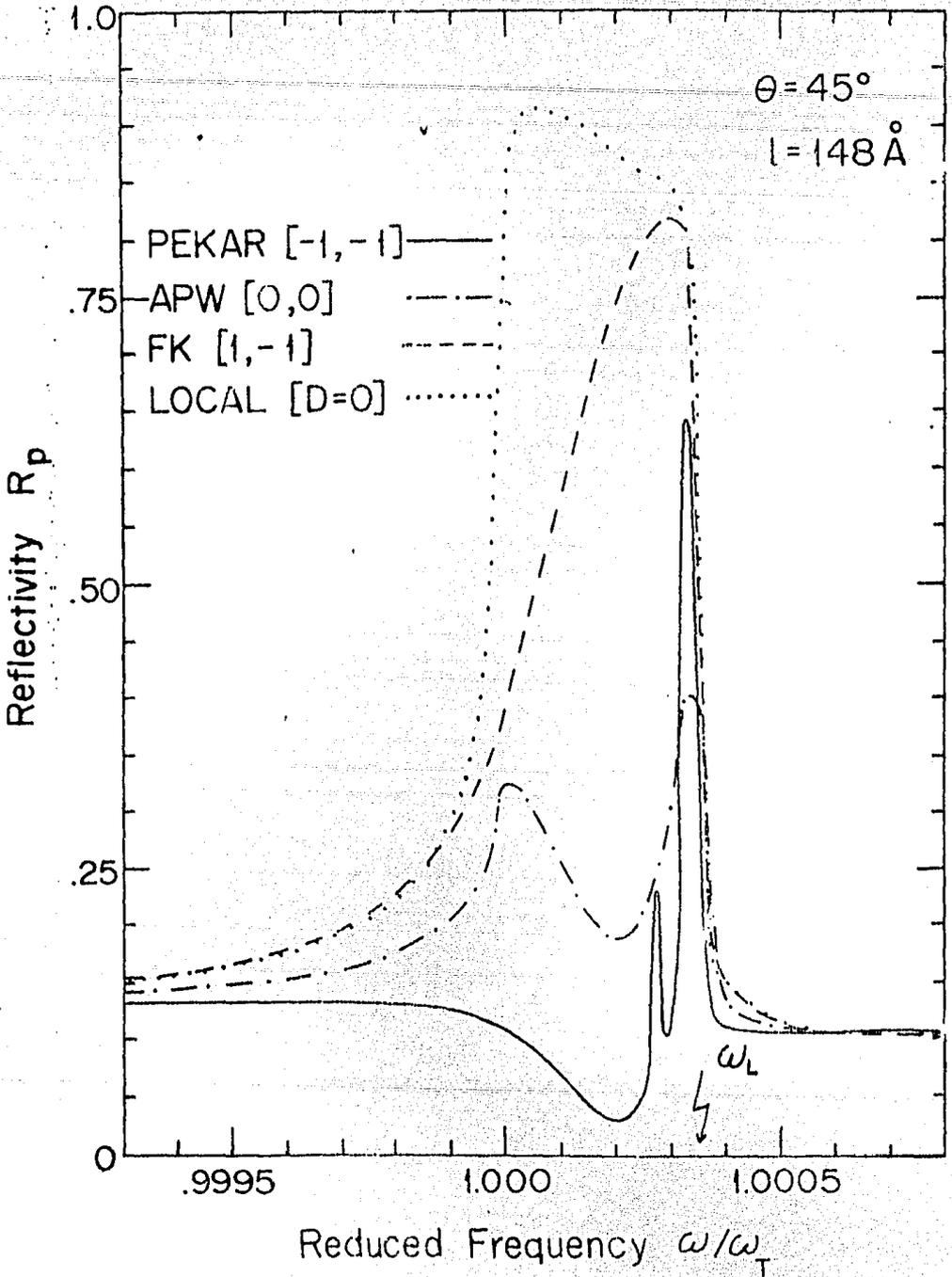


Fig. 5.2

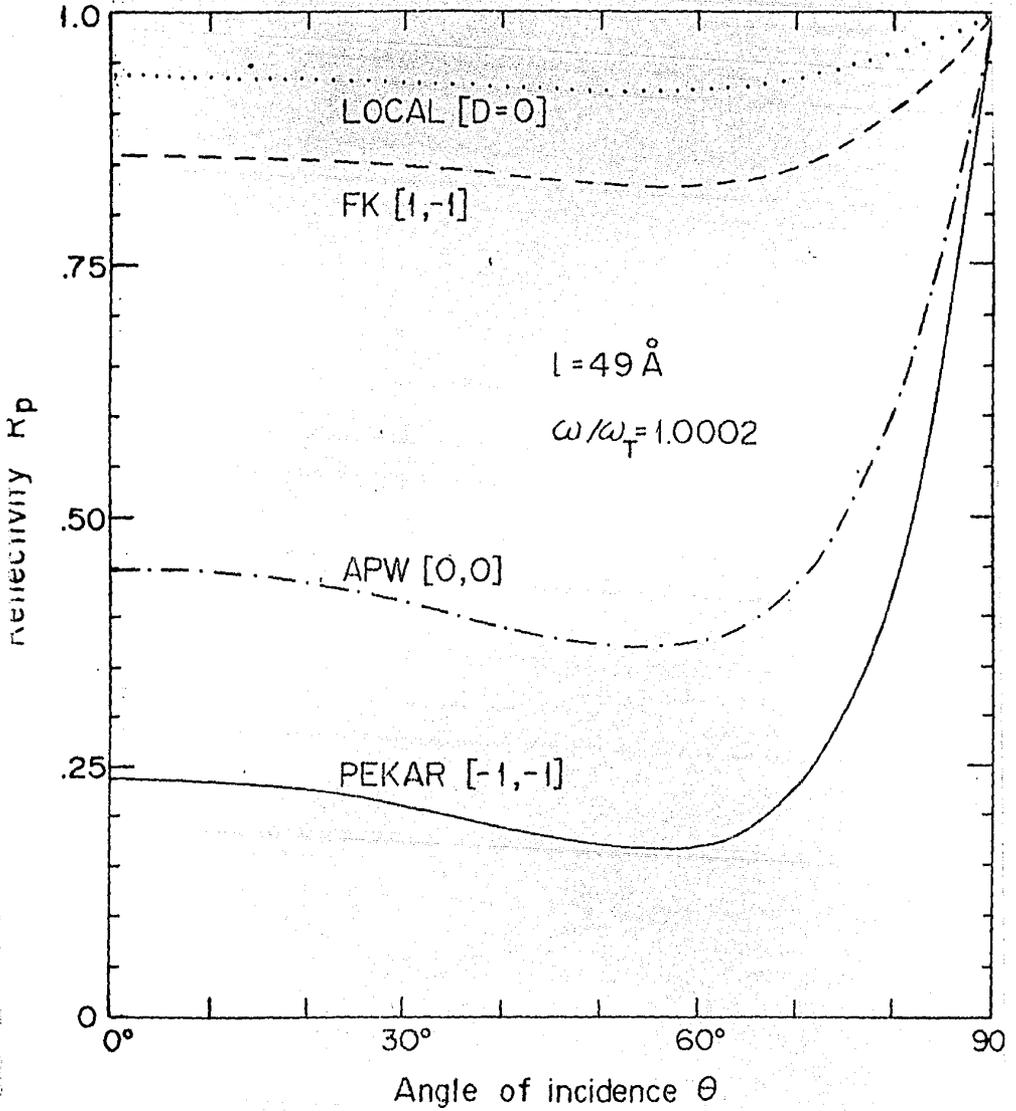


