



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA "LUIS RIVERA TERRAZAS"

**"EFECTOS CUÁNTICOS EN LA RESPUESTA
ÓPTICA DE NANOESTRUCTURAS DE METAL
NO LOCAL Y DIELECTRICO"**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

**DOCTOR EN CIENCIAS
(FÍSICA)**

PRESENTA:

M. EN C. SHUNASHI GUADALUPE CASTILLO LÓPEZ

ASESOR(ES):

**DR. FELIPE PÉREZ RODRÍGUEZ (IFUAP)
DR. NYKOLAY MAKAROV (ICUAP)**

No. de CVU: 558715

JUNIO DE 2019

Universidad Autónoma de Puebla
Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas”

**EFECTOS CUÁNTICOS EN LA RESPUESTA
ÓPTICA DE NANOESTRUCTURAS DE
METAL NO LOCAL Y DIELECTRICO**

Tesis presentada por

M. en C. Shunashi Guadalupe Castillo López

para obtener el grado de

**Doctor en Ciencias
(Física)**

Dirigida por

**Dr. Felipe Pérez Rodríguez (IFUAP)
Dr. Nykolay Makarov (ICUAP)**

Puebla, México
Junio 2019

©2019 - M. en C. Shunashi Guadalupe Castillo López

Derechos Reservados

Agradecimientos

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo económico otorgado para la realización de mis estudios doctorales, No. de CVU: 558715. A la Vicerrectoría de Investigación y Estudios de Posgrado de la BUAP por el apoyo económico otorgado a través del proyecto de investigación “Efectos cuánticos en la respuesta óptica de nanocapas de metal no local” (Clave: 100312733-VIEP2018). Al Instituto de Física “Ing. Luis Rivera Terrazas” de la BUAP por todas las facilidades brindadas durante mis estudios. A mis asesores: Dr. Felipe Pérez Rodríguez y Dr. Nykolay Makarov, gracias por las valiosas enseñanzas científicas y por su gran apoyo durante el desarrollo de esta tesis. Al Dr. Arkadii Krokhin por su hospitalidad durante mi estancia de investigación en la Universidad del Norte de Texas, y por sus valiosas contribuciones a este trabajo de tesis.

Agradezco a mis padres Argelia López Orozco y Víctor Manuel Castillo por enseñarme desde pequeña a alcanzar mis objetivos, y a mi hermana Dulce Natalia por despertar en mi el gusto por la ciencia. A Abraham Noé Ponce H. por motivarme siempre a cumplir mis metas. A mi maestro y amigo el Dr. Raúl A. Brito Orta por todas las horas que dedicó mostrándome lo maravilloso que es la física, muchas gracias por su gran paciencia.

Y por todas las bendiciones en mi vida, agradezco a Dios.

*Dedicado a ...
mi padre, Víctor Manuel Castillo†.*

Efectos Cuánticos en la Respuesta Óptica de Nanoestructuras de Metal No Local y Dieléctrico

Resumen

En este trabajo presentamos un estudio teórico del transporte electromagnético a través de una nanoestructura de dieléctrico y metal con capas metálicas ultra delgadas, cuando la cuantización del movimiento electrónico y su contribución no local a la conductividad eléctrica, juegan un papel determinante. En la región de los THz y a una temperatura relativamente baja, estas condiciones pueden ser alcanzadas cuando el grosor de la película metálica es del orden de la profundidad de penetración del campo electromagnético, y la película se vuelve parcialmente transparente. Con la finalidad de describir la respuesta electromagnética de las capas metálicas ultra delgadas que conforman el arreglo regular, hemos derivado expresiones analíticas para la densidad de corriente no local cuántica de los electrones de conducción dentro de una película metálica aplicando el formalismo de Kubo. Usando este resultado, calculamos analíticamente el campo electromagnético dentro de la película metálica expresándolo como una superposición de modos electromagnéticos discretos. Para estudiar la respuesta externa obtenemos las expresiones generales para las impedancias superficiales de ambas fronteras de la película metálica que determinaran por completo la transmisión y absorción de energía electromagnética. Encontramos que la dependencia en la frecuencia de las impedancias superficiales cuánticas presenta resonancias claramente pronunciadas, cuyo origen es consecuencia de la discretización de los números de onda electrónico y electromagnético dentro de la película metálica nano-delgada, y está directamente relacionado con el efecto del amortiguamiento de Landau en el régimen cuántico. Estas resonancias cuánticas no locales están bien definidas cuando el grosor de la película metálica es menor que la profundidad de penetración del campo eléctrico. Nuestra teoría demuestra la dinámica de transición al régimen del amortiguamiento de Landau clásico predicho por el enfoque de la ecuación cinética de Boltzmann, cuando el grosor de la película metálica es varias veces mayor que la profundidad de penetración del campo; y conduce al régimen local clásico descrito por el modelo de Drude-Lorentz al despreciar los efectos de la dispersión espacial.

Cuando las películas metálicas ultra delgadas son parte de una superred dieléctrico-metal, surgen otras resonancias dentro de las placas dieléctricas, conocidas como resonancias

de Fabry-Perot. Gracias a estas resonancias, el espectro de transmisión de la superred está caracterizado por bandas de paso relativamente estrechas. Nuestros resultados muestran que la relación de dispersión de los modos fotónicos se modifica sustancialmente en las regiones donde la frecuencia de una transición electrónica cuántica, causando el amortiguamiento de Landau cuántico, se encuentra cerca de una resonancia de Fabry-Perot del dieléctrico. Específicamente, el cruce evitado de la resonancia cuántica del amortiguamiento de Landau y la banda de paso fotónica asociada a una resonancia de Fabry-Perot, da lugar a la formación de nuevas brechas prohibidas y/o bandas de paso cuánticas dependiendo de la posición relativa de estas dos resonancias. El mecanismo para la formación de estas nuevas brechas prohibidas difiere del convencional provocado por las reflexiones de Bragg sobre un conjunto periódico de dispersores. El mecanismo que evita la propagación de los modos fotónicos dentro de estas nuevas brechas prohibidas es la absorción sin colisiones de energía electromagnética debido a la transición entre dos estados electrónicos cuantizados, es decir, el amortiguamiento de Landau cuántico. Dentro de las nuevas brechas prohibidas cuánticas, a diferencia de las brechas producidas por reflexiones de Bragg, la densidad de estados fotónicos es distinta de cero. Estos modos “oscuros” existentes dentro de estas brechas prohibidas exhiben dispersión anómala y disipación fuerte. La disipación de los modos fotónicos es causada por la cuantización del amortiguamiento de Landau y se mantiene finita inclusive en el límite de colisiones electrónicas bajas. Nuestros resultados obtenidos dentro del Formalismo de Kubo son cualitativamente distintos a los predichos por el modelo clásico local de Drude-Lorentz.

Quantum Effects on the Optical Response of Nonlocal Metal and Dielectric Nanostructures

Abstract

In this work we present a theoretical study of electromagnetic transport through dielectric-metal nanostructure with ultra-thin metal films, when size quantization of electron motion and their nonlocal contribution to conductivity play an essential role. Within THz region and at relatively low temperature such conditions are realized when the thickness of metal layers is comparable to the skin-depth and metal film becomes partially transparent. In order to describe the electromagnetic response of ultra-thin metallic layers that composed the regular bilayer array, we have derived general analytical expressions for the quantum nonlocal electron current density in a metallic nanoslab within the Kubo's linear response formalism. Using this result, we have analytically calculated the electromagnetic field distribution inside the metal nanoslab by expressing it as a superposition of discrete electromagnetic modes. To study the external response, we have obtained general explicit expressions for the surface impedances of both metal slab boundaries that completely determine the photonic transmission and absorption. It was found that the frequency dependence of the surface impedances has clearly pronounced resonances, whose origin is due to the discretization of the electromagnetic and electron wave numbers inside the nanoslab and is directly related to the effect of the collisionless Landau damping in the quantum regime. Such quantum nonlocal resonances are well-resolved when the thickness of the metal nanoslab is smaller than the electromagnetic skin depth. Our theory demonstrates the transition dynamics to the classical Landau damping regime predicted by the Boltzmann kinetic equation approach, when the metal slab thickness is greater than the skin depth, and leads to the classical local regime described by the Drude-Lorentz model, when the spatial dispersion effects are neglected.

When metal films are arranged in a metal-dielectric superlattice, one more resonance emerges in dielectric spacers between neighboring metal films, the so-called Fabry-Perot resonance. Due to this resonance relatively narrow pass bands exist in the transmission spectrum of a superlattice. Our results show that there is an essential difference in the regions where the frequency of an electron quantum transition, causing the quantum Landau damping, is found closely to electromagnetic Fabry-Perot resonance associated with the

dielectric layers. Specifically, avoided crossing of the quantum Landau resonance with the Fabry-Perot photonic pass band spectrum gives rise to new gaps and/or new pass bands, depending on the relative position of these two resonances. The mechanism of formation of the new gaps is qualitatively different from the conventional Bragg reflection by a set of periodic scatterers. The mechanism which prevents wave propagation in the new gaps is the collisionless absorption of electromagnetic energy due to transitions between size-quantized electron states, i.e., quantum Landau damping. In contrast to the Bragg-reflection mechanism, the new one does not require zero density of photonic states inside the gaps. Such “dark” photonic states populating the new band gaps exhibit strongly anomalous dispersion and strong decay. The decay is due to the quantized Landau damping and it remains finite even in the collisionless limit. Our theoretical results calculated within the Kubo formalism are qualitatively different from those obtained within the classical-local Drude-Lorentz model.

Publicaciones

- S. G. Castillo-López, N. M. Makarov, and F. Pérez-Rodríguez, “Quantum resonances of Landau damping in the electromagnetic response of metallic nanoslabs”, *Optics Letters*, 43, 2410-2413 (2018).
- S. G. Castillo-López, F. Pérez-Rodríguez, and N. M. Makarov, “Quantum discretization of Landau damping”, *Low Temperature Physics*, 44, 1606-1617 (2018).
- S. G. Castillo-López, A. A. Krokhin, N. M. Makarov, and F. Pérez-Rodríguez, “Electrodynamics of superlattices with ultra-thin metal layers: Quantum Landau damping and band gaps with nonzero density of states”, *Optical Materials Express*, 9, No. 2, 673-686 (2019).

Participación en eventos

- Efectos cuánticos en la respuesta óptica de películas metálicas no locales en el infrarrojo, S. G. Castillo-López, N. Makarov, F. Pérez-Rodríguez, XI Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular, Cuernavaca, Mor., México (2017).
- Quantum infrared response of a nonlocal metal film, S. G. Castillo-López, Canadian-American-Mexican Graduate Student Physics Conference, Washington, D.C., USA (2017).
- Respuesta cuántica no local de películas metálicas en el infrarrojo, S. G. Castillo-López, N. Makarov, F. Pérez-Rodríguez, LX Congreso Nacional de Física, Monterrey, N.L., México (2017).
- Quantum nonlocal effects on the THz absorption in metallic films, Shunashi G. Castillo-López, Felipe Pérez-Rodríguez, and Nykolay Makarov, March Meeting, Los Angeles, CA, USA (2018).
- Quantum Landau damping in metals, F. Pérez Rodríguez, S. G. Castillo-López, N. M. Makarov, 11th International Conference of Electrical, Transport, and Optical Properties on Inhomogeneous Media, Cracovia, Polonia (2018).

- Respuesta cuántica no local de nanoestructuras multicapa de metal y dieléctrico, S. G. Castillo López, N. Makarov, F. Pérez Rodríguez, LXI Congreso Nacional de Física, Puebla, Pue., México (2018).
- Cuantización del amortiguamiento de Landau en películas y nanoestructuras metálicas, Felipe Pérez-Rodríguez, Shunashi Guadalupe Castillo-López y Nykolay Makarov, Octava Reunión Anual de la División de Estado Sólido, “Parque Takilhsukut”, Papantla, Ver., México (2019).

Estancias de Investigación

- Estancia académica en la Universidad del Norte de Texas (UNT) del 01 de abril al 01 de mayo de 2018 en Denton, Texas, USA. La estancia fue supervisada por el Dr. Arkadii Krokhin profesor investigador del Departamento de Física de la UNT.

Distinciones

- Premio Carlos Graef Fernández por haber obtenido el tercer lugar en los mejores carteles del LX Congreso Nacional de Física 2017 otorgado por la Sociedad Mexicana de Física.

Proyectos de Investigación

- Participación en el proyecto de investigación VIEP-BUAP, “Efectos cuánticos en la respuesta óptica de nanocapas de metal no local” (Clave: 100312733-VIEP2018).
- Participación en la continuación del proyecto de investigación VIEP-BUAP, “Efectos cuánticos en la respuesta óptica de nanocapas de metal no local”, 2019 (en revisión).

Índice general

1. Introducción	1
2. Fundamentos teóricos	6
2.1. Dispersión espacial y efecto pelicular en metales	6
2.2. Modelo de Drude-Lorentz	10
2.3. Enfoque de la ecuación cinética de Boltzmann	14
3. Formalismo cuántico de Kubo	24
3.1. Formalismo de Kubo	24
3.1.1. Identidad de Kubo	29
3.2. Fórmula de Kubo para el vector de densidad de corriente y el tensor de conductividad eléctrica	30
4. Respuesta electromagnética de una película delgada metálica	34
4.1. Densidad de corriente cuántica no local	34
4.2. Ecuaciones de Maxwell. Distribución del campo electromagnético	37
4.3. Impedancias superficiales	43
4.3.1. Respuesta electromagnética resonante: Amortiguamiento de Landau Cuántico	46
4.3.2. Espectros ópticos de impedancias superficiales	48
4.4. Absorción, transmisión y reflexión de una película metálica	55
4.4.1. Matriz de transferencia de la película	55
4.4.2. Espectros ópticos de absorción	57
5. Electrodinámica de una nanoestructura de metal no local y dieléctrico	60
5.1. Matriz de transferencia de la celda unitaria y relación de dispersión	62
5.2. Absorción y transmisión de una nanoestructura de N capas	65
5.3. Espectros ópticos: Efectos del amortiguamiento de Landau cuántico	66
6. Conclusiones	78
Bibliografía	80

Capítulo 1

Introducción

En un sistema metálico, los electrones de conducción absorben energía electromagnética mediante tres mecanismos principales [1]: El primero de ellos es el debido a las colisiones de los electrones con defectos, impurezas, fonones, etc. que existen en el volumen de una muestra metálica. Este proceso dispersivo es controlado por la frecuencia de relajación electrónica ν . El segundo mecanismo de absorción de energía electromagnética es también de naturaleza colisional, y está asociado con la dispersión de electrones debido a la falta de uniformidad de las superficies metálicas. De manera similar a la frecuencia de colisiones en el bulto ν , las propiedades disipativas de las superficies metálicas son descritas por la frecuencia de relajación de superficie ν_{sup} . El tercer mecanismo, el cual no involucra colisiones electrónicas, es el llamado amortiguamiento de Landau [2]. Este fenómeno describe la absorción directa de energía por parte de electrones que viajan en fase con la onda electromagnética, y tiene lugar bajo condiciones de dispersión espacial fuerte, o no localidad, del metal.

En los últimos años, la influencia del amortiguamiento de Landau en la respuesta óptica no local de nanoestructuras metálicas ha sido un tema de gran interés [3–16]. Lo anterior se debe al hecho de que en muestras de alta calidad y a temperaturas lo suficientemente bajas, i.e., bajas frecuencias de relajación electrónica tanto en el bulto como en la superficie del metal, la absorción de energía electromagnética disminuye hasta un límite natural asociado con el mecanismo de absorción remanente: el amortiguamiento de Landau [3, 4].

Este fenómeno ha sido estudiado en muestras metálicas en bulto (vea por ejemplo, [1] y sus referencias), películas delgadas [3] y heteroestructuras periódicas de metal y dieléctrico [4–6] en el marco del enfoque semiclásico de la ecuación cinética de Boltz-

mann. Como se muestra en los trabajos anteriormente mencionados, el amortiguamiento de Landau constituye un mecanismo inevitable que altera drásticamente las propiedades electromagnéticas de dichos sistemas metálicos en el rango de frecuencias de los THz e infrarrojo cercano. El amortiguamiento de Landau se manifiesta también en la respuesta óptica de algunos sistemas en el rango visible del espectro y el ultravioleta. Por ejemplo, se ha encontrado que el amortiguamiento de Landau contribuye a la atenuación del plasmón de superficie en una gran variedad de nanoestructuras metálicas: nanopartículas de distintas formas [7, 8], nanocápsulas de dimensión cero [9, 10], nanotubos coaxiales de una dimensión y películas ultra delgadas de dos dimensiones [9], nanodímeros [7, 11], cadenas [12], y puntos cuánticos cerca de superficies metálicas [13].

En nanoestructuras metálicas los fenómenos cuánticos emergen debido al confinamiento del sistema (en una o más dimensiones) a un espacio extremadamente pequeño. Con ello surge también una pregunta fundamental: Cómo debe ser interpretado el amortiguamiento de Landau, considerado originalmente un fenómeno clásico, en el régimen cuántico. Con la finalidad de responder esta interrogante, y en general, de estudiar la influencia del amortiguamiento de Landau en la respuesta electromagnética un sistema metálico en el régimen cuántico, este trabajo de tesis doctoral tiene como objetivo general:

Investigar teóricamente los efectos cuánticos en la respuesta óptica no local de sistemas nanoestructurados metal-dieléctrico.

De acuerdo con nuestro protocolo de tesis, las metas específicas que nos permitieron alcanzar nuestro objetivo, son:

1. Derivar de primeros principios una expresión para la conductividad de películas delgadas metálicas no local y cuántica mediante el formalismo de Kubo.
2. Estudiar efectos cuánticos en los espectros ópticos de reflexión, transmisión y absorción de películas metálicas haciendo uso de la nueva expresión de la conductividad no local cuántica.
3. Obtener y analizar los espectros ópticos de reflexión, transmisión y absorción de sistemas nanoestructurados compuestos de capas metal-dieléctrico.

El trabajo de investigación que presentamos a continuación ha sido organizado en cinco capítulos restantes, los cuales detallaremos a continuación.

En el Capítulo 2 presentamos al lector una revisión del fenómeno de dispersión espacial o no localidad en muestras metálicas en volumen. Discutimos el efecto pelicular en metales en ambos regímenes, normal y anómalo, los cuales se establecen bajo condiciones de dispersión espacial, débil y fuerte, respectivamente. En este capítulo formulamos de manera general el problema inicial a resolver: la respuesta electromagnética de una película metálica. Dicho problema es abordado aplicando el modelo clásico de Drude-Lorentz que describe una relación local entre la densidad de corriente y el campo eléctrico aplicado. Se presentan las expresiones para el campo electromagnético y las impedancias superficiales en una placa metálica, así como sus distintos límites asintóticos para placas gruesas y muy delgadas. Por otra parte, utilizando el enfoque semiclásico de la ecuación cinética de Boltzmann para la función de distribución electrónica, describimos la respuesta electromagnética de la placa metálica en un régimen de dispersión espacial fuerte. Aquí, tanto el campo electromagnético, como las impedancias superficiales de la placa, resultan ser una superposición de modos electromagnéticos independientes con números de onda discretos. Se demuestra también que las ecuaciones de los campos eléctrico y magnético, al igual que las impedancias superficiales, se reducen a las expresiones del modelo de Drude-Lorentz al desprestigiar los efectos de la dispersión espacial. También se explica el origen clásico del amortiguamiento de Landau, y se discute la influencia de este mecanismo en las propiedades ópticas de placas metálicas en la región de los THz [3].

En el Capítulo 3 se describe de manera breve el formalismo cuántico propuesto por R. Kubo en su artículo [17], así como en los trabajos [18–20] de diversos autores, para el cálculo de la respuesta lineal de un sistema físico a un campo externo aplicado que varía en el tiempo. Con la ayuda de la fórmula general de Kubo se derivan las expresiones para la densidad de corriente y el tensor de conductividad eléctrica para un gas de electrones cuánticos en presencia de un campo eléctrico externo.

En el Capítulo 4 se presenta un análisis detallado de la respuesta electromagnética cuántica no local de una película metálica con espesor nanométrico, y en particular, el efecto que tiene el amortiguamiento de Landau en ella. Aplicando la fórmula de Kubo derivada al final del Capítulo 3, obtenemos una expresión analítica para la densidad de corriente cuántica de los electrones de conducción dentro de la película metálica. Usando este resultado analítico, resolvemos las ecuaciones de Maxwell escribiendo los campos eléctrico y magnético como una superposición de modos electromagnéticos discretos con números de onda cuantizados, similar al caso semiclásico, pero con una nueva permitividad efectiva

cuántica. Siguiendo las definiciones generales presentadas en el Capítulo 2, calculamos las impedancias superficiales cuánticas no locales en ambos lados de la película metálica, las cuales determinan por completo la transmisión y absorción de energía electromagnética. Partiendo de las impedancias cuánticas derivamos las fórmulas asintóticas para tres límites de la respuesta electromagnética de la placa metálica nano-delgada: el régimen cuántico local o versión cuántica del modelo de Drude-Lorentz, el límite semiclásico no local descrito por la ecuación cinética de Boltzmann, y el régimen correspondiente al modelo clásico local de Drude-Lorentz. En este capítulo presentamos también resultados específicos obtenidos de cálculos numéricos de las impedancias superficiales de películas de plata con distintos grosores. Con base en los resultados numéricos y las expresiones analíticas, explicamos la aparición de resonancias en los espectros de las impedancias superficiales en el régimen cuántico no local, como un efecto de la discretización cuántica del amortiguamiento de Landau. Esta manifestación cuántica del amortiguamiento de Landau se origina debido a la discretización de los números de onda de los electrones y del campo electromagnético dentro de una película nano-delgada. Se demuestra que estas resonancias cuánticas se manifiestan también en los espectros de absorción de placas de aluminio en la región del infrarrojo lejano. Dichas resonancias cuánticas no locales están bien definidas cuando el grosor de la película metálica d es menor que la profundidad de penetración del campo electromagnético en el metal $\delta = c/\omega_p$. La dinámica de transición entre los regímenes no locales, cuántico y clásico, es gobernada por la variación del grosor de la película metálica d . El formalismo cuántico no local derivado en este capítulo, constituye una teoría más general para la respuesta electromagnética de películas metálicas, ya que contiene como caso límite el enfoque de Boltzmann cuando el grosor de la placa metálica es mucho mayor que la profundidad de penetración del campo eléctrico. Dentro del límite local clásico, nuestros resultados corresponden con el modelo de Drude-Lorentz.

El Capítulo 5 se analizan las propiedades ópticas de una superred de metal y dieléctrico con películas metálicas nano-delgadas, donde las dinámicas del campo electromagnético y de los electrones de conducción en la dirección perpendicular a las superficies metálicas están cuantizadas. La respuesta electromagnética de las capas metálicas es descrita de acuerdo con el formalismo cuántico no local desarrollado en el Capítulo 4; mientras que las placas dieléctricas están caracterizadas por una permitividad constante. La resolución de las ecuaciones de Maxwell en cada medio proveen expresiones analíticas para los campos eléctrico y magnético. Aplicando las condiciones de frontera para el campo elec-

tromagnético en las interfaces dieléctrico-metal de una celda unitaria, y haciendo uso del teorema de Bloch, derivamos la ecuación de dispersión para los modos fotónicos en la superred. Esta relación de dispersión tiene en consideración el fenómeno del amortiguamiento de Landau cuántico, ya que depende de las impedancias superficiales cuánticas no locales derivadas en el Capítulo 4. Cuando las películas metálicas nano-delgadas se encuentran dentro de un arreglo metal-dieléctrico, adicional a las resonancias cuánticas del amortiguamiento de Landau en el metal, surgen también resonancias de Fabry-Perot dentro de las placas dieléctricas que separan las capas metálicas. Debido a estas resonancias, las bandas de paso en los espectros de transmisión son relativamente estrechas. Si la resonancia cuántica del amortiguamiento de Landau y la de Fabry-Perot están próximas una de la otra, aparece el efecto de repulsión de niveles dando lugar a cambios sustanciales en la estructura de bandas de la superred, al igual que en sus espectros de transmisión y absorción. Demostramos que dependiendo de la cercanía entre estas dos resonancias, una nueva banda de paso o brecha prohibida puede emerger en el espectro fotónico. El mecanismo de formación de esta nueva estructura es distinto del mecanismo convencional de reflexiones de Bragg. Particularmente, encontramos que la densidad de estados fotónica permanece finita dentro de las nuevas brechas prohibidas pero la transmisión cae prácticamente a cero debido a la cuantización del amortiguamiento de Landau. Los estados fotónicos existentes dentro de las nuevas brechas prohibidas son estados “oscuros” caracterizados por una dispersión anómala, y su papel en la electrodinámica de nanoestructuras de metal-dieléctrico no ha sido estudiado hasta ahora.

Las conclusiones que derivan de nuestro trabajo de investigación son expuestas en el Capítulo 6 de esta tesis.

Capítulo 2

Fundamentos teóricos

2.1. Dispersión espacial y efecto pelicular en metales

Los metales son elementos químicos caracterizados por una gran densidad de electrones “libres” provenientes de orbitales atómicos de valencia. La elevada movilidad de estos electrones confiere a los metales, entre otras características, una alta conductividad eléctrica. Esos electrones responsables de la conductividad eléctrica del metal se llaman electrones de conducción. En virtud de esta propiedad, las ondas electromagnéticas son reflejadas casi en su totalidad por muestras metálicas masivas. La pequeña porción de flujo electromagnético que logra penetrar no se propaga en el conductor y decae muy cerca de su superficie. La densidad de corriente eléctrica producida por el campo se concentra en una delgada capa superficial de grosor δ . Este fenómeno se conoce como efecto pelicular, vea por ejemplo [21,22].

La profundidad de penetración del campo δ está determinada por fenómenos de dispersión temporal y espacial en la conductividad del metal. El régimen de dispersión temporal es gobernado por la relación entre la frecuencia de oscilación del campo ω y la frecuencia de relajación de los electrones ν ; mientras que los distintos regímenes de dispersión espacial se establecen comparando los valores absolutos de la profundidad de penetración δ y el recorrido libre efectivo de los electrones l_ω ,

$$l_\omega = V_F/(\nu - i\omega), \quad (2.1)$$

siendo V_F la velocidad de los electrones con la energía de Fermi ϵ_F . El recorrido efectivo l_ω aparece debido a dos factores: Las colisiones de los electrones con dispersores en el metal (impurezas, defectos, fonones y otros electrones), lo cual está regido por la frecuencia de

relajación ν , y el cambio de fase del campo electromagnético caracterizado por la frecuencia ω .

En el caso de dispersión espacial débil, el campo electromagnético cambia a una distancia $|\delta|$ mayor que la recorrida por los electrones de conducción $|l_\omega|$:

$$|l_\omega| \ll |\delta|. \quad (2.2)$$

Cuando la condición (2.2) se cumple, los electrones experimentan un campo electromagnético casi homogéneo a lo largo su trayectoria libre. Por lo cual, la relación entre la densidad de corriente $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ y el campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ en un punto de metal $\mathbf{x} = \{x, y, z\}$ y en un instante de tiempo t puede describirse a través de una relación local,

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \sigma \mathbf{E}(\mathbf{x}, t). \quad (2.3)$$

Si además la dispersión temporal es débil ($\omega \ll \nu$), la conductividad σ se reduce a la conductividad del caso estático σ_0 , y la condición (2.2) se transforma en $l \ll \delta$, siendo $l = V_F/\nu$ la longitud de recorrido libre media de los electrones. Para metales a temperatura ambiente la frecuencia de relajación ν , es del orden de 10^{13} Hz, es decir, está por debajo del infrarrojo. Bajo condiciones de dispersión espacial y temporal débiles, el efecto pelicular se conoce como normal.

En el rango de altas frecuencias $\omega \gg \nu$ (iniciando en el infrarrojo) donde la dispersión temporal domina, la longitud V_F/ω recorrida por los electrones a lo largo de un periodo $2\pi/\omega$ resulta ser menor que l . Por lo tanto, $|l_\omega| \approx V_F/\omega$ juega el papel de recorrido libre medio. En este caso el efecto pelicular se conoce como efecto pelicular infrarrojo y se caracteriza por una profundidad de penetración mínima,

$$\delta = c/\omega_p, \quad (2.4)$$

la cual no depende del tamaño de la muestra metálica ni de la frecuencia electromagnética ω . Esta profundidad de penetración se determina por el cociente de la velocidad de la luz en el vacío c y la frecuencia de plasma ω_p del gas de electrones de conducción. Los valores típicos para la profundidad de penetración mínima son $\delta \sim 10 - 100$ nm. El efecto pelicular infrarrojo tiene lugar en el siguiente intervalo de frecuencias:

$$\text{máx}[\nu, \omega_p V_F/c] \ll \omega \ll \omega_p. \quad (2.5)$$

Aquí la condición $\omega_p V_F/c \ll \omega$ se obtiene sustituyendo la profundidad de penetración (2.4) en la condición de dispersión espacial débil (2.2).

En el régimen de dispersión espacial fuerte la condición de localidad (2.2) no se cumple, por el contrario, la distancia $|\delta|$ a la cual el campo electromagnético cambia es mucho menor que $|l_\omega|$,

$$|l_\omega| \gg |\delta|. \quad (2.6)$$

En este caso el efecto pelicular se conoce como anómalo. Este efecto ha sido ampliamente estudiado en muestras metálicas masivas siendo un tema habitual en la teoría clásica de transporte eléctrico en metales, vea por ejemplo [1,21–23]. Para muestras metálicas de bulto, el efecto pelicular anómalo es particularmente importante en el rango de frecuencias,

$$\nu \ll \omega \ll \omega_p V_F / c \ll \omega_p. \quad (2.7)$$

Cuando la condición (2.6) se satisface, los electrones experimentan un campo electromagnético heterogéneo. Consecuentemente, la densidad de corriente en un punto \mathbf{x} del conductor está determinada por el campo eléctrico no sólo en ese punto sino en una vecindad de él, es decir, la relación entre la corriente y el campo eléctrico debe ser no local :

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int_V d^3\mathbf{x}' \hat{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') \mathbf{E}(\mathbf{x}', t'). \quad (2.8)$$

La ecuación (2.8) muestra que en el régimen no local (2.6), la conductividad tiene la forma de un operador integral que actúa sobre el campo eléctrico en todo el volumen V del metal. En este caso, la conductividad debe calcularse mediante una teoría microscópica como, por ejemplo, el enfoque de la ecuación cinética de Boltzmann o el formalismo de Kubo.

