

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA



INSTITUTO DE FÍSICA "LUIS RIVERA TERRAZAS"

**"EFECTOS DE DISPERSIÓN EN SISTEMAS
METALODIELÉCTRICOS PERIÓDICOS"**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS
(EN LA ESPECIALIDAD DE CIENCIA DE
MATERIALES)

PRESENTA:
M. C. FERNANDO DÍAZ MONGE

ASESOR(ES):
DR. FELIPE PÉREZ RODRÍGUEZ
DR. NYKOLAY MAKAROV

DICIEMBRE DE 2014

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

**Efectos de Dispersión Espacial en Sistemas
Metalodieléctricos Periódicos**

Tesis presentada por

Fernando Díaz Monge

para obtener el grado de

**Doctor en Ciencias
(en la Especialidad de Ciencia de Materiales)**

Dirigida por

Dr. Felipe Pérez Rodríguez y Dr. Nykolay Makarov

Puebla, México

Diciembre 2014

©2014 - Fernando Díaz Monge

Derechos Reservados

Agradecimientos

A CONACYT por el apoyo económico otorgado para mis estudios doctorales con la beca número 182775, así como el otorgado a través de los proyectos SEP-CONACYT de Ciencia Básica: “Propiedades físicas de heteroestructuras y metamateriales” (Clave: SEP-2004-C01-46425) y “Respuesta óptica no-local y efectos de desorden en metamateriales” (Clave: CB-2011-01-166382).

Al Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas” de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla por todas las facilidades prestadas durante mi estudios.

A mis asesores Dr. Felipe Pérez Rodríguez y Dr. Nykolay Makarov por su enorme paciencia y su gran apoyo durante el desarrollo de esta tesis.

Dedicado a ...

a mis padres y Hermanos y a mi Hijo Adorado

Francisco Díaz J. y Lucia Monge R.

Luis Alberto y Cristina.

David Díaz M.

Y a quienes ya no estan con migo para acompañarme

FDV[†], PJDR[†], MTCRT[†].

Efectos de Dispersión Espacial en Sistemas Metalodieléctricos Periódicos

Resumen

Se presenta un estudio teórico de los efectos de la dispersión espacial y de tamaño en la estructura de bandas fotónicas de sistemas metalodieléctricos periódicos unidimensionales (superredes). En el estudio, la relación no local entre la densidad de corriente y el campo eléctrico dentro de las capas metálicas de la superred se determina en el marco del formalismo de la ecuación cinética de Boltzmann. Se considera un componente dieléctrico, caracterizado por una función dieléctrica resonante local (independiente del vector de onda), la cual se modela aquí con un oscilador de Lorentz. Después de resolver las ecuaciones de Maxwell para los campos electromagnéticos en cada capa de la superred y aplicar las condiciones de frontera junto con el teorema de Bloch, se obtiene una expresión analítica para la relación de dispersión fotónica en términos de las impedancias superficiales en las interfaces de las capas metálicas y dieléctricas. Debido a la gran diferencia entre las permitividades de los componentes metálico y dieléctrico, la estructura de bandas fotónicas exhibe bandas de paso planas que se asocian a resonancias de Fabry-Perot en las capas dieléctricas. Hay una banda prohibida debido a la existencia de la brecha polaritónica. Otra diferencia fundamental con la situación ordinaria, cuando el dieléctrico tiene una relación de dispersión lineal del fotón, consiste en que en el caso de un material polar las resonancias de Fabry-Perot están dadas por la relación de dispersión no lineal del polaritón. Los resultados se comparan con las predicciones del modelo de Drude-Lorentz para la permitividad, dependiente de la frecuencia, del metal. Se encontró que el efecto no local sobre las bandas de resonancia Fabry-Perot es fuerte si sus correspondientes frecuencias están en el intervalo donde la diferencia entre las impedancias en ambas superficies metálicas, predichas por los formalismos local y no local, es máxima. Se presenta un método de homogenización que permite calcular la permitividad efectiva no local para una superred metalodieléctrica sin restricción sobre la magnitud del vector de onda. Se muestra como la respuesta dieléctrica no local puede cambiarse por una respuesta metamaterial no local, de tal manera que el sistema homogenizado exhiba una respuesta magnética incluso cuando los componentes no sean inherentemente medios magnéticos. Los parámetros efectivos derivados de la respuesta dieléctrica efectiva no local o de la respuesta metamaterial permiten recuperar la dispersión fotónica en toda la primera zona de Brioullin.

Spatial Dispersion Effects in Periodic Metalodielectric Systems

Abstract

A theoretical study of the spatial-dispersion and size effects upon the photonic band structure of one-dimensional periodic metalodielectric systems (superlattices) is presented. In the study, the nonlocal relation between the electric current density and the electric field inside the metal layers is determined within the formalism of the Boltzmann kinetic equation. The dielectric component is assumed to be characterized by a local (independent of the wave vector) resonant dielectric function, which is here modeled with a Lorentz oscillator. After solving Maxwell equations for the electromagnetic fields in each superlattice layer and applying the boundary conditions together with the Bloch theorem, an analytic expression for the photonic dispersion relation in terms of the surface impedances at the interfaces of the metal and dielectric layers is obtained. Due to the large difference between the permittivities of the metal and dielectric components, the photonic band structure exhibits flat pass bands associated with Fabry-Perot resonances in the dielectric layers. There is also a wide stop band because of the existence of the polaritonic gap. Another fundamental distinction from the ordinary situation, when the dielectric possesses a lineal photon dispersion, consists in the fact that the Fabry-Perot resonances in the case of a polar material are defined by the nonlinear polariton dispersion. The results are compared with the predictions of the Drude-Lorentz model for the frequency-dependent metal permittivity. It is found that the nonlocal effect on the Fabry-Perot resonance bands is strong if their corresponding frequencies are in the interval where the difference between the impedances at both metal surfaces, predicted by the nonlocal and local formalisms, is maximal. At last, a homogenization method, allowing us to calculate the nonlocal effective permittivity for a metalodielectric superlattice without restriction on the magnitude of the wave vector of the electromagnetic mode. Besides, it is shown how the nonlocal dielectric response can be changed by a nonlocal metamaterial one, so that the homogenized system exhibits a magnetic response even when the components are not inherently magnetic media. The effective parameters, given by the nonlocal dielectric response or the metamaterial one, permit to recover the photonic dispersion within the whole first Brioullin zone.

Publicaciones

- A. Paredes-Juárez, F. Díaz-Monge, N.M. Makarov, and F. Pérez-Rodríguez, “Nonlocal effects in the electrodynamics of metallic slabs”, *JETP Lett.* **90**, 687-692 (2009), en ruso [*JETP Lett.* **90**, 623-627 (2009), en inglés].
ISSN:0021-3640 (Print), 1090-6487 (Online).
DOI: 10.1134/S0021364009210073
- F. Pérez-Rodríguez, F. Díaz-Monge, N. M. Makarov, R. Márquez-Islas, B. Flores-Desirena, “Spatial-dispersion effects in one-dimensional photonic crystals with metallic inclusions”, *MSMW’07 Symposium Proceedings, Kharkov, Ukraine (Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc, 2007)*, pp. 92-97.
ISBN: 1-4244-1237-4
DOI: 10.1109/MSMW.2007.4294583
- N. M. Makarov, A. Paredes-Juárez, F. Díaz-Monge, F. Pérez-Rodríguez, “Is the Drude-Lorentz model adequate for a metallic slab within terahertz/infrared frequency range?”, *MSMW’2010 Symposium Proceedings, Kharkov, Ukraine (Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc, 2010)*, W-22 (*3 pages*).
ISBN: 978-1-4244-7898-9.
DOI:10.1109/MSMW.2010.5546027
- 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”, *Opt. Mater. Express*, enviado (2014).
eISSN: 2159-3930.

Participación en eventos

- F. Díaz Monge, F. Pérez Rodríguez, N.M. Makarov, “Efectos de la dispersión espacial y de tamaño en la estructura de bandas de cristales fotónicos metalodieléctricos 1D”. XLVIII Congreso Nacional de la SMF, Guadalajara, Jal. 17-21 Octubre de 2005. Programas y resúmenes, p. 78.
- F. Pérez Rodríguez, R. Márquez, B. Flores Desirena, F. Díaz Monge, N. Makarov, “Efectos de dispersión espacial y tamaño en heteroestructuras metalo-dieléctricas”, Taller de Metamateriales, Salón Guillermo Haro, INAOE, Tonantzintla, 9-13 de enero de 2006. Programa del Taller.
- F. Pérez-Rodríguez, F. Díaz-Monge, N. M. Makarov, R. Márquez-Islas, B. Flores-Desirena, *Invited paper*: “Spatial-dispersion effects in one-dimensional photonic crystals with metallic inclusions”. The Sixth International Kharkov Symposium on Physics and Engineering of Microwaves, Millimeter and Submillimeter Waves and Workshop on Terahertz Technologies (MSMW’07), Kharkov, Ukraine, June 25-30, 2007. Symposium program, INV.15.
- N. M. Makarov, A. Paredes-Juárez, F. Díaz-Monge, F. Pérez-Rodríguez, “Is the Drude-Lorentz model adequate for a metallic slab within terahertz/infrared frequency range?”, 2010 International Kharkov Symposium on Physics and Engineering of Microwaves, Millimeter and Submillimeter Waves (MSMW’2010), Kharkov, Ukraine, June 21-26, 2010. Sessions and papers, W-22.

Contenido

1	Introducción	1
2	La dispersión espacial	6
2.1	Efecto pelicular en metales	9
2.2	Dispersión espacial en semiconductores	14
2.3	Respuesta dieléctrica no local de cristales fotónicos	20
2.4	Respuesta bianisótropa efectiva	23
3	Formalismo teórico	25
3.1	Modelo del arreglo metalodieléctrico periódico	25
3.2	Capa dieléctrica	27
3.3	Ecuaciones de Maxwell para la placa metálica	30
3.4	Ecuación cinética y su solución	31
3.5	Cálculo de la densidad de corriente eléctrica	35
3.6	Caso de reflexión especular.	37
3.6.1	Representación de Fourier. Distribución del campo electromagnético.	40
3.6.2	Matriz de transferencia para la placa metálica	43
3.7	Matriz de transferencia para la celda unitaria y la relación de dispersión . .	44
4	Efectos de dispersión espacial	48
4.1	La placa metálica no local sola	49
4.2	Superred de metal no local y dieléctrico	55
4.3	Superred de metal no local y dieléctrico resonante	58
5	Respuesta efectiva no local	65
5.1	Respuesta dieléctrica no local	67
5.1.1	Visible e infrarrojo cercano	69
5.1.2	Infrarrojo lejano	71
5.2	Respuesta metamaterial	75
6	Conclusiones	79
	Bibliografía	82

Capítulo 1

Introducción

En las últimas tres décadas se han investigado activamente los materiales artificiales conocidos como cristales fotónicos. Estos materiales están compuestos, generalmente, por dieléctricos arreglados de manera regular, es decir, periódica. A diferencia de los cristales naturales que tienen periodicidad estructural igual a la del potencial atómico, los cristales fotónicos tienen una variación periódica de su permitividad dieléctrica con periodo comparable con la longitud de onda λ de la luz [1, 2]. El interés por los cristales fotónicos está íntimamente ligado a la posibilidad de controlar de manera efectiva la propagación de ondas electromagnéticas dentro de ellos y, en particular, a la formación de una estructura de bandas espectrales que dependa no sólo del tipo de arreglo periódico, sino también de la clase de inclusiones dentro de la celda unitaria.

En los últimos años se ha retomado la investigación de estructuras periódicas que contengan metal o semiconductor en calidad de uno de los elementos de la celda elemental. Esta dirección de investigación abre la posibilidad real de fabricar materiales con propiedades ópticas predeterminadas. Sorprendentemente, este tipo de materiales exhiben un comportamiento extraordinario y se conocen actualmente también como *metamateriales*. Sus propiedades ópticas (en general, electromagnéticas) resultan cualitativamente distintas de las de sus materiales constituyentes ya que provienen de su estructura periódica y del alto contraste dieléctrico. En esta dirección se han llevado a cabo numerosos trabajos en los cuales se han descubierto propiedades verdaderamente novedosas como lo es el índice de refracción negativo de los metamateriales llamados “izquierdos”. Como se muestra en el trabajo de V. Veselago [3], esta propiedad original es una consecuencia de la interacción de ondas electromagnéticas con un material cuya permitividad dieléctrica ε y permeabili-

dad magnética μ son simultáneamente negativas. Veselago les dió el nombre de izquierdos porque el vector de onda es antiparalelo al producto cruz usual de “la mano derecha” de los campos eléctrico y magnético.

Los materiales con ε y μ negativos no son fáciles de encontrar entre los materiales existentes en la naturaleza por la razón de que las resonancias, asociadas a la generación de polarizaciones eléctricas, producen $\varepsilon < 0$ en frecuencias muy altas, i.e. en frecuencias ópticas para los metales, y en la región de tera Hz (THz) al infrarrojo (IR) para los semiconductores y dieléctricos. Por otro lado, las resonancias de sistemas magnéticos ocurren típicamente en frecuencias mucho menores, claramente por debajo de la región de THz e IR. En los años 90, los investigadores comenzaron a indagar la posibilidad de diseñar materiales artificiales con respuesta electromagnética “a la medida”. Para formar el material artificial se crea un arreglo periódico de elementos diseñados de tal manera que exhiban una respuesta fuerte a los campos electromagnéticos aplicados. Si el tamaño (r) y el espacio (s) entre los elementos es mucho menor que la longitud λ de la onda electromagnética ($r \ll \lambda$, $s \ll \lambda$), entonces la radiación incidente no puede distinguir entre el arreglo de elementos y un material homogéneo. En este caso se puede reemplazar conceptualmente el compuesto heterogéneo por un material homogéneo descrito con los parámetros materiales efectivos ε_{ef} y μ_{ef} . A frecuencias no muy altas, los conductores son excelentes candidatos para ser utilizados como componentes de los materiales artificiales debido a su fuerte respuesta a los campos electromagnéticos. En los trabajos [4, 5], J. B. Pendry y colegas propusieron una variedad de estructuras que formarían los metamateriales magnéticos. Esas estructuras están compuestas de espiras o tubos de conductor con una brecha insertada y forman parte de metamateriales con respuesta efectiva (ε_{ef} y μ_{ef} negativos) en un rango amplio [5]. Estos metamateriales refractan la luz con un ángulo negativo, es decir, los haces refractado e incidente se encuentran del mismo lado respecto a la normal a la superficie. Es interesante comentar que un índice de refracción negativo bien definido no es necesariamente un prerrequisito para el fenómeno de refracción negativa. En verdad, utilizando cristales fotónicos se pueden realizar muchas relaciones de dispersión nuevas, incluyendo rangos en los cuales la frecuencia tiene una dispersión negativa en función del vector de onda como se requiere en el fenómeno de refracción negativa. Utilizando cristales fotónicos se ha observado el fenómeno de enfocamiento igual al predicho para materiales de índice negativo [6, 7].

Cabe mencionar que en todas las investigaciones teóricas que se han comentado, el componente metálico o semiconductor de la estructura periódica se describe en el marco

de un modelo bastante burdo y simple. A saber, se supone que la permitividad dieléctrica es ya sea infinita o se describe con la fórmula clásica de “relajación” que se deriva de la teoría de Drude-Lorentz (vea, por ejemplo, [4]). Esta última toma en cuenta sólo los efectos de dispersión de frecuencia y no considera en absoluto la dispersión espacial. Es evidente que tal modelo es adecuado solamente en compuestos cuyos constituyentes son elementos suficientemente masivos, y de ninguna manera se puede aplicar en los objetos de investigación modernos y de gran perspectiva: micro- y nanoestructuras. Actualmente la creación de nuevos metamateriales con estructura micro- y nano-periódica es una dirección prioritaria de la tecnología de los cristales fotónicos. Para esto se requiere de la realización de nuevas investigaciones experimentales en tales materiales y la creación de modelos teóricos adecuados para la descripción de sus propiedades electromagnéticas y ópticas. La última parte (la teórica) de este problema debe basarse en los siguientes puntos.

A. En las microestructuras clásicas es necesario considerar la dispersión espacial en la conductividad electrónica, la cual conduce a la aparición de efectos de tamaño clásico y al efecto de película anómalo en los elementos metálicos y semiconductores de la celda primitiva [5].

B. La gran mayoría de los trabajos teóricos sobre el efecto de tamaño se relacionan con la situación estática y por eso no permiten utilizar sus resultados en el rango de altas frecuencias de radio-ondas. Esto significa que para la descripción de la óptica de los micro- y nanomateriales se requiere de la creación de una teoría nueva del efecto de tamaño clásico de alta frecuencia.

C. Es evidente que en las situaciones consideradas la concepción ampliamente aceptada de los parámetros efectivos requiere de una justificación especial.

Con el fin de contribuir al desarrollo de este campo de la física de materiales, la presente tesis tiene como Objetivo General:

Investigar teóricamente el efecto de la dispersión espacial y de tamaño en las propiedades electromagnéticas de estructuras metalodieléctricas.

En particular, se logró alcanzar las metas específicas que habían sido planteadas en el protocolo del trabajo de tesis doctoral:

1. Investigar el efecto de la dispersión espacial en la propagación de ondas electromagnéticas a través de estructuras metalodieléctricas unidimensionales (superredes).
2. Estudiar del efecto de tamaño clásico en la propiedades electromagnéticas de estruc-

turas metalodieléctricas.

3. Resolver el problema de parámetros efectivos para estas estructuras bajo las condiciones de dispersión espacial.

A fin de describir en detalle la investigación teórica realizada y analizar con profundidad los resultados obtenidos, la parte restante de esta tesis se ha organizado de la siguiente manera.

En el Capítulo 2 se presenta una revisión de los efectos asociados a la dispersión espacial en dieléctricos, metales, semiconductores, y cristales fotónicos. Primeramente, se presentan las expresiones generales para la respuesta dieléctrica no local de medios tanto conductores como aislantes, las cuales están dadas en términos de la conductividad y la permitividad no locales, respectivamente. Además, se muestra la equivalencia, en el caso dinámico, entre la respuesta dieléctrica no local y la bianisótropa no local. Esta última está formada por cuatro tensores: de permitividad, de permeabilidad y dos magnetoeléctricos (respuestas cruzadas). En este capítulo se estudia el efecto pelicular en los metales en sus dos regímenes normal y anómalo (o de dispersión espacial fuerte). Se presenta también una descripción de la dispersión espacial en semiconductores, la cual se observa en la región de la resonancia excitónica. Se muestra que la dependencia de la función dieléctrica respecto del vector de onda en el semiconductor permite la propagación de modos electromagnéticos adicionales (tanto transversales como longitudinales). Por tanto, para definir las amplitudes de estos modos adicionales es necesario estudiar la interacción de los excitones con la superficie del semiconductor. En esta sección se analizan los distintos mecanismos de interacción excitón-superficie. Luego, se demuestra que la respuesta dieléctrica efectiva de un cristal fotónico homogeneizado en general es no local (dependiente del vector de onda). Ahí se comentan los trabajos que reportan expresiones explícitas para el tensor de permitividad efectivo no local. En la última sección, se reescribe la respuesta dieléctrica efectiva no local como una respuesta bianisótropa metamaterial mediante la redefinición del campo magnético y el vector de desplazamiento.

En el Capítulo 3 se formula el problema electrodinámico a resolver en este trabajo de investigación, a saber, el cálculo de la relación de dispersión de los campos electromagnéticos que pueden propagarse en una superred de dieléctrico local y metal espacialmente dispersivo. Con este fin, se resuelven las ecuaciones de Maxwell para los campos electromagnéticos en cada capa. La placa dieléctrica se caracteriza con una función dieléctrica

local, la cual en principio puede depender de la frecuencia. En el caso de la capa metálica, la ecuación material que relaciona la densidad de corriente eléctrica con el campo eléctrico se calcula con base en el formalismo de la ecuación cinética de Boltzmann. En el caso de reflexión especular de los electrones al colisionar con las fronteras de la capa metálica, se obtiene una expresión analítica compacta para la ecuación material la cual resulta ser integral (i.e. no local). Con estos resultados analíticos, se aplican las condiciones de frontera para los campos electromagnéticos así como el teorema de Bloch, permitiendo derivar la relación de dispersión de los modos fotónicos en la superred metalodieléctrica. En todas las etapas de esta derivación se verifica que los resultados encontrados se reducen a aquellos que corresponden al caso de capas de metal local, cuya respuesta dieléctrica puede describirse con el modelo simple de Drude-Lorentz.