Fig. 5.3

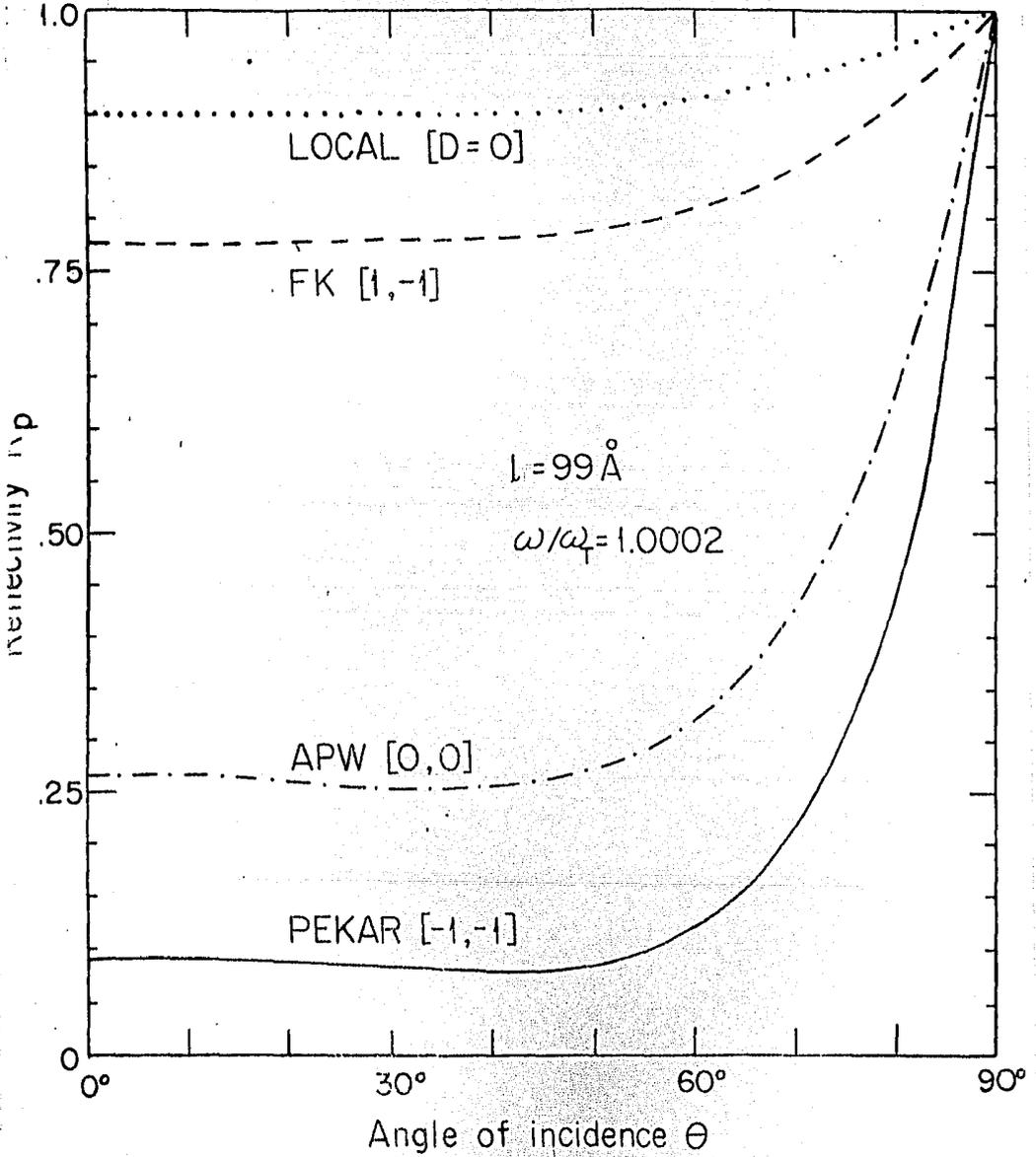


Fig. 5.4