Los fenómenos físicos descritos hasta ahora corresponden a propiedades eléctricas de metales en el bulto. Por otra parte, la inclusión de fronteras en un material produce una heterogeneidad en el medio que puede dar lugar a fenómenos de dispersión espacial. En el caso de una placa metálica, el efecto de tamaño (clásico y cuántico) influye fuertemente en la conductividad eléctrica del sistema metálico, y por ende, en sus propiedades ópticas, vea por ejemplo [3, 24].

En esta tesis nos enfocaremos en el caso de películas metálicas (y nanoestructuras con inclusiones metálicas) con grosor del orden de la profundidad de penetración del campo $d \sim \delta$. Para ello considere una película metálica de grosor d confinada a la región del espacio:

$$0 \leq x \leq d, \quad -\infty < y, z < \infty. \quad (2.9)$$

La onda electromagnética plana de frecuencia ω incide de manera perpendicular a la superficie $x = 0$ y se propaga a lo largo de la dirección x . La orientación de los campos eléctrico

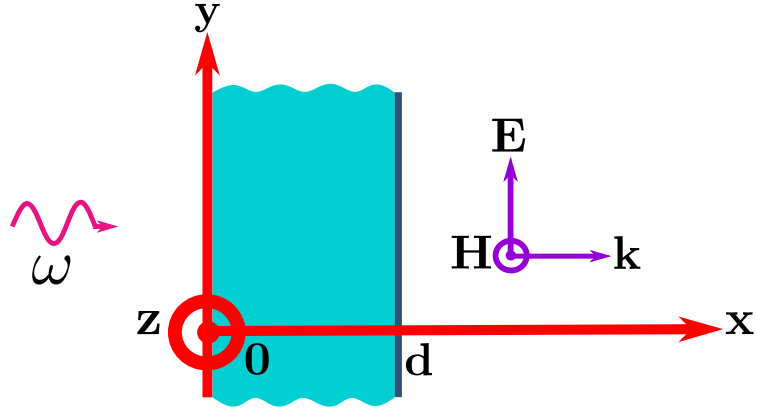


Figura 2.1: Esquema de la película metálica y el campo electromagnético propagante.

$\mathbf{E}(x, t)$ y magnético $\mathbf{H}(x, t)$ es paralela a los ejes y y z , respectivamente, como lo muestra el esquema en la Figura 2.1. Dentro de la película metálica (2.9) los campos pueden escribirse como,

$$\mathbf{E}(x, t) = \{0, E(x), 0\} \exp(-i\omega t), \quad (2.10a)$$

$$\mathbf{H}(x, t) = \{0, 0, H(x)\} \exp(-i\omega t). \quad (2.10b)$$

La respuesta de los electrones de conducción al campo eléctrico (2.10a) produce una densidad de corriente monocromática $\mathbf{j}(x, t)$ que fluye en la misma dirección que $\mathbf{E}(x, t)$, en este caso,

$$\mathbf{j}(x, t) = \{0, j(x), 0\} \exp(-i\omega t). \quad (2.11)$$

Las ecuaciones de Maxwell permiten derivar la ecuación que describe la distribución del campo eléctrico dentro de la placa metálica (2.9). Esta ecuación tiene la forma:

$$\frac{d^2 E(x)}{dx^2} + k^2 E(x) + \frac{4\pi i k^2}{\omega} j(x) = 0. \quad (2.12)$$

Aquí el segundo término del lado izquierdo de la ecuación (2.12) surge de la corriente de desplazamiento siendo $k = \omega/c$ el número de onda electromagnético en el espacio vacío, mientras que el tercer término corresponde a la densidad de corriente longitudinal de los electrones de conducción. Por otra parte, la distribución del campo magnético $H(x)$ está relacionada con la derivada del campo eléctrico $E'(x)$ respecto a la coordenada x por medio de la Ley de Faraday:

$$E'(x) = ikH(x). \quad (2.13)$$

La relación general que existe entre los valores de los campos eléctrico y magnético en las fronteras de la placa $x = 0$ y $x = d$,

$$\begin{pmatrix} E(0) \\ E(d) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \zeta_0 & -\zeta_d \\ \zeta_d & -\zeta_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H(0) \\ H(d) \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

define las cantidades ζ_0 y ζ_d conocidas como impedancias superficiales. Estas impedancias son características inherentes del sistema metálico, ya que especifican por completo la respuesta electromagnética de la película metálica a una perturbación externa. En particular, estas impedancias superficiales nos permitirán, más adelante, calcular los espectros de absorción, trasmisión y reflexión de películas metálicas.

Para encontrar la distribución de los campos $E(x)$ y $H(x)$ dentro de la placa metálica, y derivar las impedancias superficiales ζ_0 y ζ_d , es necesario conocer la forma explícita de $j(x)$ en la Ec.(2.12). Con este fin, existen diversas aproximaciones para modelar $j(x)$. En concreto, para nuestra investigación resultan relevantes las fórmulas para la densidad de corriente obtenidas mediante el modelo clásico local de Drude-Lorentz y el enfoque semiclásico no local de la ecuación cinética de Boltzmann. Por ello, en las siguientes secciones se analizará de manera breve la respuesta electromagnética de una película metálica en el marco del modelo de Drude-Lorentz y el enfoque de Boltzmann. Posteriormente, en el Capítulo 3 se presenta de manera general el formalismo cuántico de Kubo y su aplicación al problema de transporte electromagnético. En el Capítulo 4, con la ayuda de dicho formalismo, se derivará de primeros principios una expresión para la densidad de corriente cuántica no local para la película metálica (2.9) en presencia del campo eléctrico (2.10a). Esta nueva expresión nos permitirá estudiar las propiedades ópticas de películas metálicas delgadas en el régimen cuántico de dispersión espacial fuerte, y comparar estos resultados con predicciones clásicas en los regímenes local y no local.

2.2. Modelo de Drude-Lorentz

El modelo de Drude-Lorentz [21] considera los electrones de conducción como un gas degenerado de partículas que se mueven en presencia de un arreglo de iones positivos conformado por núcleos atómicos y electrones de orbitales internos. En ausencia de campos externos, los electrones de conducción siguen trayectorias lineales que se ven abruptamente modificadas al interactuar con los iones de la red. El tiempo que transcurre entre choques

o tiempo de relajación de los electrones es igual a $1/\nu$. Durante este lapso, las interacciones de los electrones con otros electrones y/o con iones son despreciadas. En presencia de un campo electromagnético externo, la dinámica de los electrones es dictada clásicamente por las leyes de Newton en presencia de dichos campos manteniendo las consideraciones básicas del enfoque.

Dentro del modelo de Drude-Lorentz, la densidad de corriente $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ generada por un campo eléctrico externo $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ con dependencia temporal armónica $\exp(-i\omega t)$ se presenta en la forma:

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \sigma_{DL}(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{x}, t), \quad (2.15a)$$

$$\sigma_{DL}(\omega) = \frac{\omega_p^2}{4\pi(\nu - i\omega)}. \quad (2.15b)$$

La conductividad eléctrica $\sigma_{DL}(\omega)$ en el modelo de Drude-Lorentz depende explícitamente de la frecuencia ω de excitación del campo. Por lo cual, la fórmula (2.15b) resulta útil para estudiar los efectos de dispersión temporal en la conductividad de un sistema metálico. Es importante enfatizar que en la ecuación (2.15a) la densidad de corriente depende del campo eléctrico de manera local como se establece en la Ec.(2.3). Por lo tanto, el modelo de Drude-Lorentz es adecuado para describir la interacción de campos electromagnéticos con metales sólo en el régimen de dispersión espacial débil (2.2). En la expresión (2.15b), la frecuencia de plasma ω_p está determinada por la masa efectiva m del electrón, la carga elemental e y la densidad del gas de electrones en bulto N ,

$$\omega_p^2 = 4\pi N e^2 / m, \quad (2.16a)$$

$$N = k_F^3 / 3\pi^2 \quad (2.16b)$$

Aquí $k_F = \sqrt{2m\epsilon_F}/\hbar$ es el número de onda de electrones con energía de Fermi ϵ_F .

Retomemos el problema de la placa metálica (2.9) excitada por el campo electromagnético (2.10). La descripción de la densidad de corriente (2.11) de acuerdo con el modelo clásico local de Drude-Lorentz (2.15), permite resolver de manera analítica y directa la ecuación (2.12). En este caso (2.12) toma la forma:

$$\frac{d^2 E(x)}{dx^2} + k^2 E(x) + \frac{4\pi i k^2}{\omega} \sigma_{DL}(\omega) E(x) = 0. \quad (2.17)$$

A continuación definiendo la cantidad,

$$\begin{aligned}\varepsilon_{DL}(\omega) &= 1 + \frac{4\pi i \sigma_{DL}(\omega)}{\omega} \\ &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\nu)},\end{aligned}\quad (2.18)$$

podemos reescribir la ecuación (2.17) como la ecuación de Helmholtz que satisfaría el campo eléctrico $E(x)$ dentro de una placa dieléctrica:

$$\frac{d^2 E(x)}{dx^2} + k^2 \varepsilon_{DL} E(x) = 0. \quad (2.19)$$

De la ecuación (2.19) se sigue que, en el modelo de Drude-Lorentz el metal puede ser considerado como un medio dieléctrico con permitividad compleja ε_{DL} . La parte imaginaria positiva de (2.18), está asociada con la disipación de energía electromagnética desde la onda hacia el metal debida a las colisiones de los electrones en el bulto metálico.

Las distribuciones de los campos eléctrico y magnético que satisfacen las ecuaciones (2.19) y (2.13) resultan ser una superposición de ondas planas:

$$E(x) = \frac{i}{\sqrt{\varepsilon_{DL}}} \frac{H(0) \cos [k\sqrt{\varepsilon_{DL}}(x-d)] - H(d) \cos (k\sqrt{\varepsilon_{DL}}x)}{\sin (k\sqrt{\varepsilon_{DL}}d)}, \quad (2.20a)$$

$$H(x) = \frac{H(0) \sin [k\sqrt{\varepsilon_{DL}}(d-x)] + H(d) \sin (k\sqrt{\varepsilon_{DL}}x)}{\sin (k\sqrt{\varepsilon_{DL}}d)}. \quad (2.20b)$$

Aquí las constantes de integración $H(0)$ y $H(d)$ representan las amplitudes del campo magnético en las superficies de la placa $x = 0$ y $x = d$, respectivamente. Dichas amplitudes se encuentran relacionadas con las derivadas $E'(0)$ y $E'(d)$ del campo eléctrico mediante la Ley de Faraday (2.13).

Usando las expresiones para los campos (2.20) y de acuerdo con la definición (2.14), se obtienen las impedancias superficiales del modelo de Drude-Lorentz para una placa metálica:

$$\zeta_0^{(DL)} = \frac{i}{\sqrt{\varepsilon_{DL}}} \cot (kd\sqrt{\varepsilon_{DL}}), \quad (2.21a)$$

$$\zeta_d^{(DL)} = \frac{i/\sqrt{\varepsilon_{DL}}}{\sin (kd\sqrt{\varepsilon_{DL}})}. \quad (2.21b)$$

El análisis elemental de estas fórmulas muestra lo siguiente:

En el caso de placas metálicas gruesas, las impedancias clásicas locales (2.21) tienden a valores asintóticos, los cuales son bien conocidos en el teoría del efecto pelicular normal (ver Ref. [1]),

$$\zeta_0^{(DL)} \rightarrow 1/\sqrt{\varepsilon_{DL}}, \quad \zeta_d^{(DL)} \rightarrow 0 \quad \text{para} \quad kd\sqrt{|\varepsilon_{DL}|} \rightarrow \infty. \quad (2.22)$$

Por el contrario, para placas metálicas muy delgadas, las impedancias (2.21) en ambas superficies se igualan teniendo el mismo límite asintótico:

$$\zeta_0^{(DL)} \approx \zeta_d^{(DL)} \rightarrow i/kd\varepsilon_{DL} \quad \text{para} \quad (kd)^2|\varepsilon_{DL}| \ll 1. \quad (2.23)$$

Para nuestra investigación, el caso más importante se encuentra en el rango de altas frecuencias donde la frecuencia de la onda electromagnética ω se ubica entre la frecuencia de relajación de los electrones ν y la frecuencia de plasma ω_p ,

$$\nu \ll \omega \ll \omega_p. \quad (2.24)$$

Aquí la permitividad de Drude-Lorentz (2.18) puede simplificarse como,

$$\varepsilon_{DL} = -\left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2 \left(1 - i\frac{\nu}{\omega}\right). \quad (2.25)$$

Considerando la fórmula (2.25), las expresiones para las impedancias superficiales tanto de placas gruesas (2.22) como delgadas (2.23) se reducen, respectivamente, a las siguientes expresiones:

$$\zeta_0^{(DL)} \rightarrow \frac{\nu - 2i\omega}{2\omega_p}, \quad \zeta_d^{(DL)} \rightarrow 0, \quad \text{si } \delta \ll d; \quad (2.26a)$$

$$\zeta_0^{(DL)} \approx \zeta_d^{(DL)} \rightarrow \frac{\delta}{d} \frac{\nu - i\omega}{\omega_p}, \quad \text{si } d^2 \ll \delta^2. \quad (2.26b)$$

De los resultados (2.26) vemos que las impedancias en el régimen de altas frecuencias (2.24) son principalmente imaginarias. Además, el valor de las impedancias (2.26b) para películas delgadas es δ/d veces mayor que el de placas gruesas (2.26a). En el rango de altas frecuencias la profundidad de penetración δ del campo electromagnético en el metal, Ec. (2.4), se obtiene dentro del modelo de Drude-Lorentz para $\varepsilon_{DL} = -(\omega_p/\omega)^2$.

En resumen, el modelo de Drude-Lorentz es una aproximación clásica adecuada para estudiar el transporte electromagnético en muestras metálicas sólo en el régimen local, ya que la relación constituyente (2.15a) entre la densidad de corriente y el campo eléctrico

es local por definición. Por lo tanto, este modelo no es apropiado cuando se tienen condiciones de dispersión espacial fuerte. Los fenómenos no locales resultan particularmente importantes en la respuesta óptica de películas sumamente delgadas por las siguientes razones. Primero, como fue dicho anteriormente las fronteras de una placa pueden inducir efectos de no localidad en la conductividad del metal conocidos como efectos de tamaño. Y segundo, la reducción del grosor de la placa a escalas nanométricas ($d \sim \delta$) amerita un tratamiento cuántico para la respuesta electromagnética del sistema metálico.

2.3. Enfoque de la ecuación cinética de Boltzmann

La ecuación cinética de Boltzmann posibilita el estudio estadístico de las propiedades físicas y de transporte de sistemas fuera del equilibrio. Dentro de este enfoque el sistema de muchas partículas se describe mediante una función de distribución $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ definida en el espacio de posiciones $\mathbf{x} = \{x, y, z\}$ y momentos $\mathbf{p} = \{p_x, p_y, p_z\}$. El conjunto de todos los valores posibles de \mathbf{x} y \mathbf{p} definen el espacio fase del sistema de partículas. En el caso general, la función de distribución depende también del tiempo t . Específicamente, la cantidad $2f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{p}/(2\pi\hbar)^3$ determina el número promedio de partículas ubicadas en un elemento diferencial de volumen $d^3\mathbf{x} = dx dy dz$ centrado en la posición \mathbf{x} a la vez que sus momentos pertenecen a un elemento de volumen $d^3\mathbf{p} = dp_x dp_y dp_z$ centrado en el momento \mathbf{p} en cada instante del tiempo t . Cabe mencionar que el factor 2 en dicha cantidad considera los dos valores permitidos del espín electrónico.

Ciertamente, para el cálculo de cualquier coeficiente cinético es imprescindible conocer la función de distribución que describe propiamente el problema. En particular, la densidad de corriente eléctrica generada por los electrones de conducción en un punto \mathbf{x} de un metal en un instante de tiempo t se obtiene aplicando la ecuación:

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = -2e \int \mathbf{v}(\mathbf{p}) f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (2.27)$$

Aquí $\mathbf{v}(\mathbf{p})$ es la velocidad promedio de los electrones en el conductor.

Cuando el sistema se encuentra en equilibrio termodinámico (equilibrio térmico, químico y mecánico), la densidad de probabilidad de los electrones de conducción coincide con la función de distribución de Fermi-Dirac $f_F(\epsilon)$ para partículas fermiónicas,

$$f_F(\epsilon) = \{1 + \exp[(\epsilon - \epsilon_F)/T]\}^{-1}. \quad (2.28)$$

Dicha función depende solamente de la energía electrónica $\epsilon = \epsilon(\mathbf{p})$, teniendo como parámetros la energía de Fermi ϵ_F y la temperatura T . Por su parte, la energía de los electrones dentro de un arreglo metálico es siempre una función par del momento electrónico $\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon(-\mathbf{p})$ gracias a la simetría cristalina del sistema. Por lo tanto, al sustituir la distribución (2.28) en la expresión (2.27), ya que $\mathbf{v} = \partial\epsilon(\mathbf{p})/\partial\mathbf{p}$, se sigue que en el equilibrio la densidad de corriente dentro de un conductor es nula,

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (2.29)$$

Por otra parte, en presencia de un campo electromagnético externo la función de distribución $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ de los electrones de conducción se desvía de la función de equilibrio de Fermi-Dirac f_F . Si los electrones no colisionan a lo largo de su trayectoria, la función de distribución fuera del equilibrio $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ debe conservar el número de partículas $2f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{p}/(2\pi\hbar)^3$ que atraviesan un elemento de volumen del espacio fase $d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{p}$ en cada instante de tiempo t , i.e., $df(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)/dt = 0$. En el caso contrario, cuando las colisiones juegan un papel importante, la densidad de electrones en un elemento de volumen del espacio fase varía con el tiempo. De tal manera que el cambio total en el tiempo de la función de distribución $df(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)/dt$ es generado por procesos de dispersión electrónica. Esta situación física se expresa matemáticamente mediante la ecuación cinética de Boltzmann:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{d\mathbf{p}}{dt} = I(f). \quad (2.30)$$

El primer término del lado izquierdo de la Ec. (2.30) nos da la dependencia explícita en el tiempo de la función $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$. A su vez, el segundo término al ser proporcional a la velocidad promedio de los electrones $\mathbf{v} = d\mathbf{x}/dt$ está relacionado con el cambio en el tiempo de la función de distribución debido a procesos de difusión; mientras que el tercer término representa las variaciones de $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ producidas por la acción de la fuerza aplicada $d\mathbf{p}/dt$. Del lado derecho de la igualdad (2.30), encontramos que todos los procesos de colisión electrónica considerados por el modelo son incluidos en la integral de colisiones $I(f)$.

No existe forma unívoca de describir los procesos de dispersión dentro de un metal, en este sentido, existen diversas aproximaciones para calcular la integral de colisiones $I(f)$. Uno de los modelos más sencillos se conoce como aproximación del tiempo de relajación τ , cuya forma está dada por la ecuación:

$$I(f) = -\frac{f - f_F}{\tau}. \quad (2.31)$$

Para apreciar el significado físico de τ supongamos que el campo eléctrico y cualquier otro gradiente de temperatura o concentración desaparecen en un tiempo $t = 0$. En este caso, la ecuación cinética (2.30) adquiere la forma:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f - f_F}{\tau}, \quad (2.32)$$

teniendo como solución,

$$f(t) = f_F + [f(0) - f_F] \exp(-t/\tau). \quad (2.33)$$

De la solución (2.33) vemos que τ es el tiempo necesario para que la función de distribución $f(t)$ tienda a su valor de equilibrio f_F . Específicamente, τ suele ser un parámetro fenomenológico en la teoría relacionado con el tiempo que transcurre entre colisiones electrónicas. Correspondientemente, su inverso $\nu = 1/\tau$ precisa la frecuencia con la que los electrones interactúan con impurezas, defectos, fonones y otros electrones en el bulto metálico. Dentro de la aproximación del tiempo de relajación estos procesos de dispersión constituyen el mecanismo que restablece el equilibrio local en el sistema.

Regresando al problema que nos concierne: una placa metálica (2.9) en presencia de un campo electromagnético (2.10). Para calcular la densidad de corriente generada por los electrones de conducción resolvemos la ecuación cinética (2.30) considerando la geometría particular del problema (2.9)-(2.10). A continuación sustituimos la función de distribución en la ecuación general (2.27). Los detalles de la derivación pueden ser consultados en la Ref. [3]. Como resultado tenemos que la expresión para la densidad de corriente (2.11) dentro del enfoque de Boltzmann es:

$$j(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \sigma(x - x') E(x'), \quad (2.34a)$$

donde $\sigma(x)$ es el kernel del operador integral de conductividad,

$$\sigma(x) = \frac{3\sigma_{DL}}{4l_\omega} \int_0^1 dn_x \frac{(1 - n_x^2)}{n_x} \exp\left(-\frac{|x|}{l_\omega n_x}\right). \quad (2.34b)$$

Aquí $n_x = v_x/V_F$ es la proyección de un vector unitario dirigido a lo largo de la velocidad electrónica en la dirección de propagación v_x . A diferencia del modelo de Drude-Lorentz (2.15a), la ecuación (2.34a) describe una relación no local entre la densidad de corriente y el campo eléctrico como lo indica la ecuación (2.8). Por lo cual, la ecuación cinética de Boltzmann constituye un enfoque adecuado para el estudio clásico de la respuesta electromagnética de películas metálicas en el régimen dispersión espacial fuerte (2.6).

Es importante mencionar que las expresiones (2.34) fueron derivadas considerando la reflexión especular de los electrones en las fronteras $x = 0$ y $x = d$ de la placa metálica. Como consecuencia, las ecuaciones (2.34) para la densidad de corriente longitudinal dentro de una placa metálica coinciden con las que se obtienen para el caso de un metal infinito ($-\infty < x < \infty$). Sin embargo, la única pero significativa diferencia radica en las propiedades de paridad y periodicidad impuestas al campo eléctrico $E(x)$ en la Ref. [3]:

$$E(x) = E(-x); \quad E(x \pm 2d) = E(x). \quad (2.35a)$$

Debido a la conexión que existe entre $E(x)$ y $j(x)$ por medio de la ecuación (2.12), las propiedades de simetría de la densidad de corriente (2.34a) quedan determinadas automáticamente:

$$j(x) = j(-x); \quad j(x \pm 2d) = j(x). \quad (2.35b)$$

Note que originalmente el campo eléctrico y la densidad de corriente fueron definidos en la región del espacio (2.9). No obstante, la aplicación de las ecuaciones (2.35) permitió la continuación analítica de $E(x)$ y $j(x)$ en todo el eje x ($-\infty < x < \infty$), tal como lo señala la Ec. (2.34a).

Sustituyendo la expresión para la densidad de corriente (2.34) en la ecuación de Maxwell (2.12), se obtiene una ecuación integrodiferencial para el campo $E(x)$, la cual conviene resolver aplicando el método de representación de Fourier.

A continuación se describe de manera general la transformación de la ecuación de Maxwell (2.12) con el método de Fourier. De acuerdo con las propiedades de paridad y periodicidad (2.35), los campos deben ser transformados usando las siguientes definiciones: Para el campo eléctrico,

$$E(x) = \frac{1}{2d} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(k_s) \cos(k_s x), \quad (2.36a)$$

$$\mathcal{E}(k_s) = 2 \int_0^d dx E(x) \cos(k_s x), \quad (2.36b)$$

donde k_s es el número de onda discretizado del campo electromagnético:

$$k_s = \pi s/d, \quad s = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (2.37)$$

De manera similar para la densidad de corriente,

$$j(x) = \frac{1}{2d} \sum_{s=-\infty}^{\infty} j(k_s) \cos(k_s x), \quad (2.38a)$$

$$j(k_s) = 2 \int_0^d dx j(x) \cos(k_s x). \quad (2.38b)$$

Las expresiones (2.36b) y (2.38b) muestran que las transformadas de Fourier $\mathcal{E}(k_s)$ y $j(k_s)$ son funciones par del número de onda electromagnético k_s :

$$\mathcal{E}(k_s) = \mathcal{E}(-k_s) = \mathcal{E}(k_{-s}); \quad (2.39a)$$

$$j(k_s) = j(-k_s) = j(k_{-s}). \quad (2.39b)$$

A continuación aplicando el operador integral,

$$2 \int_0^d dx \cos(k_s x) \dots \quad (2.40)$$

a la ecuación general (2.12) se obtiene la siguiente expresión:

$$2 \int_0^d \cos(k_s x) \frac{d^2 E(x)}{dx^2} dx + k^2 \mathcal{E}(k_s) + \frac{4\pi i k^2}{\omega} j(k_s) = 0. \quad (2.41)$$

Para transformar el primer término de (2.41) integramos dos veces por partes, posteriormente, aplicando la Ley de Faraday se sigue que:

$$\begin{aligned} 2 \int_0^d \cos(k_s x) \frac{d^2 E(x)}{dx^2} dx &= 2E'(d) \cos(k_s d) - 2E'(0) - k_s^2 \mathcal{E}(k_s) \\ &= 2ik [H(d) \cos(k_s d) - H(0)] - k_s^2 \mathcal{E}(k_s). \end{aligned} \quad (2.42)$$

Usando el resultado (2.42) en la ecuación (2.41) obtenemos la representación- k_s de la ecuación inicial (2.12) en su forma más general:

$$(k_s^2 - k^2) \mathcal{E}(k_s) - \frac{4\pi i k^2}{\omega} j(k_s) = 2ik [H(d) \cos(k_s d) - H(0)]. \quad (2.43)$$

En el enfoque de Boltzmann, la transformada de Fourier de la densidad de corriente $j(k_s)$ que aparece (2.43) se deriva haciendo uso de la definición (2.38b) y la expresión (2.34) para $j(x)$:

$$j(k_s) = \frac{3\sigma_{DL}}{2} \int_0^1 \frac{(1 - n_x^2) dn_x}{1 + (k_s l_\omega n_x)^2} \mathcal{E}(k_s). \quad (2.44)$$

Resolviendo la ecuación algebraica (2.43) para la transformada de Fourier $\mathcal{E}(k_s)$ con la subsecuente aplicación de las fórmulas (2.36a) y (2.13), se obtienen, respectivamente, las distribuciones de los campos eléctrico y magnético dentro de la placa metálica:

$$E(x) = \frac{ik}{d} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{H(d) \cos[k_s(d-x)] - H(0) \cos(k_s x)}{k_s^2 - k^2 \varepsilon_B(k_s)}, \quad (2.45a)$$

$$H(x) = \frac{1}{d} \sum_{s=-\infty}^{\infty} k_s \frac{H(d) \sin[k_s(d-x)] + H(0) \sin(k_s x)}{k_s^2 - k^2 \varepsilon_B(k_s)}. \quad (2.45b)$$

Cada término en las expresiones (2.45) representa la contribución al campo total de un modo normal electromagnético discreto s con número de onda cuantizado k_s , Ec. (2.37).

A diferencia del modelo de Drude-Lorentz en el que es posible definir la permitividad del metal (4.39), dentro del enfoque de Boltzmann dicha cantidad no puede ser precisada bajo condiciones de dispersión espacial fuerte, Ec. (2.6). Sin embargo, cada modo normal s del campo contribuye a la respuesta electromagnética de la placa mediante su propia permitividad $\varepsilon_B(k_s)$:

$$\varepsilon_B(k_s) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\nu)} \mathcal{K}(k_s l_\omega). \quad (2.46)$$

La dependencia en el número de onda k_s de la permitividad efectiva (2.46) está determinada por el factor de no localidad clásico $\mathcal{K}(k_s l_\omega)$:

$$\mathcal{K}(k_s l_\omega) = \frac{3}{2} \int_0^1 \frac{(1 - n_x^2) dn_x}{1 + (k_s l_\omega n_x)^2}. \quad (2.47)$$

Sustituyendo las expresiones (2.45) para los campos eléctrico y magnético del enfoque de la ecuación cinética de Boltzmann en la definición general (2.14), se obtienen las impedancias superficiales clásicas no locales:

$$\zeta_0^{(B)} = -\frac{ik}{d} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{k_s^2 - k^2 \varepsilon_B(k_s)}, \quad (2.48a)$$

$$\zeta_d^{(B)} = -\frac{ik}{d} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{\cos(k_s d)}{k_s^2 - k^2 \varepsilon_B(k_s)}. \quad (2.48b)$$

Al igual que las distribuciones de los campos dentro de la placa metálica (2.45), ambas impedancias (2.48) reciben contribuciones de los modos electromagnéticos independientes s a través de sus permitividades efectivas (2.46). Nótese que adicionalmente a los parámetros ω , ν y d presentes en las impedancias de Drude-Lorentz (2.21), las impedancias clásicas

no locales (2.48) dependen de un parámetro extra presente en el factor de no localidad $\mathcal{K}(k_s l_\omega)$: la velocidad de Fermi V_F . Este cuarto parámetro determina el ancho de la región de no localidad (2.7) en muestras masivas.