El Capítulo 4 presentan resultados tanto analíticos como numéricos para la relación de dispersión de modos electromagnéticos en sistemas periódicos unidimensionales con componentes metálicas no locales. Particularmente, se analiza la estructura de bandas fotónicas de una superred con capas de Al y vacío. Además, se estudian las bandas fotónicas en el caso cuando el medio dieléctrico es temporalmente dispersivo (como un cristal iónico o un semiconductor heteropolar) en la región de frecuencias donde la dispersión espacial del componente metálico se manifiesta notablemente. Se muestran resultados concretos para una superred de Al y GaN.

El Capítulo 5 se dedica al cálculo de la respuesta dieléctrica efectiva no local de las superredes de metal y dieléctrico en el rango del visible e infrarrojo cercano, así como del infrarrojo lejano. A diferencia de teorías de homogenización previas, las cuales se describen en el Capítulo 2, el procedimiento de homogenización propuesto no tendrá ninguna restricción en la magnitud del vector de onda del modo electromagnético. Se considerará solo el caso de modos que se propagan en dirección perpendicular a los planos de las placas de la superred. En la segunda parte de este capítulo, se mostrará como la respuesta dieléctrica no local se puede cambiar por una respuesta metamaterial no local tal que el sistema homogeneizado exhiba respuesta magnética a pesar de que los materiales componentes no sean inherentemente medios magnéticos.

Finalmente, las conclusiones derivadas de los resultados de esta tesis se exponen en el Capítulo 6.

Capítulo 2

La dispersión espacial

En años recientes hemos sido testigos de la creación e investigación de medios artificiales con periodicidad unidimensional (1D), bidimensional (2D) y tridimensional (3D), en los cuales un metal o semiconductor forma parte de la celda unitaria, así como del desarrollo de teorías y métodos numéricos para describir la propagación de ondas electromagnéticas en estas estructuras [8–10]. En el capítulo anterior hemos mencionado que el interés en estos materiales artificiales se debe principalmente a la posibilidad real de controlar las propiedades ópticas de los cristales fotónicos y al enorme potencial para el desarrollo de dispositivos ópticos con una respuesta a la medida dependiendo de la razón que haya entre la constante de red a y la longitud de la onda electromagnética λ , los parámetros geométricos de la estructura y la fracción volumétrica de llenado. Cuando la longitud de onda del campo electromagnético es menor o del orden de la constante de red ($\lambda \lesssim a$), la radiación incidente en este tipo de estructuras experimenta el fuerte contraste dieléctrico entre los materiales que la constituyen, y como consecuencia de ello, surgen ciertos intervalos de frecuencia en los cuales las ondas electromagnéticas no pueden propagarse en cualquier dirección. Tal intervalo de frecuencia es comúnmente llamado gap fotónico (*photonic band gap*, **PBG**) [11, 12]. Por otro lado, cuando la longitud de onda es mucho mayor que la constante de red ($\lambda \gg a$), la radiación incidente viaja a través de la estructura sin experimentar los detalles de la estructura artificial, es decir el medio se comporta como si fuese un medio homogéneo, y sus propiedades ópticas se pueden describir empleando las ecuaciones de Maxwell a nivel “*macro*”, las cuales se derivan después de promediar los campos electromagnéticos y las relaciones constitutivas [13, 14].

Entre las estructuras artificiales metalodielectricas periódicas existen algunas que

exhiben intervalos de frecuencia en la región de micro ondas en donde la permitividad y la permeabilidad son ambas negativas, en consecuencia poseen un índice de refracción negativo [3]. Con el objetivo de ampliar su frecuencia de operación a la región óptica, su estructura celular original se ha rediseñado y miniaturizado hasta el orden de los nanómetros [15, 16]. En los trabajos teóricos que describen la función dieléctrica del componente metálico que forma parte de la estructura de estos metamateriales, se supone infinita o se toma de tablas de muestras en volumen, y en otros trabajos se describe con mayor detalle mediante la conductividad clásica y su correspondiente función dieléctrica

$$\sigma_{cl} = \frac{\omega_p^2}{4\pi(\nu - i\omega)} \quad \longrightarrow \quad \varepsilon_{cl}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\nu)}, \quad (2.1)$$

la cual se deriva de la teoría de Drude-Lorentz. En estas expresiones ω es la frecuencia del campo electromagnético, ω_p y ν son las frecuencias de plasma y de relajación de los electrones de conducción, respectivamente. Hablando estrictamente, este modelo sólo es adecuado para muestras en volumen y su utilización para la descripción del componente metálico en estas estructuras no es correcta. En verdad, debido a que en la mayoría de los casos el período puede llegar a ser del orden de la longitud de onda de la radiación incidente, los efectos de tamaño comienzan a jugar un papel importante en la descripción de su comportamiento electromagnético y, por consiguiente, el tamaño de las inclusiones metálicas puede ser comparable con la profundidad pelicular de la onda electromagnética.

Además, si el medio dieléctrico en estas estructuras artificiales, no es el espacio vacío, la función dieléctrica ε que caracteriza a este componente deberá incluir los efectos de la dispersión temporal (dependencia de la permitividad en función de la frecuencia), o bien las excitaciones elementales de los semiconductores, “excitones”, debido que estos últimos pueden acoplarse fuertemente a la radiación incidente, y la descripción correcta de sus propiedades ópticas debe incluir los efectos de no localidad o de dispersión espacial (dependencia de la permitividad en función del vector de onda).

Por lo anteriormente mencionado, la descripción de estas estructuras con la radiación electromagnética, y la obtención de sus propiedades ópticas, debe considerar los efectos de tamaño (dependencia de la conductividad respecto del tamaño del componente metálico) y pelicular (penetración del campo electromagnético en el metal hasta una distancia finita), así como los efectos de la dispersión espacial en la función dieléctrica del componente semiconductor o aislante. Es decir, la función de respuesta para el metal debe

tener la siguiente forma

$$\mathbf{j}_i(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}' \sigma_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') \mathbf{E}_j(\mathbf{r}', t'), \quad (2.2)$$

y en los dieléctricos como en los semiconductores, el vector de desplazamiento eléctrico

$$\mathbf{D}_i(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}' \varepsilon_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') \mathbf{E}_j(\mathbf{r}', t'). \quad (2.3)$$

En las ecuaciones (2.2) y (2.3), $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')$ y $\sigma_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')$, son la función dieléctrica y conductividad no locales del medio. El intervalo de no localidad de estas funciones es la distancia $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, y la integración con respecto a t' de estas se determina por causalidad ya que t' es el tiempo en el cual actúa el campo eléctrico y t es el tiempo durante el cual la respuesta surge, o sea el medio sufre un retraso en su respuesta (dispersión temporal) debido a la excitación.

La no localidad espacial se atribuye al tamaño finito de las unidades (moléculas, excitones), velocidades finitas de los electrones y trayectoria libre media l , mientras que la dispersión temporal se asocia a los tiempos de relajación τ y tiempos de vida excitónico. Usualmente, se toma las transformadas de Fourier $t \rightarrow \omega$, $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{k}$ [13], de las ecuaciones (2.2) y (2.3):

$$\mathbf{j}_i(\mathbf{k}, \omega) = \sigma_{ij}(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{E}_j(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.4a)$$

$$\mathbf{D}_i(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_{ij}(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{E}_j(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.4b)$$

La dependencia de la frecuencia ω y del vector de onda \mathbf{k} , en $\sigma_{ij}(\mathbf{k}, \omega)$, $\varepsilon_{ij}(\mathbf{k}, \omega)$, indica dispersión temporal y espacial, respectivamente. La función dieléctrica $\varepsilon_{ij}(\mathbf{k}, \omega)$ describe completamente tanto las propiedades eléctricas como las magnéticas de un medio en el caso dinámico [17]. Estas últimas se asocian a la influencia de la inducción magnética \mathbf{B} sobre el campo \mathbf{D} . Ciertamente, en el caso dinámico ($\omega \neq 0$), el campo \mathbf{B} puede expresarse en términos de \mathbf{E} mediante la ley de Faraday

$$\mathbf{B}(\mathbf{k}, \omega) = (c/\omega) \mathbf{k} \times \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.5)$$

Por lo tanto, la dependencia de $\mathbf{D}(\mathbf{k}, \omega)$ en función de $\mathbf{B}(\mathbf{k}, \omega)$, puede ser siempre incluida (ocultada) sin dificultad por la relación entre $\mathbf{D}(\mathbf{k}, \omega)$ y $\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)$, es decir por la respuesta dieléctrica general (2.4b). En el caso cuasiestático $\omega \rightarrow 0$, (2.5) es sólo aplicable cuando de manera simultánea se toma la transición $\mathbf{k} \rightarrow 0$, por lo que $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$ describirá la respuesta

dieléctrica de medios estructuralmente heterogéneos en el régimen $\lambda \gg a$ (homogenización del medio) como una constante dieléctrica efectiva local del medio $\varepsilon_{\text{eff}} = \lim_{\omega, k \rightarrow 0} \varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$.

Si el medio es inherentemente magnético ($\mu(\mathbf{k}, \omega) \neq 0$) [18–20], conviene escribir las ecuaciones constitutivas entre \mathbf{D} , \mathbf{E} y \mathbf{B} , \mathbf{H} , en la forma generalizada:

$$\mathbf{D} = \overset{\leftrightarrow}{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega)\mathbf{E} + \overset{\leftrightarrow}{\gamma}(\mathbf{k}, \omega)\mathbf{H}, \quad (2.6a)$$

$$\mathbf{B} = \overset{\leftrightarrow}{\delta}(\mathbf{k}, \omega)\mathbf{E} + \overset{\leftrightarrow}{\mu}(\mathbf{k}, \omega)\mathbf{H}. \quad (2.6b)$$

Estas relaciones lineales expresan la llamada respuesta bianisótropa, en donde la diada $\overset{\leftrightarrow}{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega)$ de (2.6a), no es la misma que en la expresión (2.4b), aun cuando a esta diada se le siga denominando permitividad y a $\overset{\leftrightarrow}{\mu}(\mathbf{k}, \omega)$ la permeabilidad [12, 20], mientras que a las cantidades $\overset{\leftrightarrow}{\gamma}(\mathbf{k}, \omega)$, $\overset{\leftrightarrow}{\delta}(\mathbf{k}, \omega)$, se les conoce como diadas magneto-eléctricas.

2.1 Efecto pelicular en metales

Cuando una onda electromagnética incide sobre la superficie de un metal, es bien sabido que esta penetra hasta una cierta distancia finita [13, 21]. Este fenómeno es conocido como el efecto pelicular. En el caso de un metal homogéneo e isótropo, esta distancia está dada por:

$$\delta_n = \left(\frac{c^2}{2\pi\omega\sigma_0} \right)^{1/2}, \quad (2.7)$$

donde ω es la frecuencia de la onda, σ_0 es la conductividad estática del metal y c es la velocidad de la luz. De esta expresión se puede observar que el valor de la profundidad de penetración δ disminuye apreciablemente si el valor de la conductividad o frecuencia aumentan. Cuando se disminuye la temperatura de un metal puro, el valor de la trayectoria libre media de los electrones l se incrementa y en consecuencia también la conductividad. A temperaturas suficientemente bajas y frecuencias altas se puede tener que δ sea menor que l , bajo estas condiciones la suposición de que el metal es homogéneo ya no es válida, ya que δ [22], juega el papel de la variación espacial del campo electromagnético en el metal, y por lo tanto el movimiento de los portadores de carga ya no sería bajo la influencia de un campo eléctrico constante y la ley de Ohm $\mathbf{j}(x) = \sigma_0\mathbf{E}(x)$ (aquí la dirección x es perpendicular a la superficie irradiada del metal) tendrá una forma más complicada. En este caso el fenómeno se conoce como efecto pelicular anómalo y la profundidad de penetración anómala está dada

por

$$\delta_a = \left(\frac{c^2 l}{4\pi\omega\sigma_0} \right)^{1/3}. \quad (2.8)$$

La descripción detallada de este fenómeno se presenta a continuación. La alta densidad de electrones que un metal posee hace que la conductividad eléctrica sea la responsable de la reflexión casi total de la radiación electromagnética externa. Cuando $\omega \ll \omega_p$, donde ω_p es la frecuencia de plasma, una pequeña porción del flujo de energía electromagnética que penetra dentro del metal no se propaga en él, sino que se amortigua a una distancia cercana a su superficie. La corriente eléctrica inducida por el campo también se concentra sobre la capa superficial del conductor. Este fenómeno es llamado efecto pelicular, el cual se caracteriza por la profundidad de penetración δ y por la ley de distribución del campo electromagnético en el conductor. Estas, a su vez son determinadas por las características específicas de la dispersión espacial y temporal de la conductividad σ . La dispersión temporal es controlada por la relación de la frecuencia de relajación electrónica ν y la frecuencia de la onda ω . Cuando $\omega \ll \nu$ (caso cuasi-estático) la dispersión espacial es determinada por la relación entre la profundidad de penetración δ y la trayectoria libre media $l = v_F/\nu$, donde v_F es la velocidad característica del electrón sobre la superficie de Fermi. A altas frecuencias $\omega \gg \nu$, la trayectoria del electrón v_F/ω en un período de la onda $2\pi/\omega$ juega el papel de la trayectoria libre. Entonces el efecto pelicular depende de los valores relativos de las tres longitudes, δ , l , v_F/ω . La longitud más pequeña de las dos trayectorias $l = v_F/\nu$ y v_F/ω se determina mediante la combinación de ambas, dando lugar a la llamada trayectoria libre media efectiva

$$l_\omega = \frac{v_F}{\nu - i\omega}. \quad (2.9)$$

Con esta definición, las características de la dispersión espacial dependen de la comparación del valor absoluto $|l_\omega|$ de l_ω y la profundidad pelicular δ .

Cuando $|l_\omega| \ll \delta$, $\omega \ll \nu$ se dice que las dispersiones espacial y temporal son débiles. Debido a que la distancia en la cual el campo electromagnético cambia fuertemente excede a $|l_\omega|$, la relación entre el campo eléctrico $\mathbf{E}(x)$ y $\mathbf{j}(x)$ puede ser considerada como local, es decir su valor sólo depende del punto donde se evalúa, ya que que el movimiento de los electrones se realiza prácticamente bajo la acción de un campo eléctrico constante. En un metal con superficie de Fermi esférica o red cúbica, el tensor de conductividad se reduce

a un escalar y la ley de Ohm es válida:

$$\mathbf{j}(x) = \sigma \mathbf{E}(x). \quad (2.10)$$

Sustituyendo esta expresión en las ecuaciones de Maxwell, y bajo la condición $\omega \ll \omega_p$, la corriente de desplazamiento se puede despreciar, con lo cual se llega a la siguiente solución para el campo eléctrico en el metal

$$E_\alpha(x) = E_\alpha(0) \exp(-x/\delta), \quad E_x = 0, \quad \alpha = y, z, \quad (2.11)$$

donde δ , la longitud compleja de penetración, tiene la siguiente expresión

$$\delta^2 = \frac{ic^2}{4\pi\omega\sigma}, \quad \text{Re } \delta > 0. \quad (2.12)$$

Es importante notar que δ es compleja no sólo por el amortiguamiento, sino también por el cambio de fase de la onda en el metal. Para que la electrodinámica del metal a dispersión espacial débil este completamente determinada es necesario complementar con la expresión de la conductividad. A temperatura ambiente, la frecuencia de relajación electrónica ν es del orden de 10^{13} s^{-1} , por lo tanto, la desigualdad $\omega \ll \nu$ (bajas frecuencias) es válida hasta la banda de frecuencias del infrarrojo, y los efectos de la dispersión temporal son despreciablemente pequeños, por lo que la conductividad σ es real y coincide con su expresión estática σ_0 :

$$\sigma_0 = \frac{Ne^2l}{p_F} = \frac{\omega_p^2}{4\pi\nu}. \quad (2.13)$$

El campo eléctrico dentro del metal genera una gran corriente disipativa (2.10), en este caso la solución de la ecuación (2.12) para δ es

$$\delta = \frac{\delta_n}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{i\pi}{4}\right) = \frac{\delta_n}{1-i}, \quad (2.14)$$

$$\delta_n = \frac{c}{\sqrt{2\pi\omega\sigma_0}} = \frac{c}{\omega_p} \left(\frac{2\nu}{\omega}\right)^{1/2}.$$

De esta última expresión se puede observar que que la onda electromagnética incidente sobre la superficie del metal es amortiguada en la distancia δ_n al interior del metal, de igual forma la variación de la fase con la distancia es caracterizada por el mismo valor de δ_n y el efecto pelicular se llama clásico o normal.

Cuando $\omega \gg \nu$ (altas frecuencias, región del infrarrojo), $v_F/\omega \ll l$, y la conductividad metálica σ es dada por

$$\sigma_{cl} = \frac{Ne^2l\omega}{p_F} = \frac{\omega_p^2}{4\pi(\nu - i\omega)} \simeq \frac{\omega_p^2}{4\pi\omega} \left(i + \frac{\nu}{\omega}\right), \quad (2.15)$$

la cual es principalmente imaginaria, donde p_F es el momento de Fermi del electrón. En este caso la profundidad de penetración

$$\delta = \delta_{\text{ir}} \left(1 + \frac{i\nu}{2\omega} \right), \quad \delta_{\text{ir}} = c/\omega_p. \quad (2.16)$$

De esta última ecuación la profundidad de penetración δ_{ir} es constante e independiente de ω y ν . Para metales típicos, $\omega_p \sim 10^{15} - 10^{16} \text{ s}^{-1}$, de lo cual se deduce que $\delta_{\text{ir}} \sim 10^{-6} - 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$, por lo que en esta región del espectro electromagnético la profundidad de penetración es pequeña. Dado que la trayectoria libre media efectiva l_ω y la profundidad de penetración son funciones de la frecuencia de onda ω , es claro que la dispersión espacial débil debe imponer ciertas restricciones sobre ω , ya que ellas resultan ser diferentes dependiendo del carácter del efecto pelicular. A altas frecuencias $\omega \gg \nu$, la desigualdad $|l_\omega| \ll \delta$ es equivalente a $\omega \gg \omega_p v_F / c$ cuando v_F / ω juega el papel de trayectoria libre y (2.16) tiende a la constante c / ω_p . Por lo tanto, el efecto pelicular infrarrojo tiene lugar en el intervalo

$$\max[\nu, \omega_{\text{ir}}] \ll \omega \ll \omega_p, \quad \omega_{\text{ir}} = \omega_p v_F / c. \quad (2.17)$$

El orden de magnitud de la frecuencia límite ω_{ir} es igual a 10^{13} s^{-1} y coincide con la frecuencia de relajación a temperatura ambiente. Si $\omega \ll \nu$, la longitud $|l_\omega|$ es igual a $l = v_F / \nu$, y la profundidad de penetración δ está dada por (2.14), la desigualdad $|l_\omega| \ll \delta$ es equivalente a $\omega \ll \nu^3 / \omega_{\text{ir}}^2$. Esto es por que las frecuencias más bajas corresponden al efecto pelicular normal

$$\omega \ll \min[\omega_n, \nu], \quad \omega_n = \nu^3 / \omega_{\text{ir}}^2. \quad (2.18)$$

De las condiciones (2.17) y (2.18), se concluye que a altas temperaturas, cuando

$$\omega_{\text{ir}} \lesssim \nu \lesssim \omega_n, \quad (2.19)$$

sólo la dispersión espacial débil ($|l_\omega| \ll \delta$) es realiza y todos los mecanismos posibles de la interacción de los campos electromagnéticos con los electrones de conducción se limitan a los efectos peliculares normales e infrarrojos.

A bajas temperaturas y altas frecuencias, la distancia de penetración $\delta \ll |l_\omega|$. A este límite se le conoce como dispersión espacial fuerte o efecto pelicular anómalo en la física de metales. En este caso la relación (2.10) ya no es válida porque esta fórmula sólo aplica bajo la suposición de un campo homogéneo. En el caso general, la densidad de corriente \mathbf{j} en un punto dado en el conductor es determinado por el campo eléctrico \mathbf{E} no sólo en este

punto, sino también en la vecindad de este, dentro de una región de longitud $\sim |l_\omega|$. Dicho de otro modo, la relación entre \mathbf{j} y \mathbf{E} es no-local. En este caso la conductividad σ no tiene una forma simple y en su lugar debe encontrarse un operador integro-diferencial, o sea la relación debe ser de la forma (2.2), la cual se determina a partir de una teoría microscópica, que para el caso de electrones libres, se puede encontrar con ayuda de la teoría cinética para la función de distribución y las ecuaciones de Maxwell [23–25]. Sin embargo existe una aproximación basada en consideraciones físicas simples, debidas a Pippard [24, 25] y conocidas como el principio de ineffectividad, las cuales a pesar de que no son estrictas, ellas dan la noción correcta de la naturaleza del efecto pelicular anómalo.