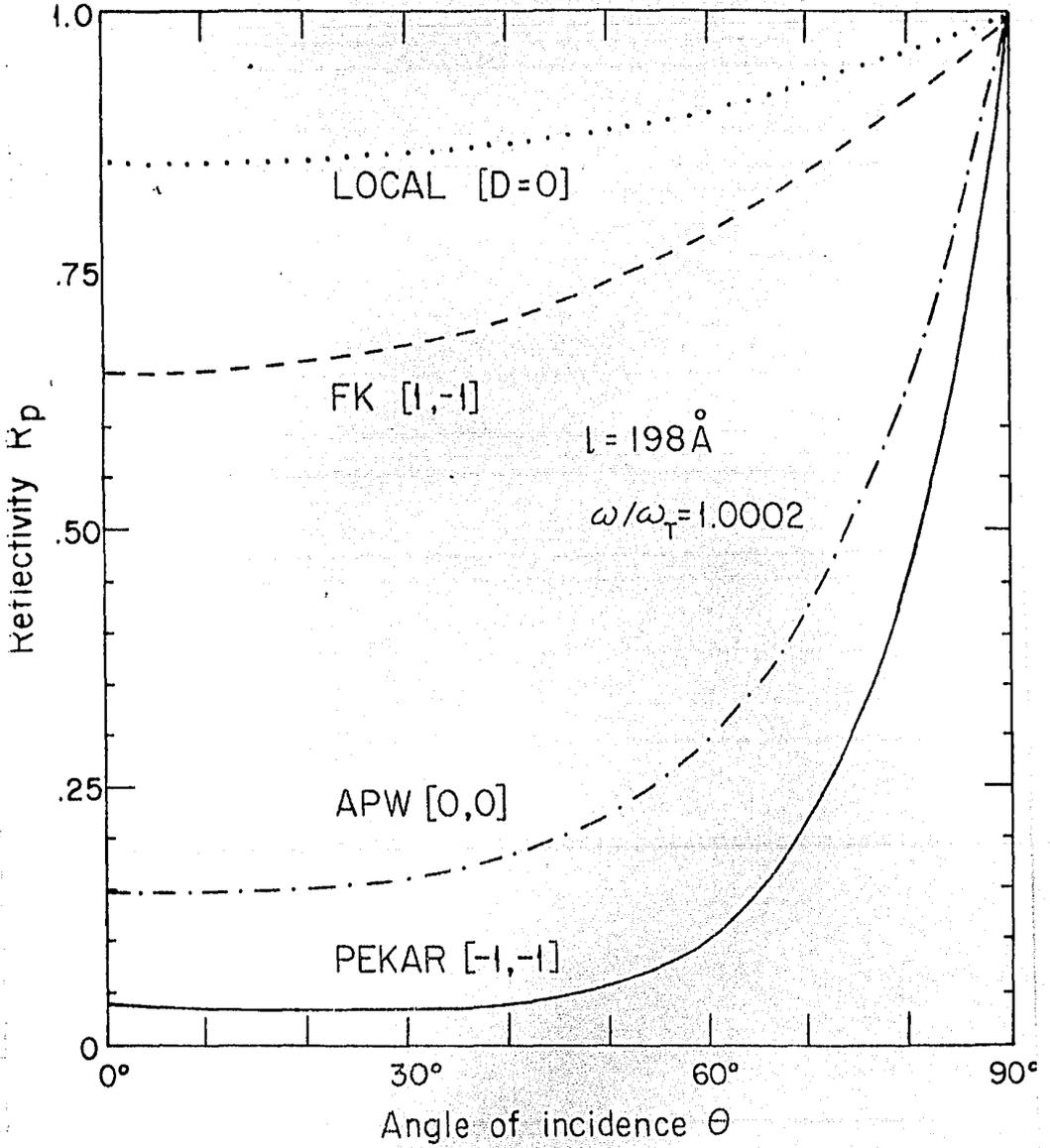


Fig. 5.5

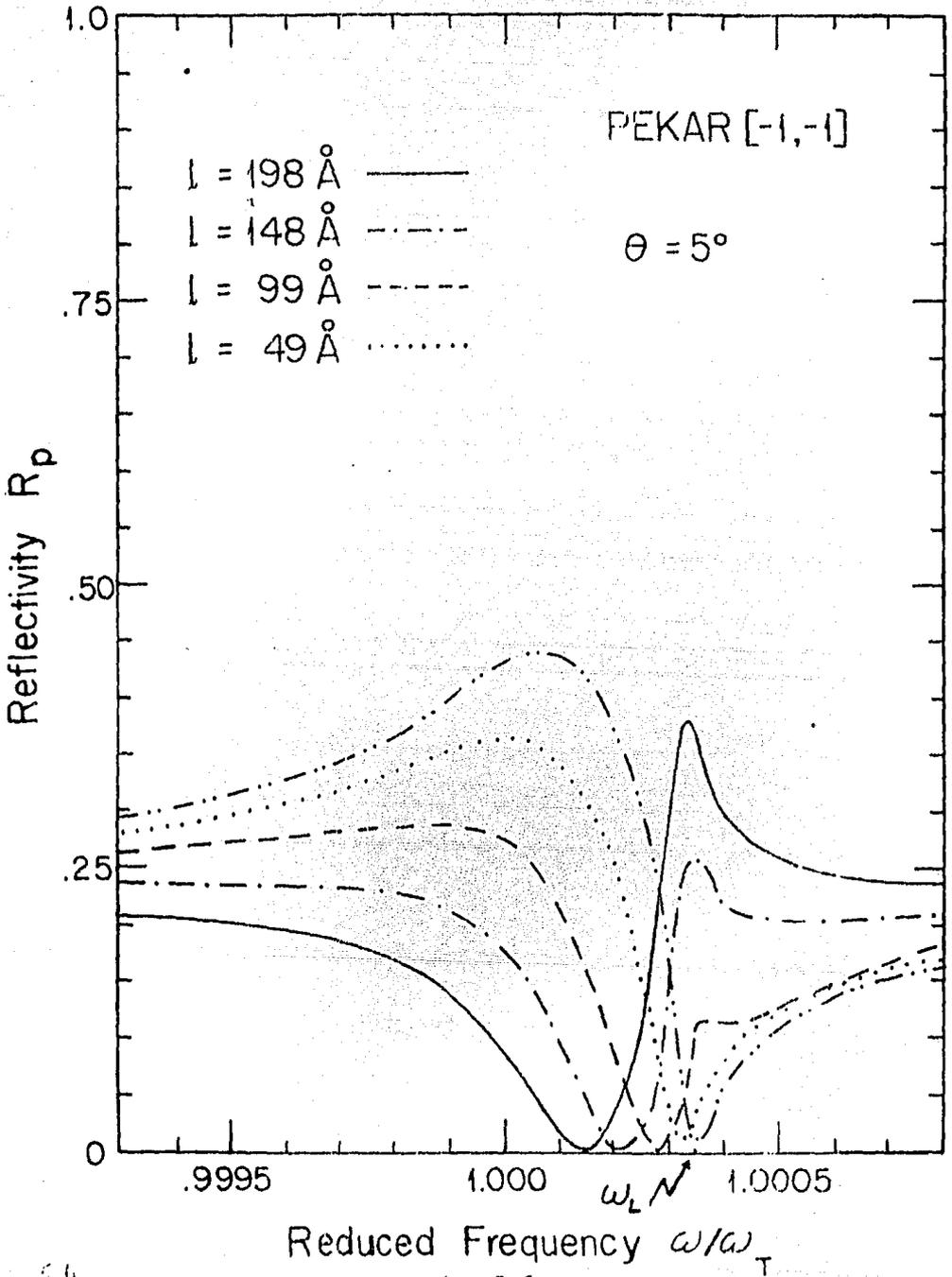


Fig. 5.6