Es importante señalar que el factor de no localidad clásico (2.47) posee dos singularidades aisladas n_x^+ y n_x^- en los puntos:

$$n_x^\pm = \pm \frac{i}{k_s l_\omega} \quad (2.49)$$

$$= \pm \frac{\omega + i\nu}{k_s V_F}. \quad (2.50)$$

El polo n_x^- con la parte real negativa se encuentra fuera del intervalo de integración $\{n_x | 0 \leq n_x \leq 1\}$, por lo cual, no contribuye al valor de la integral. Por su parte, el polo n_x^+ con la parte real positiva, se ubicará dentro de los límites de la integral al cumplirse que $\omega/k_s V_F < 1$, vea la Figura 2.2. Entonces, la singularidad en n_x^+ tiene lugar dentro del intervalo de integración

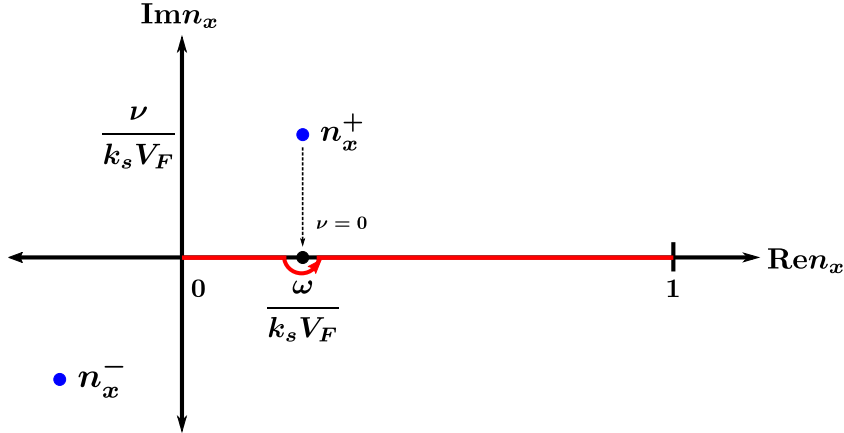


Figura 2.2: Ubicación de los polos n_x^\pm .

cuando la escala de variación espacial $|k_s|^{-1}$ del modo normal electromagnético s es menor que el recorrido libre efectivo $|l_\omega|$ de los electrones, es decir,

$$|k_s l_\omega| > 1. \quad (2.51)$$

La expresión (2.51) especifica una condición de no localidad para cada modo normal electromagnético s análoga a la Ec. (2.6) para muestras masivas. En el régimen de dispersión espacial fuerte (2.51) el factor de no localidad clásico presenta un comportamiento singular en n_x^+ , Ec. (2.50). Como consecuencia, la permitividad efectiva $\varepsilon_B(k_s)$ es provista de una parte imaginaria positiva incluso cuando la frecuencia de relajación electrónica tiende a

cero, $\nu \rightarrow 0$. En este caso, el polo n_x^+ se encuentra sobre el eje de los números reales (ver Figura 2.2). Como resultado la integral (2.47) por sí misma tiene una parte imaginaria:

$$\int_0^1 \frac{(1 - n_x^2) dn_x}{1 + (k_s l_\omega n_x)^2} = \mathcal{P.V.} \int_0^1 \frac{(1 - n_x^2) dn_x}{1 + (k_s l_\omega n_x)^2} + i\pi \operatorname{Res}_{n_x=n_x^+} \frac{(1 - n_x^2)}{1 + (k_s l_\omega n_x)^2}. \quad (2.52)$$

De esta manera, la no localidad del sistema metálico provee a los electrones de un mecanismo de absorción de energía electromagnética, que es adicional al de colisiones. Este mecanismo sin colisiones es conocido como amortiguamiento de Landau.

Por el contrario, cuando la dispersión espacial es débil, la escala de variación espacial de los modos electromagnéticos es mucho mayor que el recorrido libre electivo de los electrones,

$$|k_s l_\omega| \ll 1. \quad (2.53)$$

En este caso $\omega/k_s V_F \gg 1$, por lo que el polo n_x^+ se localiza fuera del intervalo de integración $\{n_x | 0 \leq n_x \leq 1\}$. En consecuencia, el factor de no localidad clásico $\mathcal{K}(k_s l_\omega)$ no exhibe la singularidad n_x^+ , Ec. (2.50), en cambio tiene como límite la unidad,

$$\mathcal{K}(k_s) \approx \frac{3}{2} \int_0^1 (1 - n_x^2) dn_x = 1. \quad (2.54)$$

Consecuentemente, la permitividad efectiva derivada en el enfoque de la ecuación cinética (2.46) se simplifica obteniéndose la permitividad del modelo de Drude-Lorentz (2.18), i.e., $\varepsilon_B \approx \varepsilon_{DL}$. Más aun, sustituyendo $\varepsilon_B = \varepsilon_{DL}$ en las ecuaciones para el campo electromagnético (2.45) y las impedancias superficiales (2.48) del modelo de Boltzmann, las sumas sobre los modos normales s pueden ser evaluadas explícitamente. Como resultado se llegan a las expresiones para los campos (2.18) e impedancias superficiales (2.21) del modelo de Drude-Lorentz. Por lo tanto, el enfoque de la ecuación cinética de Boltzmann constituye una aproximación más general al problema del transporte electromagnético en metales que contiene en el caso límite (2.53) el modelo clásico local de Drude-Lorentz.

Regresemos al régimen no local (2.51) para describir un poco más el amortiguamiento de Landau. Clásicamente, este mecanismo es llevado a cabo por electrones que viajan en fase con las ondas electromagnéticas satisfaciendo la condición:

$$\omega = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}. \quad (2.55)$$

Aquí \mathbf{v} es la velocidad electrónica y \mathbf{k} es el vector de onda del campo electromagnético. Dentro de un metal, \mathbf{k} es prácticamente perpendicular a su superficie y de acuerdo con nuestro sistema de referencia esta dirigido a lo largo del eje x , vea la Figura 2.1.

En muestras metálicas masivas con efecto pelicular anómalo $\delta \ll V_F/(\nu - i\omega)$, el mecanismo de absorción dominante es el amortiguamiento de Landau. Aquí la velocidad de fase ω/k de ondas con longitud de variación característica $k^{-1} \sim \delta$, es mucho menor que la velocidad de Fermi de los electrones V_F , es decir, $\omega\delta \ll V_F$. Por esta razón, la condición de absorción (2.55) $\omega = kv_x$ sólo puede satisfacerse por electrones con $v_x/V_F \sim \delta\omega/V_F \ll 1$, i.e., electrones que se mueven prácticamente paralelos a las superficies del metal. Con base en lo anterior podemos distinguir dos clases de electrones dentro de un metal: Los primeros son aquellos que se mueven en el bulto metálico y cuya absorción de energía es determinada por la frecuencia de colisiones ν . Los otros electrones concentrados en la profundidad de piel del metal se mueven a lo largo de la superficie mientras absorben energía directa de la onda electromagnética mediante el mecanismo de Landau.

En el caso de la placa metálica (2.9), el número de onda electromagnético k_s toma valores discretos, Ec. (2.37). Por lo que la condición de absorción del mecanismo de Landau (2.55) presenta la forma:

$$\omega = k_s v_x. \quad (2.56)$$

La expresión (2.56) es equivalente a la condición de no localidad (2.51) (con $\nu = 0$) que se deduce de manera natural dentro del enfoque de la ecuación cinética de Boltzmann. Esto muestra que dicho enfoque permite estudiar los efectos del amortiguamiento de Landau clásico en la respuesta óptica de placas metálicas. Por el contrario, estos efectos no pueden ser analizados con el modelo de Drude-Lorentz ya que éste no considera el fenómeno de dispersión espacial de metales.

En el marco del enfoque de Boltzmann, la respuesta electromagnética clásica no local tanto de placas metálicas como de arreglos con elementos metálicos ha sido estudiada de manera exhaustiva, por ejemplo, en los trabajos [3–6, 25]. Específicamente, en el caso de placas metálicas, en las Refs. [3, 25] se muestra que en la región de altas frecuencias (2.7), la absorción de energía electromagnética oscila con la frecuencia del campo irradiado ω y el espesor de la placa d . También destacan que la amplitud de estas oscilaciones aumenta con la velocidad de Fermi de los electrones V_F . Las oscilaciones en la absorción son una manifestación del mecanismo de amortiguamiento de Landau clásico, ya que este patrón se mantiene al disminuir el parámetro de colisiones electrónicas ν .

Con ayuda del enfoque de la ecuación cinética de Boltzmann es posible describir clásicamente la respuesta óptica de una placa metálica en condiciones de dispersión espacial

fuerte, gracias a la relación no local que existe entre la densidad de corriente y el campo eléctrico, Ec.(2.34a). Además, en el régimen local (2.53) el enfoque de Boltzmann contiene como caso límite el modelo clásico de Drude-Lorentz. Por otra parte, debido a efectos de tamaño, dentro de la placa metálica el campo electromagnético exhibe una superposición de modos normales independientes, Ec(2.45). Este hecho supone la discretización del número de onda electromagnético $k_s = s\pi/d$, Ec.(2.37). Aunado a lo anterior, en el caso de películas metálicas con grosores nanométricos, debemos considerar también la cuantización del movimiento transversal electrónico, lo cual implica la discretización de una segunda cantidad: el momento de los electrones. Por lo tanto, las propiedades electromagnéticas de películas muy delgadas deben ser investigadas con base en un tratamiento cuántico. En particular, en esta tesis nos interesa estudiar el fenómeno del amortiguamiento de Landau en el régimen cuántico, y sus implicaciones en las propiedades fotónicas de arreglos metalodieléctricos.

Capítulo 3

Formalismo cuántico de Kubo

3.1. Formalismo de Kubo

En este capítulo se desarrolla de manera breve el formalismo propuesto por R. Kubo en el marco de la mecánica estadística cuántica en su artículo [17]. Este formalismo se presenta como una alternativa al cálculo de la respuesta lineal de un sistema físico a un campo externo aplicado que varía en el tiempo t .

Supongamos que el hamiltoniano total del sistema $\hat{H}(t)$ puede ser separado en el hamiltoniano del sistema aislado \hat{H}_0 que no depende del tiempo t , más un término perturbativo dependiente del tiempo $\hat{V}(t)$:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t). \quad (3.1)$$

Cabe aclarar que en la ecuación (3.1) hemos señalado solamente la dependencia en el tiempo de los operadores. Sin embargo, tanto el hamiltoniano del sistema en equilibrio \hat{H}_0 como el potencial perturbativo $\hat{V}(t)$, pueden ser funciones de otras cantidades como la posición o el momento de las partículas.

Inicialmente ninguna fuerza externa es aplicada sobre el sistema, $\hat{V}(-\infty) = 0$, por lo que su estado inicial está caracterizado estadísticamente por el operador de densidad $\hat{\rho}_0$:

$$\hat{\rho}_0 = \frac{\exp(-\tilde{\beta}\hat{H}_0)}{\text{Tr}\{\exp(-\tilde{\beta}\hat{H}_0)\}}. \quad (3.2)$$

Aquí $\tilde{\beta} = 1/T$ denota el inverso de la temperatura del sistema.

Por otro lado, al encenderse la perturbación en el sistema, la evolución del operador

de densidad $\hat{\rho}(t)$ es descrita por la ecuación de Liouville-von Neumann,

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)], \quad (3.3)$$

donde los corchetes denotan el conmutador de dos operadores. La ecuación (3.3) para el operador de densidad en la representación de Schrödinger debe satisfacerse junto con la condición inicial,

$$\hat{\rho}(-\infty) = \hat{\rho}_0. \quad (3.4)$$

Con este fin proponemos escribir el operador de densidad del sistema $\hat{\rho}(t)$ como la expansión:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0 + \Delta\hat{\rho}(t), \quad (3.5)$$

donde $\Delta\hat{\rho}(t)$ representa la corrección de primer orden al operador de densidad inicial $\hat{\rho}_0$.

Sustituyendo la expresión (3.5) en la ecuación de evolución (3.3) y considerando la condición de equilibrio $[\hat{H}_0, \hat{\rho}_0] = 0$, en la aproximación lineal respecto a la perturbación $\hat{V}(t)$ obtenemos la igualdad:

$$i\hbar \frac{\partial \Delta\hat{\rho}(t)}{\partial t} = [\hat{H}_0, \Delta\hat{\rho}(t)] + [\hat{V}(t), \hat{\rho}_0]. \quad (3.6)$$

Resulta conveniente resolver la ecuación (3.6) utilizando la representación de Heisenberg del sistema sin perturbar, es decir, aquella en la que la dinámica de los operadores es dictada por el hamiltoniano \hat{H}_0 . Dentro de la representación de Heisenberg respecto al sistema en equilibrio, los operadores son transformados de acuerdo con las siguientes definiciones: Para el potencial perturbativo $\hat{V}(t)$,

$$\hat{V}^{(H)}(t) = \exp\left(\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right) \hat{V}(t) \exp\left(-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right). \quad (3.7)$$

El operador de densidad $\Delta\hat{\rho}(t)$,

$$\Delta\hat{\rho}^{(H)}(t) = \exp\left(\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right) \Delta\hat{\rho}(t) \exp\left(-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right). \quad (3.8)$$

Aquí el superíndice (H) hace referencia a la representación de Heisenberg de los operadores; mientras que los operadores sin superíndices corresponden a su versión en la representación de Schrödinger. Evidentemente el hamiltoniano \hat{H}_0 y el operador de densidad $\hat{\rho}_0$ del sistema aislado en la representación de Heisenberg conservan la misma forma de la representación

de Schrödinger, i.e., $\hat{H}_0^{(H)} \equiv \hat{H}_0$ y $\hat{\rho}_0^{(H)} \equiv \hat{\rho}_0$. Si ahora tomamos la derivada respecto al tiempo de la expresión (3.9) tenemos que,

$$i\hbar \frac{\partial \Delta \hat{\rho}^{(H)}(t)}{\partial t} = i\hbar \left(\frac{\partial \Delta \hat{\rho}^{(H)}(t)}{\partial t} \right)^{(H)} + [\Delta \hat{\rho}^{(H)}(t), \hat{H}_0]. \quad (3.9)$$

Con la ayuda de la Eq. (3.6) expresamos la parte derecha de la ecuación (3.9) como el conmutador entre el potencial perturbativo en la representación de Heisenberg $F(t)\hat{A}^{(H)}$ y la densidad inicial $\hat{\rho}_0$. De tal manera, podemos reescribir la ecuación (3.9) en la forma compacta y cerrada:

$$i\hbar \frac{\partial \Delta \hat{\rho}^{(H)}(t)}{\partial t} = [\hat{V}^{(H)}(t), \hat{\rho}_0]. \quad (3.10)$$

La solución de la ecuación (3.10) sujeta a la condición inicial (3.4), la cual equivale a exigir que $\Delta \hat{\rho}^{(H)}(-\infty) = 0$, tiene la forma:

$$\Delta \hat{\rho}^{(H)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [\hat{V}^{(H)}(t'), \hat{\rho}_0]. \quad (3.11)$$

Regresemos a la representación de Schrödinger del operador (3.11) mediante la aplicación de la transformación inversa,

$$\Delta \hat{\rho}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \exp\left(-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right) [\hat{V}^{(H)}(t'), \hat{\rho}_0] \exp\left(\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right). \quad (3.12)$$

Sustituyendo el resultado (3.12) en la expansión (3.5), obtenemos el operador de densidad del sistema fuera del equilibrio,

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \exp\left(-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right) [\hat{V}^{(H)}(t'), \hat{\rho}_0] \exp\left(\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right). \quad (3.13)$$

El operador de densidad $\hat{\rho}(t)$ contiene toda la información física relevante del sistema. En particular la expresión (3.13) constituye una aproximación de primer orden respecto al potencial perturbativo $\hat{V}(t)$. La respuesta del sistema a tal perturbación es analizada a través de la evolución en el tiempo de una observable física O , la cual en mecánica cuántica está asociada con un operador hermítico \hat{O} . Si la perturbación es débil, el valor esperado del operador puede calcularse mediante una aproximación lineal empleando la expresión (3.13).

Así el promedio del ensamble $\langle \hat{O}(t) \rangle$ se define como,

$$\begin{aligned} \langle \hat{O}(t) \rangle &\equiv \text{Tr}\{\hat{\rho}(t) \hat{O}\} \\ &= \langle \hat{O}_0 \rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr}\left\{ \exp\left(-\frac{i\hat{H}_0 t'}{\hbar}\right) [\hat{V}^{(H)}(t'), \hat{\rho}_0] \exp\left(\frac{i\hat{H}_0 t'}{\hbar}\right) \hat{O} \right\} \\ &= \langle \hat{O}_0 \rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr}\left\{ [\hat{V}^{(H)}(t'), \hat{\rho}_0] \hat{O}^{(H)}(t) \right\} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Aquí $\langle \hat{O}_0 \rangle = \text{Tr}\{\hat{\rho}_0 \hat{O}\}$. Para obtener la expresión final (3.14) hemos utilizado la propiedad conmutativa de la traza, $\text{Tr}\{XY\} = \text{Tr}\{YX\}$, y la representación de Heisenberg $\hat{O}^{(H)}(t)$ del operador \hat{O} :

$$\hat{O}^{(H)}(t) = \exp\left(\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right) \hat{O} \exp\left(-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right). \quad (3.15)$$

El cambio en la propiedad física O debido a la presencia del potencial perturbativo está dado entonces por la cantidad $\langle \Delta \hat{O}(t) \rangle = \langle \hat{O}(t) \rangle - \langle \hat{O}_0 \rangle$:

$$\langle \Delta \hat{O}(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr}\left\{ [\hat{V}^{(H)}(t'), \hat{\rho}_0] \hat{O}^{(H)}(t) \right\}. \quad (3.16)$$

La expresión (3.16) constituye una ecuación general para el cálculo de la respuesta externa de un sistema a cualquier potencial perturbativo dependiente del tiempo. En la mayoría de los casos, dicha perturbación $\hat{V}(t)$ puede escribirse como el producto de un operador hermítico \hat{A} por una función compleja $F(t)$ que representa el campo de fuerza clásico,

$$\hat{V}(t) = F(t)\hat{A}. \quad (3.17)$$

Aquí, el operador \hat{A} en la representación de Schrödinger no depende explícitamente del tiempo; mientras que la función $F(t)$, que dicho sea de paso conmuta con \hat{A} , es quien depende explícitamente de t . Suponiendo que el potencial perturbativo tiene la forma (3.17), sustituimos $\hat{V}^{(H)}(t) = F(t)\hat{A}^{(H)}(t)$ en la ecuación (3.16), teniendo como resultado:

$$\langle \Delta \hat{O}(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr}\left\{ F(t') [\hat{A}^{(H)}(t'), \hat{\rho}_0] \hat{O}^{(H)}(t) \right\}, \quad (3.18)$$

donde $\hat{A}^{(H)}(t)$ es la representación de Heisenberg del operador \hat{A} ,

$$\hat{A}^{(H)}(t) = \exp\left(\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right) \hat{A} \exp\left(-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right). \quad (3.19)$$

Como veremos a continuación una relación que nos será de gran utilidad es la llamada identidad de Kubo:

$$-\frac{1}{i\hbar}[\hat{A}^{(H)}(t), \hat{\rho}_0] = \int_0^{\tilde{\beta}} \hat{\rho}_0 \hat{A}^{(H)}(t - i\hbar\lambda) d\lambda. \quad (3.20)$$

Aquí $\hat{A}^{(H)}(t) \equiv [d\hat{A}/dt]^{(H)}(t)$, es decir, primero debemos derivar el operador \hat{A} respecto al tiempo t en la representación de Schrödinger, y posteriormente, transformar dicha derivada a su representación de Heisenberg. El operador $\hat{A}^{(H)}(t)$ está relacionado con el operador $\hat{A}^{(H)}(t)$, Ec. (3.19), mediante la ecuación de movimiento de Heisenberg:

$$\hat{A}^{(H)}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^{(H)}(t), \hat{H}_0], \quad (3.21)$$

Cuando $t = 0$ las representaciones de Heisenberg y Schrödinger coinciden, $\hat{A}^{(H)}(0) = \hat{A}$. En este caso la ecuación (3.21) se transforma en la relación:

$$\hat{A} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{H}_0]. \quad (3.22)$$

Cabe mencionar que la igualdad (3.20) aparece en el artículo original de Kubo [17] y su demostración se ofrece al lector en la subsección 3.1.1 de este capítulo.

Por último, con la ayuda de la identidad de Kubo (3.20), reescribimos la ecuación (3.16) como:

$$\begin{aligned} \langle \Delta \hat{O} \rangle &= - \int_{-\infty}^t dt' \int_0^{\tilde{\beta}} d\lambda \operatorname{Tr} \left\{ \hat{\rho}_0 F(t') \hat{A}^{(H)}(t' - i\hbar\lambda) \hat{O}^{(H)}(t) \right\} \\ &= - \int_{-\infty}^t dt' \int_0^{\tilde{\beta}} d\lambda \operatorname{Tr} \left\{ \hat{\rho}_0 F(t') \exp \left[\frac{iH_0(t' - i\hbar\lambda)}{\hbar} \right] \hat{A} \exp \left[-\frac{iH_0(t' - i\hbar\lambda)}{\hbar} \right] \hat{O}^{(H)}(t) \right\} \\ &= - \int_{-\infty}^t dt' \int_0^{\tilde{\beta}} d\lambda \operatorname{Tr} \left\{ \hat{\rho}_0 F(t') \hat{A} \hat{O}^{(H)}(t - t' + i\hbar\lambda) \right\} \\ &= - \int_{-\infty}^t dt' \int_0^{\tilde{\beta}} d\lambda \operatorname{Tr} \left\{ \hat{\rho}_0 \hat{V}(t') \hat{O}^{(H)}(t - t' + i\hbar\lambda) \right\}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

donde $\hat{V}(t)$ representa la derivada del operador \hat{A} con respecto al tiempo a $t = 0$, Ec. (3.22), multiplicada por la función compleja $F(t)$ sin derivar,

$$\hat{V}(t) = F(t) \hat{A} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{V}(t), \hat{H}_0]. \quad (3.24)$$

El resultado general (3.23) se conoce como fórmula de Kubo. Esta ecuación resulta útil en el cálculo de diversos coeficientes cinéticos tales como conductividad eléctrica, susceptibilidad magnética y conductividad térmica de sistemas sometidos a perturbaciones débiles.

3.1.1. Identidad de Kubo

En esta subsección demostraremos la identidad de Kubo (3.20) presentada en la Sección 3.1:

$$-\frac{1}{i\hbar}[\hat{A}^{(H)}(t), \hat{\rho}_0] = \int_0^{\tilde{\beta}} \hat{\rho}_0 \hat{A}^{(H)}(t - i\hbar\lambda) d\lambda. \quad (3.25)$$

Para comenzar consideremos solamente la parte derecha de la igualdad (3.25). De acuerdo con la definición (3.19), tenemos que,

$$\hat{A}^{(H)}(t - i\hbar\lambda) = \exp(\lambda\hat{H}_0) \hat{A}^{(H)}(t) \exp(-\lambda\hat{H}_0). \quad (3.26)$$

Siguiendo la fórmula (3.21) reescribimos la ecuación (3.26) como:

$$\hat{A}_H(t - i\hbar\lambda) = \frac{1}{i\hbar} \exp(\lambda\hat{H}_0) [\hat{A}^{(H)}(t), \hat{H}_0] \exp(-\lambda\hat{H}_0). \quad (3.27)$$

Ahora calculemos el conmutador (3.27):

$$\begin{aligned} \hat{A}_H(t - i\hbar\lambda) &= \frac{1}{i\hbar} \left[\exp(\lambda\hat{H}_0) \hat{A}_H(t) \hat{H}_0 \exp(-\lambda\hat{H}_0) - \exp(\lambda\hat{H}_0) \hat{H}_0 \hat{A}^{(H)}(t) \exp(-\lambda\hat{H}_0) \right] \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[-\exp(\lambda\hat{H}_0) \hat{A}^{(H)}(t) \frac{d \exp(-\lambda\hat{H}_0)}{d\lambda} - \frac{d \exp(\lambda\hat{H}_0)}{d\lambda} \hat{A}^{(H)}(t) \exp(-\lambda\hat{H}_0) \right] \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \left\{ \frac{d}{d\lambda} \left[\exp(\lambda\hat{H}_0) \hat{A}^{(H)}(t) \exp(-\lambda\hat{H}_0) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Sustituyendo (3.28) en la parte derecha de la ecuación (3.25), obtenemos:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_H(t), \hat{\rho}_0] &= -\frac{1}{i\hbar} \int_0^{\tilde{\beta}} \hat{\rho}_0 \frac{d}{d\lambda} \left[\exp(\lambda\hat{H}_0) \hat{A}^{(H)}(t) \exp(-\lambda\hat{H}_0) \right] d\lambda \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \frac{\exp(-\tilde{\beta}\hat{H}_0)}{\text{Tr} \exp(-\tilde{\beta}\hat{H}_0)} \left[\exp(\tilde{\beta}\hat{H}_0) \hat{A}^{(H)}(t) \exp(-\tilde{\beta}\hat{H}_0) - \hat{A}^{(H)}(t) \right] \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \left[\hat{A}^{(H)}(t) \hat{\rho}_0 - \hat{\rho}_0 \hat{A}^{(H)}(t) \right] \\ &= -\frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H(t), \hat{\rho}_0]. \end{aligned}$$

La identidad de Kubo (3.25) queda demostrada.

3.2. Fórmula de Kubo para el vector de densidad de corriente y el tensor de conductividad eléctrica

En esta sección aplicaremos la fórmula de Kubo (3.23) al caso particular del transporte electromagnético en metales. Considere un metal no magnético en presencia de un campo eléctrico. Gracias a la alta densidad de electrones de conducción en el metal, este campo es débil en todas las situaciones reales. En este caso, el término $\hat{V}(t)$ en el hamiltoniano total (3.1) representa la perturbación en la energía debido a la presencia del potencial eléctrico escalar $\phi(\mathbf{x}, t)$:

$$\hat{V}(t) = \int d^3\mathbf{x} \phi(\mathbf{x}, t) \hat{\rho}(\mathbf{x}). \quad (3.29)$$

Aquí, $\hat{\rho}(\mathbf{x})$ es el operador de densidad de carga del sistema sin perturbar. Dicho operador representa la distribución de electrones de conducción con carga $-e$ dentro del metal.

Suponiendo que el campo eléctrico total existente $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ es conservativo, éste estará relacionado con el potencial escalar como $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = -\nabla\phi(\mathbf{x}, t)$. La respuesta lineal del sistema a dicho campo puede ser calculada aplicando el resultado (3.23). Así, el promedio de la densidad de corriente $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ generada en la dirección α por la aplicación de un campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ en dirección β es:

$$j_\alpha(\mathbf{x}, t) = -2 \int_{-\infty}^t dt' \int_0^{\tilde{\beta}} d\lambda \text{Tr}\{\hat{\rho}_0 \hat{V}(t) \hat{J}_\alpha^{(H)}(\mathbf{x}, t - t' + i\lambda\hbar)\}, \quad (3.30)$$

Aquí $\hat{\mathbf{J}}^{(H)}(\mathbf{x}, t)$ representa el operador de densidad de corriente eléctrica en la representación de Heisenberg. Este mismo operador en la representación de Schrödinger, $\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{x})$, no depende explícitamente del tiempo t . También hemos incluido el factor 2 en la expresión (3.30) considerando los estados electrónicos degenerados con respecto a su espín.

El primer paso para obtener la densidad de corriente (3.30) es calcular la derivada parcial respecto al tiempo $\hat{V}(t)$ de la perturbación. Usando la igualdad (3.24), se sigue que:

$$\begin{aligned} \hat{V}(t) &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{V}(t), \hat{H}_0] \\ &= \int d^3\mathbf{x} \phi(\mathbf{x}, t) \frac{1}{i\hbar} [\hat{\rho}(\mathbf{x}), \hat{H}_0] \\ &= \int d^3\mathbf{x} \phi(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \hat{\rho}(\mathbf{x})}{\partial t} \end{aligned}$$

Usando la ecuación de continuidad, $\partial \hat{\rho}(t) / \partial t = -\nabla \cdot \hat{\mathbf{J}}$, seguida de operaciones matemáticas

que comprenden integración por partes y la aplicación del teorema de Gauss, se tiene:

$$\begin{aligned}
 \hat{V}(t) &= - \int d^3\mathbf{x} \phi(\mathbf{x}, t) \nabla \cdot \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{x}) \\
 &= \int d^3\mathbf{x} \nabla \phi(\mathbf{x}, t) \cdot \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{x}) \\
 &= - \int d^3\mathbf{x} \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}, t)
 \end{aligned} \tag{3.31a}$$

Entonces, de acuerdo con la ecuación (3.30), el cambio en la densidad de corriente debido a la presencia del campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ está dado por el promedio:

$$j_\alpha(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{x}' \int_{-\infty}^t dt' \varphi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t') E_\beta(\mathbf{x}', t'), \tag{3.32a}$$

donde $\varphi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t')$ es la llamada función de respuesta,

$$\varphi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t') = 2 \int_0^{\tilde{\beta}} d\lambda \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_0 \hat{J}_\beta^{(H)}(\mathbf{x}', t' - i\hbar\lambda) \hat{J}_\alpha^{(H)}(\mathbf{x}, t) \right\}. \tag{3.32b}$$

A continuación, empleando la base $|a\rangle$ de eigen funciones donde el hamiltoniano \hat{H}_0 es diagonal, calculemos la forma explícita de la función de respuesta $\varphi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t')$:

$$\begin{aligned}
 \varphi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t') &= 2 \int_0^{\tilde{\beta}} \sum_a \langle a | \hat{\rho}_0 \exp \left[\frac{i\hat{H}_0(t' - i\hbar\lambda)}{\hbar} \right] \hat{J}_\beta(\mathbf{x}') \exp \left[-\frac{i\hat{H}_0(t' - i\hbar\lambda)}{\hbar} \right] \\
 &\quad \times \exp \left(\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar} \right) \hat{J}_\alpha(\mathbf{x}) \exp \left(-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar} \right) |a\rangle d\lambda.
 \end{aligned}$$

Con ayuda de la relación de cerradura $\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = \hat{1}$, se llegan a las expresiones,

$$\begin{aligned}
 \varphi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t, t') &= 2 \sum_{a, a'} \langle a | \hat{J}_\beta(\mathbf{x}') |a'\rangle \langle a' | \hat{J}_\alpha(\mathbf{x}) |a\rangle \exp \left[-\frac{i(\epsilon_a - \epsilon_{a'})(t - t')}{\hbar} \right] \times \\
 &\quad \times \frac{\exp(-\tilde{\beta}\epsilon_a)}{\text{Tr}\{\exp(-\tilde{\beta}\epsilon_a)\}} \times \int_0^{\tilde{\beta}} \exp[(\epsilon_a - \epsilon_{a'})\lambda] d\lambda \\
 &= 2 \sum_{a, a'} \langle a | \hat{J}_\beta(\mathbf{x}') |a'\rangle \langle a' | \hat{J}_\alpha(\mathbf{x}) |a\rangle \times \frac{\tilde{\mathfrak{F}}_{a'} - \tilde{\mathfrak{F}}_a}{\epsilon_a - \epsilon_{a'}} \times \exp \left[-\frac{i(\epsilon_a - \epsilon_{a'})(t - t')}{\hbar} \right].
 \end{aligned} \tag{3.33a}$$

En la última expresión (3.33a) hemos tenido en cuenta que el gas de electrones cuánticos obedece la estadística de Fermi-Dirac. Esto significa que la matriz de densidad de los electrones no perturbados $\hat{\rho}_0$ en la representación del hamiltoniano \hat{H}_0 es diagonal con elementos diagonales iguales a la función de distribución de Fermi-Dirac (2.28):

$$\tilde{\mathfrak{F}}_a = \frac{\exp(-\tilde{\beta}\epsilon_a)}{\text{Tr}\{\exp(-\tilde{\beta}\epsilon_a)\}} \equiv f_F(\epsilon_a). \tag{3.34}$$

En la función de distribución de equilibrio \mathfrak{F}_a , la energía de los electrones de conducción ϵ_a está cuantizada.