De acuerdo con este principio, los electrones pueden moverse paralelamente a la superficie del metal o a ángulos grandes respecto de esta. Los electrones que se mueven a ángulos grandes, pasan poco tiempo (más pequeño que $|l_\omega|/v_F$) en el campo eléctrico y por lo tanto casi no interactúan con éste. Como resultado de lo anterior, la acción del campo eléctrico sobre los electrones y su contribución a la corriente eléctrica es insignificante. Por lo tanto, a tales electrones se les llama ineficientes. Los electrones que se mueven paralelamente a la superficie o a un ángulo pequeño ($|l_\omega|$ dentro de la profundidad δ) son acelerados por el campo eléctrico y por consiguiente para ellos el campo es prácticamente uniforme. Estos son los electrones que precisamente forman la corriente de apantallamiento en la profundidad pelicular y para estos su ángulo es del orden de $\delta/|l_\omega|$. Debido a esto, sólo una fracción muy pequeña de electrones son eficientes $N_{ef} = N\delta/|l_\omega|$, y la conductividad asociada a ellos puede ser evaluada con

$$\sigma_{ef} = \frac{N_{ef}e^2|l_\omega|}{p_F} = \frac{N\delta e^2}{p_F} = \frac{\sigma_0\delta}{l}. \quad (2.20)$$

La ecuación (2.20) no depende de la trayectoria $|l_\omega|$, lo cual indica que en el efecto pelicular anómalo la dispersión temporal no es relevante. Lo único importante es que el valor de σ_{ef} está determinado por la profundidad de penetración δ .

Como ya se mencionó anteriormente, los electrones eficientes se mueven prácticamente en un campo eléctrico constante, y consecuentemente la relación entre la densidad de corriente \mathbf{j} y \mathbf{E} , se puede escribir aproximadamente mediante la ley de Ohm (2.10), y la profundidad pelicular se puede determinar de (2.12), sustituyendo en ella (2.20) para

obtener como resultado

$$\begin{aligned}\delta &= \delta_a \exp(i\pi/6), \\ \delta_a &= \left(\frac{c^2 l}{4\pi\sigma_0\omega} \right)^{1/3} = \left(\frac{c^2 v_f}{\omega_p^2 \omega} \right)^{1/3} = \delta_n \left(\frac{l}{2\delta_n} \right)^{1/3}.\end{aligned}\tag{2.21}$$

En la aproximación principal, δ_a es independiente de la trayectoria libre media l , y en consecuencia de la temperatura, en contraste con δ_n . Entonces bajo las condición de baja temperatura y en muestras suficientemente puras, la dispersión espacial fuerte (efecto pelicular anómalo), toma lugar en un intervalo de frecuencias que van desde unas fracciones de Hertz hasta la región del infrarrojo.

2.2 Dispersión espacial en semiconductores

Como se mencionó al inicio de este capítulo, cuando el medio dieléctrico que forma parte de la estructura no es el vacío, sino que es un semiconductor, la descripción de sus propiedades ópticas de este tipo de componente se realiza a partir de su función dieléctrica ε , la cual debe considerar los efectos de dispersión espacial. En la cercanía de una transición excitónica ε debe depender explícitamente del vector de onda \mathbf{k} [26–28]. El modelo de Hopfield y Thomas para la función dieléctrica de un semiconductor excitónico basado en el modelo de osciladores armónicos acoplados tiene la siguiente forma [28]

$$\varepsilon(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\omega_p^2}{\omega_T^2 + Dk^2 - \omega^2 - i\omega\nu},\tag{2.22}$$

donde ε_∞ es la constante dieléctrica de fondo, ω_T es la frecuencia de resonancia excitónica, ν es una constante de amortiguamiento, ω_p es una medida de la fuerza del oscilador (aunque formalmente esta cantidad es similar a la frecuencia de plasma en un conductor, pero debe recordarse que no hay cargas libres en un cristal aislante), con $D = \hbar\omega_T/(m_e + m_h)$, y m_e, m_h las masas del electrón y del hueco respectivamente. El término Dk^2 se conoce como parámetro de dispersión espacial y está relacionado con la energía total $E = \hbar\omega_0$ requerida para crear un excitón

$$E \equiv \hbar\omega_0 = \hbar\omega_T + \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e + m_h)},\tag{2.23}$$

en donde el primer término $\hbar\omega_T = E_g + E_n$, es la energía necesaria para crear un excitón sin movimiento con número cuántico principal n (E_g es la energía del gap del semiconductor y

E_n es la energía de un átomo hidrogenoide), mientras que el segundo término corresponde a la energía cinética del excitón [29, 30]. Una estimación numérica de este término muestra que su valor es tres ordenes de magnitud más pequeña que la energía potencial, pero esto no es un indicativo de que los efectos de dispersión espacial sean despreciables, ya que cuando ν es lo suficientemente pequeña (a temperaturas lo suficientemente bajas y en cristales de alta calidad), los efectos no locales son completamente necesarios para interpretar las propiedades ópticas relacionadas a los excitones. El uso de la función dieléctrica dependiente del vector de onda, (2.22), en las ecuaciones de Maxwell da como resultado modos normales longitudinales y transversales de volumen adicionales, los cuales no se pueden describir en la aproximación local, la cual se obtiene tomando $k = 0$ en (2.22).

Estos modos adicionales fueron investigados inicialmente por Pekar [26, 27], a partir del cálculo de la estructura de bandas electrónicas. Sin embargo, estos modos también pueden ser descritos con el modelo de Thomas y Hopfield. En verdad, si se considera un medio infinito homogéneo e isótropo en ausencia de fuentes externas, los campos pueden separarse en sus contribuciones longitudinales y transversales, paralela y perpendicular al vector de onda \mathbf{k} respectivamente. Entonces, en el caso de ondas planas transversales $e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}$, para las cuales se satisface la expresión $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = 0$, su relación de dispersión tiene la forma

$$k^2 = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \varepsilon(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.24)$$

Si en esta expresión se sustituye la función dieléctrica de Thomas y Hopfield (2.22) se obtiene una ecuación bicuadrática en k , dando lugar a dos modos transversales para cada frecuencia con vector de onda \mathbf{k} :

$$k^2 = \frac{1}{2} \left\{ \Gamma_0^2 + \varepsilon_\infty \frac{\omega^2}{c^2} \pm \left[\left(\Gamma_0^2 - \varepsilon_\infty \frac{\omega^2}{c^2} \right)^2 + \frac{4\omega^2\omega_p^2}{c^2 D} \right]^{1/2} \right\}. \quad (2.25)$$

donde

$$\Gamma_0^2 \equiv \frac{(\omega^2 + i\nu\omega - \omega_T^2)}{D}. \quad (2.26)$$

Por otro lado, las ondas longitudinales las cuales obedecen la ecuación $\mathbf{E} \times \mathbf{k} = 0$, tienen como relación de dispersión

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{k}) = 0, \quad (2.27)$$

la cual se satisface para los vectores de onda

$$k^2 = \Gamma_0^2 - \frac{\omega_p^2}{D\varepsilon_\infty} \quad (2.28)$$

De estos tres modos, el longitudinal sólo puede ser excitado cuando la radiación incidente tiene polarización p (TM), mientras que los modos transversales resultantes pueden ser excitados si la radiación incidente tiene polarización s (TE) o p . Por otro lado, si la dispersión espacial estuviera ausente, sólo un modo podría propagarse, o sea uno transversal. El comportamiento de estas excitaciones se parece al de los excitones para vectores de onda grandes y se asemeja al de las ondas electromagnéticas para vectores de onda pequeños, teniéndose una región de transición entre ambos comportamientos. A los modos, que consisten de excitones fuertemente acoplados al campo electromagnético, se les denomina polariton-excitón (o polaritones excitónicos) [30].

Los polaritones excitónicos interactúan con la superficie del semiconductor a distancias del orden del radio excitónico. Dicha interacción se puede describir en el marco del modelo simplificado propuesto por Thomas y Hopfield, mediante la suposición de que el único efecto de la superficie consiste en repeler al excitón dando lugar a una región libre de excitones, la cual es conocida como capa muerta. Esta capa termina de manera abrupta en la región excitónica (no local) donde se existen los modos electromagnéticos adicionales, cuyas amplitudes se determinan mediante la postulación de condiciones de frontera adicionales ABC's (*Additional Boundary Conditions*), una condición para cada modo extra, debido a que las condiciones impuestas por las ecuaciones de Maxwell resultan insuficientes. La formación de la capa muerta surge como resultado de un potencial generado por la interacción del excitón con su carga imagen en la superficie, siempre que esta se encuentre limpia, ya que la presencia de impurezas y defectos, dan lugar a potenciales extrínsecos que pueden ya sea atraer o repeler a los excitones y como consecuencia afectar de manera significativa la reflectividad superficial de los semiconductores. Varios modelos teóricos se han propuesto para describir de la manera más realista el movimiento de los excitones en la proximidad de la superficie de medios semi-infinitos y películas delgadas. Para los primeros, los excitones obedecen una ecuación de Schrödinger de masas efectivas, con la adición de un potencial de interacción del electrón y el hueco con la superficie, $V_s(r_e, r_h)$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{\epsilon_0 r} + V_s(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \right] \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = E\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h), \quad (2.29)$$

los dos primeros términos son los operadores de energía cinética del electrón y del hueco, cuyas masas efectivas en las bandas de conducción y valencia son m_e y m_h , respectivamente. El tercer término representa la interacción de Coulomb entre el hueco y el electrón, siendo apantallada por la constante dieléctrica estática ϵ_0 , $-e$ es la carga del electrón y r es la

distancia de separación entre el electrón y el hueco. Las soluciones de (2.29), se obtienen usualmente mediante métodos aproximados, uno de los más comunmente empleados es el de la teoría adiabática [31–33], de acuerdo con la cual el movimiento relativo puede desacoplarse del movimiento del centro de masas, obteniéndose las siguientes ecuaciones

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{e^2}{\varepsilon_0 r} + V_s(\mathbf{r}, Z) \right] \varphi(\mathbf{r}, Z) = E_r(Z) \varphi(\mathbf{r}, Z), \quad (2.30a)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 + E_r(Z) \right] \phi(\mathbf{R}) = E \phi(\mathbf{R}). \quad (2.30b)$$

Aquí, μ es la masa reducida, M es la masa translacional del excitón, $\mathbf{r} = (x, y, z)$ es el vector de posición relativo, $\mathbf{R} = (X, Y, Z)$ es el vector de posición del centro de masas y Z es la distancia del excitón a la superficie. El potencial V_s tiene efectos considerables en la cercanía de la superficie ya que en el volumen del cristal ($Z \rightarrow \infty$) $V_s = 0$, y los eigenvalores de (2.30a), coinciden con la energía de enlace para un excitón en un medio infinito ($E_b = |E_r(\infty)|$). Para encontrar los eigenvalores de energía $E_r(Z)$, en la vecindad de la superficie, es necesario conocer la forma explícita del potencial V_s . Según el trabajo [33], en ausencia de campos eléctricos externos se tiene

$$V_s(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \frac{pe^2}{\varepsilon_0} \left[\frac{1}{4z_e} + \frac{1}{4z_h} - \frac{1}{\sqrt{(z_e + z_h)^2 + x^2 + y^2}} \right], \quad (2.31)$$

en donde los dos primeros términos toman en cuenta la interacción del electrón y del hueco con sus respectivas cargas imágenes, el último término describe la interacción de cada partícula con la imagen de la otra, $p = (\varepsilon_0 - 1)/(\varepsilon_0 + 1)$ es el factor de imagen dentro de un medio semi-infinito con constante dieléctrica estática ε_0 . Usando las coordenadas del centro de masa y del movimiento relativo, V_s se puede expandir en potencias de $(1/Z)$, obteniéndose una forma relativamente sencilla que se sustituye en (2.30a). Esta ecuación se puede resolver mediante métodos variacionales, con la condición de que el electrón y el hueco deben permanecer en el semiespacio material $z_e > 0$, $z_h > 0$, dando los eigenvalores $E_r(Z)$:

$$E_r(Z) \simeq -E_b + V_0 e^{-Z/d} + \sigma p E_b \frac{a_B^3}{Z^3}, \quad (2.32)$$

con E_b la energía de enlace del electrón y del hueco lejos de la superficie, a_B es el radio de Bohr excitónico, V_0, d son parámetros que se ajustan de acuerdo con el comportamiento de los excitones en diferentes semiconductores y σ toma los valores de $1/2$ y 7 para el estado

base y el primer estado excitado del excitón respectivamente.

En general, la ecuación (2.32) puede escribirse como

$$E_r(Z) = -E_b + \Delta E(Z), \quad (2.33)$$

en la cual el segundo término es un factor de corrección debido a la interacción con la superficie a una distancia finita, ya que como se puede observar de (2.32), cuando $Z \rightarrow \infty$, $\Delta E(Z) = 0$. En esta misma ecuación se puede notar que cuando el excitón se acerca a la superficie la energía de enlace del excitón disminuye, por lo cual $E_r(Z)$ juega el papel de un potencial efectivo en la ecuación de movimiento relativo del excitón. Además, para la ecuación del movimiento de centro de masas (2.30b), se debe aclarar que $\hbar\omega = E_g + E$ es la energía que requiere un fotón para crear un excitón de energía E con respecto al gap, mientras que $\hbar\omega_T = E_g - E_b$ es la energía mínima para generar un excitón en el volumen, por lo que (2.30b) puede escribirse como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} + \hbar\omega_T + \Delta E(Z) \right] \phi(\mathbf{R}) = \hbar\omega\phi(\mathbf{R}). \quad (2.34)$$

En esta ecuación $\Delta E(Z)$ juega el papel de una energía potencial correspondiente a una fuerza que actúa sobre el excitón cuando este se aproxima a la superficie, por lo cual puede ser identificada con un potencial superficial $V(Z)$ tal como el introducido por Thomas y Hopfield para explicar la presencia de la capa muerta.

Lo referido hasta este punto, sólo ha tratado con el movimiento mecánico de un solo excitón y se ha ignorado el hecho de que cuando se propaga radiación electromagnética en la cercanía de la superficie de un semiconductor excitónico, el campo eléctrico oscilante genera una polarización macroscópica en el medio. Una solución adecuada del problema requiere de la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo. Sin embargo, Thomas y Hopfield [28], mediante argumentos sencillos en los cuales introducen la polarización excitónica, logran obtener un sistema de dos ecuaciones diferenciales acopladas, una de las cuales se obtiene de las ecuaciones de Maxwell y la otra de la ecuación de Schrödinger del movimiento de centro de masas del excitón.

La ecuación diferencial proveniente de las ecuaciones de Maxwell, es una ecuación de onda que relaciona al campo eléctrico con la polarización excitónica,

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{R}) = \frac{\omega^2}{c^2} (\varepsilon_\infty + 4\pi\mathbf{P}(\mathbf{R})), \quad (2.35)$$

donde

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_T - [(\varepsilon_\infty - 1)/4\pi]\mathbf{E}. \quad (2.36)$$

Obsérvese que esta polarización excitónica difiere de la polarización ordinaria \mathbf{P}_T , porque de esta se excluye el fondo dieléctrico ε_∞ del cristal. La segunda ecuación diferencial, proveniente de la ecuación de Schrödinger tiene la siguiente forma

$$\left[-\frac{\hbar\omega}{M}\nabla^2 + \omega_T^2 - \omega^2 + \frac{2\omega_T V(Z)}{\hbar} \right] \mathbf{P}(\mathbf{R}) = \frac{\omega_P^2}{4\pi} \mathbf{E}(\mathbf{R}). \quad (2.37)$$

Las ecuaciones (2.35) y (2.37), deben resolverse para $\mathbf{E}(\mathbf{R})$, $\mathbf{P}(\mathbf{R})$ y para cualquier modo de polarización, a fin de obtener las propiedades ópticas tales como la reflexión y la refracción dado el potencial $V(Z)$. Soluciones analíticas para estas ecuaciones pueden obtenerse para tres modelos de potencial [30], y en el caso de polarizaciones s, p , si en ellas se desprecia la dependencia en z . En cualquier otro caso, estas se deben integrar numéricamente [34]. Es claro que las soluciones en cualquiera de los casos (analítico o numérico) se deben tomar en cuenta las ABC's y las condiciones de frontera derivadas de las ecuaciones de Maxwell para calcular las razones de las amplitudes.

En los trabajos [35, 36] las ecuaciones (2.35) y (2.37) para películas delgadas en el caso de polarización s, p , con un potencial modelado por dos potenciales de superficie de Morse generalizados, se pueden manipular para desacoplarse. Para la polarización s se obtiene

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\partial^4}{\partial z^4} + \left(\varepsilon_\infty \frac{\omega^2}{c^2} - k_x^2 + \Gamma^2(z) \right) \frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2 \left(\frac{\partial \Gamma^2}{\partial z} \right) \frac{\partial}{\partial z} \right] P_y(z) \\ & + \left[\left(\varepsilon_\infty \frac{\omega^2}{c^2} - k_x^2 \right) \Gamma^2(z) - \frac{\omega_p^2 \omega^2 M}{c^2 \hbar \omega_T} + \frac{\partial^2 \Gamma^2}{\partial z^2} \right] P_y(z) = 0, \end{aligned} \quad (2.38)$$

y para la polarización p

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \varepsilon_\infty \frac{\omega^2}{c^2} - k_x^2 \right) \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \Gamma^2(z) \right) P_x(z) \right] \\ & - \frac{\omega_p^2 M}{\varepsilon_\infty \hbar \omega_T} \left(\varepsilon_\infty \frac{\omega^2}{c^2} - k_x^2 \right) P_x(z) - ik_x \frac{\omega_p^2 M}{\varepsilon_\infty \hbar \omega_T} \frac{\partial P_z(z)}{\partial z} = 0 \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned} & ik_x \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \Gamma^2(z) \right) P_x(z) \right] + \frac{\omega^2 \omega_p^2 M}{c^2 \hbar \omega_T} P_z(z) \\ & - \left(\varepsilon_\infty \frac{\omega^2}{c^2} - k_x^2 \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \Gamma^2(z) \right) P_z(z) = 0, \end{aligned} \quad (2.40)$$

donde

$$\Gamma^2(z) = \Gamma_B^2 + \Delta\Gamma^2(z), \quad \Gamma_B^2 = \frac{M}{\hbar\omega_T} \left[\omega^2 - \omega_T^2 - \frac{\hbar\omega_T}{M} k_x^2 + i\omega\nu \right], \quad \Delta\Gamma^2(z) = -\frac{2MV(z)}{\hbar^2}. \quad (2.41)$$

Las soluciones de estas ecuaciones sobre la superficie de la película de espesor L , se obtienen por el método la expansión en series de $P_x(z), P_y(z), P_z(z)$, como una superposición de modos de volumen, cada una de ellas moduladas de manera conveniente en la superficie. Otra manera de solucionar estas ecuaciones se basa en la técnica de matriz de transferencia, como se muestra en el artículo de revisión [29] y referencias citadas ahí. En este mismo trabajo se muestra la solución para superredes constituidas de bicapas de semiconductor excitónico-aislante para las polarizaciones s, p , además del análisis de microcavidades y pequeñas partículas con dos geometrías (cilindros y esferas), y sistemas en los cuales la superficie del semiconductor no es ideal. Sin embargo los sistemas que contienen en su estructura componentes metálicos y semiconductores como se menciona al en la Introducción y al inicio de este capítulo, han llamado la atención de los investigadores debido a sus propiedades ópticas interesantes. Al respecto, en [37], se analizan teóricamente las propiedades ópticas de un cristal fotónico en el cual, el semiconductor se modela mediante la función dieléctrica no local (2.22), mientras que el componente metálico se modela mediante la función dieléctrica tipo Drude(2.1), para ambos modos de polarización s, p .

2.3 Respuesta dieléctrica no local de cristales fotónicos

Como se comentó en la Introducción de esta tesis, la propagación de ondas electromagnéticas en estructuras periódicas artificiales en donde un metal o semiconductor forman parte de la estructura puede analizarse en función de la razón que haya entre la longitud de onda λ , los parámetros geométricos de la estructura, la forma de las inclusiones, el tipo de material y fracción de llenado. El régimen cuando la longitud de onda es mucho mayor que la constante de red a , se conoce como el límite de *longitud de onda larga*, en donde la variación de los campos electromagnéticos es poco apreciable a distancias comparables con la trayectoria libre media electrónica, y con el tamaño de las inclusiones metálicas. En este régimen, la radiación percibe al medio como si este fuese homogéneo, aun cuando el medio en su estructura interna sea heterogéneo. El desarrollo de una teoría de homogeneización para la descripción de las propiedades ópticas de cristales fotónicos ha sido de gran interés

por su relativa simplicidad. Al respecto existen trabajos en los cuales el proceso de homogenización se ha llevado a cabo para inclusiones dieléctricas y metálicas, de forma arbitraria, en el límite de longitud de onda larga [9, 11, 38]. Estos trabajos se limitan a la generalidad de uno o más de los aspectos mencionados al inicio. Si el contraste dieléctrico de los componentes es moderado se emplean aproximaciones para la descripción de las propiedades ópticas tales como: la solución de problemas con valores en la frontera y el formalismo de primeros principios de Fourier. Por otra parte si el contraste dieléctrico es grande o en la estructura se tienen elementos resonantes, se emplean generalmente métodos numéricos. Sin embargo, además de estas aproximaciones existen otras, igualmente numéricas pero de mayor generalidad como: el método de recuperación de parámetros efectivos y el método de campo promedio en los cuales se determinan parámetros dinámicos efectivos como la permitividad $\varepsilon(\omega)$ y la permeabilidad $\mu(\omega)$.