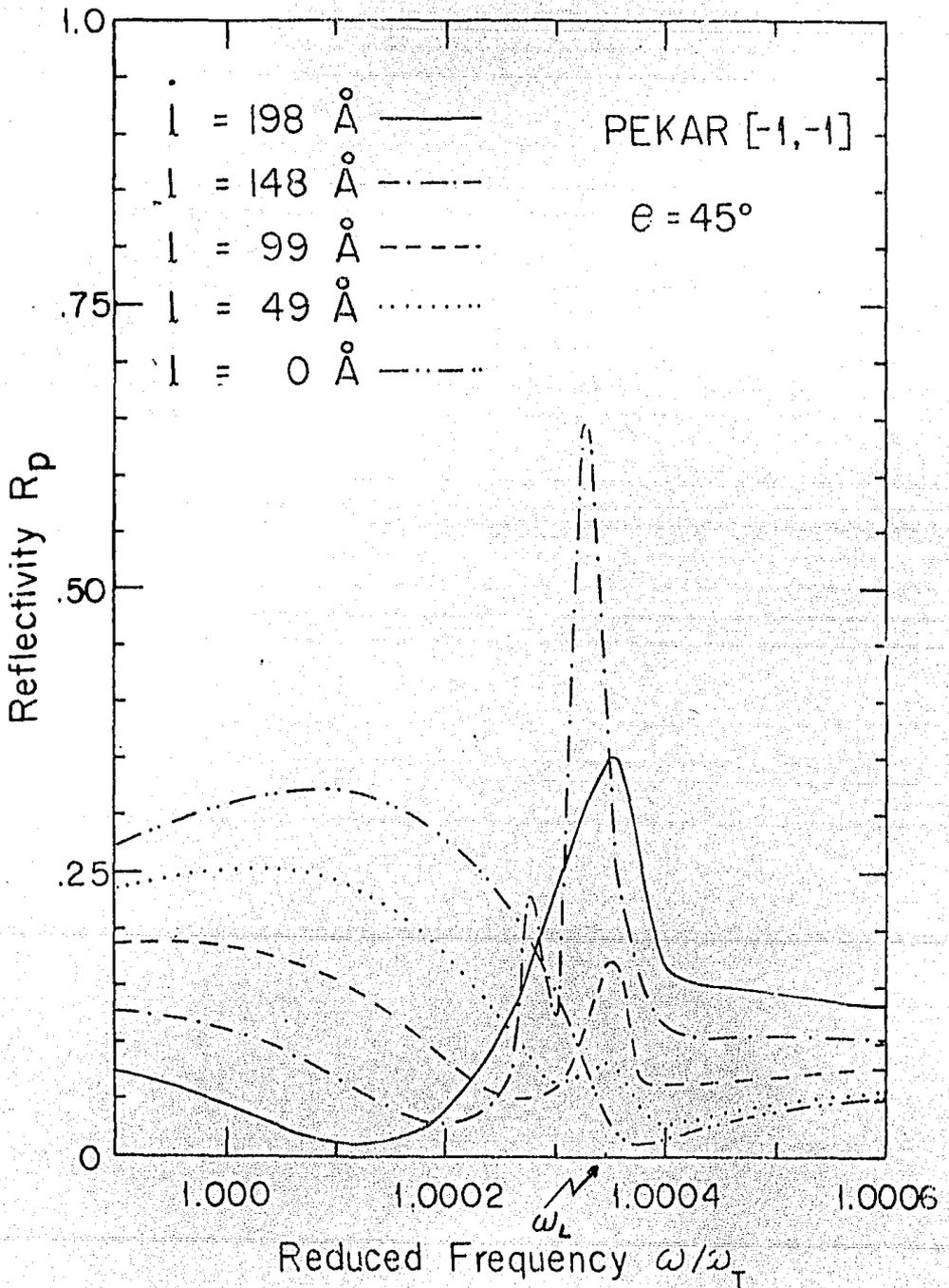


Fig. 5.7

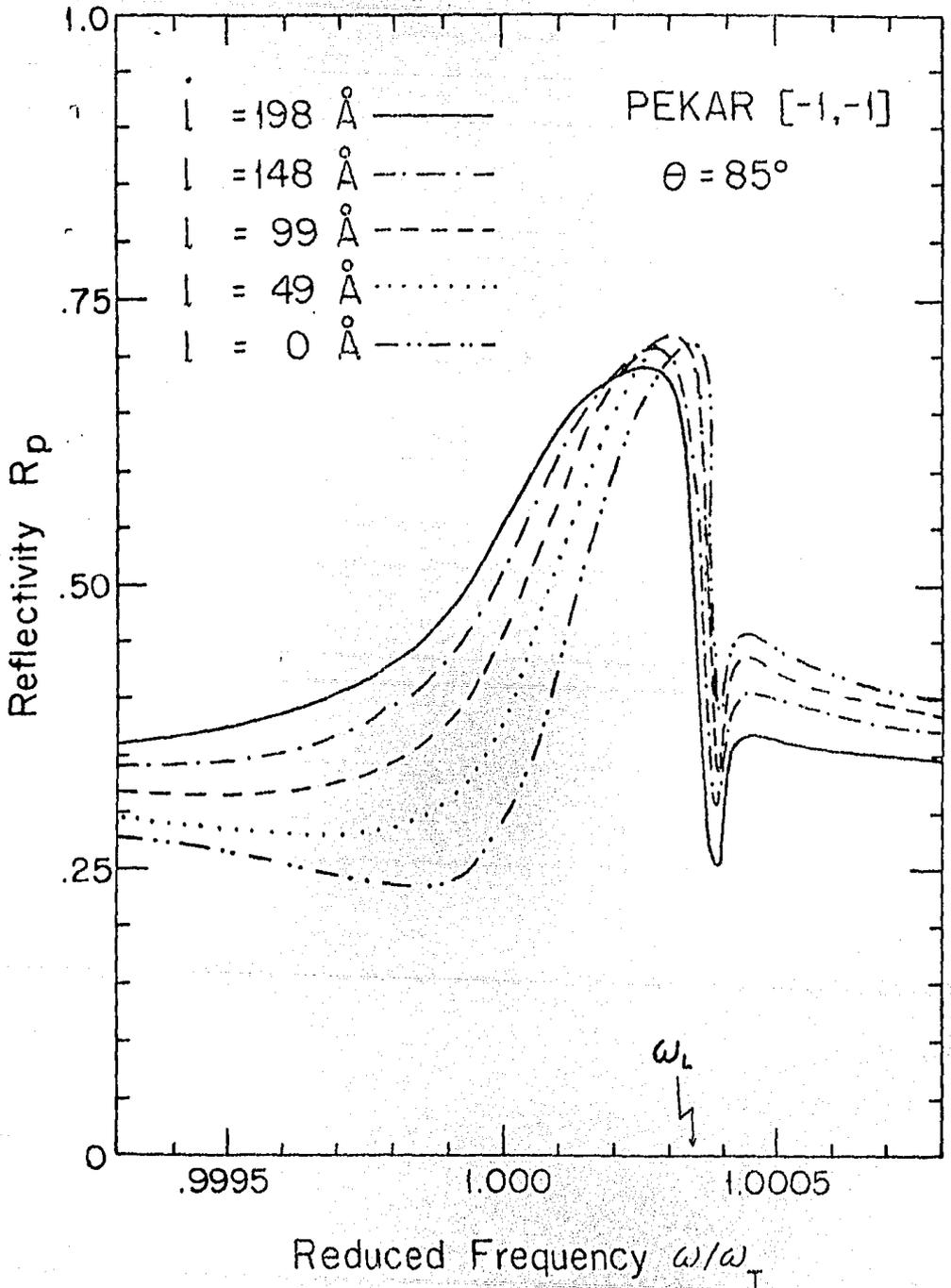