A continuación calculemos la transformada de Fourier en el tiempo de la densidad de corriente $j_\alpha(\mathbf{x}, t)$. Para ello apliquemos las fórmulas:

$$\tilde{j}_\alpha(\mathbf{x}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) j_\alpha(\mathbf{x}, t), \quad (3.35a)$$

para la densidad de corriente (3.32a), y

$$\tilde{E}_\beta(\mathbf{x}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) E_\beta(\mathbf{x}, t) \quad (3.35b)$$

para el campo eléctrico. De la expresión (3.33a) vemos que la función de respuesta $\varphi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t-t')$ depende del tiempo solamente a través de la diferencia $\tau = t - t'$. Por lo cual, de acuerdo con el teorema de convolución, la transformada de Fourier $\tilde{j}_\alpha(\mathbf{x}, \omega)$ está dada por la función:

$$\tilde{j}_\alpha(\mathbf{x}, \omega) = \int d^3\mathbf{x}' \chi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) \tilde{E}_\beta(\mathbf{x}', \omega), \quad (3.36)$$

donde $\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega)$ es la transformada de Fourier en el tiempo de la función de respuesta $\varphi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau)$:

$$\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) = \int_0^{\infty} d\tau \exp(i\omega\tau) \varphi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau). \quad (3.37)$$

Debido a que la función de respuesta en la representación de Fourier $\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega)$ debe ser una función analítica en el plano ω complejo, debe considerarse que la frecuencia ω tiene una pequeña parte imaginaria $\omega \rightarrow \omega + i\nu$. Con ello se asegura el comportamiento analítico de la función durante la integración (3.37):

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) &= 2 \sum_{a, a'} \langle a | \hat{J}_\beta(\mathbf{x}') | a' \rangle \langle a' | \hat{J}_\alpha(\mathbf{x}) | a \rangle \times \frac{\mathfrak{F}_{a'} - \mathfrak{F}_a}{\epsilon_a - \epsilon_{a'}} \times \\ &\quad \times \int_0^{\infty} d\tau \exp\{-i[\epsilon_a - \epsilon_{a'} - \hbar(\omega + i\nu)]\tau/\hbar\} \\ &= 2 \sum_{a, a'} \langle a | \hat{J}_\beta(\mathbf{x}') | a' \rangle \langle a' | \hat{J}_\alpha(\mathbf{x}) | a \rangle \times \frac{\mathfrak{F}_{a'} - \mathfrak{F}_a}{\epsilon_a - \epsilon_{a'}} \times \frac{1}{\nu + i(\epsilon_a - \epsilon_{a'} - \hbar\omega)/\hbar} \\ &= 2\hbar \sum_{a, a'} \frac{\mathfrak{F}_a - \mathfrak{F}_{a'}}{\epsilon_{a'} - \epsilon_a} \times \frac{\langle a | \hat{J}_\alpha(\mathbf{x}) | a' \rangle \langle a' | \hat{J}_\beta(\mathbf{x}') | a \rangle}{\hbar\nu + i(\epsilon_{a'} - \epsilon_a - \hbar\omega)}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Cabe mencionar que esta pequeña parte imaginaria ν puede interpretarse como la frecuencia de relajación de los electrones al interactuar con el campo electromagnético o impurezas,

defectos y fonones en el metal. De tal manera que la frecuencia de relajación electrónica ν entra en el formalismo de Kubo como un parámetro fenomenológico.

Finalmente, obtenemos la representación de Fourier de la densidad de corriente cuántica de los electrones de conducción:

$$\tilde{j}_\alpha(\mathbf{x}, \omega) = \int d^3\mathbf{x}' \chi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) \tilde{E}_\beta(\mathbf{x}', \omega), \quad (3.39a)$$

$$\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) = 2\hbar \sum_{a,a'} \frac{\tilde{\mathfrak{F}}_a - \tilde{\mathfrak{F}}_{a'}}{\epsilon_{a'} - \epsilon_a} \times \frac{\langle a | \hat{J}_\alpha(\mathbf{x}) | a' \rangle \langle a' | \hat{J}_\beta(\mathbf{x}') | a \rangle}{\hbar\nu + i(\epsilon_{a'} - \epsilon_a - \hbar\omega)}. \quad (3.39b)$$

Aquí $\langle a | \hat{J}_\alpha(x, \mathbf{r}) | a' \rangle$ y $\langle a' | \hat{J}_\beta(x, \mathbf{r}) | a \rangle$ son los elementos de matriz del operador de densidad de corriente eléctrica $\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{x})$. La forma de dichas cantidades se conoce bien de libros mecánica cuántica elemental, por ejemplo [26]. La ecuación (3.39a) describe una relación local (2.8) entre la densidad de corriente y el campo eléctrico aplicado. Esto la vuelve una herramienta muy útil en el estudio cuántico de la respuesta electromagnética de metales bajo condiciones de dispersión espacial fuerte. Por ello, en la siguiente sección aplicaremos la fórmula de Kubo (3.39) en el cálculo de la densidad de corriente de una película metálica ultra delgada, lo cual nos pertimirá analizar sus propiedades ópticas en un régimen cuántico no local.

Capítulo 4

Respuesta electromagnética de una película delgada metálica

4.1. Densidad de corriente cuántica no local

En este capítulo estudiaremos de manera analítica y numérica la respuesta óptica de una película metálica, Ec. (2.9), expuesta a un campo electromagnético con polarización (2.10), vea la Figura 2.1. Con este fin, emplearemos el formalismo de Kubo para derivar una expresión cuántica no local de la densidad de corriente eléctrica producida por los electrones de conducción en el metal. Dicho estudio puede ser consultado también en nuestros trabajos [27, 28].

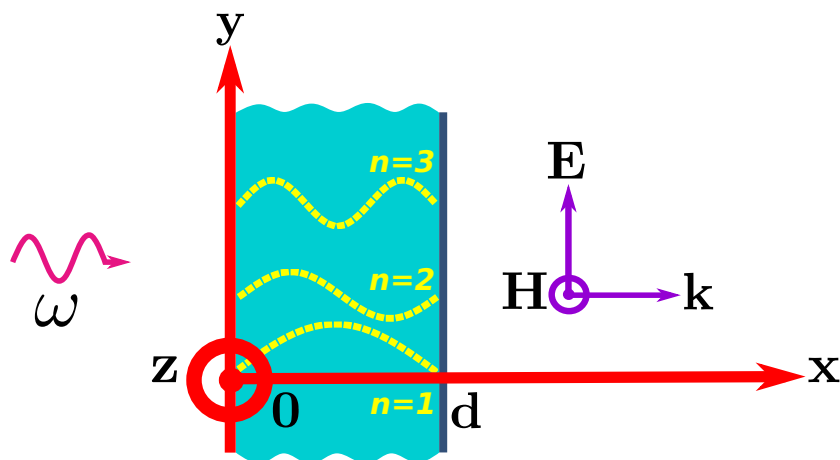


Figura 4.1: Esquema del sistema.

Dentro de la película metálica el movimiento transversal de los electrones de conducción se encuentra restringido por las fronteras del material, $x = 0$ y $x = d$. Considerando por simplicidad que los electrones se reflejan especularmente en dichas fronteras, en ausencia del campo electromagnético, podemos homologar el movimiento electrónico con el de una partícula confinada por barreras impenetrables. En este caso, cada electrón de conducción dentro de la película (2.9) es descrito por el estado estacionario de una sola partícula, el cual está determinado por el conjunto completo a de tres números cuánticos electrónicos:

$$a = \{n, q_y, q_z\}, \quad n = 1, 2, 3, \dots; \quad -\infty < q_y, q_z < \infty. \quad (4.1)$$

El número entero n especifica la componente transversal del número de onda electrónico q_x , éste toma los valores discretos:

$$q_x = q_n \equiv \pi n/d. \quad (4.2)$$

Por el contrario, los números de onda longitudinales q_y y q_z son cantidades continuas debido a que el movimiento de los electrones de conducción no tiene restricción alguna a lo largo de las direcciones y y z .

La dependencia de las eigenenergías ϵ_a del hamiltoniano del sistema no perturbado en los números cuánticos (4.1) se define por la fórmula:

$$\epsilon_a = \epsilon_n(q_y, q_z) \equiv \frac{\hbar^2}{2m} (q_n^2 + q_y^2 + q_z^2). \quad (4.3)$$

En correspondencia con las energías (4.3), se definen las funciones de onda ortonormalizadas $\Psi_a(x, y, z)$ de los electrones en los estados- a dentro del metal:

$$\Psi_a(x, y, z) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin(q_n x) \frac{1}{2\pi} \exp(iq_y y + iq_z z). \quad (4.4)$$

La densidad de corriente cuántica de los electrones de conducción $\mathbf{j}(x, \mathbf{r}; t) = \mathbf{j}(x, \mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$, en la aproximación lineal en el campo eléctrico $\mathbf{E}(x, \mathbf{r}; t) = \mathbf{E}(x, \mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$, puede ser calculada haciendo uso de la fórmula de Kubo para la densidad de corriente eléctrica (3.39). En este caso, en que el campo eléctrico y densidad de corriente son monocromáticos, la ecuación (3.39a) toma la forma:

$$j_\alpha(x, \mathbf{r}) = \int_V dx' d^2\mathbf{r}' \chi_{\alpha\beta}(x, \mathbf{r}; x', \mathbf{r}') E_\beta(x', \mathbf{r}'); \quad (4.5)$$

$$\alpha, \beta = x, y, z; \quad \mathbf{r} = \{y, z\};$$

Aquí la región de integración cubre el volumen total V del metal (2.9), y la suma sobre el índice vectorial repetido β está implícita. En la expresión (4.5), las transformadas de Fourier respecto al tiempo de la densidad de corriente $\tilde{j}_\alpha(x, \mathbf{r}, \omega) = j_\alpha(x, \mathbf{r})2\pi\delta(\omega - \omega')$ y el campo eléctrico $\tilde{E}_\beta(x', \mathbf{r}', \omega) = E_\beta(x', \mathbf{r}')2\pi\delta(\omega - \omega')$ fueron calculadas de acuerdo con las definiciones (3.35).

La función de respuesta $\chi_{\alpha\beta}(x, \mathbf{r}; x', \mathbf{r}')$ es la misma que la definida en la ecuación (3.39b). En dicha fórmula, a y a' , corresponden al conjunto completo de números cuánticos (4.1) y (4.2) de estados electrónicos no perturbados con energías (4.3), ϵ_a y $\epsilon_{a'}$, respectivamente. Además, el símbolo de suma implica la adición sobre los números cuánticos discretos n y n' , y la integración sobre las cantidades continuas q_y, q_z y q'_y, q'_z . Los elementos de matriz $\langle a | \hat{J}_\alpha(x, \mathbf{r}) | a' \rangle$ de la componente α del operador de densidad de corriente presentes en la expresión (3.39b), son tomados respecto a los estados- a del sistema en equilibrio,

$$\langle a | \hat{J}_\alpha(x, \mathbf{r}) | a' \rangle = \frac{i\hbar e}{2m} \left[\Psi_a^*(x, \mathbf{r}) \nabla_\alpha \Psi_{a'}(x, \mathbf{r}) - \Psi_{a'}(x, \mathbf{r}) \nabla_\alpha \Psi_a^*(x, \mathbf{r}) \right]. \quad (4.6)$$

Así, en la fórmula (4.6), $\Psi_a(x, \mathbf{r})$ representa las funciones de onda electrónicas (4.4), y el asterisco “*” implica la conjugación compleja.

De acuerdo con la expresión general (4.5) y considerando la polarización del campo eléctrico (2.10a), obtenemos la densidad de corriente (2.11),

$$j(x) = \int_0^d dx' \chi(x, x') E(x'), \quad 0 \leq x \leq d. \quad (4.7)$$

Aquí $\chi(x, x')$ es la función de respuesta truncada dada por la fórmula:

$$\chi(x, x') = \int_{-\infty}^{\infty} d^2 \mathbf{r}' \chi_{yy}(x, \mathbf{r}; x', \mathbf{r}'). \quad (4.8)$$

Siguiendo la definición (4.6), los elementos de matriz que componen la función de respuesta $\chi_{yy}(x, \mathbf{r}; x', \mathbf{r}')$ tienen la forma,

$$\begin{aligned} \langle a | \hat{J}_y(x, \mathbf{r}) | a' \rangle &= -\frac{\hbar e(q_y + q'_y)}{md(2\pi)^2} \sin(q_n x) \sin(q_{n'} x) \\ &\times \exp[-i(q_y - q'_y)y] \exp[-i(q_z - q'_z)z]. \end{aligned} \quad (4.9a)$$

$$\begin{aligned} \langle a' | \hat{J}_y(x', \mathbf{r}') | a \rangle &= -\frac{\hbar e(q_y + q'_y)}{md(2\pi)^2} \sin(q_n x') \sin(q_{n'} x') \\ &\times \exp[i(q_y - q'_y)y'] \exp[i(q_z - q'_z)z']. \end{aligned} \quad (4.9b)$$

La sustitución de las fórmulas (4.9) en la función de respuesta (3.39b) nos permite evaluar la integral sobre el radio vector $\mathbf{r}' = \{y', z'\}$ descrita en la Ec. (4.8). Lo anterior da lugar a la aparición de dos funciones delta de Dirac,

$$\delta(q_y - q'_y) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy'}{2\pi} \exp [i (q_y - q'_y) y'], \quad (4.10a)$$

$$\delta(q_z - q'_z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{2\pi} \exp [i (q_z - q'_z) z']; \quad (4.10b)$$

que representan la conservación de los números de onda continuos q_y y q_z en los estados cuánticos a y a' . Con ayuda de las funciones (4.10) resolvemos las integrales de q_y y q'_y presentes de manera implícita en el símbolo de suma sobre a' de la ecuación (3.39b). De esta manera eliminamos también la dependencia en el radio vector $\mathbf{r} = \{x, y\}$. Como resultado obtenemos una expresión cuántica exacta y explícita para $\chi(x, x')$,

$$\begin{aligned} \chi(x, x') = & \frac{2\hbar^2 e^2}{m^2} \sum_{n, n'=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_z}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_y}{2\pi} q_y^2 \frac{\mathfrak{F}_n(q_y, q_z) - \mathfrak{F}_{n'}(q_y, q_z)}{\epsilon_{n'}(q_y, q_z) - \epsilon_n(q_y, q_z)} \times \\ & \times \frac{(2/d)^2 \sin(q_n x) \sin(q_{n'} x) \sin(q_n x') \sin(q_{n'} x')}{(\nu - i\omega) + i\hbar(q_{n'}^2 - q_n^2)/2m}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Es importante resaltar que la función de respuesta troncada (4.11) es una función par y periódica de periodo $2d$ con respecto a sus argumentos x y x' ,

$$\begin{aligned} \chi(x, x') &= \chi(-x, x') = \chi(x, -x'), \\ \chi(x, x') &= \chi(x + 2d, x') = \chi(x, x' + 2d). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Las simetrías (4.12) que exhibe la función de respuesta, determinan la representación de Fourier adecuada, y físicamente razonable, que debe ser aplicada para la resolución del problema.

4.2. Ecuaciones de Maxwell. Distribución del campo electromagnético

La ecuación de Maxwell (2.12) con la densidad de corriente $j(x)$ determinada por las ecuaciones (4.7) y (4.11), constituye una ecuación integrodiferencial para el campo eléctrico $E(x)$. Aprovechando las simetrías (4.12), podemos tratar de resolver la Ec. (2.12) aplicando el método de transformación de Fourier discreto, de manera similar a como lo hicimos en el caso semiclásico, Sec. (2.3).

Específicamente, la densidad de corriente eléctrica $j(x)$, definida en el intervalo finito $0 \leq x \leq d$, es una función par y periódica de x como lo dictan las fórmulas (4.7) y (4.12),

$$j(x) = j(-x); \quad j(x) = j(x + 2d). \quad (4.13a)$$

En el caso del campo eléctrico $E(x)$, definido en el intervalo $0 \leq x \leq d$, la conexión entre éste y la densidad de corriente a través de la ecuación (2.12), condicionan las propiedades de simetría de $E(x)$ haciéndolo también una función par y periódica de x ,

$$E(x) = E(-x); \quad E(x) = E(x + 2d). \quad (4.13b)$$

Las simetrías de paridad y periodicidad (4.13) dan lugar a la continuación analítica de $j(x)$ y $E(x)$ en todo el eje x ($-\infty < x < \infty$). Notemos que a diferencia con el caso clásico donde las simetrías (4.13b) fueron impuestas sobre el campo eléctrico, en el tratamiento cuántico éstas surgen de manera natural gracias a una elección adecuada del sistema de coordenadas del problema.

Con base en el método de transformación de Fourier introducido en la Sec.(2.3), para el campo eléctrico $E(x)$ y la densidad de corriente $j(x)$ se aplican las transformadas (2.36) y (2.38) con números de onda electromagnéticos discretos k_s , Ec. (2.37). Como resultado, la ecuación de Maxwell (2.12) se transforma en la Ec. (2.43). Para resolver dicha ecuación se requiere primero calcular la transformada de Fourier $j(k_s)$ de la densidad de corriente. Con este fin, transformemos la expresión (4.7) de acuerdo con la definición (2.38b),

$$j(k_s) = 2 \int_0^d dx' E(x') \int_0^d dx \chi(x, x') \cos(k_s x). \quad (4.14)$$

Sustituyendo la fórmula (4.11) para la función de respuesta trucada $\chi(x, x')$ en la ecuación (4.14), obtenemos:

$$\begin{aligned} j(k_s) &= \frac{\hbar^2 e^2}{4m^2 d} \sum_{n, n'=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_z}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_y}{2\pi} q_y^2 \\ &\times \frac{\mathfrak{F}_n(q_y, q_z) - \mathfrak{F}_{n'}(q_y, q_z)}{\epsilon_{n'}(q_y, q_z) - \epsilon_n(q_y, q_z)} \left[(\nu - i\omega) + \frac{i\hbar}{2m} (q_{n'}^2 - q_n^2) \right]^{-1} \\ &\times 4 \int_0^d dx' E(x') \sin(q_n x') \sin(q_{n'} x') \\ &\times \frac{4}{d} \int_0^d dx \cos(k_s x) \sin(q_n x) \sin(q_{n'} x). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Para derivar la expresión (4.15) hemos considerado que los sumandos en la Ec. (4.11) son funciones par de los índices n y n' . Por lo cual, el sumando es igual a cero para $n = 0$ o $n' = 0$. Estas circunstancias nos permitieron remplazar las sumas de una manera conveniente,

$$\sum_{n,n'=1}^{\infty} \dots \rightarrow \frac{1}{4} \sum_{n,n'=-\infty}^{\infty} \dots \quad (4.16)$$

Siguiendo la definición (2.36b) y usando la expresión integral para la delta de Kronecker $\delta_{s,s'}$,

$$\delta_{s,s'} = \frac{1}{d} \int_0^d dx \cos[(k_s - k_{s'})x], \quad (4.17)$$

es posible reescribir las siguientes integrales como:

$$4 \int_0^d dx' E(x') \sin(q_n x') \sin(q_{n'} x') = \mathcal{E}(q_n - q_{n'}) - \mathcal{E}(q_n + q_{n'}); \quad (4.18a)$$

$$\frac{4}{d} \int_0^d dx \cos(k_s x) \sin(q_n x) \sin(q_{n'} x) = \delta_{n',n+|s|} + \delta_{n',n-|s|} - \delta_{-n',n+|s|} - \delta_{-n',n-|s|}. \quad (4.18b)$$

Remplacemos ahora las fórmulas (4.18) en el resultado (4.15),

$$\begin{aligned} j(k_s) &= \frac{\hbar^2 e^2}{4m^2 d} \sum_{n,n'=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_z}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_y}{2\pi} q_y^2 \\ &\times \frac{\mathfrak{F}_n(q_y, q_z) - \mathfrak{F}_{n'}(q_y, q_z)}{\epsilon_{n'}(q_y, q_z) - \epsilon_n(q_y, q_z)} \left[(\nu - i\omega) + \frac{i\hbar}{2m} (q_{n'}^2 - q_n^2) \right]^{-1} \\ &\times [\mathcal{E}(q_n - q_{n'}) - \mathcal{E}(q_n + q_{n'})] \\ &\times (\delta_{n',n+|s|} + \delta_{n',n-|s|} - \delta_{-n',n+|s|} - \delta_{-n',n-|s|}). \end{aligned} \quad (4.19)$$

A continuación en el tercer y cuarto término de la expresión (4.19), los cuales involucran las funciones $\delta_{-n',n+|s|}$ y $\delta_{-n',n-|s|}$, respectivamente, cambiamos el índice $n' \rightarrow -n'$. Consecuentemente, los términos tercero y cuarto se convierten en el primero y el segundo. De esta manera tenemos que,

$$\begin{aligned} j(k_s) &= \frac{\hbar^2 e^2}{2m^2 d} \sum_{n,n'=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_z}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_y}{2\pi} q_y^2 \\ &\times \frac{\mathfrak{F}_n(q_y, q_z) - \mathfrak{F}_{n'}(q_y, q_z)}{\epsilon_{n'}(q_y, q_z) - \epsilon_n(q_y, q_z)} \left[(\nu - i\omega) + \frac{i\hbar}{2m} (q_{n'}^2 - q_n^2) \right]^{-1} \\ &\times [\mathcal{E}(q_n - q_{n'}) - \mathcal{E}(q_n + q_{n'})] (\delta_{n',n+|s|} + \delta_{n',n-|s|}). \end{aligned} \quad (4.20)$$

En la expresión (4.20), en el segundo término con $\delta_{n',n-|s|}$, realizamos un doble intercambio de los índices en las sumas, $n \rightarrow -n$ y $n' \rightarrow -n'$. Esta operación transforma las funciones

$\delta_{n',n+|s|} + \delta_{n',n-|s|} \rightarrow 2\delta_{n',n+|s|}$. Posteriormente, evaluamos la suma sobre el índice n' con ayuda de la delta restante $\delta_{n',n+|s|}$. Estas operaciones algebraicas dan lugar a la fórmula:

$$j(k_s) = \frac{i\hbar^2 e^2}{m^2 d} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_z}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_y}{2\pi} q_y^2 \times \quad (4.21)$$

$$\times \frac{\mathfrak{F}_n(q_y, q_z) - \mathfrak{F}_{n+|s|}(q_y, q_z)}{\epsilon_{n+|s|}(q_y, q_z) - \epsilon_n(q_y, q_z)} \frac{\mathcal{E}(k_s) - \mathcal{E}(|k_s| + 2q_n)}{\omega - \omega_{n+|s|,n} + i\nu}.$$

Durante el cálculo de la ecuación (4.21) fue necesario: Usar la propiedad de paridad de la energía electrónica (4.3) como función del número cuántico n , considerar la paridad de la transformada de Fourier (2.36b) del campo eléctrico, y evidentemente, aplicar la ley de conservación para el número de onda electrónico transversal discreto q_n ,

$$q_{n+|s|} = q_n + |k_s|. \quad (4.22)$$

Adicionalmente, en la expresión (4.21) hemos introducido la frecuencia $\omega_{n+|s|,n}$ de transición electrónica entre los niveles energéticos (4.3) con índices cuánticos $n + |s|$ y n debido a la absorción o emisión de un fotón con momento $\hbar|k_s|$,

$$\omega_{n+|s|,n} = \frac{\hbar}{2m} (q_{n+|s|}^2 - q_n^2) = \omega_{n,s} + \omega_s; \quad (4.23a)$$

$$\omega_{n,s} = \frac{\hbar|k_s|q_n}{m} = |k_s|V_F \frac{q_n}{k_F}, \quad \omega_s = \frac{\hbar k_s^2}{2m}. \quad (4.23b)$$

Notemos que $\omega_{-n-|s|,-n} = \omega_{n+|s|,n}$. La frecuencia de transición cuántica (4.23a) está conformada por dos términos: $\omega_{n,s}$ que representa la versión cuasi clásica de $\omega_{n+|s|,n}$; y ω_s conocida como la frecuencia de retroceso, la cual carece de contraparte clásica. Por lo tanto, ω_s debe despreciarse en el régimen clásico del problema.

La expresión (4.21) para la densidad de corriente eléctrica puede simplificarse más aún utilizando la relación,

$$\frac{\mathfrak{F}_n(q_y, q_z) - \mathfrak{F}_{n+|s|}(q_y, q_z)}{\epsilon_{n+|s|}(q_y, q_z) - \epsilon_n(q_y, q_z)} \approx \delta(\epsilon_n(q_y, q_z) - \epsilon_F)$$

$$= \frac{2m}{\hbar^2} \delta(q_y^2 + q_z^2 - [k_F^2 - q_n^2]). \quad (4.24)$$

La función delta de Dirac describe la ley de conservación de energía que satisfacen los medios metálicos sólidos cuya temperatura se mantiene siempre muy por debajo de la energía de Fermi de los electrones, $T \ll \epsilon_F$. Cabe mencionar que la dependencia en la temperatura de

la conductividad eléctrica del metal proviene principalmente de la frecuencia de relajación ν de los electrones de conducción.

Teniendo en cuenta la aproximación (4.24), escribimos la densidad de corriente cuántica como,

$$j(k_s) = \frac{ie^2}{\pi^2 md} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\mathcal{E}(k_s) - \mathcal{E}(|k_s| + 2q_n)}{\omega - \omega_{n+|s|,n} + i\nu} I_n, \quad (4.25)$$

donde la integral I_n está definida por

$$I_n = 2 \int_0^{\infty} dq_z \int_0^{\infty} dq_y q_y^2 \delta(q_y^2 + q_z^2 - [k_F^2 - q_n^2]). \quad (4.26)$$

Para facilitar el cálculo de la integral (4.26) hagamos el cambio de variable a coordenadas polares, $q_y = q_t \cos \varphi$, $q_z = q_t \sin \varphi$, $dq_y dq_z = q_t dq_t d\varphi$. Entonces,

$$\begin{aligned} I_n &= 2 \int_0^{\infty} dq_t q_t^3 \delta(q_t^2 - [k_F^2 - q_n^2]) \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos^2 \varphi \\ &= \begin{cases} \frac{\pi}{4} (k_F^2 - q_n^2) & \text{para } |q_n| = \pi|n|/d < k_F, \\ 0 & \text{en cualquier otro caso.} \end{cases} \end{aligned} \quad (4.27)$$

En consecuencia, al sustituir el resultado (4.27) en la ecuación (4.25), la variación del índice n en la suma se restringe al intervalo finito $-N_F < n < N_F$, siendo

$$N_F = [k_F d / \pi]. \quad (4.28)$$

El entero positivo N_F representa el número total de canales conductores electrónicos dentro de una película metálica de espesor d . De acuerdo con la Ec. (4.28), el valor de N_F está determinado por la parte entera $[k_F d / \pi]$ del parámetro de canales $k_F d / \pi$. La cuantización (4.2) del número de onda transversal electrónico $q_x = q_n$, sujeta a la condición de conservación de la energía electrónica $\epsilon_n(q_t) = \epsilon_F$, conlleva a la cuantización del número de onda $q_t = \sqrt{q_y^2 + q_z^2}$ del vector de onda longitudinal $\mathbf{q}_t = \{q_y, q_z\}$. Evidentemente, el transporte electrónico dentro de la película metálica es llevado a cabo por un número limitado de estados cuánticos que son capaces de propagarse a través del metal, es decir, estados en los que el número de onda longitudinal q_t tiene valores reales. Por esta razón el número cuántico $|n|$ correspondiente a un estado propagante, o canal conductor, está delimitado por N_F . Los estados electrónicos restantes con índices $|n| > N_F$, representan estados evanescentes con valores de q_t puramente imaginarios, por lo que no contribuyen en las propiedades de transporte electrónico del metal.