En el primero de los dos últimos métodos mencionados arriba, se exige que el espectro de dispersión de un medio heterogéneo laminado corresponda al de un medio homogéneo [39–42], mientras que en el segundo, los campos electromagnéticos en el cristal fotónico se promedian en una celda unitaria [43–45]. Como se expone en el trabajo [12], otras aproximaciones similares también se han empleado para la descripción de los sistemas metalodieléctricos periódicos. Adicionalmente, en este último trabajo se presenta una teoría de homogenización general basada en el formalismo de Fourier, para cristales fotónicos con periodicidad unidimensional, bidimensional y tridimensional, con tipo de red de Bravais y forma de inclusiones (metálicas o dieléctricas) arbitrarias. De acuerdo con esta teoría, las ecuaciones de Maxwell para campos macroscópicos del cristal fotónico, se obtienen promediando los campos electromagnéticos en el interior del cristal fotónico. Finalmente, se ha derivado una expresión explícita para la conductividad eléctrica efectiva:

$$\overset{\leftrightarrow}{\Sigma}(\mathbf{k}) = \frac{i}{\omega\mu_0} \left[\{\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{N}}^{-1}(\mathbf{k}; 0, 0)\}^{-1} - (k^2 - k_0^2) \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{I}} + \mathbf{k}\mathbf{k} \right], \quad (2.42)$$

la cual depende del vector de onda \mathbf{k} . La diada $\{\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{N}}^{-1}(\mathbf{k}; 0, 0)\}^{-1}$ en la ecuación (2.42), es la inversa de un bloque de tres por tres de $\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{N}}^{-1}(\mathbf{k}; 0, 0)$ que se obtiene a su vez de la inversa de una matriz de tamaño infinito $\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{N}}^{-1}(\mathbf{k}; \mathbf{G}, \mathbf{G}')$, dada por

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{N}}(\mathbf{k}; \mathbf{G}, \mathbf{G}') = \left[(|\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 - k_0^2) \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{I}} - (\mathbf{k} + \mathbf{G})(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \right] \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} - i\omega\mu_0 \hat{\sigma}(\mathbf{G} - \mathbf{G}) \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{I}}. \quad (2.43)$$

Aquí, \mathbf{G} y \mathbf{G}' , son vectores de la red recíproca, $\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{I}}$ es la diada unidad, $\delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'}$ es la delta de Kronecker, ω es la frecuencia, $k_0 = \omega/c$ y c es la velocidad de la luz en el vacío y $\hat{\sigma}(\mathbf{G})$, es

el coeficiente de Fourier de la conductividad generalizada

$$\hat{\sigma}(\mathbf{G}) = \frac{1}{V_c} \int_{V_c} \hat{\sigma}(\mathbf{r}) \exp[-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}] d\mathbf{r}, \quad (2.44)$$

donde

$$\hat{\sigma}(\mathbf{r}) = \sigma(\mathbf{r}) - i\omega\varepsilon_0\chi(\mathbf{r}), \quad (2.45)$$

con $\sigma(\mathbf{r})$ y $\chi(\mathbf{r})$ siendo la conductividad y la susceptibilidad usuales del material, respectivamente, las cuales son funciones periódicas de las coordenadas, y V_c el volumen de la celda unitaria.

Con la conductividad redefinida por la ecuación (2.42), la densidad de corriente macroscópica adquiere la siguiente forma

$$\mathbf{J}_0 = \overset{\leftrightarrow}{\Sigma}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E}_0. \quad (2.46)$$

Usando la conductividad y la densidad de corriente definidas por las ecuaciones (2.42, 2.46), las ecuaciones de Maxwell para los campos macroscópicos del cristal fotónico pueden escribirse en la forma

$$\mathbf{k} \times \mathbf{B}_0 = -\mu_0[\omega\varepsilon_0 \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{I}} + i \overset{\leftrightarrow}{\Sigma}(\mathbf{k})] \cdot \mathbf{E}_0. \quad (2.47)$$

$$\mathbf{k} \cdot [\omega\varepsilon_0 \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{I}} + i \overset{\leftrightarrow}{\Sigma}(\mathbf{k})] \cdot \mathbf{E}_0 = 0. \quad (2.48)$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E}_0 = \omega\mathbf{B}_0. \quad (2.49)$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{B}_0 = 0. \quad (2.50)$$

Al compararse estas expresiones con las ecuaciones de Maxwell para un medio macroscópico homogéneo, con el fin de determinar la respuesta efectiva del material, deben definirse las relaciones entre los campos auxiliares \mathbf{D} y \mathbf{H} y los campos \mathbf{E} y \mathbf{B} . Dado que la respuesta del material no es única, una de las posibilidades es establecer las relaciones constitutivas de la siguiente manera

$$\mathbf{D} = \overset{\leftrightarrow}{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega) \cdot \mathbf{E}, \quad (2.51)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0\mathbf{H}. \quad (2.52)$$

La elección anterior, no toma en cuenta de manera explícita efectos magnéticos, por lo cual las propiedades electromagnéticas del material homogéneo, estarán determinadas por la dependencia de la diada dieléctrica $\overset{\leftrightarrow}{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega)$ en función del vector de onda:

$$\overset{\leftrightarrow}{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_0 \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{I}} + \frac{i}{\omega} \overset{\leftrightarrow}{\Sigma}(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.53)$$

La dependencia explícita de \mathbf{k} y de ω , indica que la respuesta dieléctrica es no local. Por lo tanto, aun cuando una estructura metalodieléctrica periódica no posea inclusiones magnéticas, se pueden producir efectos magnéticos de acuerdo con lo que se mencionó al inicio de este capítulo. Cabe mencionar que la función dieléctrica efectiva no local coincide con los resultados obtenidos en el trabajo [46], el cual se base en una teoría más general [47]. Además, el uso de este tensor efectivo en las ecuaciones de Maxwell para los campos en el medio homogeneizado permite obtener la estructura de bandas completa del cristal fotónico.

2.4 Respuesta bianisótropa efectiva

Las relaciones constitutivas entre el vector de desplazamiento \mathbf{D} y el campo magnético \mathbf{H} y los campos físicos macroscópicos \mathbf{E} y \mathbf{B} definidos por las ecuaciones (2.51, 2.52), es una de muchas posibilidades, y quizá la relación lineal más general de las ecuaciones constitutivas es la llamada respuesta bianisótropa, de la cual ya hicimos mención (2.6a, 2.6b). En esta sección daremos la forma explícita de las diadas $\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\varepsilon}}$, $\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\mu}}$, $\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\gamma}}$, $\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\delta}}$. La determinación de estas en el límite de longitud de onda larga $ka \ll 1$, donde k es la magnitud del vector de onda del campo electromagnético macroscópico y a es la constante de red, se puede efectuar mediante una expansión en serie de potencias de k de la conductividad efectiva no local (2.42) (bajo la condición $ka \ll 1$) para el cristal fotónico homogeneizado. Dicho desarrollo fue reportado en el trabajo [12], donde se demuestra que

$$\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\Sigma}}(\mathbf{k}) = \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\Sigma}}^{(0)} + k \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\Sigma}}^{(1)}(\hat{\mathbf{k}}) + k^2 \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\Sigma}}^{(2)}(\hat{\mathbf{k}}) + \dots \quad (2.54)$$

Aquí, $\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\Sigma}}^{(0)}$, $\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\Sigma}}^{(1)}$, $\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\Sigma}}^{(2)}$, son las tres primeras diadas del desarrollo y $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$ es un vector unitario. En el desarrollo anterior se supone que la frecuencia es independiente de \mathbf{k} , siendo lo suficientemente pequeña ($\omega \ll 2\pi c/a$). Con estos primeros términos, las diadas de la respuesta bianisótropa $\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\varepsilon}}$, $\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\mu}}$, $\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\gamma}}$, $\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\delta}}$, adquieren la forma:

$$\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\varepsilon}} = \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\alpha}} - \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\beta}} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\psi}}^{-1} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\phi}}, \quad \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\gamma}} = \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\beta}} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\psi}}^{-1}, \quad \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\delta}} = -\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\psi}}^{-1} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\phi}}, \quad \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\mu}} = \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\psi}}^{-1}, \quad (2.55)$$

donde

$$\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\alpha}} = \varepsilon_0 \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{I}} + \frac{i}{\omega} \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\Sigma}}^{(0)}, \quad (2.56)$$

$$\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\beta}} = -i(1-p) \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\Sigma}}^{(1)}(\hat{\mathbf{k}}) \cdot (\hat{\mathbf{k}} \times \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{I}}), \quad (2.57)$$

$$\overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\phi}} = -ip \hat{\mathbf{k}} \times \overset{\leftrightarrow}{\boldsymbol{\Sigma}}^{(1)}(\hat{\mathbf{k}}), \quad (2.58)$$

$$\overleftrightarrow{\boldsymbol{\psi}} = (1/\mu_0) \overleftrightarrow{\mathbf{I}} + i\omega \hat{\mathbf{k}} \times \overleftrightarrow{\boldsymbol{\Sigma}}^{(2)}(\hat{\mathbf{k}}) \cdot (\hat{\mathbf{k}} \times \overleftrightarrow{\mathbf{I}}). \quad (2.59)$$

Aquí, la cantidad p es un parámetro auxiliar, cuyo valor se determina mediante la imposición de las relaciones de simetría de Onsager entre las diadas efectivas de la respuesta bianisótropa,

$$\overleftrightarrow{\boldsymbol{\varepsilon}} = \overleftrightarrow{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{T}}, \quad \overleftrightarrow{\boldsymbol{\mu}} = \overleftrightarrow{\boldsymbol{\mu}}_{\text{T}}, \quad \overleftrightarrow{\boldsymbol{\delta}} = -\overleftrightarrow{\boldsymbol{\gamma}}_{\text{T}}, \quad (2.60)$$

las cuales se satisfacen cuando $p = 1/2$. El subíndice T, en las relaciones anteriores indica sólo la transpuesta de las diadas. Debe observarse que $\overleftrightarrow{\boldsymbol{\varepsilon}}$, $\overleftrightarrow{\boldsymbol{\mu}}$, $\overleftrightarrow{\boldsymbol{\gamma}}$ dependen de la dirección del vector de onda \mathbf{k} , pero no de su magnitud k , y como se apunta en [12], se introduce anisotropía adicional a la red. En consecuencia, estas diadas pueden diagonalizarse en diferentes sistemas de coordenadas. Una de las ventajas de la respuesta bianisótropa efectiva en comparación con la respuesta dieléctrica no local, descrita en la sección anterior, consiste en que los efectos magnéticos y quirales (asociados a los tensores de permeabilidad y los magneto-eléctricos cruzados) son claramente revelados. Aunque ambas descripciones son bastante generales, tienen el inconveniente de que la determinación de los parámetros efectivos requiere resolver sistemas de ecuaciones algebraicas de gran tamaño.

Cabe mencionar que los cristales fotónicos con componentes naturalmente magnéticas o quirales, cuya respuesta electromagnética tiene de inicio la forma bianisótropa, se pueden homogeneizar con la teoría propuesta en el trabajo [48]. Esta teoría de homogeneización también se basa en el formalismo de Fourier y provee fórmulas explícitas para los tensores efectivos, que en general son funciones del vector de onda (no localidad), aplicables a cristales fotónicos con tipo de red de Bravais y forma de las inclusiones arbitrarios.

Capítulo 3

Formalismo teórico

Como se ha comentado ampliamente en los capítulos previos, en las dos últimas décadas se ha retomado el estudio de materiales izquierdos en el sentido dado por Veselago [3], los cuales son en sí estructuras metalodieléctricas periódicas. Sin embargo, en las investigaciones teóricas el componente metálico o semiconductor de la estructura periódica se ha descrito en el marco de un modelo bastante burdo y simple. A saber, se supone que la constante dieléctrica es ya sea infinita o se describe con la fórmula clásica de relajación que se deriva de la teoría de Drude-Lorentz. Esta última toma en cuenta sólo los efectos de dispersión de frecuencia y no considera en absoluto los efectos de dispersión espacial. En el presente capítulo se estudia un arreglo periódico unidimensional infinito de capas alternantes de dieléctrico y metal, en el cual se introducen los efectos de dispersión espacial a través del momento del electrón $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. Para llevar a cabo este análisis comenzamos primeramente por la capa dieléctrica y posteriormente analizamos la placa metálica. Cabe mencionar que en este análisis se considera una onda electromagnética con polarización s (o, lo mismo, polarización TE). Sin embargo nuestro principal problema se centra en encontrar la densidad de corriente dentro de la capa metálica. Para resolver el problema planteado utilizamos la ecuación cinética, y calculamos la densidad de corriente eléctrica.

3.1 Modelo del arreglo metalodieléctrico periódico

Consideremos el siguiente arreglo infinito unidimensional periódico de capas dieléctricas y placas metálicas alternantes como se muestra en la Fig. 3.1. La celda unitaria de la estructura consiste de dos elementos alternantes – la capa de dieléctrico con espesor d_i

y la placa metálica con espesor d_m . La celda tiene su espesor d que coincide con el período de la estructura,

$$d = d_i + d_m. \quad (3.1)$$

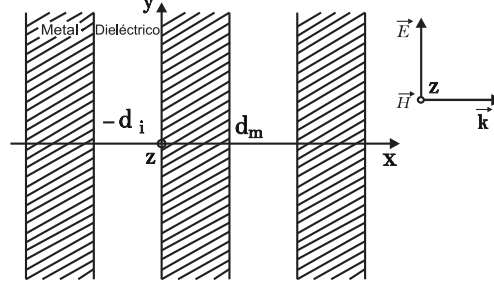


Figura 3.1: Arreglo infinito de capas alternantes de dieléctrico y metal.

Suponemos que la onda electromagnética monocromática de frecuencia ω tiene polarización s o, en otras palabras, polarización TE. Específicamente, la onda se propaga en la dirección del eje x , su vector de campo eléctrico $\mathbf{E}(x, t)$ es paralelo al eje y , mientras que su vector de campo magnético $\mathbf{H}(x, t)$ es paralelo al eje z ,

$$\mathbf{E}(x, t) = \{0, E(x), 0\} \exp(-i\omega t), \quad (3.2a)$$

$$\mathbf{H}(x, t) = \{0, 0, H(x)\} \exp(-i\omega t). \quad (3.2b)$$

Es importante notar que consideramos materiales no-magnéticos (la permeabilidad magnética del dieléctrico y del metal son $\mu_i = \mu_m = 1$). Esto conduce a la condición de continuidad para los campos eléctrico $E(x)$ y magnético $H(x)$ en las fronteras entre las capas dieléctricas y las metálicas. Nuestra meta es estudiar las propiedades espectrales y de transporte de dichos sistemas. Con este fin, tenemos que obtener la relación de transferencia de la onda electromagnética plana a través de la celda unitaria del arreglo periódico que estamos considerando. Es evidente que en sistemas periódicos las propiedades de todas las celdas unitarias son equivalentes. Esto significa que es suficiente considerar cualquiera de las celdas. En nuestro análisis es apropiado seleccionar la celda unitaria restringida en el intervalo $[-d_i, d_m]$ (vea la Fig. 3.1). Tomando en cuenta las condiciones de continuidad, la relación de transferencia a través de la celda especificada se puede presentar en la siguiente forma

matricial

$$\begin{pmatrix} E(d_m) \\ H(d_m) \end{pmatrix} = \hat{Q} \begin{pmatrix} E(-d_i) \\ H(-d_i) \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

La celda $[-d_i, d_m]$ incluye la capa dieléctrica $[-d_i, 0]$ y la placa metálica $[0, d_m]$. En consecuencia, la matriz de transferencia \hat{Q} puede expresarse como el producto,

$$\hat{Q} = \hat{M}\hat{D}, \quad (3.4)$$

de la matriz de transferencia para la placa metálica \hat{M} por la matriz para la capa dieléctrica \hat{D} . Las últimas matrices se definen por las relaciones

$$\begin{pmatrix} E(0) \\ H(0) \end{pmatrix} = \hat{D} \begin{pmatrix} E(-d_i) \\ H(-d_i) \end{pmatrix}, \quad (3.5a)$$

$$\begin{pmatrix} E(d_m) \\ H(d_m) \end{pmatrix} = \hat{M} \begin{pmatrix} E(0) \\ H(0) \end{pmatrix}. \quad (3.5b)$$

En las secciones siguientes calcularemos las distribuciones del campo electromagnético en la capa dieléctrica $[-d_i, 0]$ y en la placa metálica $[0, d_m]$, y obtendremos las matrices de transferencia correspondientes.

3.2 Capa dieléctrica

Primeramente analizaremos las ecuaciones de Maxwell en la capa dieléctrica $[-d_i, 0]$ con permitividad ε_i y permeabilidad $\mu_i = 1$, donde ellas toman la siguiente forma

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\varepsilon_i}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (3.6a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}. \quad (3.6b)$$

De acuerdo con la polarización (3.2), las ecuaciones de Maxwell para las componentes no cero de los rotacionales de los campos son

$$\frac{dH(x)}{dx} = i \frac{\omega \varepsilon_i}{c} E(x), \quad (3.7a)$$

$$\frac{dE(x)}{dx} = i \frac{\omega}{c} H(x). \quad (3.7b)$$

Eliminamos el campo magnético $H(x)$ de estas dos ecuaciones, e introducimos el número de onda en el vacío k y en el dieléctrico k_i ,

$$k = \omega/c, \quad k_i = \omega\sqrt{\varepsilon_i}/c. \quad (3.8)$$

Como resultado, obtenemos la ecuación de onda a la cual debe satisfacer el campo eléctrico $E(x)$, y además, reescribimos la ecuación para el campo magnético $H(x)$,

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k_i^2\right)E(x) = 0, \quad (3.9a)$$

$$H(x) = -ik^{-1}E'(x), \quad (3.9b)$$

donde el apóstrofo denota derivación con respecto a la coordenada x . Como podemos observar, la ecuación (3.9a) es una ecuación diferencial homogénea de segundo orden con coeficientes constantes. Por esto, la solución general de las ecuaciones (3.9) es la siguiente

$$E(x) = A \exp[ik_i(x + d_i)] + B \exp[-ik_i(x + d_i)], \quad (3.10a)$$

$$H(x) = A \frac{k_i}{k} \exp[ik_i(x + d_i)] - B \frac{k_i}{k} \exp[-ik_i(x + d_i)]. \quad (3.10b)$$

Para determinar de manera completa esta solución es necesario especificar las constantes A y B . Primero, con ayuda de las ecuaciones (3.10) es relativamente simple expresar las amplitudas A y B en términos de los valores de frontera de los campos eléctrico $E(0)$ y magnético $H(0)$. De la misma manera podemos expresar las constantes A y B en términos de los valores de frontera de los campos eléctrico $E(-d_i)$ y magnético $H(-d_i)$. Como resultado útil, tenemos

$$\begin{aligned} A &= \frac{E(-d_i) + kk_i^{-1}H(-d_i)}{2} = \frac{E(0) + kk_i^{-1}H(0)}{2} \exp(-ik_id_i) \\ &= \frac{k}{k_i} \frac{H(0) - H(-d_i) \exp(-ik_id_i)}{2i \sin(k_id_i)}, \end{aligned} \quad (3.11a)$$

$$\begin{aligned} B &= \frac{E(-d_i) - kk_i^{-1}H(-d_i)}{2} = \frac{E(0) - kk_i^{-1}H(0)}{2} \exp(ik_id_i) \\ &= \frac{k}{k_i} \frac{H(0) - H(-d_i) \exp(ik_id_i)}{2i \sin(k_id_i)}. \end{aligned} \quad (3.11b)$$

Sustituimos las ecuaciones (3.11) en la solución (3.10) y obtenemos otra forma para la distribución del campo electromagnético en la capa dieléctrica,

$$E(x) = -\frac{ik}{k_i} \frac{H(0) \cos[k_i(x + d_i)] - H(-d_i) \cos(k_i x)}{\sin(k_i d_i)}, \quad (3.12a)$$

$$H(x) = \frac{H(0) \sin[k_i(x + d_i)] - H(-d_i) \sin(k_i x)}{\sin(k_i d_i)}, \quad (3.12b)$$

para $-d_i \leq x \leq 0$.