Fig. 5.8

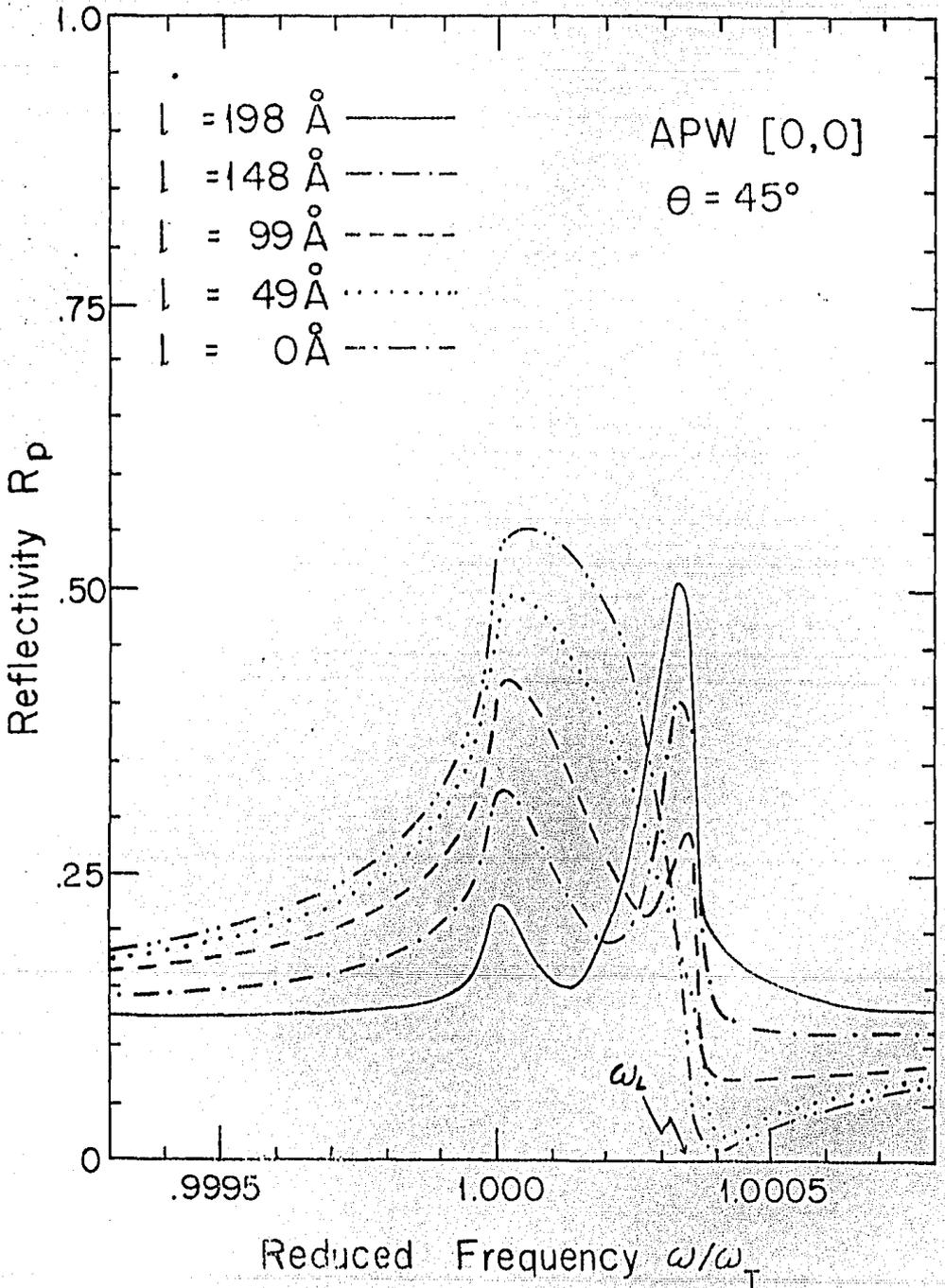


Fig. 5.9