Por tanto, la expresión final para la transformada de Fourier $j(k_s)$ de la densidad de corriente $j(x)$ tiene la forma,

$$j(k_s) = \frac{3i\omega_p^2}{16\pi} \left(\frac{k_F d}{\pi} \right)^{-1} \sum_{n=-N_F}^{N_F} \left(1 - \frac{q_n^2}{k_F^2} \right) \frac{\mathcal{E}(k_s) - \mathcal{E}(|k_s| + 2q_n)}{\omega - \omega_{n+|s|,n} + i\nu}. \quad (4.29)$$

La expresión (4.29) para la densidad de corriente cuántica contiene términos diagonales y no diagonales proporcionales a $\mathcal{E}(k_s)$ y $\mathcal{E}(|k_s| + 2q_n)$, respectivamente. En consecuencia, la sustitución de la fórmula (4.29) en la ecuación (2.43), convierte ésta última en un conjunto de ecuaciones cuya resolución no brinda resultados relativamente sencillos que faciliten la interpretación física de los mismos. Además, nuestros experimentos numéricos demostraron que la contribución principal a la fórmula (4.29) proviene del término diagonal. Por lo cual, con el fin de continuar analizando el problema de manera analítica, omitiremos el término altamente oscilante con $\mathcal{E}(|k_s| + 2q_n)$. Así,

$$j(k_s) = \frac{3i\omega_p^2}{16\pi} \left(\frac{k_F d}{\pi} \right)^{-1} \sum_{n=-N_F}^{N_F} \frac{1 - q_n^2/k_F^2}{\omega - \omega_{n+|s|,n} + i\nu} \mathcal{E}(k_s). \quad (4.30)$$

Haciendo uso de la expresión (4.30) para la densidad de corriente cuántica, podemos resolver de manera rápida y sencilla la ecuación de Maxwell (2.41) obteniendo así la transformada de Fourier del campo eléctrico $\mathcal{E}(k_s)$. Posteriormente, aplicando la transformación inversa de Fourier (2.36) y la ley de Faraday (2.13), llegamos, respectivamente, a expresiones compactas y físicamente razonables para las distribuciones de los campos eléctrico y magnético dentro de la película metálica (2.9),

$$E(x) = \frac{ik}{d} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{H(d) \cos[k_s(d-x)] - H(0) \cos(k_s x)}{k_s^2 - k^2 \varepsilon(k_s)}, \quad (4.31a)$$

$$H(x) = \frac{1}{d} \sum_{s=-\infty}^{\infty} k_s \frac{H(d) \sin[k_s(d-x)] + H(0) \sin(k_s x)}{k_s^2 - k^2 \varepsilon(k_s)}. \quad (4.31b)$$

Como se aprecia en las fórmulas (4.31), el campo electromagnético restringido al grosor finito de una película metálica, está compuesto por una superposición de modos normales electromagnéticos discretos s con números de onda cuantizados k_s , Eq. (2.37). De acuerdo con las expresiones (4.31), cada modo normal s contribuye de manera independiente a la respuesta electromagnética total de la película metálica. La interacción de los electrones de conducción con tales modos normales s está determinada por su propia permitividad

efectiva $\varepsilon(k_s)$,

$$\varepsilon(k_s) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \mathcal{Q}(k_s), \quad (4.32)$$

la cual no representa la permitividad asociada con el campo electromagnético total. Nótese que la diferencia entre las expresiones (4.31) para el campo electromagnético y las derivadas dentro del enfoque de Boltzmann (2.45) radica precisamente en la permitividad efectiva definida en cada modelo, compare entre sí las Ecs. (4.32) y (2.46).

La permitividad efectiva $\varepsilon(k_s)$ derivada dentro del formalismo cuántico, exhibe una dependencia en el número de onda k_s distinta a la predicha por en enfoque de Boltzmann (2.46). Dicha dependencia, debido tanto a efectos cuánticos como de no localidad, está contenida dentro del nuevo factor de no localidad cuántico $\mathcal{Q}(k_s)$, definido como

$$\mathcal{Q}(k_s) = \frac{3\omega}{4} \left(\frac{k_F d}{\pi} \right)^{-1} \sum_{n=-N_F}' \frac{1 - q_n^2/k_F^2}{\omega - \omega_{n+|s|,n} + i\nu}. \quad (4.33)$$

Aquí la prima “ ’ ” en el símbolo de suma indica la ausencia del término con $n = 0$. El factor de no localidad cuántico $\mathcal{Q}(k_s)$, y en consecuencia la permitividad $\varepsilon(k_s)$ del modo s , son funciones par del número de onda k_s del modo electromagnético,

$$\mathcal{Q}(-k_s) = \mathcal{Q}(k_s), \quad \varepsilon(-k_s) = \varepsilon(k_s). \quad (4.34)$$

Como podrá constatararse más adelante, la representación de modos normales electromagnéticos discretos (4.31)-(4.33) es la más relevante y adecuada para el tratamiento de la respuesta óptica de microestructuras metálicas modernas, y especialmente, para películas de grosor nanométrico, donde los efectos de tamaño y de dispersión espacial fuerte se acentúan.

4.3. Impedancias superficiales

Conociendo las expresiones explícitas para la distribución del campo electromagnético (4.31) dentro de la película metálica (2.9) estamos en posibilidades de calcular las impedancias superficiales que caracterizan la respuesta óptica de la película. Siguiendo la definición general (2.14), encontramos que las impedancias cuánticas no locales ζ_0 y ζ_d

están dadas por las expresiones analíticas:

$$\zeta_0 = -\frac{ik}{d} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{k_s^2 - k^2 \varepsilon(k_s)}, \quad (4.35a)$$

$$\zeta_d = -\frac{ik}{d} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{\cos(k_s d)}{k_s^2 - k^2 \varepsilon(k_s)}. \quad (4.35b)$$

Ambas impedancias están compuestas por distintos modos electromagnéticos s caracterizados por sus permitividades $\varepsilon(k_s)$, Ecs.(4.32),(4.33).

Bajo condiciones de dispersión espacial débil (2.53), la escala de variación espacial $|k_s|^{-1}$ de cada modo electromagnético s es mucho mayor que el valor absoluto del recorrido libre efectivo de los electrones $l_\omega = V_F/(\nu - i\omega)$. Por lo cual, la frecuencia de transición electrónica $\omega_{n+|s|,n}$ se vuelve despreciable en comparación con la frecuencia compleja $\omega + i\nu$,

$$|k_s l_\omega| = V_F |k_s| / |\omega + i\nu| \ll 1 \quad \Leftrightarrow \quad |\omega_{n+|s|,n}| \ll |\omega + i\nu|. \quad (4.36)$$

En esta situación el factor de no localidad cuántico $Q(k_s)$ puede ser representado adecuadamente por su valor $Q(0)$,

$$Q(0) = \frac{\omega}{\omega + i\nu} \mathcal{K}_{DL}^{(q)}, \quad (4.37a)$$

$$\mathcal{K}_{DL}^{(q)} = \frac{3}{2} \frac{1}{k_F d / \pi} \sum_{n=1}^{N_F} \left[1 - \left(\frac{n}{k_F d / \pi} \right)^2 \right]. \quad (4.37b)$$

La expresión (4.37b) para el factor $\mathcal{K}_{DL}^{(q)}$ nos permite evaluar explícitamente la suma sobre el número cuántico electrónico n . Como resultado, la permitividad efectiva de los modos electromagnéticos (4.32) pierde su dependencia en el número de onda electromagnético k_s , transformándose en la versión cuántica de la permitividad local del modelo Drude-Lorentz,

$$\varepsilon(0) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\nu)} \mathcal{K}_{DL}^{(q)}, \quad (4.38a)$$

$$\mathcal{K}_{DL}^{(q)} = \frac{3}{2} \frac{N_F}{k_F d / \pi} \left[1 - \frac{1}{6} \frac{(N_F + 1)(2N_F + 1)}{(k_F d / \pi)^2} \right]. \quad (4.38b)$$

Note que la permitividad de Drude-Lorentz cuántica (4.38) posee la misma forma que la permitividad clásica (2.18), pero con la frecuencia de plasma renormalizada debido a la cuantización electrónica: $\omega_p \rightarrow \omega_p \sqrt{\mathcal{K}_{DL}^{(q)}}$. La transición hacia el modelo clásico de Drude-Lorentz se alcanza cuando el número de canales conductores electrónicos N_F es suficientemente grande, tal que, no existe una diferencia significativa entre el parámetro de canales

$k_F d/\pi$ y su parte entera N_F . En este caso $\mathcal{K}_{DL}^{(q)} \rightarrow 1$, y la permitividad (4.38) se transforma en la permitividad clásica (2.18) del modelo de Drude-Lorentz,

$$\varepsilon(0) \rightarrow \varepsilon_{DL}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\nu)} \quad \text{para } k_F d/\pi \gg 1. \quad (4.39)$$

Dentro del régimen local (4.36), la suma sobre el índice de modo s en las ecuaciones (4.35) para las impedancias superficiales puede ser calculada de manera explícita, resultando en las expresiones,

$$\zeta_0^{(\text{loc})} = \frac{i}{\sqrt{\varepsilon(0)}} \cot\left(kd\sqrt{\varepsilon(0)}\right), \quad (4.40a)$$

$$\zeta_d^{(\text{loc})} = \frac{i/\sqrt{\varepsilon(0)}}{\sin\left(kd\sqrt{\varepsilon(0)}\right)}. \quad (4.40b)$$

Nótese que las impedancias locales (4.40) tienen la misma forma que las impedancias clásicas del modelo de Drude-Lorentz (2.21), pero con la permitividad cuántica (4.38) en lugar de la permitividad clásica (2.18).

En el contexto del análisis presentado en la Sección (2.2) sobre los diferentes límites asintóticos (2.22)-(2.26) de las impedancias superficiales en el caso clásico local, volvamos nuestra atención a las impedancias cuánticas (4.35) para describir algunas de sus características más notables en el régimen de altas frecuencias (2.24). Dichas expresiones contienen el término correspondiente al modo electromagnético con índice $s = 0$. Este término coincide estrictamente con el límite asintótico de las impedancias locales de placas sumamente delgadas (2.23), por lo cual este término debe contribuir de manera importante en las impedancias superficiales cuánticas de películas delgadas. En particular, la contribución del modo normal $s = 0$ es no dispersiva, independientemente de si los otros modos distintos de cero $|s| \neq 0$ son locales ($|k_s l_\omega| \ll 1$) o no locales ($|k_s l_\omega| > 1$). Como se mencionó anteriormente, las ecuaciones asintóticas (2.23),(2.26) definidas por el término $s = 0$, son especialmente relevantes cuando los demás modos son también no dispersivos. Sin embargo, como lo demuestran nuestros resultados numéricos discutidos en la Sección (4.3.2), para películas metálicas suficientemente delgadas ($d < \delta$), incluso en el caso de dispersión espacial fuerte ($|k_s l_\omega| > 1$), el modo local $s = 0$ puede contribuir fuertemente a la dependencia en la frecuencia ω de la parte imaginaria de las impedancias superficiales (4.35). Dicha participación está descrita por la ecuación (2.26) obtenida en el régimen de altas frecuencias (2.24) cuando $d^2 \ll \delta^2$.

4.3.1. Respuesta electromagnética resonante: Amortiguamiento de Landau Cuántico

Nuestros resultados (4.30)-(4.33),(4.35) predicen que en el régimen cuántico local, la respuesta electromagnética de una película metálica se caracteriza por un comportamiento resonante, el cual es provocado por la cuantización del movimiento transversal de los electrones de conducción. Específicamente, de acuerdo con la expresión (4.33) para el factor de no localidad cuántico $Q(k_s)$, cada modo normal electromagnético con índice s distinto de cero ($s \neq 0$) experimenta un conjunto de resonancias cuánticas. Cada conjunto de resonancias está conformado por las contribuciones igualitarias de dos modos normales con índices $\pm|s|$, ello debido a la propiedad de paridad (4.34) del factor de no localidad cuántico. Para dos modos normales $\pm|s|$ en particular, el conjunto $|s|$ de resonancias cuánticas asociado a ellos, aparece cuando los valores de la frecuencia ω de la onda electromagnética coinciden con la frecuencia de transición electrónica $\omega_{n+|s|,n}$, Ec. (4.23a),

$$\omega = \omega_{n+|s|,n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, N_F. \quad (4.41)$$

La cantidad de resonancias dentro del conjunto $|s|$ es igual al número total de canales conductores electrónicos N_F , (4.28). Debido a la restricción que existe en el número cuántico electrónico n , las frecuencias (4.41) del conjunto resonante $|s|$ están confinadas al intervalo de frecuencias,

$$0 < \omega - \omega_s < |k_s|V_F = |s|(\pi V_F/c)(\delta/d)\omega_p. \quad (4.42)$$

Resulta interesante notar que el intervalo (4.42) coincide con el rango de frecuencias donde los respectivos modos normales $\pm|s|$ satisfacen la condición de dispersión espacial fuerte (2.51). El ancho del intervalo de no localidad (4.42) está determinado por el valor de la velocidad de Fermi V_F de los electrones de conducción y, para un metal en específico, se espera que dicho intervalo se amplíe al disminuir el grosor d de la película metálica. Los modos normales superiores con los mayores valores de $|s|$ dan lugar a un rango de no localidad (4.42) más amplio y una frecuencia de umbral ω_s más alta. Por esta razón, las resonancias del conjunto $|s+1|$ están siempre desplazadas a frecuencias más altas respecto a las resonancias del conjunto $|s|$, y nunca coinciden con estas últimas. Las resonancias pertenecientes a un mismo conjunto $|s|$ se encuentran espaciadas de manera equidistante entre sí dentro del intervalo de frecuencias (4.42). Siguiendo la ecuación (4.23a), encontramos que el espaciamiento $\Delta_s(d)$ entre resonancias consecutivas de un mismo set está dado por

la diferencia,

$$\Delta_s(d) \equiv \omega_{n+1,s} - \omega_{n,s} = |k_s| V_F (k_F d / \pi)^{-1}. \quad (4.43)$$

El espaciamiento (4.43) del conjunto resonante $|s|$ correspondiente a modos normales electromagnéticos con índices $|s| = 2, 3, \dots$ es un múltiplo del espaciamiento Δ_1 del primer conjunto con $|s| = 1$. Las amplitudes de las resonancias del factor de no localidad cuántico $\mathcal{Q}(k_s)$ son moduladas por el factor $\omega_{n+|s|,n} (1 - q_n^2/k_F^2) \propto (1 - q_n^2/k_F^2) q_n/k_F$. Por consiguiente, las amplitudes de las resonancias laterales asociadas a valores pequeños y grandes del número cuántico electrónico n , son menores que las amplitudes de las resonancias intermedias.

Evidentemente, la frecuencia de relajación electrónica $\nu \neq 0$ ensancha las resonancias y disminuye sus amplitudes. Este hecho establece la condición de resolución para las resonancias del conjunto $|s|$ restringidas al intervalo de no localidad (4.42),

$$\nu < \Delta_s(d). \quad (4.44)$$

Esto implica que aquellas resonancias que cumplan con la desigualdad (4.44) podrán ser bien resultas en los espectros ópticos del sistema.

De la definición (4.28) observamos que al incrementar el parámetro de canales $k_F d / \pi$ el número N_F de resonancias $|s|$ dentro del intervalo no local (4.42) también aumentan, y por el contrario, el espaciamiento (4.43) entre ellas disminuye. Así pues, para un valor suficientemente grande del parámetro de canales $k_F d \pi \gg 1$, la condición de resolución (4.44) se destruye. Como resultado, las resonancias de un determinado conjunto $|s|$, comienzan a traslaparse e inclusive a coalescer hasta que eventualmente desaparecen. Además, la distancia relativa entre canales conductores electrónicos $(k_F d / \pi)^{-1}$ se vuelve extremadamente estrecha. En este escenario, en la ecuación (4.33) para $\mathcal{Q}(k_s)$ la suma sobre el número cuántico electrónico n puede ser remplazada por una integral sobre la proyección transversal $n_x = q_n/k_F = n/(k_F d / \pi)$ del vector de onda unitario de los electrones. De esta manera, el factor de no localidad se convierte en su versión clásica, la cual no posee las resonancias cuánticas encontradas anteriormente,

$$\mathcal{Q}_B(k_s) = \frac{3\omega}{4} \int_{-1}^1 \frac{(1 - n_x^2) dn_x}{\omega - |k_s| V_F n_x + i\nu} = \frac{\omega}{\omega + i\nu} \mathcal{K}(k_s l_\omega). \quad (4.45)$$

Aquí $\mathcal{K}(k_s l_\omega)$ corresponde al factor de no localidad clásico (2.47) del enfoque de Boltzmann. Sustituyendo $\mathcal{Q}_B(k_s)$ en la ecuación (4.32) para la permitividad efectiva $\varepsilon(k_s)$ de los modos

normales electromagnéticos s , obtenemos exactamente la permitividad $\varepsilon_B(k_s)$ definida dentro del enfoque de Boltzmann (2.46). Como consecuencia, las fórmulas para la distribución del campo electromagnético (4.31) y las impedancias superficiales (4.35a) del formalismo cuántico se convierten en las expresiones derivadas en el caso clásico no local, Ecs.(2.45) y (2.48), respectivamente.

Como fue dicho anteriormente, el integrando (4.45) posee la singularidad de Landau, el polo (2.50), el cual en el régimen cuántico se transforma en su versión discreta: la condición de resonancia (4.41). Recordemos que bajo condiciones de dispersión espacial fuerte (2.51), donde $|k_s l_\omega| > 1$, la singularidad de Landau es su versión clásica resulta estar exactamente dentro del intervalo de integración (4.45), lo cual dota a la permitividad del enfoque semiclásico $\varepsilon_B(k_s)$ de una parte imaginaria positiva (2.52) que no depende de la frecuencia de relajación de los electrones ν . Como resultado, los modos normales $\pm|s|$ del campo electromagnético experimentan el amortiguamiento (sin colisiones) de Landau clásico (vea los detalles en los trabajos [3,4]). Claramente, la condición de no localidad $|k_s l_\omega| > 1$ señala que: El rango de frecuencias en donde el amortiguamiento de Landau clásico aparece en la respuesta electromagnética de dos modos normales $\pm|s|$ particulares, coincide con el intervalo de frecuencias (4.42) del correspondiente conjunto resonante $|s|$ (recordemos que en el límite clásico debemos omitir la frecuencia de retroceso ω_s). Por lo tanto, *en el régimen no local cuántico, el amortiguamiento de Landau se manifiesta como el conjunto $|s|$ de resonancias*, que al pasar a un régimen de no localidad clásico coalescen hasta adquirir la forma del amortiguamiento de Landau convencional.

Con el aumento de la frecuencia de la onda electromagnética ω , el recorrido libre efectivo de los electrones l_ω disminuye, alcanzándose así la transición hacia el régimen local (2.53). Aquí el amortiguamiento de Landau desaparece, ya que el factor de no localidad clásico (4.45) se aproxima a su valor asintótico,

$$\mathcal{Q}_B(k_s) \rightarrow \mathcal{Q}_B(0) = \mathcal{Q}_{DL} \equiv \frac{\omega}{\omega + i\nu} \quad \text{para} \quad |k_s l_\omega| \ll 1. \quad (4.46)$$

Reemplazando el resultado (4.46) en la permitividad efectiva del modelo cuántico (4.32), ésta se convierte en la permitividad (2.18) del modelo clásico local de Drude-Lorentz.

4.3.2. Espectros ópticos de impedancias superficiales

En esta sección presentamos los resultados de nuestros cálculos numéricos de las impedancias superficiales derivadas analíticamente en la Sección (4.3). Lo anterior tiene la

finalidad de comparar el comportamiento de dichas cantidades en los regímenes cuántico y clásico.

Las Figuras 4.2-4.5 muestran los espectros de frecuencia de la parte real e imaginaria de las impedancias superficiales, $\zeta_0(\omega/\omega_p)$ y $\zeta_d(\omega/\omega_p)$, de películas de plata (Ag) con distintos espesores d/δ normalizados a la profundidad de penetración $\delta = c/\omega_p$ del campo electromagnético. Para el caso de la Ag, $\delta \approx 22$ nm. En los siguientes experimentos numéricos hemos utilizado una frecuencia de relajación electrónica $\nu = 2,0 \times 10^{-4}\omega_p$, la cual para películas de Ag de muy alta pureza puede ser un valor bastante realista, inclusive a temperatura ambiente [29–31].

Cada panel en las Figuras 4.2 y 4.3 para la parte real de las impedancias superficiales, $\text{Re}\zeta_0$ y $\text{Re}\zeta_d$, presenta una familia de cuatro curvas. Dos de ellas, la curva verde (con trazos de líneas y puntos) y la curva rosa (punteada), fueron calculadas dentro del modelo local de Drude-Lorentz cuántico y clásico, es decir, utilizando las fórmulas (2.21) con las permitividades $\varepsilon(0)$ y ε_{DL} descritas por las Ecs. (4.38) y (2.18), respectivamente. Por su parte, la curva roja discontinua representa la dependencia en la frecuencia de la parte real de las impedancias superficiales (2.48) obtenidas con el enfoque de la ecuación cinética de Boltzmann, donde el efecto predominante es el amortiguamiento Landau clásico. Finalmente, las partes reales de las impedancias superficiales cuánticas no locales (4.35) son descritas por la líneas púrpura sólidas. La líneas azules verticales denotan el límite superior del intervalo de no localidad (4.42) correspondiente a un modo normal con $|s|$ específico, en otras palabras, a la derecha de dicho límite ese modo $\pm|s|$ en particular deja de contribuir en la respuesta no local clásica/cuántica del sistema. Consecuentemente, el valor máximo/mínimo en las curvas púrpura y roja de la Figura 4.2/4.3 se alcanza en el primer intervalo de no localidad (a la izquierda de la línea $k_1 V_F/\omega_p$), donde todos los modos normales distintos de cero $s \neq 0$ contribuyen a las impedancias superficiales.

Los paneles (a) de las Figuras 4.2 y 4.3 presentan el espectro de frecuencias de $\text{Re}\zeta_0(\omega/\omega_p)$ y $\text{Re}\zeta_d(\omega/\omega_p)$, respectivamente, para una película metálica nano-delgada, con espesor nanométrico $d/\delta = 0,35$. En este caso, el número de canales conductores electrónicos es moderado $N_F = 30$, y el intervalo de no localidad (4.42) es lo suficientemente amplio para permitir el cumplimiento de la condición de resolución (4.43), $\nu < \Delta_s(d) \approx 1,4 \times 10^{-3}|s|\omega_p$, para todos los modos normales electromagnéticos $|s|$ distintos de cero. En consecuencia, el régimen cuántico es claramente alcanzado. Aquí los espectros de la parte real de las impedancias superficiales cuánticas no locales (curvas púrpura sólidas) exhiben resonancias

muy pronunciadas que difieren drásticamente de la parte real de las impedancias no locales clásicas (curvas verdes discontinuas) originadas por el amortiguamiento de Landau clásico [3,4]. Es importante notar que dentro del rango de frecuencias $0 < \omega - \omega_1 < k_1 V_F = \pi V_F / d$, donde las resonancias más dominantes pertenecen a los modos normales $|s| = 1$, el conjunto resonante $|s| = 2$ aporta una peculiar contribución: Mientras que los máximos (mínimos) de las oscilaciones resonantes de $\text{Re}\zeta_0$ ($\text{Re}\zeta_d$) provienen de las resonancias del conjunto $|s| = 1$, los mínimos (máximos) son en realidad modulados por las resonancias del conjunto $|s| = 2$, este hecho puede apreciarse en los recuadros de los paneles (a). Adicionalmente, la Figura 4.2 muestra que dentro del intervalo de no localidad (4.42) la condición de resonancia (4.41) para el modo normal respectivo $|s|$ siempre da lugar a los máximos de las oscilaciones resonantes de $\text{Re}\zeta_0$. Por el contrario, como puede verse en la Figura 4.5, las resonancias (4.41) originadas por un modo normal $|s|$ impar (par) determinan, respectivamente, los mínimos (máximos) de la curva $\text{Re}\zeta_d$ dentro del correspondiente rango no local (4.42). Lo anterior se debe al factor de signo alternante $\cos(k_s d) = (-1)^{|s|}$ presente en los sumandos de la definición (4.35b) para la impedancia superficial ζ_d , mientras que dicho factor no aparece en la definición (4.35a) para la otra impedancia ζ_0 .

La situación intermedia entre los regímenes cuántico y clásico se muestra en los paneles (b), para una película de grosor $d/\delta = 0,75$, siendo $N_F = 60$. Este caso se encuentra cercano al límite de resolución $\nu = \Delta_1(d)$ para el conjunto resonante $|s| = 1$, el cual se alcanza cuando el espesor de placa $d \sim \delta$. Entonces, las resonancias del conjunto $|s| = 1$ están cercanas a coalescer. Como resultado, las curvas del formalismo cuántico (púrpura sólida) y del enfoque clásico no local (verde discontinua) casi coinciden dentro del intervalo $0 < \omega - \omega_1 < k_1 V_F$. Por otra parte, las resonancias de los conjuntos con índices de modo electromagnético $|s| = 2$ y $|s| = 3$ siguen siendo observables debido a que los espaciamientos entre sus resonancias (4.43) son, respectivamente, dos y tres veces más grandes que el espaciamiento $\Delta_1(d)$ correspondiente al conjunto $|s| = 1$.

Las impedancias superficiales en el panel (c), fueron calculadas para una placa metálica relativamente gruesa, $d/\delta = 3$, con un número grande de canales conductores electrónicos, $N_F = 257$. Por esta razón, los conjuntos de resonancias para los primeros modos normales $|s| \leq 10$ no pueden ser distinguidos, para tales conjuntos el espaciamiento entre resonancias $\Delta_s(d = 3\delta) < \nu$. Aquí, la dependencia en la frecuencia de las impedancias superficiales es determinada por el efecto del amortiguamiento de Landau clásico. Al establecerse el régimen clásico no local, el espectro de la parte real de las impedancias

superficiales calculadas aplicando el formalismo cuántico concuerda a la perfección con el obtenido dentro del enfoque de la ecuación cinética de Boltzmann.

Como mencionamos anteriormente, al aumentar la frecuencia de la onda ω , los factores de no localidad cuántico $\mathcal{Q}(k_s)$ y clásico $\mathcal{Q}_B(k_s)$ tienden a sus respectivos límites asintóticos (4.37) y (4.46), de tal manera, que ambas curvas no locales, cuántica (púrpura sólida) y clásica (roja discontinua), se aproximan a sus correspondientes curvas de Drude-Lorentz (cuántica o clásica). En consecuencia, las oscilaciones comienzan a suavizarse y decrecer en amplitud hasta desaparecer.

Por otro lado, al seguir la misma dependencia en frecuencia, las curvas espectrales de los modelos cuántico (verde con puntos y líneas) y clásico (rosa puntada) de Drude-Lorentz presentan la misma forma, sin embargo, se observa que: Para un grosor d de la película muy delgado, panel (a), ambas curvas exhiben diferentes valores para la parte real de las impedancias superficiales. Posteriormente, al incrementarse el espesor de la placa ambas curvas se vuelven más cercanas en el panel intermedio (b). Finalmente, cuando el grosor (o, equivalentemente, el número de canales conductores electrónicos N_F) es lo suficiente grande, llegamos al límite clásico donde las dos curvas se superponen, panel (c).

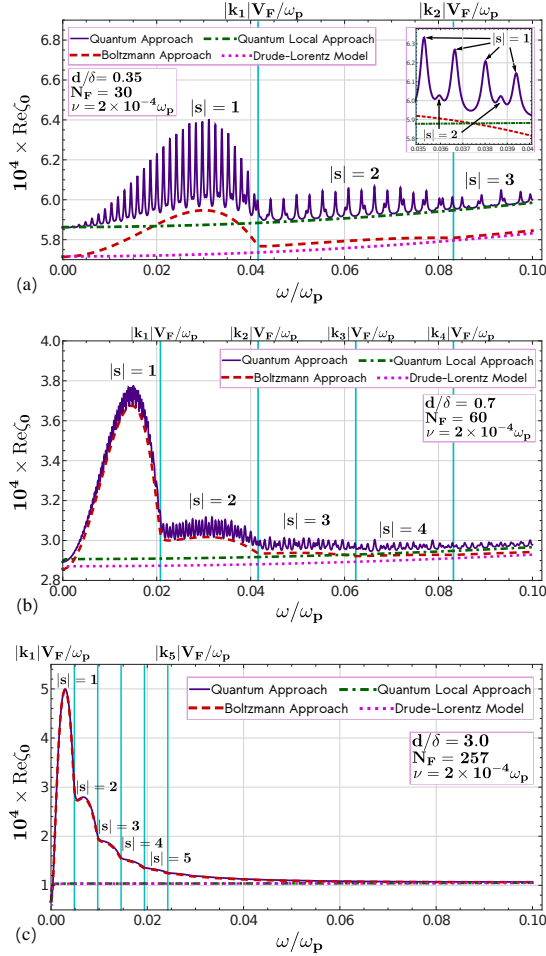


Figura 4.2: Dependencia en la frecuencia de la parte real de la impedancia superficial ζ_0 para una película de plata ($V_F = 1,39 \times 10^8$ cm/s, $\omega_p = 2,175 \times 10^3$ THz [30]) predicha por cuatro modelos diferentes. Cada panel corresponde a un valor distinto del espesor de la placa d (indicado en los paneles). La frecuencia de relajación electrónica $\nu = 2,0 \times 10^{-4} \omega_p$.

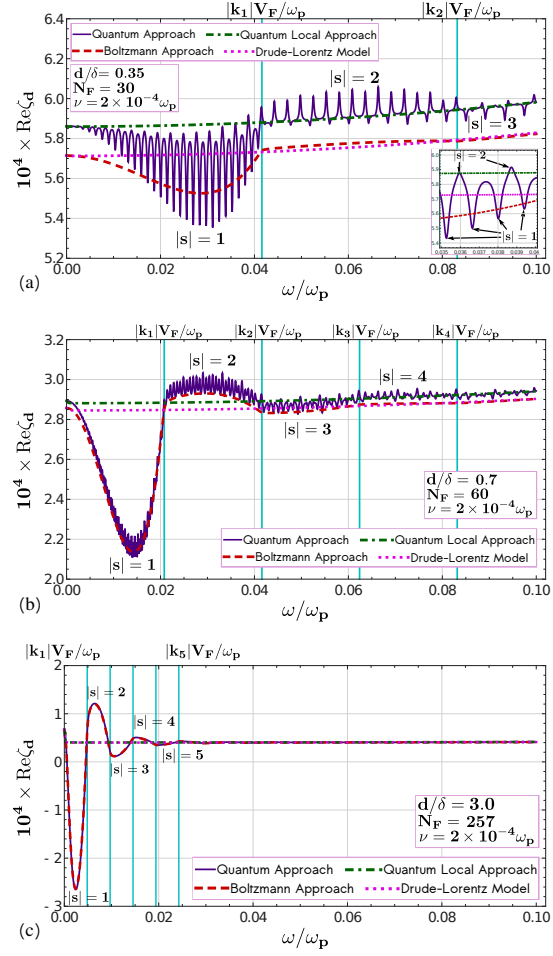


Figura 4.3: Dependencia en la frecuencia de la parte real de la impedancia superficial ζ_d en la frontera derecha $x = d$ de una placa de plata. Las curvas en los paneles (a), (b) y (c) fueron calculadas para los mismos valores del grosor de la placa d que en los paneles respectivos de la Figura 4.2.