Esta presentación es más apropiada para nuestro estudio. Particularmente, aplicando la distribución (3.12), se puede obtener la relación matricial (3.5a) entre los valores de los campos eléctrico y magnético en las dos fronteras opuestas, $x = -d_i$ y $x = 0$, de la capa dieléctrica. De tal manera, llegamos a la forma explícita para la matriz de transferencia \hat{D} a través de capa dieléctrica,

$$\hat{D} = \begin{pmatrix} \tilde{Z}_{-d_i}/\tilde{Z}_0 & -(\tilde{Z}_{-d_i}^2 - \tilde{Z}_0^2)/\tilde{Z}_0 \\ -1/\tilde{Z}_0 & \tilde{Z}_{-d_i}/\tilde{Z}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(k_i d_i) & \frac{ik}{k_i} \sin(k_i d_i) \\ \frac{ik_i}{k} \sin(k_i d_i) & \cos(k_i d_i) \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Nótese que la matriz de transferencia \hat{D} es una matriz unimodular, i.e. su determinante es igual a la unidad,

$$\det \hat{D} = D_{11}D_{22} - D_{12}D_{21} = 1. \quad (3.14)$$

En la primera expresión para la matriz \hat{D} de la ecuación (3.13), hemos introducido las impedancias adimensionales \tilde{Z}_{-d_i} y \tilde{Z}_0 de las fronteras, respectivamente, $x = -d_i$ y $x = 0$ de la capa dieléctrica que están definidas por las fórmulas

$$\tilde{Z}_{-d_i} = \frac{ik \cos(k_i d_i)}{k_i \sin(k_i d_i)}; \quad \tilde{Z}_0 = \frac{ik}{k_i} \frac{1}{\sin(k_i d_i)}. \quad (3.15)$$

Es importante destacar que las impedancias \tilde{Z}_{-d_i} y \tilde{Z}_0 y, consiguientemente, la matriz \hat{D} no dependen de las coordenadas $x = -d_i$ y $x = 0$ de las fronteras de la capa dieléctrica $[-d_i, 0]$, i.e. no dependen de la posición de la capa. Ellas dependen sólo de sus características electromagnéticas, de la permitividad ε_i , y de su espesor d_i . En vista de que todas las capas dieléctricas tienen las mismas cantidades ε_i y d_i , las fórmulas obtenidas (3.13) y (3.15) describen las propiedades electromagnéticas de cualquier capa dieléctrica en el arreglo periódico estudiado.

3.3 Ecuaciones de Maxwell para la placa metálica

Como sabemos, la característica específica de los metales es una alta densidad N de portadores libres de carga, es decir, los electrones de conducción. Entonces la diferencia entre un metal y otro está en el número (densidad) de electrones libres y en la naturaleza de la red cristalina. La densidad típica en metales es del orden de uno por átomo o $N \sim 10^{22} - 10^{23}$ partículas por centímetro cúbico. Por lo tanto las propiedades electromagnéticas de los metales están determinadas por el comportamiento del gas de Fermi de los electrones de conducción en un campo de alta frecuencia. Debido a la alta densidad N de los electrones el metal posee una gran conductividad eléctrica σ , la cual puede ser considerada como un gran parámetro con dimensión de frecuencia. También, como consecuencia de la alta N , la frecuencia de plasma ω_p del gas de electrones alcanza valores altos del orden de $10^{15} - 10^{16} s^{-1}$,

$$\omega_p = \left(\frac{4\pi N e^2}{m} \right)^{1/2}. \quad (3.16)$$

Aquí, e es el valor absoluto de la carga electrónica ($e > 0$) y m es la masa efectiva del electrón. De tal modo, las ecuaciones de Maxwell en metales incluyen la densidad de la corriente eléctrica \mathbf{j} de electrones de conducción y se escriben en la forma general como

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (3.17a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}. \quad (3.17b)$$

Como ya se había mencionado al principio, estamos considerando el caso de polarización s (o, TE) para el campo electromagnético monocromático (3.2). Por esto suponemos que la corriente eléctrica \mathbf{j} , así como el campo eléctrico \mathbf{E} , contiene sólo la componente y que en la aproximación lineal con respecto a \mathbf{E} también es monocromática,

$$\mathbf{j}(x, t) = \{0, j(x), 0\} \exp(-i\omega t). \quad (3.18)$$

Entonces las componentes no nulas de los campos eléctrico y magnético rotacionales deben obedecer las ecuaciones:

$$\frac{dH(x)}{dx} = -\frac{4\pi}{c} j(x) + i\frac{\omega}{c} E(x), \quad (3.19a)$$

$$\frac{dE(x)}{dx} = i\frac{\omega}{c} H(x). \quad (3.19b)$$

Derivando la segunda ecuación con respecto de x y, después, sustituyendo el resultado en la primera ecuación se obtiene la ecuación para la distribución del campo eléctrico en metal,

$$\frac{d^2 E(x)}{dx^2} + k^2 E(x) + \frac{4\pi i k^2}{\omega} j(x) = 0. \quad (3.20)$$

Esta ecuación debe resolverse encontrando la densidad de corriente $j(x)$ en el intervalo de la placa metálica $(0, d_m)$. Para encontrar la densidad de corriente es conveniente utilizar la ecuación cinética de Boltzmann, sobre la cual discutimos a continuación.

3.4 Ecuación cinética y su solución

El cálculo de la densidad de corriente eléctrica con el formalismo de la ecuación cinética es conveniente porque permite el estudio de los fenómenos de transporte clásico y semiclásico en metales [49]. La ecuación cinética se escribe en términos de la función de distribución electrónica $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ fuera de equilibrio en el espacio fase (\mathbf{r}, \mathbf{p}) . Es bien conocido que, por un lado, el cambio total de $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ con el tiempo está dado por la derivada total df/dt . Por otro lado, en un proceso cinético este cambio ocurre como resultado de las colisiones de los electrones con otros electrones, fonones, impurezas y otras imperfecciones del bulto metálico (es decir, defectos estructurales). Por lo tanto la forma general de la ecuación cinética es

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \frac{d\mathbf{r}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \frac{d\mathbf{p}}{dt} = I(f), \quad (3.21)$$

donde $I(f)$ es la llamada integral de colisiones la cual depende de los procesos de dispersión electrónica. El modelo fenomenológico más simple para la integral de colisiones se escribe como

$$I(f) = -\frac{f - f_F}{\tau}. \quad (3.22)$$

A pesar de su simplicidad, este modelo toma en cuenta las propiedades generales de la integral de colisiones. Específicamente, los procesos de dispersión electrónica se describen con un solo parámetro fenomenológico $\tau = \nu^{-1} > 0$ que juega el papel del tiempo de relajación para el establecimiento del equilibrio. Correspondientemente, su valor inverso ν es la frecuencia de colisiones electrónicas con las imperfecciones del bulto metálico. La integral de colisiones (3.22) se determina de la desviación de la función de distribución $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ con respecto de su valor en el equilibrio, es decir, de la función de Fermi-Dirac que depende explícitamente sólo de la energía electrónica ϵ y contiene como parámetros la

energía de Fermi ϵ_F y la temperatura T ,

$$f_F(\epsilon) = \{\exp[(\epsilon - \epsilon_F)/T] + 1\}^{-1}. \quad (3.23)$$

Por tanto, la integral de colisiones es naturalmente cero para el sistema que está en equilibrio, o sea cuando $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = f_F$. De tal modo las colisiones constituyen el mecanismo para alcanzar el equilibrio estadístico. También hay que mencionar que el modelo (3.22) es isótropo y según este los electrones se dispersan elásticamente (es decir, la energía no cambia después de una colisión). El modelo (3.22) es conocido como aproximación τ para la integral de colisiones. Es evidente que en el campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ la fuerza que actúa sobre los electrones es $d\mathbf{p}/dt = -e\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ y la ecuación cinética en la aproximación τ adquiere la forma:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - e\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f - f_F}{\tau}. \quad (3.24)$$

Aquí, $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt = \partial\epsilon/\partial\mathbf{p}$ es la velocidad de los electrones. La corriente eléctrica se expresa en términos de la función de distribución electrónica $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ con ayuda de la fórmula siguiente

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (3.25)$$

Gracias a la alta densidad electrónica N , el campo eléctrico en el metal siempre tiene un valor pequeño, así que los electrones de conducción siempre están en el estado de cuasi-equilibrio. Esto significa que su función de distribución es casi la función de Fermi-Dirac (3.23). En otras palabras, en el metal la diferencia $f - f_F$ es siempre una pequeña corrección: $|f - f_F| \ll f_F$. Regresando a nuestro problema, tomemos una placa de metal como se muestra en la Fig. 3.2, la que ocupa el espacio restringido según las desigualdades

$$0 \leq x \leq d_m, \quad -\infty < y, z < \infty. \quad (3.26)$$

Para resolver la ecuación (3.20) y obtener el campo eléctrico en la placa metálica, nuestro principal problema ahora es determinar la densidad de corriente (3.18). Con este fin buscaremos la función de distribución en la siguiente forma:

$$f(x, \mathbf{v}, t) = f_F(\epsilon) + \frac{\partial f_F}{\partial \epsilon} \chi(x, \mathbf{v}) \exp(-i\omega t). \quad (3.27)$$

Aquí, el segundo término del lado derecho es la pequeña adición lineal fuera de equilibrio a la función de distribución de Fermi $f_F(\epsilon)$, ($|\chi(x, \mathbf{v})| \ll \epsilon_F$). En virtud de que el campo electromagnético depende sólo de la coordenada x y es monocromático con una dependencia

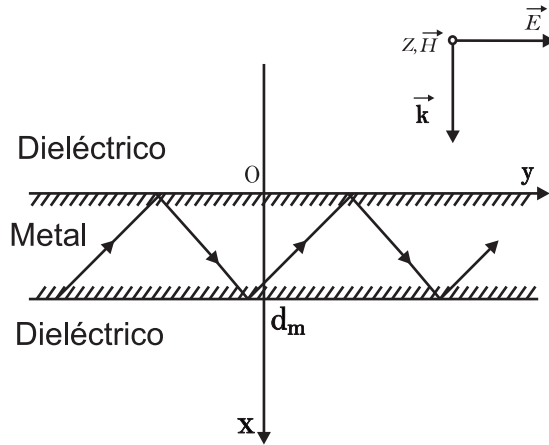


Figura 3.2: Trayectoria de los electrones en la placa metálica.

del tiempo t como $\exp(-i\omega t)$, es evidente que la corrección fuera de equilibrio también debe depender sólo de x y debe ser proporcional al factor $\exp(-i\omega t)$. Para obtener la expresión general de la componente y de la corriente eléctrica (3.18) en nuestro problema, es necesario sustituir la expresión (3.27) en la fórmula (3.25). La integral del primer término, con $f_F(\epsilon)$, de (3.27) se anula porque no existe ninguna corriente en el estado de equilibrio. Obtenemos

$$j(x) = -\frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p v_y \frac{\partial f_F}{\partial \epsilon} \chi(x, \mathbf{v}). \quad (3.28)$$

De tal modo, nuestro problema se reduce a calcular la función $\chi(x, \mathbf{v})$. Sustituimos (3.27) en (3.24) y encontramos que en la aproximación lineal con respecto al campo eléctrico $E(x)$ la función $\chi(x, \mathbf{v})$ debe obedecer la siguiente ecuación

$$v_x \frac{d\chi(x, \mathbf{v})}{dx} + (\nu - i\omega)\chi(x, \mathbf{v}) = ev_y E(x). \quad (3.29)$$

Aquí, como se puede ver en la Fig. 3.2, v_x es la velocidad de los electrones en la dirección del eje x dentro de la capa metálica. Por lo tanto, para tomar explícitamente en cuenta la dirección del movimiento del electrón dentro de la capa, introducimos dos funciones $\chi_+(x, |v_x|) = \chi(x, v_x > 0)$ y $\chi_-(x, |v_x|) = \chi(x, v_x < 0)$ con velocidades positivas y negativas: $v_x = \pm |v_x|$. Con esta convención la ecuación (3.29) toma la forma

$$\frac{d\chi_{\pm}(x, |v_x|)}{dx} \pm \gamma \chi_{\pm}(x, |v_x|) = \pm e \frac{v_y}{|v_x|} E(x), \quad \gamma = (\nu - i\omega)/|v_x|. \quad (3.30)$$

La última ecuación (3.30) es una ecuación diferencial lineal no-homogénea de primer orden.

Sus soluciones generales son las siguientes

$$\chi_+(x, |v_x|) = e^{\frac{v_y}{|v_x|} x} \int_0^x dx' E(x') \exp[-\gamma(x-x')] + \chi_+(0, |v_x|) \exp(-\gamma x), \quad (3.31a)$$

$$\chi_-(x, |v_x|) = e^{\frac{v_y}{|v_x|} x} \int_x^{d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x'-x)] + \chi_-(d_m, |v_x|) \exp[-\gamma(d_m-x)]. \quad (3.31b)$$

Aquí, las constantes arbitrarias $\chi_+(0, |v_x|)$ y $\chi_-(d_m, |v_x|)$ se eligen de tal manera que ellas coincidan con los valores de las funciones $\chi_+(x, |v_x|)$ y $\chi_-(x, |v_x|)$ sobre las fronteras de la placa metálica $x = 0$ y $x = d_m$, respectivamente. Para determinar totalmente estas constantes, establecemos las condiciones de frontera

$$\chi_+(0, |v_x|) = \rho \chi_-(0, |v_x|), \quad (3.32a)$$

$$\chi_-(d_m, |v_x|) = \rho \chi_+(d_m, |v_x|). \quad (3.32b)$$

Desde el punto de vista del proceso físico, las condiciones de frontera a la ecuación cinética describen la interacción de los electrones con las superficies metálicas. Las condiciones (3.32) representan un modelo fenomenológico, en el que la dispersión superficial de los electrones se describe con el parámetro de la especularidad ρ . Si los electrones se reflejan especularmente de la superficie metálica, el parámetro $\rho = 1$. Para la reflexión difusa $\rho = 0$. Entonces, en el caso general de reflexión superficial arbitraria $0 \leq \rho \leq 1$. Evaluando las condiciones de frontera (3.32), para las soluciones generales (3.31) obtenemos dos ecuaciones algebraicas con respecto a las constantes arbitrarias $\chi_+(0, |v_x|)$ y $\chi_-(d_m, |v_x|)$,

$$\chi_+(0, |v_x|) - \rho \exp(-\gamma d_m) \chi_-(d_m, |v_x|) = \rho e^{\frac{v_y}{|v_x|} d_m} \int_0^{d_m} dx' E(x') \exp(-\gamma x'), \quad (3.33a)$$

$$-\rho \exp(-\gamma d_m) \chi_+(0, |v_x|) + \chi_-(d_m, |v_x|) = \rho e^{\frac{v_y}{|v_x|} d_m} \int_0^{d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(d_m-x')]. \quad (3.33b)$$

Sus soluciones son

$$\begin{aligned} \chi_+(0, |v_x|) = & e^{\frac{v_y}{|v_x|} 0} \left[\frac{\rho}{1 - \rho^2 \exp(-2\gamma d_m)} \int_0^{d_m} dx' E(x') \exp(-\gamma x') \right. \\ & \left. + \frac{\rho^2 \exp(-2\gamma d_m)}{1 - \rho^2 \exp(-2\gamma d_m)} \int_0^{d_m} dx' E(x') \exp(\gamma x') \right], \end{aligned} \quad (3.34a)$$

$$\begin{aligned} \chi_-(d_m, |v_x|) = & e^{\frac{v_y}{|v_x|} d_m} \left[\frac{\rho \exp(-\gamma d_m)}{1 - \rho^2 \exp(-2\gamma d_m)} \int_0^{d_m} dx' E(x') \exp(\gamma x') \right. \\ & \left. + \frac{\rho^2 \exp(-\gamma d_m)}{1 - \rho^2 \exp(-2\gamma d_m)} \int_0^{d_m} dx' E(x') \exp(-\gamma x') \right]. \end{aligned} \quad (3.34b)$$

Con estos valores podemos escribir finalmente de manera general la suma de las soluciones de la ecuación cinética (3.30):

$$\chi_+(x, |v_x|) + \chi_-(x, |v_x|) = e^{\frac{v_y}{|v_x|}} I(x, |v_x|), \quad (3.35a)$$

$$\begin{aligned} I(x, |v_x|) &= \int_0^x dx' E(x') \exp[-\gamma(x-x')] + \int_x^{d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x'-x)] \\ &+ \frac{\rho}{1-\rho^2 \exp(-2\gamma d_m)} \int_0^{d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x+x')] \\ &+ \frac{\rho^2 \exp(-2\gamma d_m)}{1-\rho^2 \exp(-2\gamma d_m)} \int_0^{d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x-x')] \\ &+ \frac{\rho \exp(-2\gamma d_m)}{1-\rho^2 \exp(-2\gamma d_m)} \int_0^{d_m} dx' E(x') \exp[\gamma(x+x')] \\ &+ \frac{\rho^2 \exp(-2\gamma d_m)}{1-\rho^2 \exp(-2\gamma d_m)} \int_0^{d_m} dx' E(x') \exp[\gamma(x-x')]. \end{aligned} \quad (3.35b)$$

Es importante enfatizar que la solución (3.35) es aplicable en el caso general de reflexión superficial de electrones arbitraria, cuando $0 \leq \rho \leq 1$.

3.5 Cálculo de la densidad de corriente eléctrica

Para calcular la corriente electrónica $j(x)$ en la capa metálica, hay que especificar las características básicas de los electrones. Por simplicidad, vamos a suponer que la ley de dispersión de los electrones es cuadrática e isotrópica,

$$\epsilon = \mathbf{p}^2/2m = m\mathbf{v}^2/2, \quad \mathbf{p} = m\mathbf{v}. \quad (3.36)$$

Luego, como es conocido, en el metal la energía de Fermi ϵ_F siempre es mucho mayor que la temperatura T , $\epsilon_F \gg T$. Por lo tanto, la derivada de la función de Fermi-Dirac con respecto a la energía, $\partial f_F/\partial\epsilon$, puede cambiarse por la función delta de Dirac,

$$-\frac{\partial f_F}{\partial\epsilon} = \delta(\epsilon - \epsilon_F) = 2m \delta(p_t^2 - [p_F^2 - p_x^2]), \quad p_F = \sqrt{2m\epsilon_F}. \quad (3.37)$$

Este cambio nos dice que en fenómenos cinéticos metálicos la energía electrónica se conserva y es igual a la energía de Fermi, $\epsilon = \epsilon_F$, o que es lo mismo, el valor del momentum total de los electrones es igual al momentum de Fermi, $|\mathbf{p}| = p_F$. Además, en el espacio del momentum vamos a introducir las coordenadas cilíndricas $\{p_x, p_t, \varphi\}$,

$$p_y = mv_y = p_t \cos \varphi, \quad p_z = mv_z = p_t \sin \varphi, \quad \epsilon = (p_x^2 + p_t^2)/2m, \quad d^3p = dp_x p_t dp_t d\varphi. \quad (3.38)$$

Tomando en cuenta las expresiones (3.36) – (3.38), podemos escribir la densidad de corriente (3.28) de la manera siguiente

$$j(x) = \frac{4e}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x \int_0^{\infty} dp_t p_t^2 \delta(p_t^2 - [p_F^2 - p_x^2]) \int_0^{2\pi} d\varphi \cos \varphi \chi(x, v_x). \quad (3.39)$$

Ahora, aprovechando la función delta podemos evaluar la integral respecto de p_t , es decir

$$j(x) = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-p_F}^{p_F} dp_x p_t \int_0^{2\pi} d\varphi \cos \varphi \chi(x, v_x). \quad (3.40)$$

Aquí, el momentum electrónico tangencial p_t toma el valor

$$p_t = \sqrt{p_F^2 - p_x^2}. \quad (3.41)$$

Este valor es el cero del argumento de la delta de Dirac dentro del intervalo de integración de p_t si el momentum normal p_x toma sus valores en el intervalo $-p_F < p_x < p_F$. De tal modo la integración sobre p_t con la delta de Dirac también acorta el intervalo de integración sobre p_x . Vamos a dividir el intervalo de integración sobre p_x en dos intervalos, $(-p_F, 0)$ y $(0, p_F)$. Es evidente que en el primer intervalo hay que sustituir la función $\chi(x, v_x < 0) = \chi_-(x, |v_x|)$ y en el segundo $\chi(x, v_x > 0) = \chi_+(x, |v_x|)$,

$$j(x) = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \cos \varphi \left[\int_{-p_F}^0 dp_x p_t \chi_-(x, |v_x|) + \int_0^{p_F} dp_x p_t \chi_+(x, |v_x|) \right]. \quad (3.42)$$

Haciendo en la primera integral el cambio de la variable de integración $p_x \rightarrow -p_x$, obtenemos

$$j(x) = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{p_F} dp_x p_t \int_0^{2\pi} d\varphi \cos \varphi [\chi_+(x, |v_x|) + \chi_-(x, |v_x|)]. \quad (3.43)$$

Ahora es el momento de sustituir en el expresión (3.43) la fórmula (3.35a), aplicar la notación (3.38) para la velocidad v_y y evaluar la integral sobre φ tomando en cuenta que $I(x, |v_x|)$ no depende del ángulo φ . Obtenemos

$$j(x) = \frac{2\pi e^2}{(2\pi\hbar)^3 m} \int_0^{p_F} dp_x \frac{p_t^2}{|v_x|} I(x, |v_x|). \quad (3.44)$$

Introducimos las nuevas notaciones,

$$n_x = |p_x|/p_F = |v_x|/v_F = |v_x|m/p_F, \quad n_t = p_t/p_F = \sqrt{1 - n_x^2}. \quad (3.45)$$

Con estas notaciones la densidad de la corriente se escribe como

$$j(x) = \frac{2\pi e^2 p_F^2}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^1 dn_x \frac{n_t^2}{n_x} I(x, v_F n_x). \quad (3.46)$$

Para obtener la fórmula final de la densidad de la corriente en el caso general, es muy útil rememorar las expresiones para la conductividad clásica σ_{cl} , la longitud de recorrido efectiva l_ω y la densidad N de electrones en el metal,

$$\sigma_{cl} = \frac{p_F^3 e^2}{3\pi^2 \hbar^3 m(\nu - i\omega)} = \frac{\omega_p^2}{4\pi(\nu - i\omega)}, \quad l_\omega = \frac{v_F}{\nu - i\omega}, \quad N = \frac{p_F^3}{3\pi^2 \hbar^3}. \quad (3.47)$$

donde ω_p es la frecuencia de plasma de los electrones de conducción (3.16).