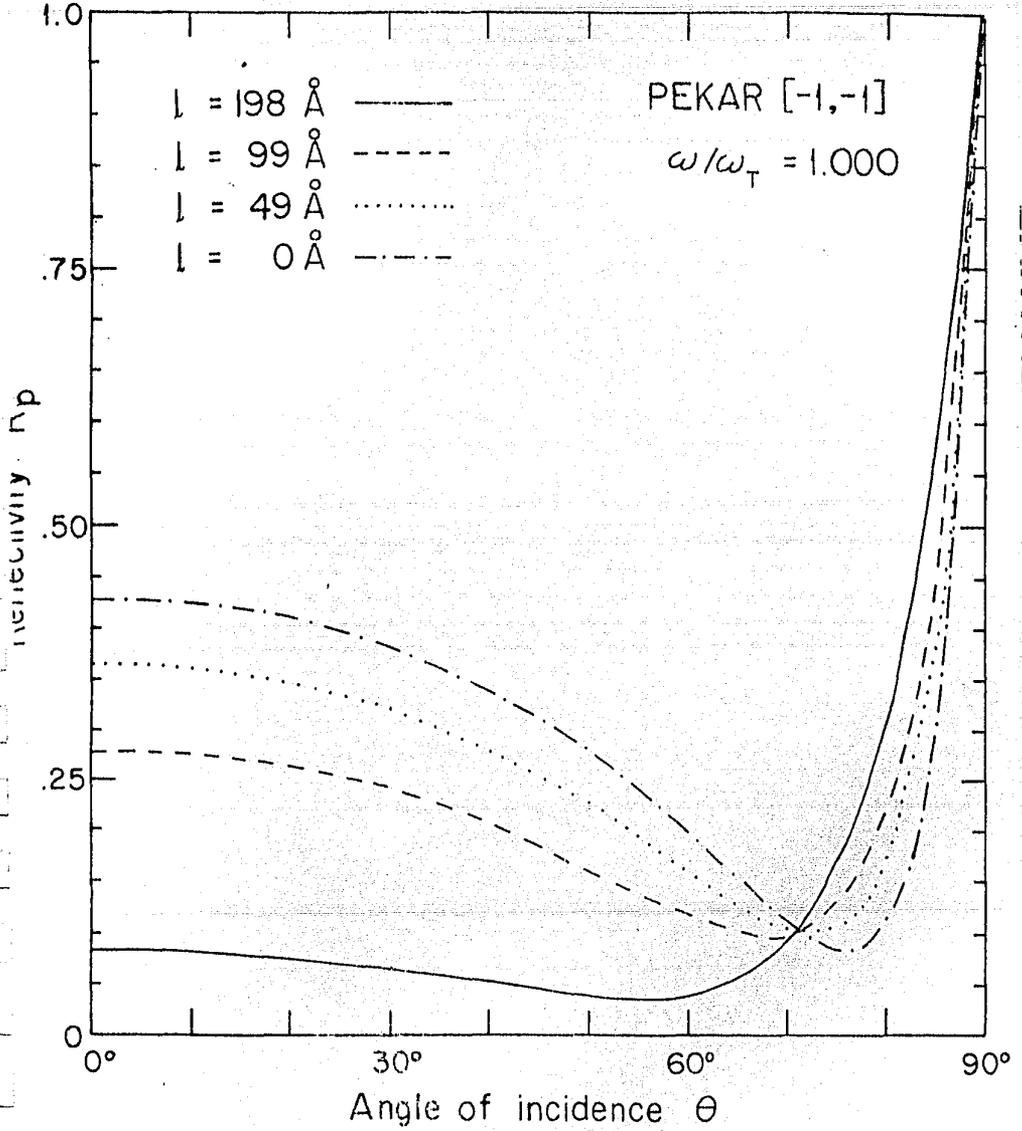


Fig. 5.10

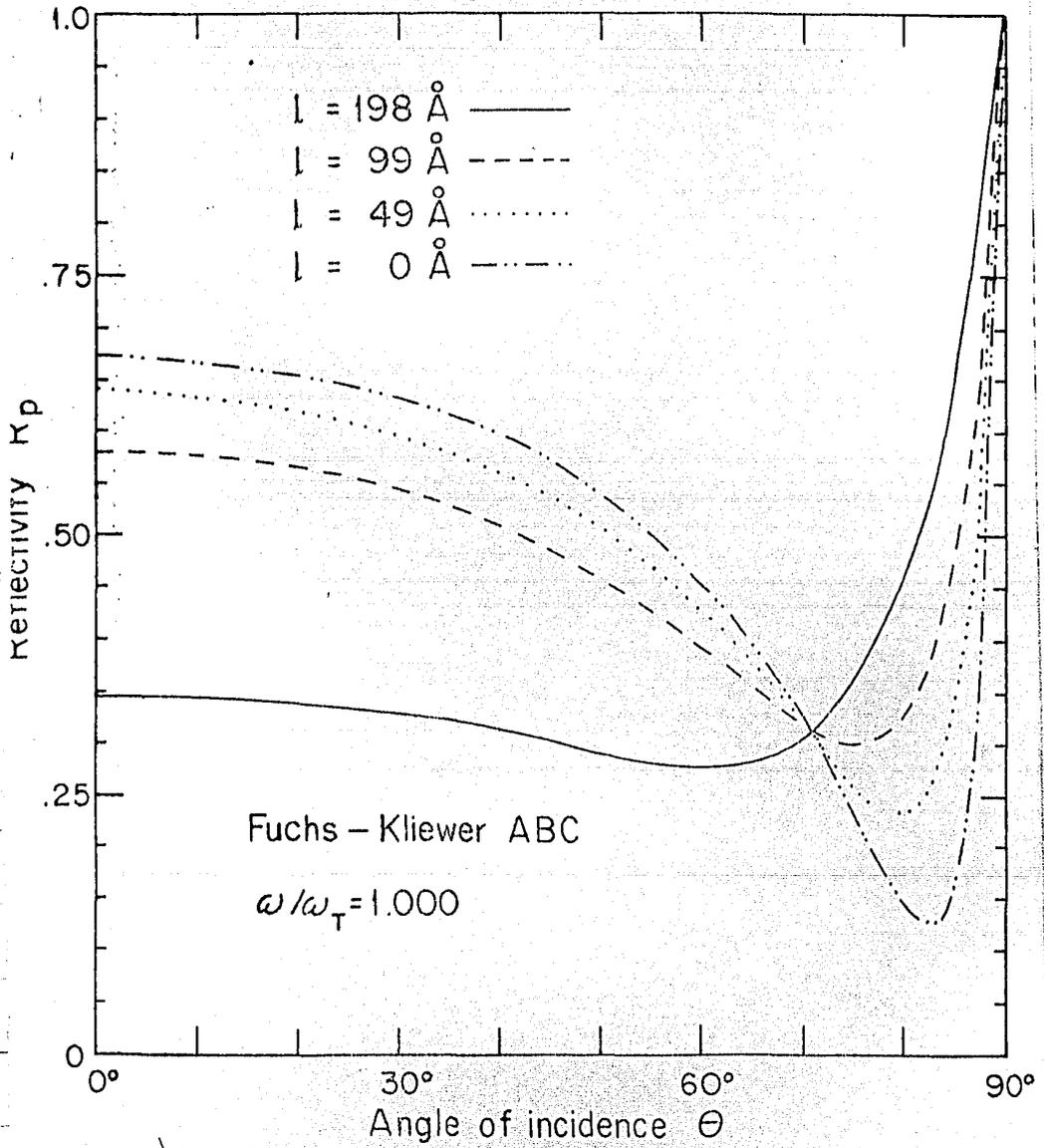