El amortiguamiento de Landau cuántico también se manifiesta en la dependencia en la frecuencia de las partes imaginarias, $\text{Im}\zeta_0$ y $\text{Im}\zeta_d$, de las impedancias superficiales (4.35). Los espectros característicos y su evolución al pasar del régimen no local cuántico al clásico (controlada por la variación del espesor adimensional d/δ de la placa) se presenta en las Figuras 4.4 y 4.5. Los resultados de nuestros cálculos numéricos revelan que en el rango de altas frecuencias, $\nu \ll \omega \ll \omega$, las partes imaginarias de las impedancias superficiales de películas nano-delgadas ($d < \delta$) poseen un término no resonante cuyo valor absoluto es grande y que además, aumenta de manera lineal con el incremento de la frecuencia ω . De acuerdo con nuestra discusión presentada después de la ecuación (2.26) en la Sección 4.3, este término local representa la contribución del modo normal no dispersivo $s = 0$ a la suma (4.35), y está descrito de manera exacta por la fórmula (2.23), teniendo como límite asintótico la Ec. (2.26b). Recordemos que dichas expresiones son también inherentes a las impedancias clásicas locales (2.21). Por tal razón, con la finalidad de eliminar esta contribución local en nuestro análisis de los efectos cuánticos no locales, en las Figuras 4.4 y 4.5, presentamos la diferencia entre la parte imaginaria de la impedancia $\zeta_0(\zeta_d)$ y la parte imaginaria de su contraparte clásica $\zeta_0^{(\text{loc})}(\zeta_d^{(\text{loc})})$ normalizada a la parte imaginaria de la impedancia local correspondiente (4.40).

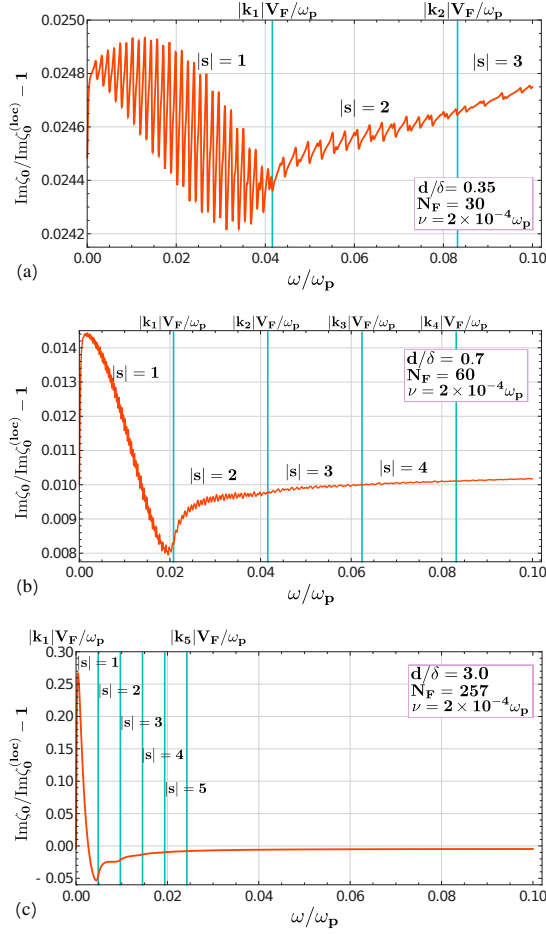


Figura 4.4: Dependencia en la frecuencia de la diferencia relativa entre las partes imaginarias de las impedancias superficiales cuántica no local ζ_0 y clásica local $\zeta_0^{(loc)}$ en la frontera izquierda $x = 0$ de una película de plata. Las curvas en los paneles (a), (b) y (c) fueron calculadas para los mismos valores del espesor de la placa d que en los paneles respectivos de la Figura 4.2.

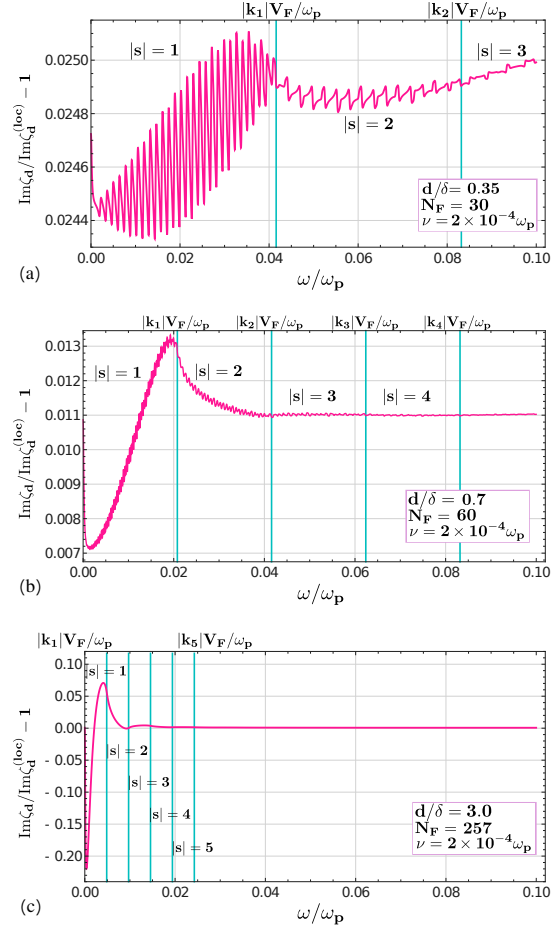


Figura 4.5: Dependencia en la frecuencia de la diferencia relativa entre las partes imaginarias de las impedancias superficiales cuántica no local ζ_d y clásica local $\zeta_d^{(loc)}$ en la frontera derecha $x = d$ de una película de plata. Las curvas en los paneles (a), (b) y (c) fueron calculadas para los mismos valores del espesor de la placa d que en los paneles respectivos de la Figura 4.2.

4.4. Absorción, transmisión y reflexión de una película metálica

4.4.1. Matriz de transferencia de la película

En esta sección del trabajo aplicaremos el método de la matriz de transferencia para resolver el problema de propagación de la onda electromagnética a través de la película metálica, es decir, derivar las fórmulas necesarias para el cálculo de los espectros ópticos del sistema metálico. Conociendo la distribución del campo electromagnético (4.31) dentro de la región $0 \leq x \leq d$, podemos encontrar la matriz de transferencia \mathbb{M} que relaciona los valores del campo eléctrico $E(x)$ y magnético $H(x)$ en ambos lados de la película. Con este fin, evaluemos las expresiones (4.31) en las fronteras $x = d$ y $x = 0$. Las ecuaciones resultantes pueden ser expresadas en forma matricial como,

$$\begin{pmatrix} E(d) \\ H(d) \end{pmatrix} = \mathbb{M} \begin{pmatrix} E(0) \\ H(0) \end{pmatrix}, \quad (4.47)$$

donde la matriz de transferencia de la película metálica está dada por la expresión,

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} \zeta_0/\zeta_d & -(\zeta_0^2 - \zeta_d^2)/\zeta_d \\ -1/\zeta_d & \zeta_0/\zeta_d \end{pmatrix}. \quad (4.48)$$

Calculando el determinante de \mathbb{M} podemos notar que se trata de una matriz unimodular, es decir, que su determinante es igual a la unidad, $\det \mathbb{M} = 1$. De acuerdo con la ecuación (4.48) los elementos de la matriz de transferencia \mathbb{M} son determinados exclusivamente por las impedancias superficiales ζ_0 y ζ_d de la película metálica, definidas por las Ecs. (2.14). Las impedancias pueden ser derivadas aplicando los distintos formalismos analizados hasta ahora, en este sentido, la definición (4.47),(4.48) representa una relación universal.

Respecto a la distribución del campo electromagnético fuera de la película, en la región del espacio libre $-\infty < x \leq 0$ de acuerdo con las ecuaciones de Maxwell en el vacío, tanto $E(x)$ como $H(x)$ pueden describirse como la superposición de dos ondas planas: una que incide con amplitud E_i sobre la frontera $x = 0$, más otra que se refleja en ella propagándose en dirección contraria con una amplitud E_r .

$$E(x \leq 0) = E_i \exp(ikx) + E_r \exp(-ikx) \quad (4.49a)$$

$$H(x \leq 0) = E_i \exp(ikx) - E_r \exp(-ikx). \quad (4.49b)$$

Por otra parte en la región posterior a la placa $x \geq d$, podemos representar el campo electromagnético transmitido como,

$$E(x \geq d) = E_t \exp [ik(x - d)] \quad (4.50a)$$

$$H(x \geq d) = E_t \exp [ik(x - d)], \quad (4.50b)$$

donde E_t especifica la amplitud de la onda electromagnética transmitida.

En conjunto las ecuaciones (4.31),(4.49) y (4.50) determinan la distribución del campo electromagnético en todo el espacio, tanto fuera como dentro de la película. No obstante, para que sean expresiones físicas válidas, dichas ecuaciones deben cumplir con la condición de continuidad (en ausencia de densidad de carga o corriente eléctrica superficial) de los campos eléctrico y magnético longitudinales en las superficies de la película. Particularmente, en la frontera izquierda $x = 0$ se deben satisfacer las relaciones,

$$E(-0) = E(+0) \quad \Rightarrow \quad E_i + E_r = E(0) \quad (4.51a)$$

$$H(-0) = H(+0) \quad \Rightarrow \quad E_i - E_r = H(0), \quad (4.51b)$$

Por su parte, la condición de continuidad en la frontera derecha de la película $x = d$ nos da las expresiones,

$$E(d-0) = E(d+0) \quad \Rightarrow \quad E_t = E(d) \quad (4.51c)$$

$$H(d-0) = H(d+0) \quad \Rightarrow \quad E_t = H(d). \quad (4.51d)$$

A continuación escribiendo las ecuaciones (4.51) en su forma matricial y usando la relación de transferencia (4.48), se sigue que,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} E_t \\ 0 \end{pmatrix} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(d) \\ H(d) \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \mathbb{M} \begin{pmatrix} E(0) \\ H(0) \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \mathbb{M} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_i \\ E_r \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Definiendo los cocientes $t = E_t/E_i$ y $r = E_r/E_i$ como las amplitudes de transmisión t y reflexión r normalizadas a la amplitud de la onda incidente, podemos reescribir la expresión

(4.52) como,

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbb{M}^{(T)} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}, \quad (4.53)$$

donde los elementos de la matriz de transferencia total $\mathbb{M}^{(T)}$ están determinados por las expresiones,

$$\mathbb{M}_{11}^{(T)} = \frac{\zeta_0}{\zeta_d} - \frac{1 + (\zeta_0^2 - \zeta_d^2)}{2\zeta_d}, \quad (4.54a)$$

$$\mathbb{M}_{12}^{(T)} = -\frac{1 - (\zeta_0^2 - \zeta_d^2)}{2\zeta_d}, \quad (4.54b)$$

$$\mathbb{M}_{21}^{(T)} = +\frac{1 - (\zeta_0^2 - \zeta_d^2)}{2\zeta_d}, \quad (4.54c)$$

$$\mathbb{M}_{22}^{(T)} = \frac{\zeta_0}{\zeta_d} + \frac{1 + (\zeta_0^2 - \zeta_d^2)}{2\zeta_d}. \quad (4.54d)$$

Es importante resaltar que la matriz de transferencia total $\mathbb{M}^{(T)}$ es también unimodular, i.e., $\det \mathbb{M}^{(T)} = 1$. Consecuentemente, es posible calcular la transmisión T , reflexión R , así como la absorción A de energía electromagnética de acuerdo con las siguientes expresiones [29],

$$T = |t|^2 = \left| \mathbb{M}_{22}^{(T)} \right|^{-2}, \quad R = |r|^2 = \left| \mathbb{M}_{21}^{(T)} / \mathbb{M}_{22}^{(T)} \right|^2, \quad A = 1 - T - R. \quad (4.55)$$

4.4.2. Espectros ópticos de absorción

A continuación presentamos la dependencia en la frecuencia de la absorción $A(\omega/\omega_p)$ de una película de aluminio (Al) para tres valores distintos del espesor normalizado d/δ . La frecuencia de relajación de los electrones se ha fijado en $\nu = 2,5 \times 10^{-4}\omega_p$, un valor bastante realista para el caso de películas de Al de alta pureza [29,32]. Cada panel de la Figura 4.6 presenta un conjunto de cuatro curvas obtenidas aplicando los diferentes enfoques descritos anteriormente: El modelo clásico local de Drude-Lorentz (curva roja punteada) y su versión cuántica (curva azul de puntos y líneas), el enfoque de la ecuación cinética de Boltzmann (curva verde discontinua) y el formalismo cuántico no local (curva morada sólida). Para el cálculo de cada una de estas gráficas hicimos uso de las fórmulas generales (4.55) y (4.54), sustituyendo en cada caso las expresiones para las impedancias superficiales correspondientes.

Gracias al hecho de que la parte real de las impedancias superficiales determinan las pérdidas electromagnéticas en un metal, el efecto de la cuantización resonante del amor-

tiguamiento de Landau debe manifestarse también en el espectro de absorción de películas metálicas [28].

El panel (a) presenta la respuesta electromagnética de una película nano-delgada cuyo grosor $d/\delta = 0,5$, con $\delta \approx 13$ nm. Esta película admite un número de canales conductores electrónicos relativamente pequeño, $N_F = 35$, de tal manera que el régimen cuántico puede ser alcanzado. Aquí el espectro de absorción cuántico no local (curva morada sólida) exhibe una estructura resonante cuyo origen es debido a la discretización de los números de onda electromagnético y electrónico dentro de la película, y está directamente asociada con la discretización cuántica del amortiguamiento de Landau. Este resultado contrasta fuertemente con las oscilaciones suaves en la absorción predichas por el enfoque clásico no local de Boltzmann (curva verde discontinua). Estos dos comportamientos en la absorción, resonancias marcadas y oscilaciones suaves, son manifestaciones de un mismo mecanismo de absorción no local, en el régimen cuántico y clásico, respectivamente.

El panel (b) representa la situación intermedia en la transición del régimen de no localidad cuántico hacia el clásico. El espesor de la película metálica $d/\delta = 1$ y $N_F = 70$. Aquí, las resonancias del conjunto $|s| = 1$ están cercanas a coalescer, por lo que las curvas no locales cuántica y clásica casi coinciden en el primer intervalo de no localidad $0 < \omega - \omega_1 < k_1 V_F$. Por otra parte, las resonancias de los conjuntos $|s| = 2$ y $|s| = 3$ todavía se distinguen gracias a que los espaciamentos entre sus resonancias son dos y tres veces más grandes que en el conjunto $|s| = 1$, Ec. (4.43).

Por último, en el panel (c) se exhibe el espectro de absorción calculado para una placa de Al más gruesa $d/\delta = 4$, teniendo un número de canales conductores electrónicos grande, $N_F = 281$. En este caso, las predicciones del formalismo cuántico no local y el enfoque de Boltzmann coinciden exactamente, ya que la absorción de energía electromagnética está determinada por el amortiguamiento de Landau clásico.

La dinámica de los espectros de absorción al incrementar el grosor de la placa d/δ muestra la transición del régimen cuántico no local hacia el clásico no local. Adicionalmente, al aumentar de la frecuencia de la onda electromagnética ω , los espectros no locales cuántico y clásico tienden, respectivamente, a las curvas locales del modelo cuántico y clásico de Drude-Lorentz. Respecto a los espectros de absorción calculados con los modelos cuántico (azul con puntos y líneas) y clásico (rojo de puntos) de Drude-Lorentz, estos presentan la misma dependencia en la frecuencia pero con valores distintos cuando el grosor de la película $d < \delta$, panel (a). Después, en el panel (b), ambas curvas comienzan a aproximarse una a la

otra, y subsecuentemente, se traslapan en el panel (c) conforme aumenta el espesor de la placa $d \gg \delta$.

Como se puede constatar de la comparación directa de las Figuras 4.6 y 4.2, la dependencia en la frecuencia de la absorción $A(\omega)$ en el infrarrojo lejano de películas metálicas sigue la misma forma del espectro de frecuencias de $\text{Re}\zeta_0(\omega)$.

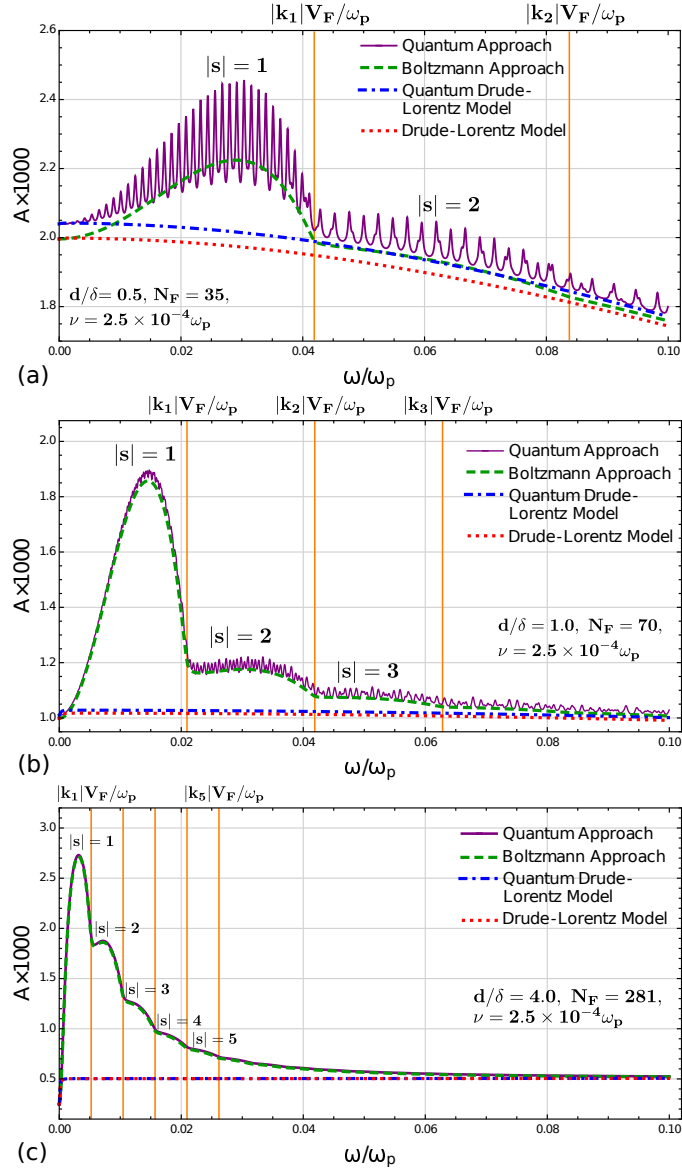


Figura 4.6: Espectro de absorción $A(\omega)$ de una película de aluminio ($V_F = 2,03 \times 10^8$ cm/s, $\omega_p = 3,82 \times 10^3$ THz) predicho por cuatro modelos distintos. Cada panel corresponde a un valor distinto del grosor de la película d indicados en la figura.

Capítulo 5

Electrodinámica de una nanoestructura de metal no local y dieléctrico

En este capítulo estudiaremos las propiedades ópticas de un arreglo multicapa binario de metal y dieléctrico en el régimen cuántico no local. Como se mostró en el Capítulo 4, dentro de una película metálica con un espesor nanométrico ($\leq \delta$), la cuantización del movimiento de los electrones da lugar a la cuantización resonante del amortiguamiento de Landau. Este mecanismo se manifiesta como resonancias en las impedancias superficiales y espectros de absorción de dichos sistemas. Por lo que surge la interrogante de cómo este fenómeno de no localidad cuántico influye en la respuesta electromagnética de nanoestructuras compuestas por capas metálicas nano-delgadas. Los resultados que presentamos a continuación fueron publicados en nuestro artículo [33].

Considere una estructura multicapa binaria siendo excitada de manera unilateral por una onda electromagnética de frecuencia ω . Cada celda unitaria está conformada por una placa dieléctrica y una capa metálica, con espesores d_a y d_b , respectivamente. Así, el tamaño de una celda binaria (a, b) es $d = d_a + d_b$. El campo electromagnético se propaga en la dirección de crecimiento del arreglo (eje x) y posee una polarización descrita por las ecuaciones (2.10), tal como lo indica el esquema en la Figura 5.1.

De acuerdo con las ecuaciones de Maxwell, el campo eléctrico dentro una placa dieléctrica es gobernado por la ecuación de Helmholtz (2.19); donde debemos remplazar la

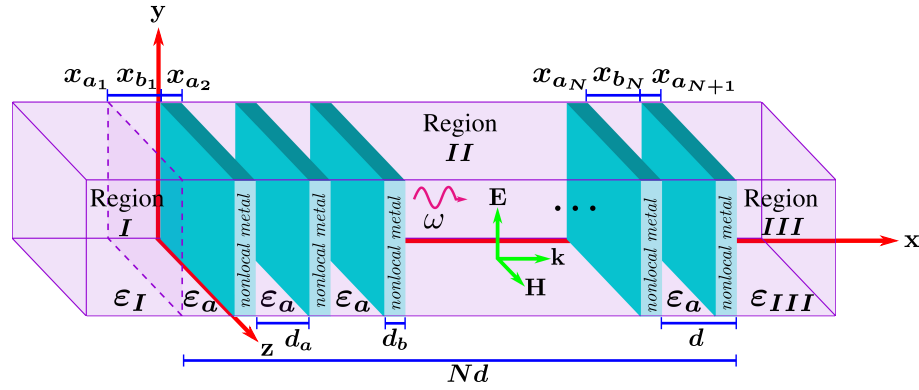


Figura 5.1: Geometría de la estructura multicapa binaria y la onda electromagnética propagante. El arreglo en la región *II* se encuentra embebido entre las regiones *I* y *III*.

permitividad de Drude-Lorentz ε_{DL} por la permitividad ε_a para un dieléctrico sin pérdidas. Por lo tanto, dentro de la placa dieléctrica a_ℓ perteneciente a la ℓ -ésima celda unitaria (a, b) ($\ell = 1, 2, 3, \dots, N$), la distribución del campo electromagnético corresponde a la superposición de ondas planas:

$$E_{a_\ell}(x) = i \frac{k}{k_a} \frac{H_{a_\ell}(x_{a_\ell}) \cos[k_a(x_{b_\ell} - x)] - H_{a_\ell}(x_{b_\ell}) \cos[k_a(x - x_{a_\ell})]}{\sin(k_a d_a)}, \quad (5.1a)$$

$$H_{a_\ell}(x) = \frac{H_{a_\ell}(x_{a_\ell}) \sin[k_a(x_{b_\ell} - x)] + H_{a_\ell}(x_{b_\ell}) \sin[k_a(x - x_{a_\ell})]}{\sin(k_a d_a)}, \quad (5.1b)$$

donde $x_{a_\ell} \leq x \leq x_{b_\ell} = x_{a_\ell} + d_a$. Aquí los puntos x_{a_ℓ} y x_{b_ℓ} indican, respectivamente, las fronteras izquierdas de las capas consecutivas a_ℓ y b_ℓ , vea la Figura 5.1. Nótese también que la diferencia $x_{a_{\ell+1}} - x_{a_\ell} = d$, determina el grosor de una celda unitaria (a, b) . En las expresiones (5.1), $k_a = k\sqrt{\varepsilon_a}$, representa el número de onda del campo electromagnético dentro del medio dieléctrico. Adicionalmente, las constantes de integración $H_{a_\ell}(x_{a_\ell})$ y $H_{a_\ell}(x_{b_\ell})$ especifican el valor del campo magnético en las fronteras izquierda x_{a_ℓ} y derecha x_{b_ℓ} de la placa dieléctrica a_ℓ .

Debido a efectos cuánticos y de dispersión espacial fuerte, la respuesta electromagnética de películas metálicas de grosor nanométrico $d_b \leq \delta$ debe describirse mediante el formalismo cuántico no local derivado en la Sección (4.2). De acuerdo con las ecuaciones (4.31), el campo electromagnético heterogéneo existente dentro de la capa metálica b_ℓ de la ℓ -ésima celda unitaria puede ser escrito de la forma,

$$E_{b_\ell}(x) = \frac{ik}{d_b} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{H_{b_\ell}(x_{a_{\ell+1}}) \cos[k_s(x_{a_{\ell+1}} - x)] - H_{b_\ell}(x_{b_\ell}) \cos[k_s(x - x_{b_\ell})]}{k_s^2 - k^2 \varepsilon(k_s)}, \quad (5.2a)$$

$$H_{b_\ell}(x) = \frac{1}{d_b} \sum_{s=-\infty}^{\infty} k_s \frac{H_{b_\ell}(x_{a_{\ell+1}}) \sin [k_s(x_{a_{\ell+1}} - x)] + H_{b_\ell}(x_{b_\ell}) \sin [k_s(x - x_{b_\ell})]}{k_s^2 - k^2 \varepsilon(k_s)}, \quad (5.2b)$$

para $x_{b_\ell} \leq x \leq x_{a_{\ell+1}} = x_{b_\ell} + d_b$. Recordemos que en las expresiones cuánticas no locales (5.2) para los campos eléctrico y magnético, cada modo normal independiente s contribuye a la respuesta electromagnética a través de su número de onda cuantizado $k_s = s\pi/d_b$ y su propia permitividad (4.32)-(4.33).

5.1. Matriz de transferencia de la celda unitaria y relación de dispersión

Con el fin de alcanzar nuestro objetivo principal en esta tesis: Estudiar teóricamente los efectos cuánticos en la respuesta no local de nanoestructuras de metal y dieléctrico, aplicaremos el método de la matriz de transferencia para el cálculo de las propiedades ópticas de estos sistemas. Debido a que en un sistema multicapa todas las celdas unitarias (a, b) son equivalentes, debemos comenzar nuestro estudio con el análisis de la respuesta electromagnética de solamente una de estas celdas.

Considere la ℓ -ésima celda unitaria restringida al intervalo $x_{a_\ell} \leq x \leq x_{a_{\ell+1}}$. La estructura de dicha celda se compone de una placa dieléctrica en la región $x_{a_\ell} \leq x \leq x_{b_\ell}$ seguida de una película metálica ubicada en el intervalo $x_{b_\ell} \leq x \leq x_{a_{\ell+1}}$. Las condiciones de frontera de los campos electromagnéticos en las interfaces metal-dieléctrico, $x = x_{b_\ell}$ y $x = x_{a_{\ell+1}}$, dan lugar a relaciones lineales entre los campos eléctricos (5.1) y (5.2) en ambas fronteras de la celda ℓ (a, b) , las cuales son presentadas en forma matricial como,

$$\begin{pmatrix} E(x_{a_{\ell+1}}) \\ H(x_{a_{\ell+1}}) \end{pmatrix} = \mathbb{Q} \begin{pmatrix} E(x_{a_\ell}) \\ H(x_{a_\ell}) \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

La matriz de transferencia \mathbb{Q} de la celda unitaria puede ser calculada mediante el producto de la matriz de transferencia \mathbb{D} de la placa dieléctrica a_ℓ por la matriz de transferencia \mathbb{M} de la capa metálica b_ℓ . Específicamente, evaluando las expresiones (5.1) para el campo electromagnético en ambas fronteras de la placa dieléctrica x_{a_ℓ} y x_{b_ℓ} establecemos la relación de transferencia,

$$\begin{pmatrix} E(x_{b_\ell}) \\ H(x_{b_\ell}) \end{pmatrix} = \mathbb{D} \begin{pmatrix} E(x_{a_\ell}) \\ H(x_{a_\ell}) \end{pmatrix}, \quad (5.4)$$

que define a la matriz \mathbb{D} como,

$$\mathbb{D} = \begin{pmatrix} \cos(k_a d_a) & \frac{ik}{k_a} \sin(k_a d_a) \\ \frac{ik_a}{k} \sin(k_a d_a) & \cos(k_a d_a) \end{pmatrix}. \quad (5.5)$$

Nótese que $\det \mathbb{D} = 1$. Por otro lado, la matriz de transferencia \mathbb{M} está determinada por la relación entre los valores de los campos (5.2) en las fronteras de la capa metálica x_{b_ℓ} y $x_{a_{\ell+1}}$,

$$\begin{pmatrix} E(x_{a_{\ell+1}}) \\ H(x_{a_{\ell+1}}) \end{pmatrix} = \mathbb{M} \begin{pmatrix} E(x_{b_\ell}) \\ H(x_{b_\ell}) \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

Aquí \mathbb{M} está dada por la ecuación (4.48) para la matriz de transferencia de la película metálica sola. Lo anterior se debe a que tanto \mathbb{M} como \mathbb{D} no dependen de la posición de las placas, solamente dependen de las propiedades electromagnéticas de cada material y del espesor de las capas. Por lo tanto, al ser idénticas todas las celdas unitarias (a, b), la matriz de transferencia \mathbb{Q} en cada una de ellas es la misma,

$$\mathbb{Q} = \mathbb{M}\mathbb{D}. \quad (5.7)$$

Los elementos de la matriz \mathbb{Q} están descritos en términos de las impedancias superficiales (4.35) como,

$$Q_{11} = \frac{\zeta_0}{\zeta_{d_b}} \cos(k_a d_a) - i \frac{\zeta_0^2 - \zeta_{d_b}^2}{Z_a \zeta_{d_b}} \sin(k_a d_a), \quad (5.8a)$$

$$Q_{12} = -\frac{\zeta_0^2 - \zeta_{d_b}^2}{\zeta_{d_b}} \cos(k_a d_a) + i \frac{Z_a \zeta_0}{\zeta_{d_b}} \sin(k_a d_a), \quad (5.8b)$$

$$Q_{21} = -\frac{1}{\zeta_{d_b}} \cos(k_a d_a) + i \frac{\zeta_0}{Z_a \zeta_{d_b}} \sin(k_a d_a), \quad (5.8c)$$

$$Q_{22} = \frac{\zeta_0}{\zeta_{d_b}} \cos(k_a d_a) - i \frac{Z_a}{\zeta_{d_b}} \sin(k_a d_a). \quad (5.8d)$$

Para una placa de un medio dieléctrico no magnético, la impedancia Z_a tiene la forma estándar $Z_a = 1/\sqrt{\varepsilon_a}$. Debido a que \mathbb{Q} es el producto de dos matrices unimodulares (5.7), la matriz de transferencia de la celda unitaria es también unimodular, $\det \mathbb{Q} = 1$.