Entonces, combinado estas definiciones (3.47) junto con la ecuación (3.46), la podemos reescribir de la manera final

$$j(x) = \frac{3\sigma_{cl}}{4l_\omega} \int_0^1 dn_x \frac{n_x^2}{n_x} I(x, v_F n_x). \quad (3.48)$$

La expresión obtenida es un resultado completamente general, en el cual sólo basta sustituir la función $I(x, v_F n_x)$ que es descrita por la fórmula (3.35b).

3.6 Caso de reflexión especular.

De acuerdo con (3.35b) en el caso de reflexión especular de los electrones ($\rho = 1$) la integral $I(x, |v_x|)$ adquiere la forma

$$\begin{aligned} I(x, |v_x|) &= \int_0^x dx' E(x') \exp[-\gamma(x - x')] + \int_x^{d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x' - x)] \\ &+ \int_0^{d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x + x')] \\ &+ \frac{\exp(-2\gamma d_m)}{1 - \exp(-2\gamma d_m)} \int_0^{d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x + x')] \\ &+ \frac{\exp(-2\gamma d_m)}{1 - \exp(-2\gamma d_m)} \int_0^{d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x - x')] \\ &+ \frac{\exp(-2\gamma d_m)}{1 - \exp(-2\gamma d_m)} \int_0^{d_m} dx' E(x') \exp[\gamma(x + x')] \\ &+ \frac{\exp(-2\gamma d_m)}{1 - \exp(-2\gamma d_m)} \int_0^{d_m} dx' E(x') \exp[\gamma(x - x')]. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Desde el punto de vista físico, esta expresión tiene un aspecto muy extraño porque depende del espesor de la capa metálica d_m . Realmente, en el caso cuando el electron choca con superficie metálica de manera especular, las componentes de su momentum p_y y velocidad v_y las cuales determinan la corriente eléctrica no son afectadas, mientras que las componetes p_x y v_x cambian sólo su signo (pero estas no son modificadas en su magnitud). De tal modo,

podemos concluir que la placa metálica con fronteras especulares debe tener la misma densidad de corriente eléctrica que tiene un metal infinito. Cabe mencionar que tal conclusión es congruente con los resultados de los modelos SRM (Specular Reflection Model [50, 51]) y SCIB (Semi-Classical Infinite Barrier [52, 53]). Considerando lo anterior en el régimen no local, transformaremos la expresión (3.49) a una forma más simple tal que no dependa explícitamente del espesor d_m . Recordemos que en (3.49) la coordenada x está restringida por la desigualdad (3.26), $0 \leq x \leq d_m$. En virtud de que en (3.49) el campo eléctrico $E(x)$ está determinado sólo dentro del intervalo $0 \leq x \leq d_m$, podemos continuarlo al intervalo $-d_m \leq x \leq 0$ como una función par, $E(-x) = E(x)$. Después, en las tercera, cuarta y sexta integrales cambiamos $x' \rightarrow -x'$, para obtener

$$\begin{aligned}
I(x, |v_x|) &= \int_0^x dx' E(x') \exp[-\gamma(x-x')] + \int_x^{d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x'-x)] \\
&+ \int_{-d_m}^0 dx' E(x') \exp[-\gamma(x-x')] \\
&+ \frac{\exp(-2\gamma d_m)}{1 - \exp(-2\gamma d_m)} \int_{-d_m}^{d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x-x')] \\
&+ \frac{\exp(-2\gamma d_m)}{1 - \exp(-2\gamma d_m)} \int_{-d_m}^{d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x'-x)]. \tag{3.50}
\end{aligned}$$

Transformemos los dos últimos términos como

$$\begin{aligned}
I(x, |v_x|) &= \int_0^x dx' E(x') \exp[-\gamma(x-x')] + \int_x^{d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x'-x)] \\
&+ \int_{-d_m}^0 dx' E(x') \exp[-\gamma(x-x')] \\
&+ \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-d_m}^{d_m} dx' E(x') \exp\{-\gamma[x-x'+2d_m(n+1)]\} \\
&+ \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-d_m}^{d_m} dx' E(x') \exp\{-\gamma[x'-x+2d_m(n+1)]\}. \tag{3.51}
\end{aligned}$$

Considerando $E(x)$ como una función periódica con el período $2d_m$, es decir $E(x+2nd_m) = E(x)$, en el cuarto término hacemos el cambio $x' - 2d_m(n+1) \rightarrow x'$ y en el quinto término

$x' + 2d_m(n+1) \rightarrow x'$. Finalmente, se tiene

$$\begin{aligned}
 I(x, |v_x|) &= \int_0^x dx' E(x') \exp[-\gamma(x-x')] + \int_x^{d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x'-x)] \\
 &+ \int_{-d_m}^0 dx' E(x') \exp[-\gamma(x-x')] \\
 &+ \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-d_m-2(n+1)d_m}^{-d_m-2nd_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x-x')] \\
 &+ \sum_{n=0}^{\infty} \int_{d_m+2nd_m}^{d_m+2(n+1)d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x'-x)]. \tag{3.52}
 \end{aligned}$$

Es evidente que las sumas de las integrales en los dos últimos términos pueden expresarse explícitamente como

$$\begin{aligned}
 I(x, |v_x|) &= \int_0^x dx' E(x') \exp[-\gamma(x-x')] + \int_x^{d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x'-x)] \\
 &+ \int_{-d_m}^0 dx' E(x') \exp[-\gamma(x-x')] + \int_{-\infty}^{-d_m} dx' E(x') \exp[-\gamma(x-x')] \\
 &+ \int_{d_m}^{\infty} dx' E(x') \exp[-\gamma(x'-x)] \\
 &= \int_{-\infty}^x dx' E(x') \exp[-\gamma(x-x')] + \int_x^{\infty} dx' E(x') \exp[-\gamma(x'-x)]. \tag{3.53}
 \end{aligned}$$

Por último, la expresión para $I(x, |v_x|)$ se reescribe en la forma

$$\begin{aligned}
 I(x, |v_x|) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' E(x') \exp(-\gamma|x-x'|), \quad 0 \leq x \leq d_m, \\
 E(-x) &= E(x), \quad E(x \pm 2d_m) = E(x). \tag{3.54}
 \end{aligned}$$

Ahora sustituimos la fórmula obtenida (3.54) en la expresión general (3.48) para la densidad de corriente eléctrica y llegamos al resultado que es aplicable en el caso de reflexión especular de los electrones,

$$j(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \sigma(x-x') E(x'). \tag{3.55}$$

Aquí, el kernel integral del operador de la conductividad se escribe como

$$\sigma(x) = \frac{3\sigma_{cl}}{4l_\omega} \int_0^1 dn_x \frac{n_t^2}{n_x} \exp\left(-\frac{|x|}{l_\omega n_x}\right), \quad \sigma(-x) = \sigma(x). \tag{3.56}$$

Podemos observar que las fórmulas (3.55), (3.56) son completamente similares a las del caso del modelo del metal infinito. Volvamos a la ecuación de Maxwell (3.20). Sustituuyamos

en esta ecuación la densidad de corriente eléctrica (3.55). La ecuación de Maxwell toma la forma:

$$\frac{d^2 E(x)}{dx^2} + k^2 E(x) - \frac{k^2 \omega_p^2}{\omega(\omega + i\nu)} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \Xi(x - x') E(x') = 0. \quad (3.57)$$

Aquí, hemos introducido la conductividad adimensional de acuerdo con la definición siguiente

$$\Xi(x) = \frac{\sigma(x)}{\sigma_{cl}} = \frac{3}{4l_\omega} \int_0^1 dn_x \frac{n_t^2}{n_x} \exp\left(-\frac{|x|}{l_\omega n_x}\right), \quad \Xi(-x) = \Xi(x). \quad (3.58)$$

3.6.1 Representación de Fourier. Distribución del campo electromagnético.

Debido a que la ecuación de Maxwell (3.57) es una ecuación diferencial-integral con el kernel (3.58) que depende sólo de la diferencia de los argumentos $x - x'$ y los límites integrales son infinitos, para resolverla es conveniente aplicar el método de representación de Fourier. De acuerdo con las propiedades de la paridad y periodicidad (3.54), emplearemos la representación discreta, es decir presentamos el campo eléctrico como

$$\begin{aligned} E(x) &= \frac{1}{2d_m} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(k_s) \exp(ik_s x) = \frac{1}{2d_m} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(k_s) \cos(k_s x) \\ &= \frac{1}{2d_m} \mathcal{E}(0) + \frac{1}{d_m} \sum_{s=1}^{\infty} \mathcal{E}(k_s) \cos(k_s x), \end{aligned} \quad (3.59a)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(k_s) &= \int_{-d_m}^{d_m} dx E(x) \exp(-ik_s x) = \int_{-d_m}^{d_m} dx E(x) \cos(k_s x) \\ &= 2 \int_0^{d_m} dx E(x) \cos(k_s x). \end{aligned} \quad (3.59b)$$

Cabe notar que la transformada de Fourier $\mathcal{E}(k_s)$ tiene la propiedad de paridad,

$$\mathcal{E}(k_{-s}) = \mathcal{E}(-k_s) = \mathcal{E}(k_s), \quad k_s = \pi s/d_m. \quad (3.60)$$

También, reescribamos algunas fórmulas útiles para la función delta de Dirac y el símbolo delta de Kronecker,

$$\begin{aligned} 2d_m \delta(x - x') &= \sum_{s=-\infty}^{\infty} \exp[ik_s(x - x')] = \sum_{s=-\infty}^{\infty} \cos[k_s(x - x')] \\ &= 1 + 2 \sum_{s=1}^{\infty} \cos[k_s(x - x')], \end{aligned} \quad (3.61a)$$

$$\begin{aligned}
 2d_m \delta_{s,s'} &= \int_{-d_m}^{d_m} dx \exp[-i(k_s - k_{s'})x] = \int_{-d_m}^{d_m} dx \cos[(k_s - k_{s'})x] \\
 &= 2 \int_0^{d_m} dx \cos[(k_s - k_{s'})x].
 \end{aligned} \tag{3.61b}$$

Adicionalmente, introducimos la “transformada” de Fourier $\mathcal{K}(k_s)$ de la conductividad adimensional $\Xi(x)$,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{K}(k_s) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Xi(x) \exp(-ik_s x) = 2 \int_0^{\infty} dx \Xi(x) \cos(k_s x) = \frac{3}{2} \int_0^1 dn_x \frac{n_t^2}{1 + (k_s l_\omega n_x)^2} \\
 &= \frac{3}{2} \left\{ \left[\frac{1}{k_s l_\omega} + \frac{1}{(k_s l_\omega)^3} \right] \arctan(k_s l_\omega) - \frac{1}{(k_s l_\omega)^2} \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.62}$$

Es evidente que la “transformada” de Fourier $\mathcal{K}(k_s)$ es una función par,

$$\mathcal{K}(k_{-s}) = \mathcal{K}(-k_s) = \mathcal{K}(k_s). \tag{3.63}$$

Ahora, apliquemos a ambas partes de la ecuación (3.57) el operador integral $2 \int_0^{d_m} dx \cos(k_s x) \dots$, también en el último término de (3.57) utilicemos la expresión (3.59a) para el campo eléctrico $E(x')$,

$$\begin{aligned}
 2 \int_0^{d_m} dx \frac{d^2 E(x)}{dx^2} \cos(k_s x) + k^2 \mathcal{E}(k_s) - \frac{k^2 \omega_p^2}{\omega(\omega + i\nu)} \frac{1}{d_m} \sum_{s'=-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(k_{s'}) \times \\
 \times \int_0^{d_m} dx \cos(k_s x) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \Xi(x - x') \exp(ik_{s'} x') = 0.
 \end{aligned} \tag{3.64}$$

Integramos dos veces por partes el primer término de esta ecuación, obtenemos

$$2 \int_0^{d_m} dx \frac{d^2 E(x)}{dx^2} \cos(k_s x) = 2E'(d_m) \cos(k_s d_m) - 2E'(0) - k_s^2 \mathcal{E}(k_s). \tag{3.65}$$

Aquí, el apóstrofo del campo eléctrico indica la derivada con respecto a la coordenada x .

Transformamos el último término de la ecuación (3.64) de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{d_m} \sum_{s'=-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(k_{s'}) \int_0^{d_m} dx \cos(k_s x) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \Xi(x-x') \exp(ik_{s'} x') \quad (\text{cambio } x-x' \rightarrow x') \\
&= \frac{1}{d_m} \sum_{s'=-\infty}^{\infty} \mathcal{K}(k_{s'}) \mathcal{E}(k_{s'}) \int_0^{d_m} dx \cos(k_s x) \exp(ik_{s'} x) \\
&= \sum_{s'=-\infty}^{\infty} \mathcal{K}(k_{s'}) \mathcal{E}(k_{s'}) \frac{1}{2d_m} \left\{ \int_0^{d_m} dx \exp[i(k_s + k_{s'})x] + \int_0^{d_m} dx \exp[-i(k_s - k_{s'})x] \right\}, \\
& \quad (\text{en el primer término cambiamos } x \rightarrow -x, s' \rightarrow -s') \\
&= \sum_{s'=-\infty}^{\infty} \mathcal{K}(k_{s'}) \mathcal{E}(k_{s'}) \frac{1}{2d_m} \int_{-d_m}^{d_m} dx \exp[-i(k_s - k_{s'})x] \\
&= \sum_{s'=-\infty}^{\infty} \mathcal{K}(k_{s'}) \mathcal{E}(k_{s'}) \delta_{s,s'} = \mathcal{K}(k_s) \mathcal{E}(k_s). \tag{3.66}
\end{aligned}$$

Sustituyendo los resultados (3.65) y (3.66) en la ecuación (3.64), llegamos a la ecuación algebraica para la transformada de Fourier $\mathcal{E}(k_s)$,

$$\left\{ k_s^2 - k^2 \left[1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\nu)} \mathcal{K}(k_s) \right] \right\} \mathcal{E}(k_s) = 2E'(d_m) \cos(k_s d_m) - 2E'(0). \tag{3.67}$$

Entonces su solución es

$$\mathcal{E}(k_s) = \frac{2E'(d_m) \cos(k_s d_m) - 2E'(0)}{k_s^2 - k^2 \varepsilon(k_s)} = 2ik \frac{H(d_m) \cos(k_s d_m) - H(0)}{k_s^2 - k^2 \varepsilon(k_s)}. \tag{3.68}$$

De las fórmulas (3.59a), (3.68) y (3.19b) se puede ver que la distribuciones de campo eléctrico y campo magnético, respectivamente, en la placa metálica se expresan en la forma

$$E(x) = \frac{ik}{d_m} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{H(d_m) \cos[k_s(d_m - x)] - H(0) \cos(k_s x)}{k_s^2 - k^2 \varepsilon(k_s)}, \tag{3.69a}$$

$$H(x) = \frac{1}{d_m} \sum_{s=-\infty}^{\infty} k_s \frac{H(d_m) \sin[k_s(d_m - x)] + H(0) \sin(k_s x)}{k_s^2 - k^2 \varepsilon(k_s)}, \tag{3.69b}$$

para $0 \leq x \leq d_m$.

Como se deduce de estos resultados, en el caso de reflexión especular de los electrones, la capa metálica puede caracterizarse por una constante dieléctrica efectiva en la representación de Fourier,

$$\varepsilon(k_s) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\nu)} \mathcal{K}(k_s), \quad \varepsilon(k_{-s}) = \varepsilon(-k_s) = \varepsilon(k_s). \tag{3.70}$$

La dependencia de ε en función del número de onda $k_s = \pi s/d_m$ es, en sí, la respuesta de los electrones en las placas metálicas al s -ésimo modo y, por tanto, no *es una permitividad asociada con el campo electromagnético total*. La permitividad $\varepsilon(k_s)$ depende del modo del número de onda k_s via el *factor de no localidad* $\mathcal{K}(k_s l_\omega)$ (3.62). Por conveniencia del análisis posterior, hemos escrito aquí, de manera explícita, la dependencia de \mathcal{K} en función del parámetro adimensional $k_s l_\omega$. Dependiendo del número de onda k_s , el factor (3.62) define enteramente el efecto de la dispersión espacial en la permitividad de modo (3.70). Debido a esto, es importante escribir sus asíntotas,

$$\mathcal{K}(k_s l_\omega) \approx 1 - (k_s l_\omega)^2/5, \quad (k_s l_\omega)^2 \ll 1; \quad (3.71)$$

$$\mathcal{K}(k_s l_\omega) \approx 3\pi/4 |k_s l_\omega|, \quad |k_s l_\omega| \gg 1. \quad (3.72)$$

Estas expresiones muestran el efecto no local, que puede ser ignorado sólo cuando la desigualdad (3.71), es satisfecha para todos los modos que contribuyen al campo eléctrico total (3.69a). Ya que en este caso el factor de no localidad $\mathcal{K}(k_s l_\omega) \approx 1$, la permitividad $\varepsilon(k_s)$ es la misma para todos los modos y coincide con el modelo de Drude-Lorentz (2.1). En consecuencia, esta última expresión puede aplicarse en la descripción electrodinámica de una placa siempre y cuando se cumpla la condición (3.71).

3.6.2 Matriz de transferencia para la placa metálica

Con ayuda de los resultados de la subsección anterior es posible resolver el problema de transferencia a través de la placa metálica. Específicamente, en la ecuación (3.69a) ponemos $x = 0$ y, después, $x = d_m$. Las fórmulas obtenidas de tal manera, nos dan la relación matricial (3.5b) con la matriz de transferencia de la placa metálica \hat{M} en la siguiente forma explícita

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} Z_0/Z_{d_m} & -(Z_0^2 - Z_{d_m}^2)/Z_{d_m} \\ -1/Z_{d_m} & Z_0/Z_{d_m} \end{pmatrix}. \quad (3.73)$$

Nótese que la matriz de transferencia \hat{M} es una matriz unimodular, i.e. su determinante es igual a la unidad,

$$\det \hat{M} = M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21} = 1. \quad (3.74)$$

Como vemos, los elementos de la matriz de transferencia del metal \hat{M} se expresan en términos de las impedancias adimensionales Z_0 y Z_{d_m} de las fronteras metálicas $x = 0$ y $x = d_m$, respectivamente,

$$Z_0 = -\frac{ik}{d_m} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{1}{k_s^2 - k^2 \varepsilon(k_s)}, \quad (3.75a)$$

$$Z_{d_m} = -\frac{ik}{d_m} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{\cos(k_s d_m)}{k_s^2 - k^2 \varepsilon(k_s)}. \quad (3.75b)$$

La expresión (3.73) para la matriz metálica \hat{M} es similar a la expresión correspondiente para la matriz dieléctrica \hat{D} de la ecuación (3.13). La diferencia consiste sólo en las impedancias metálicas y dieléctricas.