Fig. 5.11

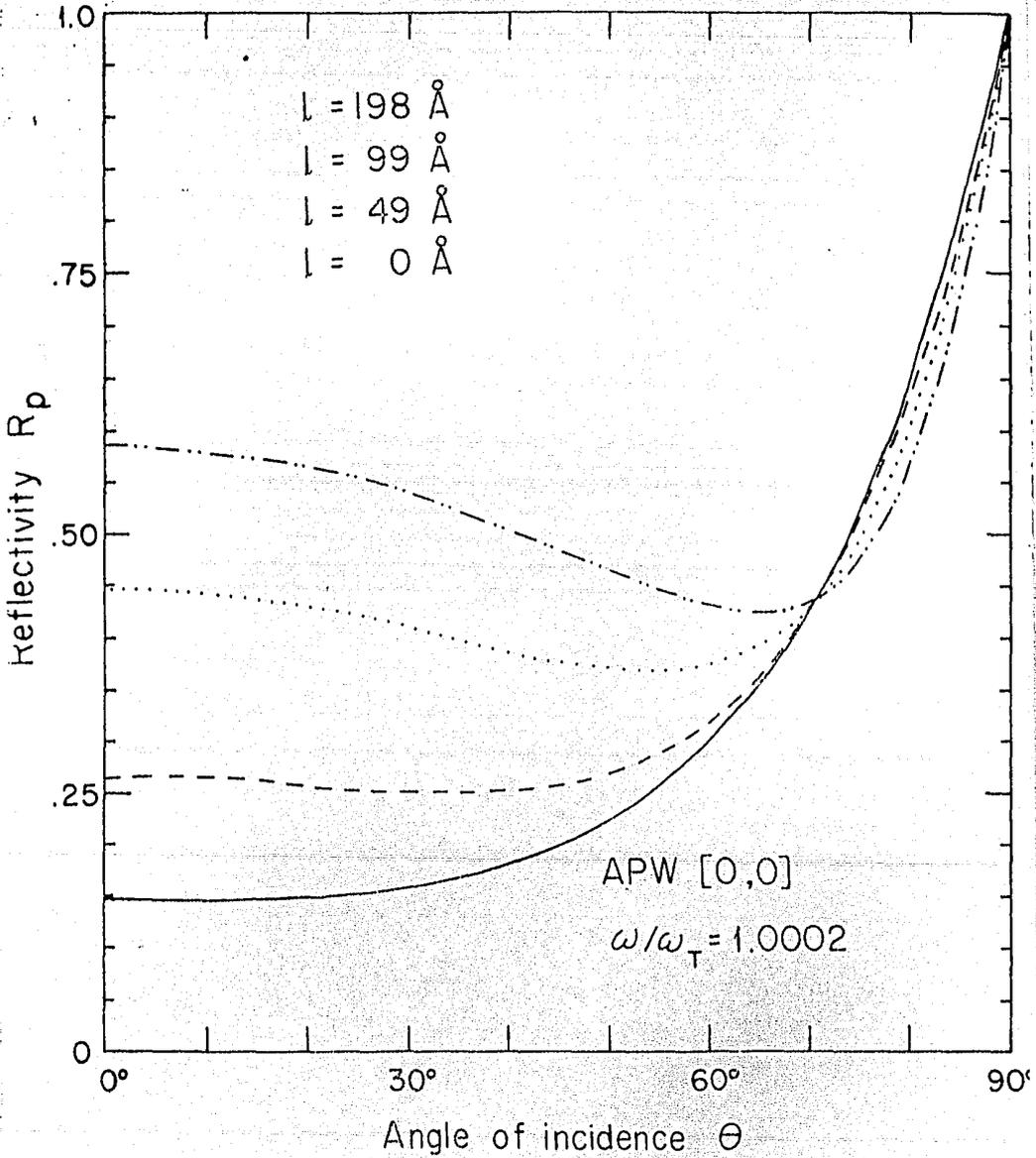


Fig. 5.12

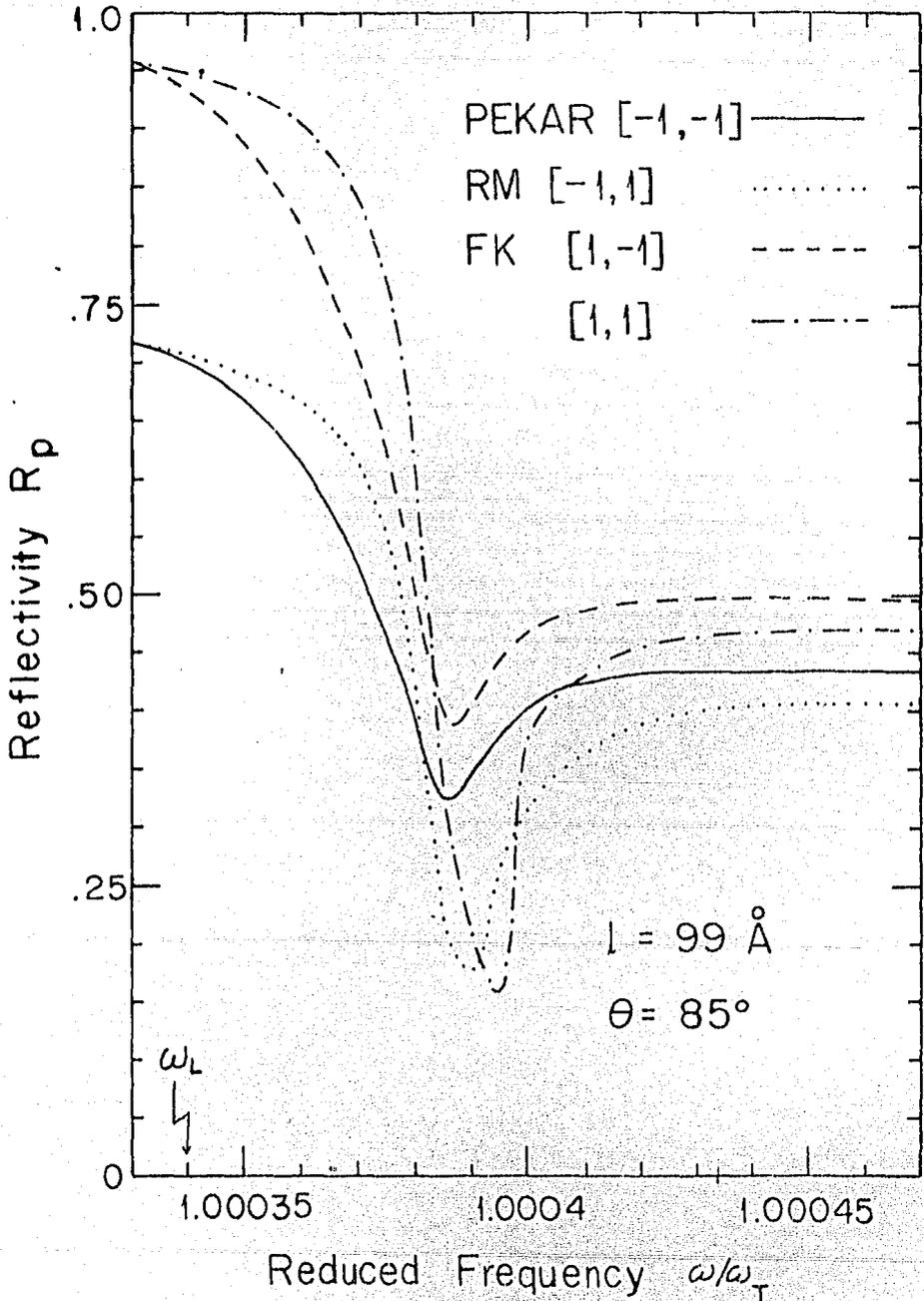