Supongamos que nuestro sistema multicapa es infinito. Con la finalidad de obtener la estructura de bandas fotónicas de la superred metal-dieléctrico haremos uso del teorema de Bloch. De acuerdo con este teorema el campo electromagnético obtenido después de atravesar un período completo d , corresponde al campo inicial multiplicado por una fase

global,

$$\begin{pmatrix} E(x_{a_{\ell+1}}) \\ H(x_{a_{\ell+1}}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(i\kappa d) & 0 \\ 0 & \exp(i\kappa d) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(x_{a_\ell}) \\ H(x_{a_\ell}) \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$

Aquí κ es el número de onda de Bloch y d el período de la superred.

Comparando las expresiones (5.3) y (5.9) notamos que se trata de relaciones de transferencia complementarias. Combinemos ambas expresiones restando la Ec. (5.9) de la Ec. (5.3),

$$\begin{pmatrix} Q_{11} - \lambda & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(x_{a_\ell}) \\ H(x_{a_\ell}) \end{pmatrix} = 0. \quad (5.10)$$

El resultado (5.10) constituye un problema de eigenvalores para la matriz \mathbb{Q} de la celda unitaria, donde $\lambda = \exp(i\kappa d)$ representa los eigenvalores de dicha matriz. La solución de la ecuación (5.10) proporciona la ecuación de dispersión que asocia el número de onda κ del modo fotónico de Bloch con su frecuencia. Los eigenvalores $\lambda = \exp(i\kappa d)$ con números de onda κ cuya parte real es mayor que su parte imaginaria, $\text{Re}\kappa > \text{Im}\kappa$, corresponden a modos fotónicos propagantes.

Entonces, para obtener una solución de la Ec. (5.10) distinta a la solución trivial, su determinante debe ser igual a cero, es decir, $\det(\mathbb{Q} - \lambda\mathbb{I}) = 0$. De aquí se sigue que,

$$\begin{aligned} \lambda^2 - \lambda \text{Tr } \mathbb{Q} + \det \mathbb{Q} &= 0 \\ \lambda^2 - \lambda \text{Tr } \mathbb{Q} + 1 &= 0 \\ \lambda [\lambda - \text{Tr } \mathbb{Q} + \lambda^{-1}] &= 0 \\ \lambda + \lambda^{-1} &= \text{Tr } \mathbb{Q} \\ 2 \cos(\gamma) &= \text{Tr } \mathbb{Q} \end{aligned} \quad (5.11)$$

Durante la derivación de las expresiones anteriores hemos usando la propiedad de unimodularidad de la matriz \mathbb{Q} , $\det \mathbb{Q} = 1$. Sustituyendo las Ecs. (5.8) en el resultado (5.11), encontramos que para un arreglo periódico unidimensional, la relación de dispersión (5.11) para el modo fotónico con número de onda de Bloch κ , toma la forma

$$\cos(\kappa d) = \frac{\zeta_0}{\zeta_{d_b}} \cos(k_a d_a) - \frac{i Z_a^2 + \zeta_0^2 - \zeta_{d_b}^2}{2 Z_a \zeta_{d_b}} \sin(k_a d_a). \quad (5.12)$$

Cabe resaltar que la ecuación de dispersión (5.12) tiene en consideración el fenómeno del amortiguamiento de Landau cuántico, que puede manifestarse como resonancias en las impedancias superficiales (4.35) de la capa metálica. Por otra parte, si las impedancias superficiales cuánticas no locales ζ_0 y ζ_d son remplazadas por las impedancias clásicas locales

ζ_0^{DL} y ζ_d^{DL} del modelo de Drude-Lorentz, Ec. (2.21), entonces la Ec. (5.12) se reduce a la ya conocida ecuación de Rytov [34],

$$\cos(\kappa^{(\text{loc})}d) = \cos(kd_b\sqrt{\varepsilon_{DL}})\cos(k_a d_a) - \frac{1}{2}\left(\sqrt{\varepsilon_{DL}}Z_a + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{DL}}Z_a}\right)\sin(kd_b\sqrt{\varepsilon_{DL}})\sin(k_a d_a). \quad (5.13)$$

5.2. Absorción y transmisión de una nanoestructura de N capas

Supongamos ahora un arreglo regular compuesto por N celdas unitarias binarias (a, b) restringido por la izquierda y por la derecha por medios homogéneos distintos. Vea la Figura 5.1.

Apliquemos el método de la matriz de transferencia procediendo de manera similar a lo hecho en la Secc. 4.4.1, para obtener las amplitudes de reflexión $r = E_r/E_i$ y transmisión $t = E_t/E_i$ en términos de la matriz de transferencia total $\mathbb{Q}^{(T)}$ del sistema,

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbb{Q}^{(T)} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}, \quad \mathbb{Q}^{(T)} = \mathbb{Q}_{III}\mathbb{Q}_{II}\mathbb{Q}_I. \quad (5.14)$$

La matriz de transferencia total $\mathbb{Q}^{(T)}$ es el producto de tres matrices diferentes correspondientes a las regiones I , II y III ,

$$\mathbb{Q}_I = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \sqrt{\varepsilon_I} & -\sqrt{\varepsilon_I} \end{pmatrix}, \quad \mathbb{Q}_{II} = \mathbb{Q}^N, \quad \mathbb{Q}_{III} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1/\sqrt{\varepsilon_{III}} \\ 1 & -1/\sqrt{\varepsilon_{III}} \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

Específicamente, la matriz \mathbb{Q}_I describe la transferencia de la onda electromagnética a través de la interfaz ($I|II$) del medio I con permitividad ε_I hacia el arreglo multicapa en la región II ,

$$\begin{pmatrix} E(x_{a_1}) \\ H(x_{a_1}) \end{pmatrix} = \mathbb{Q}_I \begin{pmatrix} E_i \\ E_r \end{pmatrix}. \quad (5.16)$$

Por su parte, la matriz \mathbb{Q}_{II} representa la matriz de transferencia de la estructura de N bicapas, la cual queda definida por la relación,

$$\begin{pmatrix} E(x_{a_{N+1}}) \\ H(x_{a_{N+1}}) \end{pmatrix} = \mathbb{Q}_{II} \begin{pmatrix} E(x_{a_1}) \\ H(x_{a_1}) \end{pmatrix}. \quad (5.17)$$

La otra matriz \mathbb{Q}_{III} , caracteriza la transferencia de la onda electromagnética por la interfaz $(II|III)$ desde la región II hasta el medio III con permitividad ε_{III} ,

$$\begin{pmatrix} E_t \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbb{Q}_{III} \begin{pmatrix} E(x_{a_{N+1}}) \\ H(x_{a_{N+1}}) \end{pmatrix}. \quad (5.18)$$

De aquí en adelante, vamos a considerar el caso simétrico donde ambos medios, I y III , son los mismos, es decir, $\varepsilon_I = \varepsilon_{III}$, en consecuencia, $\mathbb{Q}_I \mathbb{Q}_{III} = \mathbb{I}$ y $\det \mathbb{Q}^{(T)} = 1$.

Finalmente, la transmisión T , reflexión R y absorción A de una onda electromagnética ocasionada por un arreglo regular de N bicapas son expresadas mediante los elementos de la matriz de transferencia total como sigue [29],

$$T = |t|^2 = \left| \mathbb{Q}_{22}^{(T)} \right|^{-2}, \quad R = |r|^2 = \left| \mathbb{Q}_{21}^{(T)} / \mathbb{Q}_{22}^{(T)} \right|^2, \quad A = 1 - T - R. \quad (5.19)$$

5.3. Espectros ópticos: Efectos del amortiguamiento de Landau cuántico

Cuando el grosor de las capas metálicas es del orden o mayor que la profundidad de penetración del campo electromagnético, el acoplamiento de la onda en las capas dieléctricas es exponencialmente débil. En consecuencia, la estructura de bandas de la superred se caracteriza por brechas prohibidas amplias mientras que las bandas de paso resultan ser más bien estrechas. A pesar del traslape débil, la onda electromagnética logra transmitirse a lo largo de la superred gracias a la aparición de resonancias de Fabry-Perot en las capas dieléctricas. Dichas resonancias tienen lugar en los valores de frecuencia [4, 5, 29],

$$\omega_j = \frac{(c/\sqrt{\varepsilon_a})}{d_a} j\pi \quad \text{donde} \quad k_a d_a = j\pi; \quad j = 1, 2, 3, \dots \quad (5.20)$$

A pesar del alto contraste entre las impedancias superficiales de las capas metálicas ζ_0, ζ_d y la impedancia del dieléctrico Z_a , cerca de las frecuencias de resonancia de Fabry-Perot del dieléctrico (5.20), la relación de dispersión de los modos fotónicos (5.12) tiene soluciones reales que corresponden a estados propagantes.

En la Figura 5.2 presentamos los resultados de nuestros experimentos numéricos realizados para dos nanoestructuras vacío-aluminio distintas. Para cada uno de estos sistemas se muestran el espectro de absorción y transmisión, al igual que la banda de paso fotónica cerca de la primera resonancia de Fabry-Perot en el dieléctrico ($j = 1$), calculados aplicando el formalismo cuántico no local y el modelo clásico local de Drude-Lorentz.

Los parámetros que caracterizan a las capas de aluminio son: $V_F = 2,03 \times 10^8$ cm/s, $\omega_p = 3,82 \times 10^3$ THz, $\nu = 1 \times 10^{-6}\omega_p$, $d_b = 1,0\delta$ con $\delta \approx 13$ nm, para este grosor de la película metálica el número de canales conductores electrónicos $N_F = 70$. Por otro lado, los espesores usados para las placas dieléctricas son, $d_a = 447\delta$ y $d_a = 448,7\delta$ para los paneles izquierdos y derechos, respectivamente. Esta elección de d_a sitúa la frecuencia $\omega_{j=1}$ de la primera resonancia de Fabry-Perot del dieléctrico, dentro del intervalo de frecuencias (4.42) donde los primeros modos normales electromagnéticos con $|s| = 1$ tienen una fuerte respuesta no local. Por simplicidad consideramos que el arreglo multicapa está rodeado también por vacío, es decir, que $\varepsilon_I = \varepsilon_{III} = \varepsilon_a = 1$. Detallemos ahora cada uno de los incisos en la Figura 5.2. En los paneles (a) y (b) la curva roja sólida y la púrpura punteada corresponden a la parte real e imaginaria del número de onda de Bloch κ obtenido con la ecuación de dispersión (5.12) dentro del formalismo cuántico no local. Adicionalmente, la curva azul discontinua y la naranja de puntos y líneas representan la parte real e imaginaria de κ que satisface la relación de dispersión (5.13) con las impedancias clásicas locales del modelo de Drude-Lorentz.

En el caso de una arreglo multicapa finito, el número de onda de Bloch κ está cuantizado. Esto da lugar a un segundo tipo de resonancia de Fabry-Perot pero a lo largo de toda la estructura de N celdas unitarias. Dichas resonancias ocurren para los valores de frecuencia que satisfacen la condición,

$$\text{Re}\kappa = \frac{p\pi}{Nd}, \quad (5.21)$$

donde p es un entero positivo. En las curvas rojas de los paneles (a) y (b), los puntos negros especifican los valores de frecuencia donde las resonancias (5.21) ocurren para los valores de $p = 1, 2, \dots, N - 1$. Las regiones sombreadas en color verde señalan las brechas de energía prohibidas calculadas con base en el formalismo cuántico no local. Las bandas de paso o bandas permitidas aparecen en las cercanías de la resonancia de Fabry-Perot $\omega_{j=1}$, la cual ha sido señalada en las figuras con una línea vertical magenta discontinua.

La Figura 5.2(a) nos presenta el caso en donde una de las frecuencias cuánticas de transición electrónica en el metal $\omega_{n+|s|,n}$, Ec. (4.23a), señalada por la línea vertical turquesa, se localiza dentro de la banda de paso fotónica clásica local representada por la curva azul discontinua y originada por la primera resonancia de Fabry-Perot $\omega_{j=1}$, Ec. (5.20). Debido a los parámetros utilizados para describir las capas metálicas, la frecuencia de transición cuántica $\omega_{n+|s|,n}$, corresponde a una transición electrónica entre los canales conductores con

números cuánticos $n = 23$ y $n + |s| = 24$. La figura muestra una modificación drástica de la curva de dispersión fotónica causada por la aparición del amortiguamiento de Landau cuántico en las componentes metálicas. Específicamente, el cruce evitado entre la resonancia de Landau cuántica $\omega = \omega_{n+|s|,n}$ y la parte real del espectro fotónico $\text{Re}\kappa(\omega)$ genera el desdoblamiento de la banda fotónica clásica local en dos minibandas separadas por una brecha prohibida estrecha. Esta nueva ley de dispersión fotónica está representada por la línea roja sólida cuántica no local. Dentro de la nueva banda prohibida, el valor de $\text{Im}\kappa(\omega)$ es relativamente grande; mientras que la parte real del número de onda de Bloch no desaparece debido a que la frecuencia de colisiones ν es pequeña pero finita. Adicionalmente, en esta brecha prohibida la dispersión de $\text{Re}\kappa(\omega)$ es anómala.

En el panel (c) de la Figura 5.2 se exhiben la dependencia en la frecuencia de la transmisión $\log T(\omega)$ de un arreglo regular compuesto por $N = 10$ celdas unitarias calculado dentro del mismo rango de frecuencias presentado en el panel (a). Las curvas rosa discontinua y azul sólida especifican, respectivamente, los espectros de transmisión obtenidos aplicando el modelo clásico local de Drude-Lorentz y el formalismo cuántico. De acuerdo con los resultados clásicos locales, el número de picos de transmisión asociados con las resonancias de Fabry-Perot del segundo tipo (5.21) es igual a $N - 1 = 9$, y sus amplitudes son cercanas a uno. En la Ref. [4] se muestra que el amortiguamiento de Landau en el régimen clásico no local provoca el ensanchamiento y la disminución de los picos resonantes de transmisión. No obstante, como puede constatarse en el panel (c), el formalismo cuántico no local predice no sólo un decremento en los picos sino la transmisión nula de energía en un pequeño rango de frecuencias que coincide con la ubicación de la nueva brecha prohibida. Como resultado, el espectro de transmisión cuántico no local (curva azul sólida) presenta picos de transmisión adicionales que se encuentran desplazados respecto al espectro de Drude-Lorentz (curva rosa discontinua).

El análisis del espectro de absorción $\log A(\omega)$ cuántico no local presentado en el panel (e), demuestra que la absorción de energía electromagnética por parte de la nanoestructura aumenta en la región de la nueva brecha prohibida. Entonces, la interacción/competición de la resonancia de Fabry-Perot $\omega_{j=1}$ en el dieléctrico con la transición electrónica cuántica entre los estados $n = 23$ y $n = 24$ en la nano-capa metálica, producen los siguientes efectos: Modifican la dispersión de los modos fotónicos, transformando la dispersión normal en anómala, y además, incrementan el nivel de absorción del sistema.

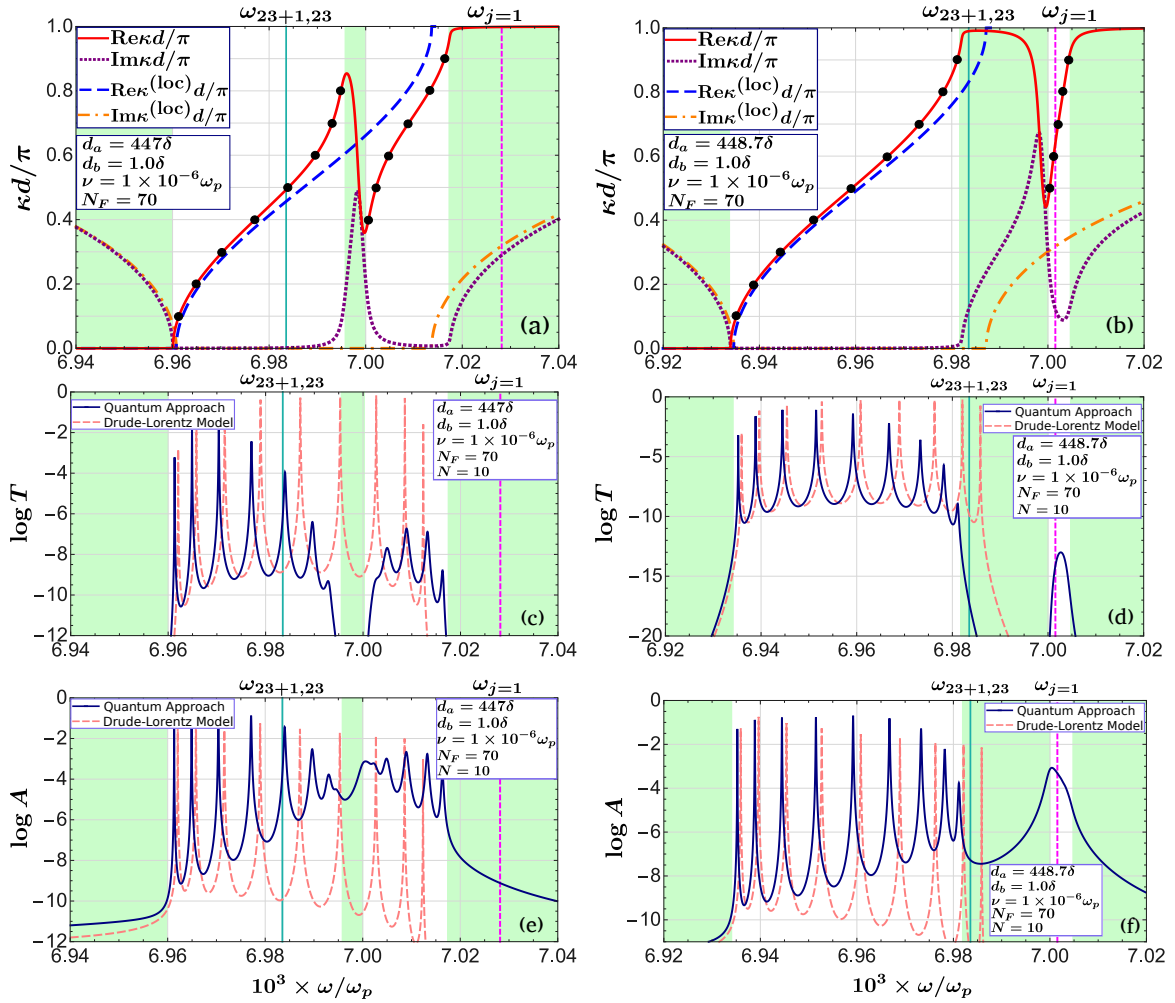


Figura 5.2: Estructura de bandas fotónica (paneles (a) y (b)), espectros de transmisión ($\log T$, paneles (c) y (d)) y absorción ($\log A$, paneles (e) y (f)) cerca de la primera resonancia de Fabry-Perot del dieléctrico, Ec. (5.20) con $j = 1$. La curvas en los paneles izquierdos (derechos) fueron calculadas para $d_a = 447\delta$ ($d_a = 448,7\delta$).

La disminución del intervalo entre las resonancias de Fabry-Perot $\omega = \omega_{j=1}$ y de transición electrónica cuántica $\omega = \omega_{n+|s|,n}$, intensifica la repulsión de niveles produciendo modificaciones aún más fuertes en los espectros ópticos clásicos locales. Cuando incrementamos ligeramente el grosor de las placas dieléctricas de $d_a = 447\delta$ a $d_a = 448,7\delta$, manteniendo el mismo grosor para las componentes metálicas $d_b = \delta$, logramos aproximar la resonancia de Fabry-Perot $\omega = \omega_{j=1}$ a la resonancia de Landau cuántica $\omega = \omega_{n+|s|,n}$. El panel (b)

de la Figura 5.2 presenta la estructura de bandas fotónica correspondiente a la situación de máxima proximidad entre resonancias. Como resultado de la intensa repulsión entre los niveles fotónicos y la resonancia de Landau cuántica, la estructura de bandas (curva roja sólida) exhibe la formación de una nueva minibanda centrada en la frecuencia $\omega_{j=1}$ inexistente en el espectro clásico local (línea azul discontinua). Además, el formalismo cuántico no local predice que el arreglo regular es relativamente transparente un rango de frecuencias donde de acuerdo con el modelo de Drude-Lorentz, el sistema es completamente opaco. Como puede ser apreciado en el panel (d), el espectro de transmisión presenta un pequeño pico cercano a la frecuencia $\omega_{j=1}$.

Recordemos que el decaimiento de una onda dentro de una estructura periódica está determinado por dos fenómenos: La reflexión de Bragg de las ondas sobre las distintas interfaces del sistema; y los mecanismos de disipación de energía. Específicamente, la ecuación de dispersión (5.12) derivada dentro del formalismo cuántico, tiene en cuenta distintos tipos de mecanismos de disipación; a saber, el debido a las colisiones electrónicas gobernado por la frecuencia ν , y el mecanismo sin colisiones del amortiguamiento de Landau cuántico. Así, el decaimiento de un modo fotónico debido al incremento en la parte imaginaria del número de onda de Bloch $\text{Im}\kappa$ es causada por reflexiones de Bragg, pero también por pérdidas irreversibles de energía durante las colisiones, y por pérdidas reversibles de energía en las transiciones electrónicas cuánticas. Por otro lado, la absorción de energía electromagnética solamente depende de procesos disipativos, tanto reversibles como irreversibles. Dicho esto, analicemos los comportamientos diferentes de la $\text{Im}\kappa$ y el espectro de absorción $\log A(\omega)$ exhibidos, respectivamente, en los paneles (b) y (f). Dentro de la brecha prohibida ubicada en el rango normalizado de frecuencias $6,98 - 7,00$, el decaimiento del modo fotónico se debe principalmente a reflexiones de Bragg consecutivas, ya que en esta región la $\text{Im}\kappa$ es grande y por el contrario, la absorción de energía es relativamente pequeña. De acuerdo con las relaciones de Kramers-Kronig [22], un fuerte incremento en la $\text{Im}\kappa$ está asociado con la dispersión anómala del modo fotónico en esta misma región. Por otra parte, en el intervalo de frecuencias normalizadas $7,0 - 7,05$ donde la nueva minibanda de paso aparece, la onda electromagnética decae debido solamente a la disipación de energía. En esta región, la $\text{Im}\kappa$ prácticamente se anula, mientras que la absorción aumenta gracias al amortiguamiento de Landau cuántico. Como consecuencia de este incremento en la absorción del sistema, la transmisión de la onda electromagnética en este rango de frecuencia es relativamente pequeña (vea el panel (d)).

Nótese también que la primera banda del espectro de transmisión cuántico no local presentado en el panel (d), es más estrecha que la predicha por el modelo clásico local de Drude-Lorentz. No obstante, el número de picos resonantes contenidos esta primera banda es todavía $N - 1 = 9$; mientras que en la segunda banda (dentro del rango normalizado de frecuencias $7,0 - 7,05$) todos los picos están traslapados. Como lo demuestran los paneles (d) y (f), debido a que los efectos no locales se manifiestan con mayor fuerza en las cercanías de la frecuencia de resonancia Fabry-Perot $\omega_{j=1}$, los espectros de transmisión y de absorción presentan, respectivamente, una disminución e incremento en las resonancias localizadas en el borde derecho de la primera banda de paso.

La Figura 5.3 muestra el caso donde la resonancia de Landau cuántica $\omega_{n+|s|,n}$ correspondiente a la transición electrónica entre los estados $n = 23$ y $n + |s| = 24$, interactúa con la banda de paso fotónica asociada a la segunda resonancia de Fabry-Perot en el dieléctrico $\omega = \omega_{j=2}$, vea Ec. (5.20), calculada con el modelo de Drude-Lorentz. Aquí hemos elegido el grosor de la placa dieléctrica d_a de tal forma que la frecuencia $\omega_{j=2}$ se localice en una vecindad de la frecuencia $\omega_{n+|s|,n}$. Los otros parámetros del sistema se mantuvieron fijos. Los resultados son consistentes con los obtenidos para el caso anterior con $\omega_{j=1}$. El efecto del amortiguamiento de Landau cuántico también se manifiesta fuertemente en los espectros ópticos de la superred. Específicamente, los paneles izquierdos revelan la formación de una nueva brecha prohibida caracterizada por una región donde la dispersión de $\text{Re}\kappa$ es anómala, y la transmisión cae abruptamente gracias al aumento de la absorción de energía electromagnética por parte del sistema. Los paneles del lado izquierdo presentan el caso de mayor proximidad entre $\omega = \omega_{n+|s|,n}$ y $\omega = \omega_{j=2}$, y por ende, de máxima repulsión de niveles, que tienen como consecuencia la formación de una banda de paso fotónica adicional.

En las estructuras de bandas fotónicas de sistemas periódicos sin pérdidas de energía, las bandas de paso se ubican en aquellos intervalos de frecuencia donde $\text{Im}\kappa = 0$; mientras que las brechas prohibidas son localizadas en las regiones donde $\text{Im} > 0$ y $\text{Re}\kappa = \text{cte}$. Dentro de las bandas prohibidas, originadas por reflexiones de Bragg, la densidad de estados fotónicos (DOS) es igual a cero, ya que no existen modos propagantes para estos valores de frecuencia. La presencia de disipación de energía caracterizada por un valor finito de la frecuencia de relajación ν , no modifica la clasificación de las zonas dentro de la estructura de bandas pero si suaviza los bordes entre las bandas de paso y brechas prohibidas [35]. Sin embargo, como se presentó anteriormente, el mecanismo sin colisiones del

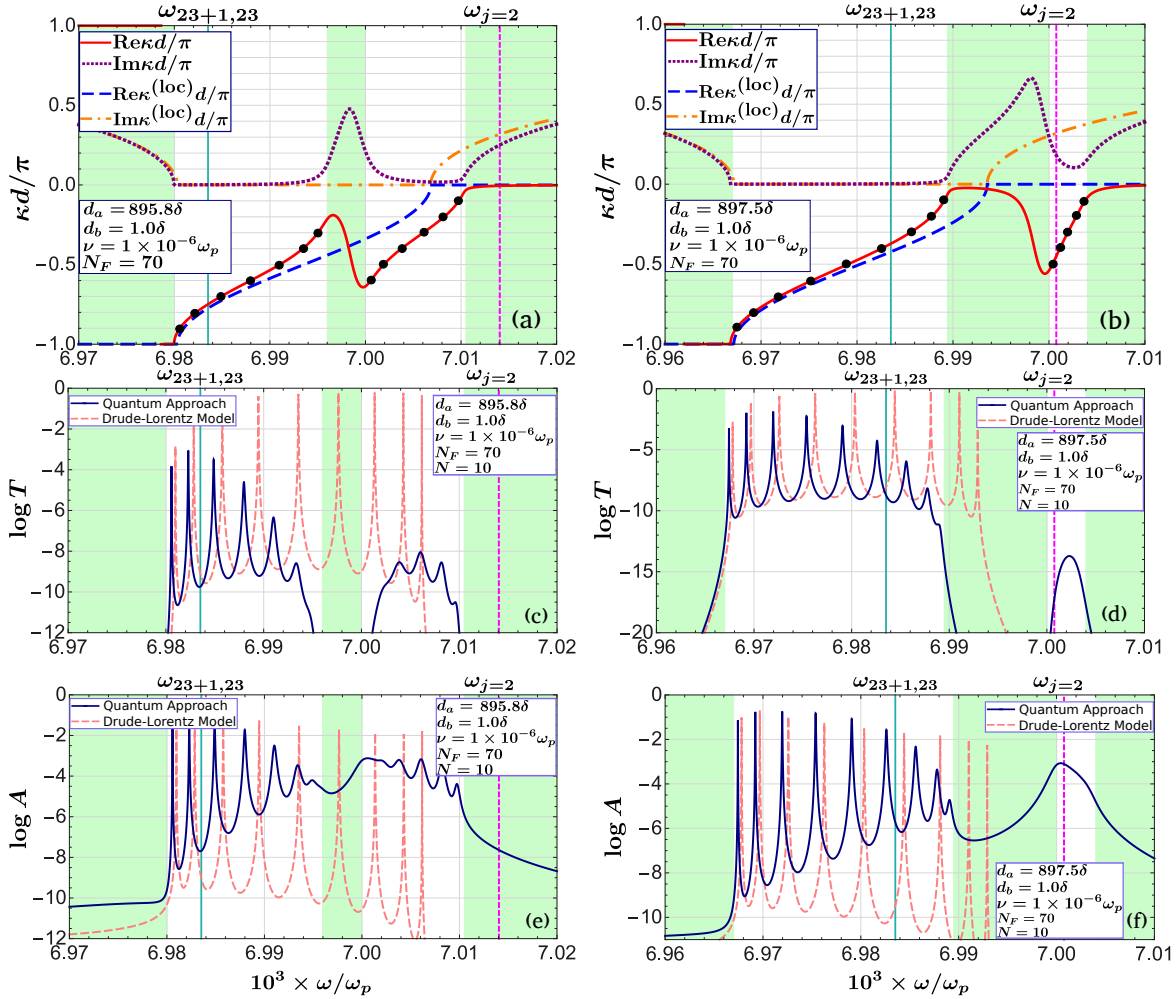


Figura 5.3: Estructura de bandas fotónica (paneles (a) y (b)), espectros de transmisión ($\log T$, paneles (c) y (d)) y absorción ($\log A$, paneles (e) y (f)) cerca de la segunda resonancia de Fabry-Perot del dieléctrico, Ec. (5.20) con $j = 2$. Las curvas en los paneles izquierdos (derechos) fueron calculadas para $d_a = 895,8\delta$ ($d_a = 897,5\delta$). Los otros parámetros son los mismos que los usados en la Fig. 5.2

amortiguamiento de Landau cuántico puede alterar drásticamente la estructura de bandas en la región cercana a la resonancia de transición electrónica cuántica. Específicamente, la cercanía entre una resonancia de Fabry-Perot del dieléctrico $\omega = \omega_j$ y una resonancia del amortiguamiento de Landau cuántica $\omega = \omega_{n+|s|,n}$, genera el fenómeno de cruce evitado de niveles produciendo nuevas brechas prohibidas y bandas de paso en la estructura de bandas

de una superred dieléctrico-metal. A diferencia de las bandas prohibidas “clásicas” donde $\text{Re}\kappa = \text{cte}$, dentro de las nuevas brechas “cuánticas”, la $\text{Re}\kappa$ no se mantiene constante, sino que muestra una dispersión anómala, vea los paneles (a) y (b) de las Figuras 5.2 y 5.3. De acuerdo con las relaciones de Kramers-Kronig, la dispersión anómala de la $\text{Re}\kappa$ está relacionada con un incremento en la $\text{Im}\kappa$, es decir, con la disipación del modo de Bloch dentro del arreglo. En el caso particular de estas brechas cuánticas, la disipación de la onda se debe principalmente a procesos de dispersión sin colisiones, ya que se mantienen finitos incluso en el límite $\nu \rightarrow 0$. A saber, este proceso es el llamado amortiguamiento de Landau cuántico que se manifiesta como transiciones cuánticas entre estados electrónicos $n + |s|$ y n promovidas por la absorción de un modo electromagnético $|s|$ dentro de las capas metálicas. Esto explica la aparición de brechas prohibidas cuánticas en la estructura de banda de una superred dieléctrico-metal en el límite de bajas colisiones. Por lo tanto, las brechas energéticas prohibidas para un sistema periódico pueden formarse debido no sólo a reflexiones de Bragg convencionales, sino también debido a la repulsión de niveles cuando uno de esos niveles es la resonancia cuántica del amortiguamiento de Landau.