Es importante notar que las impedancias metálicas Z_0 y Z_{d_m} y, consiguientemente, la matriz \hat{M} no dependen de las coordenadas $x = 0$ y $x = d_m$ de las fronteras de la placa metálica $[0, d_m]$, i.e. no dependen de la posición de la placa. Ellas dependen sólo de sus características electrónicas, y de su espesor d_m . En vista de que todas las placas metálicas se elaboran del mismo metal y tienen el mismo espesor d_m , las fórmulas obtenidas (3.73) y (3.75) describen las propiedades electromagnéticas de cualquier placa metálica en el arreglo periódico estudiado.

3.7 Matriz de transferencia para la celda unitaria y la relación de dispersión

Ahora, de acuerdo con las ecuaciones (3.3), (3.4) y por combinación de las expresiones para las matrices de transferencia del metal (3.73) y del dieléctrico (3.13), obtenemos

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} E(d_m) \\ H(d_m) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} Z_0/Z_{d_m} & -(Z_0^2 - Z_{d_m}^2)/Z_{d_m} \\ -1/Z_{d_m} & Z_0/Z_{d_m} \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} \cos(k_i d_i) & \frac{ik}{k_i} \sin(k_i d_i) \\ \frac{ik_i}{k} \sin(k_i d_i) & \cos(k_i d_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(-d_i) \\ H(-d_i) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.76)$$

La relación (3.76) describe la transferencia de la onda electromagnética plana a través de la celda unitaria, capa de dieléctrico – placa metálica, de nuestro arreglo periódico. Multiplicamos las matrices y, como resultado, llegamos a la forma final de la relación de

transferencia,

$$\begin{pmatrix} E(d_m) \\ H(d_m) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(-d_i) \\ H(-d_i) \end{pmatrix}, \quad (3.77)$$

donde la matriz de transferencia \hat{Q} se especifica por sus elementos,

$$Q_{11} = \frac{Z_0}{Z_{d_m}} \cos(k_i d_i) - i \frac{k_i}{k} \frac{Z_0^2 - Z_{d_m}^2}{Z_{d_m}} \sin(k_i d_i), \quad (3.78a)$$

$$Q_{12} = i \frac{k}{k_i} \frac{Z_0}{Z_{d_m}} \sin(k_i d_i) - \frac{Z_0^2 - Z_{d_m}^2}{Z_{d_m}} \cos(k_i d_i), \quad (3.78b)$$

$$Q_{21} = -\frac{1}{Z_{d_m}} \cos(k_i d_i) + i \frac{k_i}{k} \frac{Z_0}{Z_{d_m}} \sin(k_i d_i), \quad (3.78c)$$

$$Q_{22} = -i \frac{k}{k_i} \frac{1}{Z_{d_m}} \sin(k_i d_i) + \frac{Z_0}{Z_{d_m}} \cos(k_i d_i). \quad (3.78d)$$

Una propiedad muy importante del sistema que debemos notar es que la matriz de transferencia \hat{Q} es una matriz unimodular, i.e. su determinante es uno,

$$\det \hat{Q} = Q_{11}Q_{22} - Q_{12}Q_{21} = 1. \quad (3.79)$$

De hecho, en la Ref. [54] se demuestra que todos aquellos sistemas cuánticos, cuya matriz de transferencia tiene su determinante igual a uno, poseen simetría de reversión temporal. La propiedad (3.79) se sigue directamente de la definición (3.78) de la matriz de transferencia. Por otro lado, es claro que como las matrices \hat{M} y \hat{D} son unimodulares, su producto $\hat{Q} = \hat{M}\hat{D}$, también, debe ser una matriz unimodular.

Para proseguir nuestro análisis, ahora es útil recordar que estamos considerando un sistema periódico infinito, y, por esto, debemos referirnos al teorema de Bloch [55] también conocido en la teoría de ondas como el teorema de Floquet [56]. Siendo aplicado a nuestra celda unitaria $[-d_i, d_m]$, el teorema se lee

$$\begin{pmatrix} E(d_m) \\ H(d_m) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(i\gamma) & 0 \\ 0 & \exp(i\gamma) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(-d_i) \\ H(-d_i) \end{pmatrix}, \quad (3.80)$$

Aquí hemos introducido la fase de Bloch γ , la cual, por definición, es el producto del número de onda de Bloch κ y del periodo $d = d_i + d_m$ del sistema,

$$\gamma = \kappa d. \quad (3.81)$$

De la comparación directa se ve que las relaciones de transferencia (3.77) y (3.80) son complementarias. La unificación de ellas conduce al problema de eigenvectores y eigenvalores de nuestra matriz de transferencia (3.78),

$$\begin{pmatrix} Q_{11} - \lambda & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(x_n) \\ H(x_n) \end{pmatrix} = 0, \quad \lambda = \exp(i\gamma). \quad (3.82)$$

La coordenada x_n denota la frontera izquierda de la capa dieléctrica que pertenece a la n -ésima celda unitaria.

Es simple ver de la ecuación (3.82), que el exponencial de Bloch, $\exp(i\gamma)$, representa un eigenvalor λ de la matriz de transferencia \hat{Q} . Como sabemos, para que exista una solución no-trivial del problema (3.82), su determinante deber ser igual a cero, $\det\{\hat{Q} - \lambda\hat{I}\} = 0$, i.e.

$$\begin{aligned} \lambda^2 - (Q_{11} + Q_{22})\lambda + 1 = 0 & \rightarrow \lambda + \lambda^{-1} = Q_{11} + Q_{22} \\ & \rightarrow 2 \cos \gamma = Q_{11} + Q_{22}, \end{aligned} \quad (3.83a)$$

$$\lambda_{\pm} = \frac{Q_{11} + Q_{22}}{2} \pm i \sqrt{1 - \frac{(Q_{11} + Q_{22})^2}{4}} = \exp(\pm i\gamma). \quad (3.83b)$$

Para derivar la ecuación característica (3.83a), hemos aplicado la propiedad de unimodularidad (3.79).

La forma explícita de la ecuación (3.83a) se obtiene mediante la sustitución de las expresiones (3.78a) y (3.78d) para los elementos matriciales correspondientes. Como resultado, llegamos a la relación de dispersión

$$\cos \gamma = M_{11} \cos(k_i d_i) + \frac{i}{2} \left[\frac{k_i}{k} M_{12} + \frac{k}{k_i} M_{21} \right] \sin(k_i d_i), \quad \text{o, lo mismo,} \quad (3.84a)$$

$$\cos \gamma = \frac{Z_0}{Z_{d_m}} \cos(k_i d_i) - \frac{i}{2} \left[\frac{k_i}{k} \frac{Z_0^2 - Z_{d_m}^2}{Z_{d_m}} + \frac{k}{k_i} \frac{1}{Z_{d_m}} \right] \sin(k_i d_i). \quad (3.84b)$$

Esta relación describe la propagación de una onda electromagnética a través de nuestro arreglo periódico unidimensional de capas alternantes de dieléctrico y metal. Ella conecta la fase de Bloch γ con la frecuencia de onda ω y nos da la estructura espectral de bandas de transparencia y de opacidad.

En el modelo local de Drude-Lorentz la corriente eléctrica obedece la ley de Ohm $j(x) = \sigma_{cl} E(x)$ (2.10) y la constante dieléctrica $\varepsilon_{cl}(\omega)$ en este caso está dada por la ecuación

(2.1). Además, como se comentó en la subsección 3.6.1, en el marco del modelo de Drude-Lorentz, las expresiones para los campos electromagnéticos se pueden obtener a partir de las ecuaciones (3.69) si se sustituye el factor de no localidad \mathcal{K} para todos los modos normales por la unidad ($\mathcal{K}(k_s l_\omega) \rightarrow 1$). Subsecuentemente, las sumas en las definiciones de las impedancias superficiales Z_0 and Z_{d_m} (3.75) pueden ser calculadas de manera explícita, resultando en

$$Z_0^{(DL)} = iZ_m \frac{\cos \varphi_m}{\sin \varphi_m}, \quad Z_{d_m}^{(DL)} = iZ_m \frac{1}{\sin \varphi_m}, \quad (3.85)$$

con los parámetros ópticos del modelo de Drude-Lorentz de la placa metálica: permitividad $\varepsilon_m = \varepsilon(0)$ (3.70) [= $\varepsilon_{cl}(\omega)$ (2.1)], índice de refracción $n_m = \sqrt{\varepsilon_m}$, impedancia $Z_m = n_m^{-1}$, número de onda $k_m = kn_m$, y corrimiento de fase $\varphi_m = k_m d_m$. Sustituyendo las expresiones (3.85) para las impedancias superficiales Z_0 and Z_{d_m} en la relación de dispersión general (3.84) obtenemos su contraparte válida para una gran variedad de estructuras periódicas de bicapas [8, 57],

$$\cos(\gamma) = \cos \varphi_i \cos \varphi_m - \frac{1}{2} \left(\frac{Z_i}{Z_m} + \frac{Z_m}{Z_i} \right) \sin \varphi_i \sin \varphi_m, \quad (3.86)$$

donde $\varphi_i = k_i d_i$ denotan el corrimiento de fase en la placa dieléctrica y $Z_i = k/k_i$ su impedancia.

Capítulo 4

Efectos de dispersión espacial

Como ya se ha notado desde un inicio, estamos interesados en la descripción general de sistemas periódicos en los cuales el tamaño de la inclusión metálica es comparable con la profundidad de penetración de la onda, δ , que llamamos espesor de la capa pelicular, mientras que el componente dieléctrico o semiconductor en estas estructuras se modela mediante una función dieléctrica resonante. Los arreglos periódicos de esta naturaleza pertenecen a los llamados sistemas metamateriales, debido a sus extraordinarias propiedades electromagnéticas [12, 20, 58–62]. Entre estas propiedades, se debe mencionar la refracción negativa [5, 63, 64], que se ha observado en los metamateriales negativos dobles, cuya permitividad y permeabilidad efectiva son simultáneamente negativas. El fenómeno de refracción negativa se observa también en superredes metal-dieléctricas inherentemente-anisótropas, aún sin una permeabilidad efectiva negativa [65–67]. Las propiedades ópticas de tales sistemas metamateriales multi-laminados se han descrito en los trabajos [8, 10, 54, 68–71], así como en las referencias que aparecen en ellos, con el modelo local de Drude-Lorentz, el cual establece una relación local entre la densidad de corriente de los electrones y el campo eléctrico. Sin embargo, como ya se ha mencionado, debido a la alta movilidad de los electrones de conducción y a la falta de homogeneidad del campo electromagnético en el componente metálico, esta relación toma realmente la forma de una integral y por lo tanto es no local. Como se comentó en los capítulos previos, la no localidad (o dispersión espacial) es la responsable del efecto pelicular anómalo en los metales [21, 22]. Evidentemente, el modelo simple de Drude-Lorentz ignora absolutamente todos estos efectos. Además, en las micro y nanoestructuras modernas, en las cuales el tamaño de las inclusiones metálicas es comparable con la profundidad pelicular de penetración del campo electromagnético, es

necesario tener en cuenta el efecto de tamaño.

4.1 La placa metálica no local sola

En el capítulo anterior, el problema electrodinámico para una placa metálica se resolvió de manera analítica y auto-consistente incluyendo el efecto de no localidad en la conductividad de alta frecuencia de los electrones. Específicamente, la densidad de corriente se calculó desde el enfoque semiclásico de la ecuación cinética de Boltzmann (Secs. 3.4, 3.5, y 3.6). En contraste con el modelo de Drude-Lorentz, el enfoque cinético conduce a una relación no local (integral) entre la densidad de corriente y el campo eléctrico. La distribución del campo electromagnético en el interior de una placa metálica se obtuvo también en una forma completamente analítica (Subsec. 3.6.1). En general, se demostró que los resultados son cualitativamente diferentes de los obtenidos mediante la aproximación de Drude-Lorentz. Previo al estudio de sistemas periódicos de capas de metal no local y dieléctrico alternantes, y para un mejor entendimiento de sus propiedades fotónicas, en esta subsección estudiaremos las propiedades ópticas (absorción, reflexión y transmisión) de una placa metálica no local [72].

Consideremos que sobre la placa metálica incide una onda plana electromagnética monocromática de frecuencia ω . La onda se propaga a lo largo del eje x , perpendicular al plano de la placa (incidencia normal), y su componente eléctrica $\mathbf{E}(x, t)$ es paralela al eje y , y la magnética $\mathbf{H}(x, t)$ al eje z , o sea se pueden expresar como en las ecuaciones (3.2). La placa ocupa el espacio $0 \leq x \leq d_m$. En la región $-\infty < x < 0$, correspondiente a vacío, los campos eléctricos y magnéticos están dados por

$$E(x) = E_i \exp(ikx) + E_r \exp(-ikx), \quad (4.1a)$$

$$H(x) = E_i \exp(ikx) - E_r \exp(-ikx), \quad (4.1b)$$

donde E_i y E_r denotan las amplitudes de las ondas incidente (“ i ”) y reflejada (“ r ”). En la región $x > d_m$, posterior a la placa y correspondiente también a vacío, los campos de la onda transmitida con amplitud E_t se describen con las expresiones

$$E(x) = E_t \exp(ik(x - d_m)), \quad (4.2a)$$

$$H(x) = E_t \exp(ik(x - d_m)). \quad (4.2b)$$

Las condiciones de contorno para los campos, a saber, las condiciones de continuidad para las componentes tangenciales, a cada superficie de la placa metálica, tanto del campo eléctrico como magnético imponen relaciones entre las amplitudes E_i , E_r , E_t y el valor de los campos en $x = 0$ y $x = d_m$:

$$E(0) = E_i + E_r, \quad (4.3a)$$

$$H(0) = E_i - E_r, \quad (4.3b)$$

$$E(d_m) = E_t, \quad (4.3c)$$

$$H(d_m) = E_t. \quad (4.3d)$$

Ahora, podemos utilizar la matriz de transferencia de la placa metálica \hat{M} [ecuaciones (3.5b) y (3.73)] que relaciona los valores de los campos eléctrico y magnético en ambas superficies de la placa. Con esto, obtenemos un sistema de ecuaciones algebraicas lineales para las amplitudes E_i , E_r , E_t que escribiremos en la forma

$$E_t = (M_{11} + M_{12})E_i + (M_{11} - M_{12})E_r, \quad (4.4a)$$

$$E_t = (M_{21} + M_{22})E_i + (M_{21} - M_{22})E_r. \quad (4.4b)$$

Después de aplicar algunas operaciones algebraicas lineales, podemos escribir el sistema de ecuaciones (4.4) en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} E_t \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_i \\ E_r \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

donde los elementos de la matriz de transferencia \hat{T} están dados por

$$T_{11} = (M_{11} + M_{12} + M_{21} + M_{22})/2, \quad (4.6a)$$

$$T_{12} = (M_{11} - M_{12} + M_{21} - M_{22})/2, \quad (4.6b)$$

$$T_{21} = (M_{11} + M_{12} - M_{21} - M_{22})/2, \quad (4.6c)$$

$$T_{22} = (M_{11} - M_{12} - M_{21} + M_{22})/2. \quad (4.6d)$$

Finalmente, sustituyendo las expresiones para cada elemento de la matriz \hat{M} de la

ecuación (3.73) en (4.7), obtenemos

$$T_{11} = \frac{Z_0}{Z_{d_m}} - \frac{1 + (Z_0^2 - Z_{d_m}^2)}{2Z_{d_m}}, \quad (4.7a)$$

$$T_{12} = -\frac{1 - (Z_0^2 - Z_{d_m}^2)}{2Z_{d_m}}, \quad (4.7b)$$

$$T_{21} = \frac{1 - (Z_0^2 - Z_{d_m}^2)}{2Z_{d_m}}, \quad (4.7c)$$

$$T_{22} = \frac{Z_0}{Z_{d_m}} + \frac{1 + (Z_0^2 - Z_{d_m}^2)}{2Z_{d_m}}. \quad (4.7d)$$

Cabe mencionar que la matriz de transferencia \hat{T} también es unimodular. La solución del sistema de ecuaciones (4.5) determina los cocientes $r = E_r/E_i$ y $t = E_t/E_i$, con los cuales la reflectancia R , la transmitancia T y la absorción A de la película metálica se expresan de la siguiente manera

$$R = |r|^2 = \left| \frac{T_{21}}{T_{22}} \right|^2, \quad (4.8a)$$

$$T = |t|^2 = \left| \frac{1}{T_{22}} \right|^2, \quad (4.8b)$$

$$A = 1 - R - T. \quad (4.8c)$$

Nótese que los coeficientes de reflexión R y de transmisión T se determinan a través de las impedancias superficiales de la placa Z_0 y Z_{d_m} con ayuda de las fórmulas universales (4.8) y (4.7). La diferencia del modelo cinético respecto del modelo de Drude-Lorentz se encuentra sólo en las impedancias Z_0 y Z_{d_m} , las cuales ahora se describen con las sumas (3.75) y no con las expresiones explícitas (3.85). Como se comentó en el capítulo anterior, el paso del enfoque cinético a la aproximación de Drude-Lorentz se logra por medio de la sustitución del factor $\mathcal{K}(k_s l_\omega)$ por la unidad para todos los índices de la suma sobre s . Entonces, según el modelo local de Drude-Lorentz los elementos de la matriz \hat{T} están dados por las expresiones

$$T_{11} = \cos(k_m d_m) + \frac{i}{2} \left(\frac{k_m}{k} + \frac{k}{k_m} \right) \sin(k_m d_m), \quad (4.9a)$$

$$T_{12} = \frac{i}{2} \left(\frac{k_m}{k} + \frac{k}{k_m} \right) \sin(k_m d_m), \quad (4.9b)$$

$$T_{21} = -\frac{i}{2} \left(\frac{k_m}{k} + \frac{k}{k_m} \right) \sin(k_m d_m), \quad (4.9c)$$

$$T_{22} = \cos(k_m d_m) - \frac{i}{2} \left(\frac{k_m}{k} + \frac{k}{k_m} \right) \sin(k_m d_m). \quad (4.9d)$$

Se debe mencionar también que las impedancias superficiales en el modelo de Drude-Lorentz dependen de tres parámetros adimensionales: la frecuencia del campo electromagnético ω/ω_p y la tasa de relajación de los electrones ν , normalizadas a la frecuencia del plasma ω_p , así como del cociente d_m/δ del espesor de la placa entre el espesor mínimo de la capa pelicular $\delta = c/\omega_p$ del metal voluminoso (bulto), el cual se logra en el rango de altas frecuencias $\nu \ll \omega \ll \omega_p$, donde $\varepsilon_{cl}(\omega) \approx -\omega_p^2/\omega^2$. Es relevante el hecho de que las impedancias (3.75) en el modelo cinético dependen de un cuarto parámetro independiente $\pi v_F/c$ el cual está asociado con la velocidad de Fermi de los electrones. Este parámetro aparece en el factor de no localidad $\mathcal{K}(k_s l_\omega)$ y es responsable de los efectos de dispersión espacial.

Como se deduce de la definición (3.62) y de las asíntotas (3.71) y (3.72), la función $\mathcal{K}(k_s l_\omega)$ depende débilmente de $|s|$ si el espesor de la placa es grande, $\pi |l_\omega|/d_m \ll 1$. En este caso el factor $\mathcal{K}(k_s l_\omega)$ permanece cercano a la unidad para muchos de los índices en la suma, $0 \leq |s| < (\pi |l_\omega|/d_m)^{-1}$. Si la contribución principal a las sumas (3.69) y (3.75) se debe a términos del intervalo indicado, entonces los efectos de dispersión espacial serán pequeños. Ellos se volverán notorios sólo cuando la contribución principal se atribuya a los términos con $|s| \gg (\pi |l_\omega|/d_m)^{-1} \gg 1$. Tal situación es análoga al efecto pelicular anómalo en las muestras metálicas masivas (o de gran volumen).