Fig. 5.13

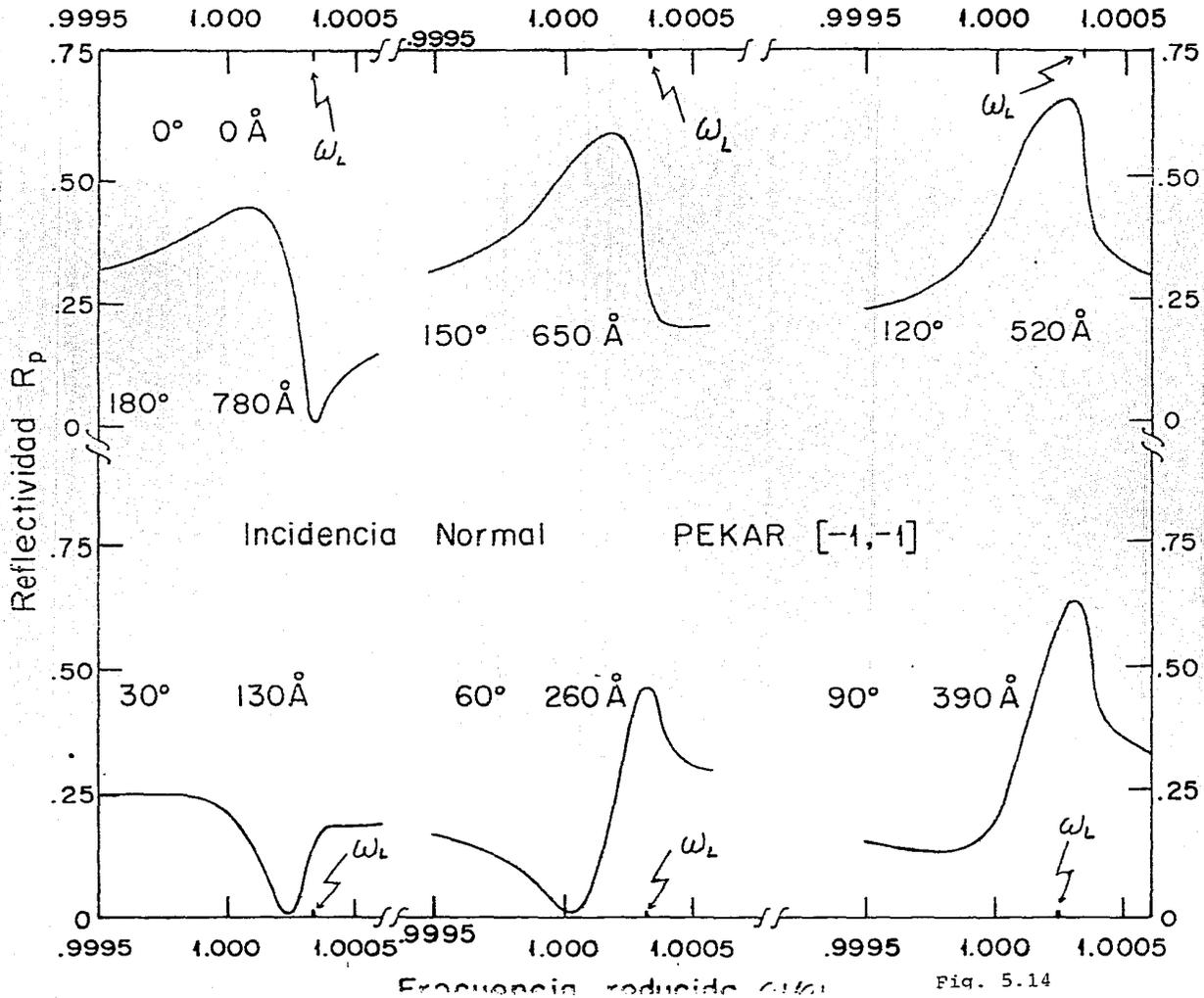


Fig. 5.14

H.1