Con la finalidad de ilustrar la naturaleza distinta de las bandas prohibidas generadas por reflexiones de Bragg y aquellas brechas cuánticas producidas por el amortiguamiento de Landau, presentamos en la Figura 5.4 la densidad de estados (DOS) correspondiente a los espectros fotónicos de los paneles (a) y (b) de las Figuras 5.2 y 5.3. Las curvas azul sólida y rosa discontinua fueron calculadas a partir de las relaciones de dispersión cuántica (5.12) y clásica (5.13), respectivamente, de acuerdo con la definición [36]:

$$\text{DOS} = \frac{1}{\pi} \left| \frac{\partial \omega}{\partial \kappa} \right|^{-1}. \quad (5.22)$$

Dentro de la región de las brechas convencionales (regiones verdes amplias localizadas en ambos lados de los espectros) la densidad de estados es cero. Por otra parte, en las brechas intermedias generadas por el amortiguamiento de Landau, la DOS tiene valores grandes en todos los espectros, independientemente de la paridad de la resonancia de Fabry-Perot, es decir, tanto para $\omega_{j=1}$ como para $\omega_{j=2}$. Esto significa que en estos valores de frecuencia, la onda de Bloch no sufre reflexiones de Bragg, sin embargo, no logra propagarse debido su interacción con los electrones cuantizados en el metal que absorben energía electromagnética de manera resonante y directa.

En los paneles (a) y (b) de la Figura 5.5 se comparan los espectros de absorción $\log A(\omega)$ calculados para distintos valores de la frecuencia de relajación ν dentro del enfoque

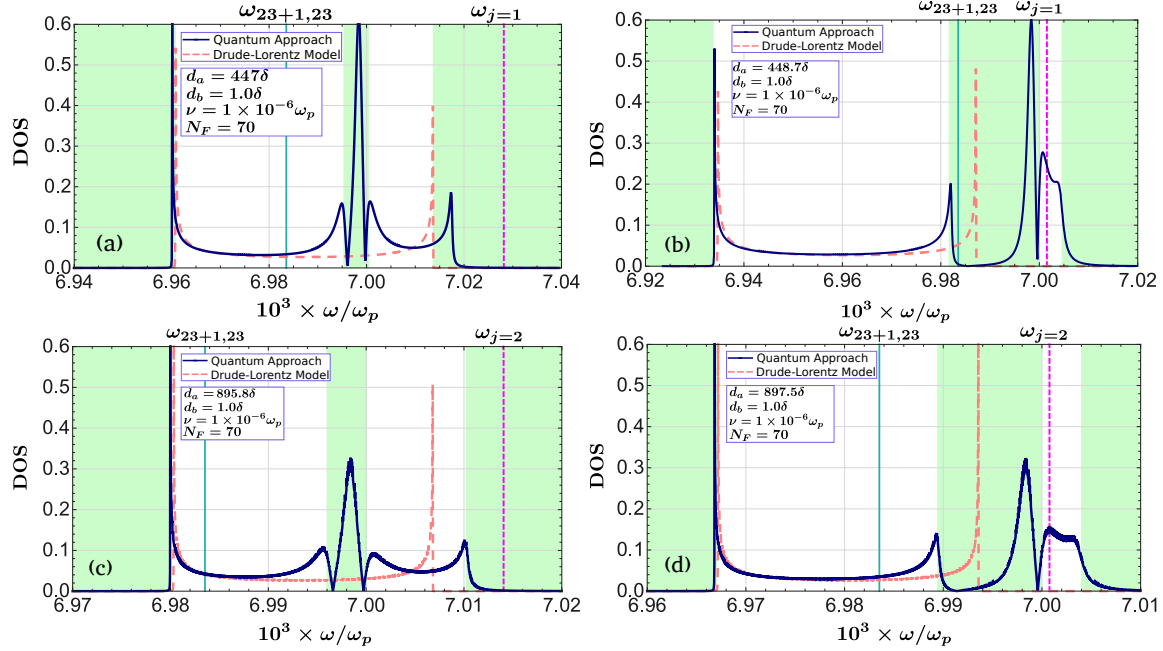


Figura 5.4: Densidad de estados fotónicos calculada a partir de las ecuaciones de dispersión (5.12) y (5.13). Note que la densidad de estados no es cero dentro de las brechas prohibidas cuánticas ubicadas en el centro del espectro.

cuántico no local y el modelo clásico local de Drude-lorentz, respectivamente. En estos espectros, los picos de absorción correspondientes a los modos de Bloch cuantizados o también llamados resonancias de Fabry-Perot de segundo tipo, son claramente apreciados dentro de un amplio rango de valores de la frecuencia de relajación $\nu/\omega_p \sim 10^{-7} - 10^{-4}$. Además, en el panel (a) se muestra claramente la manifestación de la nueva brecha prohibida donde el amortiguamiento de Landau cuántico modifica fuertemente la estructura de bandas fotónica. Dentro del régimen clásico local, la absorción de energía electromagnética se debe únicamente a las colisiones de los electrones con defectos e impurezas en el metal, con lo cual, al aumentar la frecuencia de tales colisiones ν , aumenta también la absorción de energía, vea el panel (b). En contraste, en el régimen cuántico no local, la energía es absorbida por un pequeño grupo de electrones efectivos que interactúan de manera resonante con los modos electromagnéticos del campo. La duración de dicha interacción resonante entre estos electrones y la onda, aumenta al disminuir las colisiones en el sistema $\nu \rightarrow 0$, esto da lugar a una absorción máxima en el límite de bajas colisiones, como se sigue de la Figura 5.5.

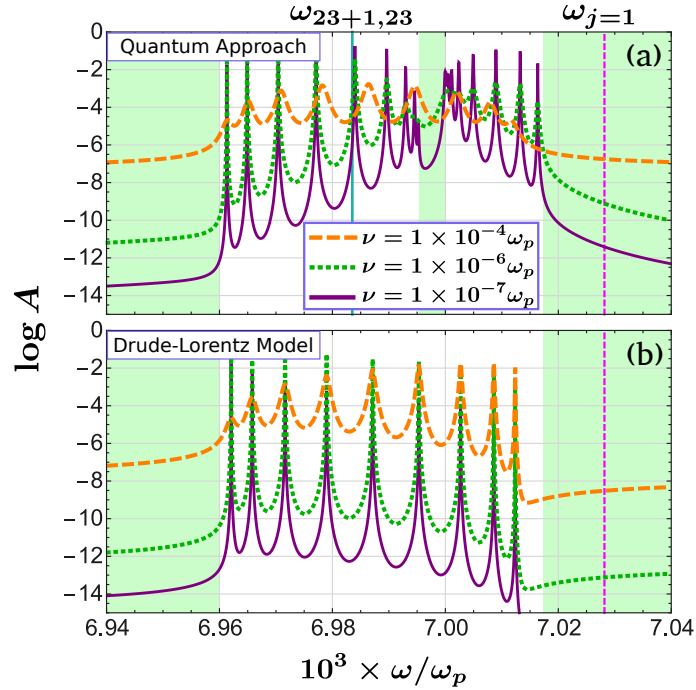


Figura 5.5: Espectros de absorción ($\log A$) de un arreglo regular de vacío-aluminio para tres valores distintos de la frecuencia de relajación ν especificados en la figura. Los otros parámetros son los mismos que los utilizados en los paneles izquierdos de la Fig. 5.2.

Efectos muy interesantes debidos a la cuantización del amortiguamiento de Landau pueden ser apreciados también en la distribución del campo eléctrico $E(x)$ dentro del arreglo regular dieléctrico-metal. Encontramos que dentro de las brechas prohibidas convencionales (debidas a reflexiones de Bragg), el perfil del campo eléctrico predicho por el modelo de Drude-Lorentz y el formalismo cuántico no local son similares, sólo con pequeñas diferencias en las amplitudes. Sin embargo, para valores de frecuencias dentro de las bandas de paso convencionales predichas por el modelo de Drude-Lorentz, el amortiguamiento de Landau cuántico es capaz de suprimir el campo eléctrico por 2 – 3 órdenes de magnitud, cambiando por completo el perfil del campo dentro del arreglo. Los efectos del amortiguamiento de Landau cuántico son más evidentes dentro de la nueva brecha prohibida cuántica, en la región de frecuencias donde una resonancia de Fabry-Perot del segundo tipo del espectro de Drude-Lorentz predice una transmisión casi perfecta. La Figura 5.6 muestra la distribución del campo eléctrico dentro de un arreglo regular para un valor de frecuencia que coincide con la sexta resonancia de Fabry-Perot, i.e., aquella frecuencia ω que satisface la Ec. (5.21) con

$p = 6$. Dichas resonancias pueden identificarse en los espectros de transmisión y/o absorción clásicos locales en los paneles izquierdos de las Figuras 5.2 y 5.3. En la Figura 5.6, las líneas verticales verdes representan las 10 capas metálicas nano-delgadas ($d_b = \delta$); mientras que las placas dieléctricas ocupan el espacio entre ellas. Las curvas roja discontinua y azul sólida representan, respectivamente, la distribución del campo eléctrico predicha por el modelo de Drude-Lorentz y el formalismo cuántico no local.

En ambos paneles, la frecuencia de la onda electromagnética está muy por debajo de la frecuencia de plasma, $\omega \sim 10^{-3}\omega_p$. Entonces, de acuerdo con el modelo de Drude-Lorentz, la permitividad del metal (2.18) es negativa $\varepsilon_{DL} \approx -\omega_p^2/\omega^2$, y las impedancias (2.21) resultan ser prácticamente imaginarias. Por lo cual, las películas metálicas en el arreglo se comportan como espejos que parcialmente reflejan y transmiten la onda electromagnética sin absorber su energía, es decir, la capa dieléctrica se convierte en un resonador. Por esta razón, al estar cerca de las resonancias de este resonador $\omega_{j=1}$, $\omega_{j=2}$ y coincidir con la resonancia de todo el arreglo $p = 6$, la onda no sólo logra transmitirse a lo largo de todo el arreglo sino que la amplitud del campo eléctrico dentro de cada resonador (capa dieléctrica) es mucho mayor que la del campo eléctrico incidente y transmitido. El patrón oscilatorio resultante depende de la paridad de dichas resonancias. Por otra parte, el campo eléctrico predicho por el formalismo cuántico no local es mucho más débil. En los recuadros de la derecha, se observa como el campo decae rápidamente a la distancia de unas pocas celdas unitarias y con un comportamiento oscilatorio distinto al clásico a causa del amortiguamiento de Landau cuántico.

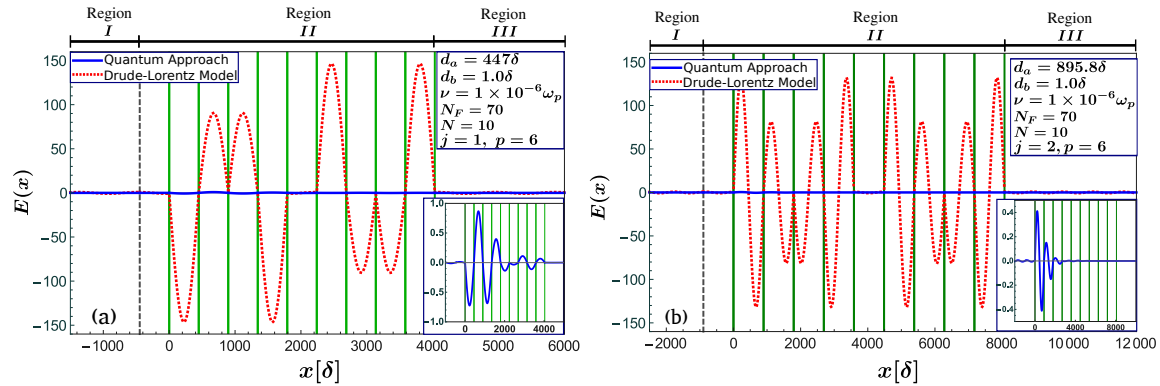


Figura 5.6: Distribución del campo eléctrico $E(x)$ normalizada a la amplitud de la onda incidente.

Por último, nos gustaría discutir brevemente la posibilidad de la observación experimental de los fenómenos predichos. En los sistemas periódicos artificiales fabricados en la vida real, las desviaciones típicas de aquellos con estructura perfecta son la rugosidad de las superficies, policristalinidad de las películas metálicas, fluctuaciones del período de la superred, impurezas, etc. Todas estas imperfecciones en muchos casos sirven como fuentes adicionales de dispersión aleatoria de los electrones de conducción, y por lo tanto, pueden ser consideradas dentro del factor fenomenológico ν jugando el papel de la frecuencia de relajación electrónica efectiva. Como lo demuestra la Figura 5.5, los efectos causados por la cuantización del amortiguamiento de Landau debe ser discernible dentro de un amplio rango de valores para la frecuencia de relajación ν . Además, pequeñas fluctuaciones del período d , dan lugar a pequeños corrimientos y a la suavización de los bordes entre las bandas de paso y las brechas prohibidas. Este tipo de defectos pueden reducir la agudeza de los picos de resonancia dentro de una banda de paso asociada a una frecuencia de Fabry-Perot. Nuestros estimaciones numéricas muestran que las fluctuaciones relativas del período de la superred no deben exceder un pequeño porcentaje.

La condición importante para la realización experimental de los efectos cuánticos del amortiguamiento de Landau, es la posibilidad de fabricar películas metálicas ultra delgadas homogéneas. La calidad de las películas metálicas depende en gran medida de la técnica de crecimiento que se emplea, por ejemplo, evaporación térmica [37, 38], pulverización con magnetron [37, 39] (magnetron sputtering), crecimiento epitaxial por haz molecular [31, 32, 40]. Esta última permite crecer películas metálicas que se vuelven homogéneas a partir de los 10 nm de grosor y con una rugosidad superficial que se reduce a escalas atómicas. Por esta razón, creemos que películas metálicas epitaxiales pueden servir como componentes adecuados para la fabricación experimental del arreglo multicapa binario.

Capítulo 6

Conclusiones

En este trabajo de investigación hemos derivado una expresión analítica general para la densidad de corriente no local cuántica en una película metálica con grosor nanométrico aplicando el formalismo de la respuesta lineal de Kubo. Usando este resultado, calculamos de manera analítica la distribución del campo electromagnético dentro de la película metálica nano-delgada expresándolo como una superposición de modos electromagnéticos discretos. Con la finalidad de estudiar la respuesta externa, obtuvimos expresiones explícitas para las impedancias superficiales de ambas fronteras de la película metálica. Encontramos que la dependencia en la frecuencia de las impedancias superficiales posee resonancias, cuyo origen es consecuencia de la discretización de los números de onda electrónico y electromagnético dentro de la película nano-delgada, y está directamente asociado con el efecto del amortiguamiento de Landau sin colisiones en el régimen cuántico. Las resonancias cuánticas no locales están bien definidas cuando el espesor de la película metálica es menor que la profundidad de penetración del campo electromagnético. Cabe destacar que el comportamiento resonante cuántico de la dependencia en la frecuencia de las impedancias superficiales difiere completamente de aquellas observadas en los otros regímenes, a saber, el régimen local cuántico, el régimen descrito por el enfoque semiclásico de la ecuación cinética de Boltzmann, y el régimen clásico local representado por el modelo de Drude-Lorentz. La diferencia es debida a la discretización del amortiguamiento de Landau en el régimen no local cuántico.

En este trabajo desarrollamos también una teoría de la transmisión electromagnética a través de superredes de metal y dieléctrico con capas metálicas ultra delgadas, en las cuales el movimiento electrónico en la dirección perpendicular a las superficies metálicas está cuantizado. Esto con el fin de investigar la influencia del amortiguamiento de Landau

cuántico, presente en la respuesta electromagnética de películas metálicas aisladas, en las propiedades ópticas de estas nanoestructuras. Específicamente, la relación de dispersión para los modos fotónicos de Bloch y los espectros de transmisión y absorción de energía electromagnética fueron calculados haciendo uso del modelo clásico local de Drude-Lorentz y el formalismo cuántico de Kubo. Los resultados obtenidos dentro de estos dos enfoques tienen algunas características en común. Sin embargo, existe una diferencia sustancial en las regiones donde la frecuencia de una transición cuántica electrónica, causando el amortiguamiento de Landau cuántico, resulta estar cerca de una resonancia electromagnética de Fabry-Perot relacionada con las placas dieléctricas. El cruce evitado de la resonancia cuántica de Landau con la banda de paso fotónica asociada a una resonancia de Fabry-Perot modifica drásticamente la relación de dispersión fotónica. El espectro resultante puede contener nuevas brechas prohibidas y/o bandas de paso cuánticas, dependiendo de la posición relativa de la frecuencia de resonancia del amortiguamiento de Landau cuántico y la frecuencia de resonancia fotónica de Fabry-Perot. El mecanismo para la formación de estas nuevas brechas prohibidas cuánticas es cualitativamente distinto de las reflexiones de Bragg convencionales causadas por un conjunto periódico de dispersores. El mecanismo que evita la propagación de los modos fotónicos dentro de estas nuevas brechas es la absorción de energía electromagnética sin colisiones debida a la transición entre estados electrónicos cuantizados, es decir, el amortiguamiento de Landau cuántico. En contraste con el mecanismo de reflexiones de Bragg, el mecanismo provisto por el amortiguamiento de Landau cuántico no requiere que la densidad de estados fotónicos sea cero dentro de las nuevas brechas prohibidas. Los modos fotónicos existentes dentro de las brechas prohibidas cuánticas exhiben una dispersión anómala. Dichos modos “oscuros” pueden servir como portadores de corto alcance con dispersión anómala fuerte. Mientras que los modos oscuros no pueden ser observados dentro de una muestra infinita, en una muestra de tamaño finito su presencia puede ser detectada debido a sus colas exponencialmente decrecientes. Recientemente, la contribución de modos plasmónicos exponencialmente decrecientes a la densidad de estados local fue medida en el campo cercano [41]. Esta misma técnica puede ser utilizada para detectar los modos fotónicos “oscuros”.

Bibliografía

- [1] E. A. Kaner, A. A. Krokhin, N. M. Makarov, *Spatial dispersion and surface electromagnetic absorption in metals* in the book *Spatial Dispersion in Solids and Plasmas*, Edited by P. Halevi, Elsevier, Amsterdam, vol. **1**, Chap. 2, 161–214 (1992).
- [2] L. Landau, On the vibrations of the electronic plasma, *J. Phys.* **10**, 25 (1946).
- [3] A. Paredes-Juárez, F. Díaz-Monge, N. M. Makarov, F. Pérez-Rodríguez, Nonlocal Effects in the Electrodynamics of Metallic Slabs, *JETP Lett*, **90**, No. 9, 623 (2009).
- [4] A. Paredes-Juárez, D. A. Iakushev, B. Flores-Desirena, N. M. Makarov, F. Pérez-Rodríguez, Landau damping of electromagnetic transport via dielectric–metal superlattices, *Optics Letters*, **40**, No. 15, 3588 (2015).
- [5] A. Paredes-Juárez, D. A. Iakushev, B. Flores-Desirena, N. M. Makarov, F. Pérez-Rodríguez, Nonlocal effect on optic spectrum of a periodic dielectric-metal stack, *Optics Express*, **22**, No. 7, 7581 (2014).
- [6] F. Díaz-Monge, A. Paredes-Juárez, D. A. Iakushev, N. M. Makarov, F. Pérez-Rodríguez, THz photonic bands of periodic stacks composed of resonant dielectric and nonlocal metal, *Optical Materials Express*, **5**, No. 2, 361 (2015).
- [7] N. A. Mortensen, S. Raza, M. Wubs, T. Søndergaard, S. I. Bozhevolnyi, A generalized nonlocal optical response theory for plasmonic nanostructures, *Nat. Commun.* **5**, 3809 (2014).
- [8] T. V. Shahbazyan, Landau damping of surface plasmons in metal nanostructures, *Phys. Rev. B* **94**, No. 23, 235431 (2016).

-
- [9] X. Li, D. Xiao, Z. Zhang, Landau damping of quantum plasmons in metal nanostructures, *New J. Phys.* **15**, No. 2, 023011 (2013).
- [10] A. S. Kirakosyan, M. I. Stockman, T. V. Shahbazyan, Surface plasmon lifetime in metal nanoshells, *Phys. Rev. B* **94**, No. 15, 155429 (2016).
- [11] J. Khurgin, W.-Y. Tsai, D. P. Tsai, G. Sun, Landau damping and limit to field confinement and enhancement in plasmonic dimers, *ACS Photonics*, **4**, 2871 (2017).
- [12] A. Brandstetter-Kunc, G. Weick, C. A. Downing, D. Weinmann, R. A. Jalabert, Non-radiative limitations to plasmon propagation in chains of metallic nanoparticles, *Phys. Rev. B* **94**, No. 20, 205432 (2016).
- [13] A. Vagov, I. A. Larkin, M. D. Croitoru, V. M. Axt, Role of nonlocality and Landau damping in the dynamics of a quantum dot coupled to surface plasmons, *Phys. Rev. B* **93**, No. 19, 195414 (2016).
- [14] S. Raza, S. I. Bozhevolnyi, M. Wubs, N. A. Mortensen, Nonlocal optical response in metallic nanostructures, *J. Physics: Condens. Matter*, **27**, No. 18, 183204 (2015).
- [15] A. A. Yushkanov, N. V. Zverev, Quantum electron plasma, visible and ultraviolet P-wave and thin metallic film, *Phys. Lett. A*, **381**, 679 (2017).
- [16] N. V. Zverev, A. A. Yushkanov, Quantum electron plasma in one-dimensional metallic-dielectric photonic crystal, *Opt. Spectrosc.*, **122**, 202 (2017).
- [17] R. Kubo, Statistical-mechanical theory of irreversible process. I. General theory and simply applications to magnetic and conduction problems, *J. Phys. Soc. Japan*, **12**, No. 6, 570 (1957).
- [18] A. A. Abrikosov, I. A. Ryzhkin, Conductivity of quasi-one-dimensional metal systems, *Adv. Phys.*, **27**, No. 2, 147 (1978).
- [19] K. B. Efetov, Supersymmetry and theory of disordered metals, *Adv. Phys.*, **32**, 53 (1983).
- [20] O. V. Konstantinov, V. I. Perel, Quantum theory of spatial dispersion of electric and magnetic susceptibilities, *Sov. Phys. JETP*, **10**, No. 3, 560 (1960).

- [21] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, Solid State Physics, HRW international editions. Holt, Rinehart and Winston (1976).
- [22] J. D. Jackson, Classical Electrodynamics, Third Edition, John Wiley and Sons, Inc. (1999).
- [23] A.A. Abrikosov and A. Becnazarov, Fundamentals of the Theory of Metals, vol. **1**, North-Holland Amsterdam (1988).
- [24] N. M. Makarov, A.V. Moroz, and V.A. Yampol'skii, Classical and quantum size effects in electron conductivity of films with rough boundaries, *Physical Review B*, **52**, No. 8, 6087 (1995).
- [25] F. Díaz Monge, Efectos de dispersión espacial en sistemas metalodieléctricos periódicos (Tesis Doctoral). Instituto de Física de la Universidad Autónoma de Puebla (IFUAP), Puebla, Pue., México.
- [26] W. Greiner, Quantum Mechanics An Introduction, Fourth Edition, Springer, (2001).
- [27] S. G. Castillo-López, F. Pérez-Rodríguez, N. M. Makarov, Quantum discretization of Landau damping, *Low Temp. Phys.*, **44**, No. 12, 1251-1260 (2018); doi: 10.1063/1.5078522
- [28] S. G. Castillo-López, N. M. Makarov, F. Pérez-Rodríguez, Quantum resonances of Landau damping in the electromagnetic response of metallic nanoslabs, *Optics Letters*, **43**, No. 10 (2018).
- [29] P. Markoš, C. M. Soukoulis, Wave Propagation. From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials, Princeton University Press, Princeton, NJ (2008).
- [30] M. A. Ordal, L. L. Long, R. J. Bell, S. E. Bell, R. R. Bell, R. W. Alexander, Jr., C. A. Ward, Optical properties of the metals Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti, and W in the infrared and far infrared, *Applied Optics*, **22**, 7 (1983).
- [31] Y. Wu, C. Zhang, N. M. Estakhri, Y. Zhao, J. Kim, M. Zhang, X.-X. Liu, G. K. Pribil, A. Alu, C.-K. Shih, X. Li, Intrinsic optical properties and enhanced plasmonic response of epitaxial silver, *Adv. Mater.*, **26**, 6106 (2014).

- [32] C-W Cheng, Y-J Liao, C-Y Liu, B-H Wu, S S Raja, C-Y Wang, X Li, C-K Shih, L-J Chen and S Gwo, Epitaxial Aluminum-on-Sapphire Films as a Plasmonic Material Platform for Ultraviolet and Full Visible Spectral Regions, *ACS Photonics*, **5**, No. 7, 2624-2630 (2018).
- [33] S. G. Castillo-López, A. A. Krokhin, N. M. Makarov, and F. Pérez-Rodríguez, Electrodynamics of superlattices with ultra-thin metal layers: Quantum Landau damping and band gaps with nonzero density of states, *Optical Materials Express*, **9**, No. 2, 673-686 (2019).
- [34] S.M. Rytov, Electromagnetic properties of a finely stratified medium, *JETP*, **2**, 466 (1956).
- [35] A.A. Krokhin and P. Halevi, Influence of weak dissipation on the photonic band structure of periodic composites, *Phys. Rev. B*, **53**, 1205 (1996).
- [36] Sourangsu Banerji, Abhishek Halder, Arpan Deyasi, Sayan Bose, Subhasis Mandal, Analytical computation of density of states of one-dimensional photonic crystal under polarized incident wave for different materials, *Journal of Electron Devices*, **19**, 2014, pp. 1654-1662.
- [37] H.V. Nguyen, I. An, R.W. Collins, Evolution of the optical functions of thin-film aluminum: A real-time spectroscopic ellipsometry study, *Phys. Rev. B*, **47**, 3947 (1993).
- [38] R. Todorov, V. Lozanova, P. Knotek, E. Černošková, M. Vlček, Microstructure and ellipsometric modelling of the optical properties of very thin silver films for application in plasmonics, *Thin Solid Films*, **628**, 22 (2017).
- [39] A.A. Earp, G.B. Smith, Evolution of plasmonic response in growing silver thin films with pre-percolation non-local conduction and emittance drop, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **44**, 255102 (2011).
- [40] Y. Zhu, W. Wang, W. Yang, H. Wang, J. Gao, G. Li, Nucleation mechanism for epitaxial growth of aluminum films on sapphire substrates by molecular beam epitaxy, *Materials Science in Semiconductor Processing*, **54**, 70 (2016).

- [41] F. Peragut, L. Cerutt, A. Baranov, J.P. Hugonin, T. Taliercio, Y. De Wilde, and J.J. Greffet, Hyperbolic metamaterials and surface plasmon polaritons, *Optica*, **4**, 1409 (2017).



BUAP

MEMORANDUM

Para:	Dr. Eugenio Rafael Méndez Méndez, (Presidente). Dr. Alberto Escalante Hernández. Dr. Giuseppe Celardo. Dr. Julio Villanueva Cab. Dr. Nykolay Makarov, (Asesor).
De:	Dr. Antonio Flores Riveros, Coordinador del área.
Asunto:	Se cita al examen de grado de Doctorado en Ciencias (Física) de la M. en C. Shunashi Guadalupe Castillo López.
Fecha:	04 de junio de 2019

Me permito informarles que el Comité Académico del IFUAP, los ha designado integrantes del Comité para el EXAMEN DE GRADO DE DOCTORADO EN CIENCIAS (FISICA) de la M. en C. Shunashi Guadalupe Castillo López, con su tesis cuyo título es: *"Efectos Cuánticos en la Respuesta Óptica de Nanoestructuras de Metal No Local y Dieléctrico"*, que presentará el próximo día: Viernes 14 de junio de 2019 a las 16:00 horas en el Auditorio del IFUAP.

Dr. Antonio Flores Riveros
Coordinador

Instituto de Física
"Ing. Luis Rivera
Terrazas"

Av. San Claudio esq. 18 sur, edif 110 A, B y C.
Ciudad Universitaria, Col. San Manuel,
Puebla, Pue. C.P. 72570
01(222) 2295610, Fax: ext. 5611