Restrinjamos nuestro análisis al rango de mayor relevancia, a saber, el de altas frecuencias: $\nu < \omega \ll \omega_p$. Si el espesor de la placa es mucho menor que el espesor mínimo de la capa pelicular $\delta = c/\omega_p$, la contribución dominante a las impedancias (3.75) proviene del término con $s = 0$ para el cual el factor de no localidad es igual a la unidad. Es evidente que la electrodinámica de muestras tan delgadas se describe bien con la teoría de Drude-Lorentz en la cual los efectos de dispersión espacial no están presentes. Cuando $d_m/\delta \ll 2\omega/\omega_p$,

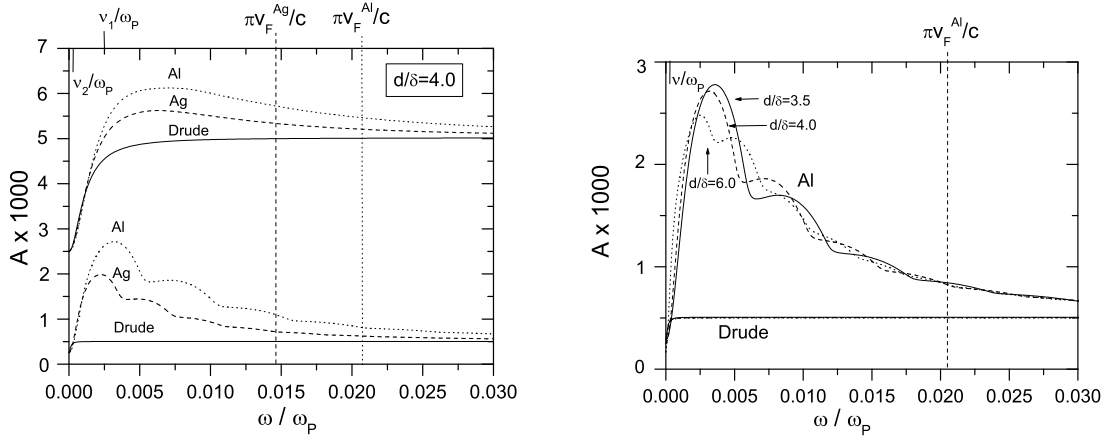


Figura 4.1: Panel izquierdo: Absorción A de placas de aluminio y plata contra la frecuencia ω para dos valores de la tasa de relajación de los electrones, $\nu_1 = 0.0025\omega_p$ (curvas superiores) y $\nu_2 = 0.1\nu_1$ (curvas inferiores). Panel derecho: Dependencia de la absorción A en función de la frecuencia para una placa de aluminio con tres diferentes valores del espesor d_m (indicados en la figura) a una tasa de relajación $\nu = 0.00025\omega_p$. En ambos paneles se presentan también las curvas respectivas calculadas con el modelo de Drude-Lorentz.

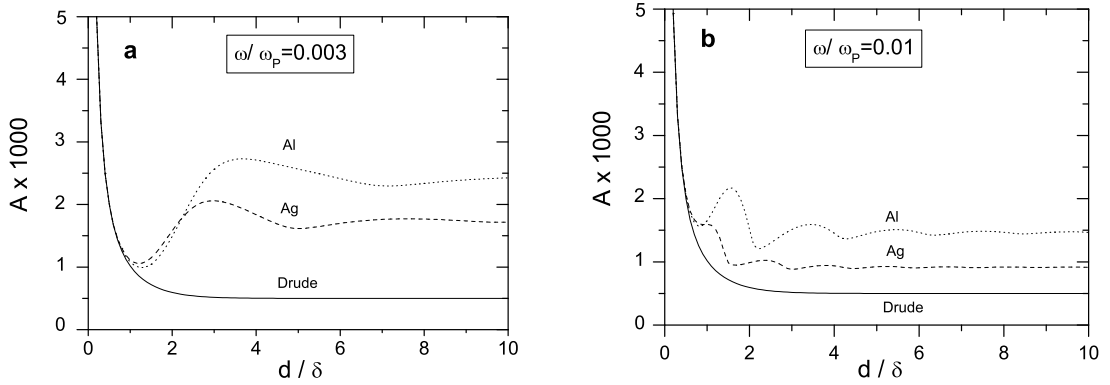


Figura 4.2: Absorción A de placas de aluminio y plata contra el espesor d ($= d_m$) para dos valores de la frecuencia ω , $0.003\omega_p$ (recuadro “a”) y $0.01\omega_p$ (recuadro “b”). Se presentan también las curvas respectivas calculadas con el modelo de Drude-Lorentz.

tales muestras son prácticamente transparentes a la radiación electromagnética.

En el rango de altas frecuencias $\nu < \omega \ll \omega_p$ la situación cambia radicalmente si el espesor de la placa se vuelve comparable con o es mayor que la profundidad de piel, $d_m \gtrsim \delta$,

y esta última resulta ser menor que la longitud de recorrido libre, $\delta < \pi|l_\omega| \approx \pi v_F/\omega$, es decir

$$\delta = c/\omega_p \lesssim d_m, \quad \nu < \omega < \pi\omega_p v_F/c \ll \omega_p \quad (4.10)$$

Bajo estas condiciones, hay contribuciones a las impedancias (3.75) de los términos con valores finitos de s para los cuales el factor de no localidad $\mathcal{K}(k_s l_\omega)$ difiere de la unidad y puede describirse adecuadamente con la fórmula asintótica (3.72).

El recuadro izquierdo de la figura 4.1 muestra la dependencia de la absorción A en placas de aluminio (Al) y plata (Ag) en función de la frecuencia normalizada ω/ω_p para dos valores de la tasa de relajación ν a una proporción fija d/δ . Estas curvas fueron calculadas con los siguientes parámetros de los materiales: $v_F^{Al} = 2.03 \times 10^8$ cm/seg, $\omega_p^{Al} = 3.82 \times 10^{15}$ Hz; $v_F^{Ag} = 1.39 \times 10^8$ cm/seg, $\omega_p^{Ag} = 0.96 \times 10^{15}$ Hz. Analicemos las tres curvas superiores graficadas para el valor $\nu = 0.0025\omega_p$, el cual ha sido utilizado en la referencia [2] en el estudio de las propiedades electromagnéticas de nanoestructuras modernas típicas. La curva inferior de esas tres no toma en cuenta los efectos de dispersión espacial ya que fue obtenida con el modelo de Drude-Lorentz. Note que la dependencia $A(\omega/\omega_p)$ en el modelo de Drude-Lorentz es universal para todos los materiales a valores de d/δ y ν/ω_p dados. La absorción $A(\omega)$ crece rápidamente con la frecuencia en el intervalo de bajas frecuencias $\omega \lesssim \nu$ y, por tanto, no se observa bien este incremento en la escala de frecuencias utilizada. En contraste con la curva inferior, las dos superiores restantes se graficaron de acuerdo al modelo cinético. Esas dos curvas difieren cualitativamente de la curva inferior. En primer lugar, en el intervalo de frecuencia de interés (4.10), la absorción electromagnética $A(\omega)$ es mucho mayor. En segundo lugar, su dependencia respecto de la frecuencia no es monótona y exhibe un máximo ancho. Una característica aún más interesante y no trivial surge a bajas tasas de relajación como puede verse en las tres curvas inferiores. Aquí, debido a la disminución en la razón ν/ω_p junto con la caída general esperada de la absorción $A(\omega)$, se observan oscilaciones en lugar de un solo máximo. Las oscilaciones se dan en el rango de frecuencias no local (4.10) y se asocian con la estructura discreta de las impedancias (3.75). Además, la comparación de los grupos superior e inferior de curvas indica que la absorción relativa en la aproximación cinética comparada con el modelo de Drude-Lorentz se incrementa a medida que ν disminuye. Las oscilaciones descubiertas se observan en mayor detalle en el recuadro derecho de la figura 4.1, donde se presentan curvas de la absorción $A(\omega)$ para la placa de aluminio usando tres diferentes valores de espesor d_m . Al mismo

tiempo, la diferencia en la absorción $A(\omega)$ para los valores de espesor elegidos en el modelo de Drude-Lorentz es exponencialmente pequeña, así que las tres curvas respectivas coinciden en la escala del recuadro derecho.

La figura 4.1 ciertamente indica que las características observadas se asocian con la influencia mutua de la dispersión espacial y del efecto de tamaño. La acción de ambos fenómenos se manifiesta particularmente en la sensibilidad de $A(\omega)$ a la magnitud de la velocidad de Fermi v_F : la anchura de la región de no localidad y la amplitud de oscilación se incrementan con v_F . El efecto de tamaño es claramente manifiesto en la dependencia del valor de la absorción, así como de la forma y el número de oscilaciones respecto del espesor de la muestra, d_m . La figura 4.2, la cual presenta la dependencia de A respecto de d_m para dos valores de frecuencia ω en el intervalo de no localidad (4.10), ilustra precisamente el efecto de tamaño en el valor de A , su perfil y el número de oscilaciones.

4.2 Superred de metal no local y dieléctrico

En la sección anterior se calcularon los coeficientes de transmisión, reflexión y absorción a incidencia normal para una placa metálica de espesor d_m en el régimen no local, en términos de las impedancias superficiales Z_0 y Z_{d_m} de la placa. Sin embargo, como ya hemos mencionado de manera reiterada estamos interesados en la obtención de las propiedades ópticas de sistemas metalodieléctricos (en particular, de dieléctrico resonante), de ahí que, primeramente presentaremos en esta sección el análisis del comportamiento electromagnético de una superred de metal no local y dieléctrico no dispersivo en la frecuencia, el cual se llevó a cabo en la Ref. [73].

Debido al fuerte contraste entre las impedancias del dieléctrico Z_i y del metal Z_0 y Z_{d_m} , la relación de dispersión general (3.84b), para los modos fotónicos puede tener soluciones para el número de onda de Bloch, $\kappa = \gamma/d$, con $|\text{Re}(\kappa)| < \pi/d$ y $0 < \text{Im}(\kappa) < |\text{Re}(\kappa)|$, sólo en las bandas de paso asociados con las resonancias de Fabry-Perot emergentes en el dieléctrico, capa i . De hecho, cuando $|Z_i/Z_0| \gg 1$ y $|Z_a/Z_{d_m}| \gg 1$ en la ecuación (3.84b), las soluciones con valores mínimos de $\text{Im}\kappa$, se encuentran en bandas muy estrechas, muy cerca de las frecuencias ω_j , en las cuales la condición de resonancia de Fabry-Perot $\varphi_i = j\pi$ ($j = 1, 2, 3, \dots$) se cumple.

Anteriormente, se comentó que las impedancias de Drude-Lorentz (3.85) dependen de tres parámetros adimensionales: ω/ω_p , ν/ω_p y d_m/δ . Es de crucial importancia que

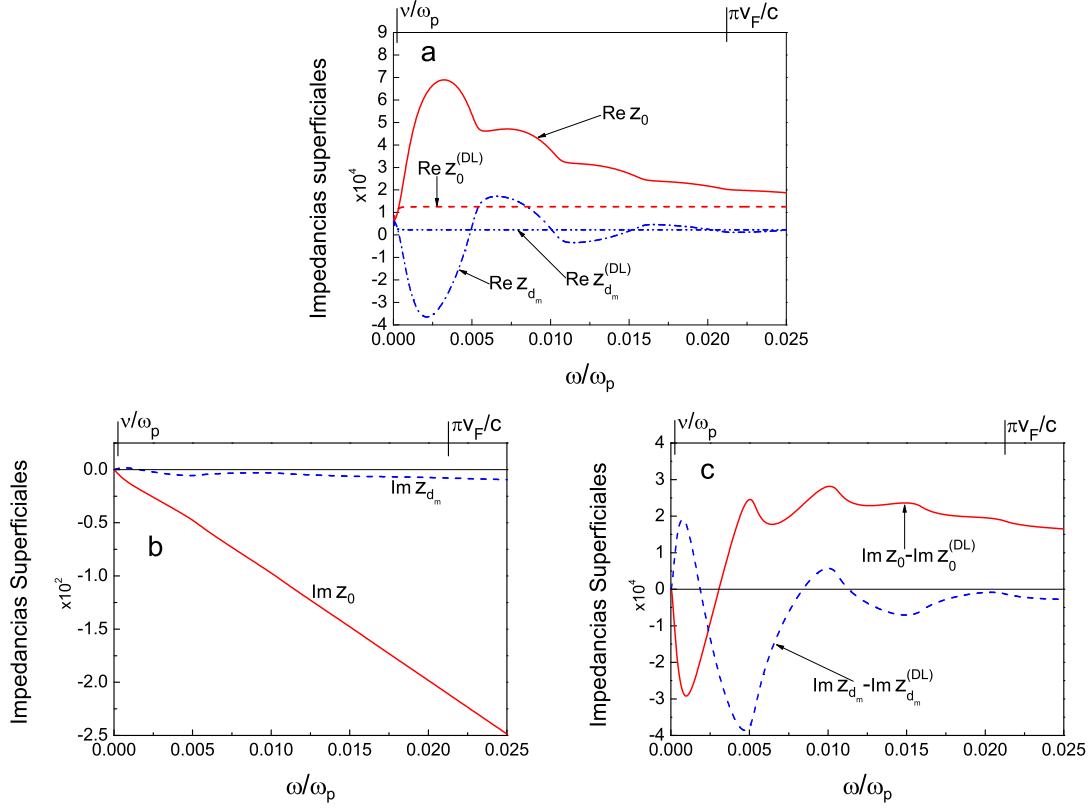


Figura 4.3: Dependencia de las partes real (a) e imaginaria (b y c) de las impedancias superficiales Z_0 y Z_{d_m} , en función de la frecuencia, calculadas con los modelos no local (Boltzmann) y local (Drude-Lorentz)

las impedancias cinéticas (3.75) dependen de un cuarto parámetro de control $\pi v_F/c \ll 1$ asociado con la velocidad de Fermi de electrones. Enfatizamos que este parámetro entra en el argumento del factor de no localidad $\mathcal{K}(k_s l_\omega)$ y es responsable del efecto de dispersión espacial, que se manifiesta en el infrarrojo si $\nu < \omega < (\pi v_F/c)\omega_p$ (véase la ecuación (4.10)). Por esta razón, el efecto no local en el espectro óptico de modos propios fotónicos para la superred metal-dieléctrico será perceptible solamente en bandas de resonancia de Fabry-Perot que aparecen en tal intervalo de frecuencias.

En cuanto a los parámetros ópticos del dieléctrico, capas- i , nuestros resultados son válidos no sólo cuando ϵ_i sea una constante positiva, sino también cuando adquiera valores complejos y/o exhiba dispersión en la frecuencia. Sin embargo, por simplicidad de análisis consideraremos aquí una superred constituida de capas de aluminio y vacío.

La Fig. 4.3 presenta la dependencia de la frecuencia de las impedancias superficiales

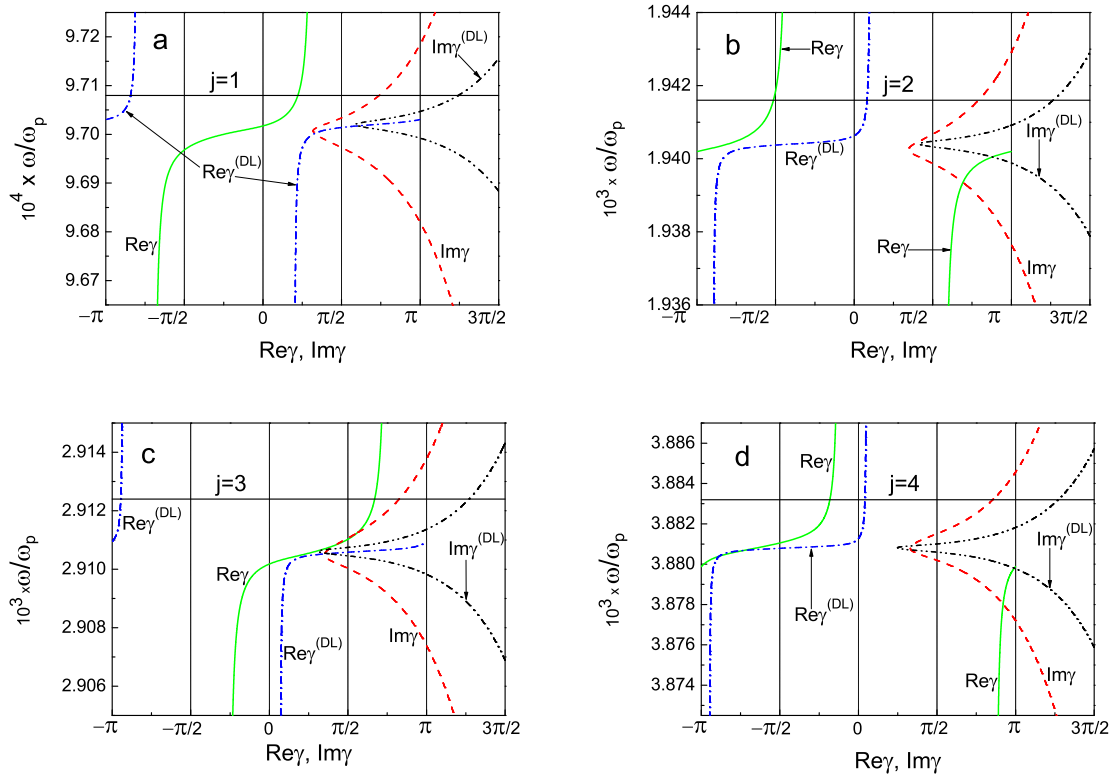


Figura 4.4: Espectro óptico para una superred de aluminio y vacío predicho por los formalismos no local (Boltzmann) y local (Drude-Lorentz). Aquí $\gamma = \kappa d$.

Z_0 y Z_{d_m} , ecuaciones (3.75), usadas para el cálculo de las bandas fotónicas de una superred de aluminio-vacío. Los parámetros usados son $d_m = 4\delta$, $v_F = 2.03 \times 10^8 \text{ cm/s}$, $\omega_p = 3.82 \times 10^{15} \text{ Hz}$ y $\nu = 0.00025\omega_p$. Como se ve en la Fig. 4.3, las diferencias entre las funciones $Z_0(\omega)$ y $Z_d(\omega)$ y las predichas por el modelo local de Drude-Lorentz son del orden de 10^{-4} que es el orden de magnitud de las partes reales de las impedancias mismas. En la Fig. 4.4, se muestran las cuatro bandas de resonancia inferiores Fabry-Perot (paneles a-d) para una superred de vacío y aluminio, cuya capa i , en la celda unitaria (i, m) , tiene un espesor d_i tal que la frecuencia $\omega_1 = \pi c/d_i$ para la primera resonancia de Fabry-Perot en la capa i coincide con la frecuencia $\omega = 9.708 \times 10^{-4}\omega_p$ del mínimo absoluto de la diferencia $\text{Im}Z_0 - \text{Im}Z_0^{(DL)}$ (línea roja en la Fig. 4.3c). Las curvas verde y roja en la Fig. 4.4 corresponden al espectro óptico predicho por la aproximación cinética, mientras que las líneas azules y negras se obtuvieron mediante el modelo de Drude-Lorentz. De acuerdo a la Fig. 4.4, la j -ésima banda de resonancia aparece debajo de la frecuencia $\omega_j = j\pi c/d_i$. Además, se pueden observar

varios de los efectos de la dispersión espacial sobre la estructura de bandas fotónicas. En primer lugar, las bandas de paso cinéticas y locales son claramente distintas. Tanto la magnitud como el signo de la parte real, $\text{Re}\kappa$, del número de onda Bloch pueden cambiar en comparación con las predicciones del modelo local. En segundo lugar, los saltos de $\text{Re}\kappa$ se producen debido a que $\text{Re}\kappa$ se limita a la primera zona de Brillouin, y son diferentes para los modelos cinético y local. Por último, el valor mínimo de la parte imaginaria $\text{Im}\kappa$ en las bandas de resonancia prácticamente no varía de banda a banda en el formalismo no local.

4.3 Superred de metal no local y dieléctrico resonante

Como hemos visto en las secciones previas, la dispersión espacial se manifiesta notablemente en el rango de los THz [72, 73]. Por lo tanto si una superred está compuesta de un metal no local y un dieléctrico *resonante* (por ejemplo, un cristal iónico o un semiconductor heteropolar), la estructura de bandas fotónicas puede ser alterada en frecuencias correspondientes a la banda prohibida, la cual es generada a partir del acoplamiento entre los fonones ópticos transversales y las ondas electromagnéticas transversales dentro del dieléctrico. El efecto de la banda prohibida polaritónica en la estructura de bandas fotónicas para sistemas periódicos con solamente componentes dieléctricos ha sido estudiado en diversos trabajos (e.g. las Refs. [74–86] y los trabajos ahí citados). Como se demuestra en la Ref. [75], la dispersión fotónica para los modos electromagnéticos de polarización E que se propagan en un cristal fotónico bidimensional (2D), compuesto de materiales con constantes dieléctricas independientes de la frecuencia, muestra bandas creadas únicamente por la periodicidad de la red. No obstante, si uno de los componentes dieléctricos es sustituido por uno resonante, entonces una banda prohibida polaritónica aparece en el espectro fotónico. Tal brecha prohibida polaritónica resulta estar acompañada por dos bandas prohibidas “gemelas” como consecuencia del alto contraste dieléctrico entre los componentes [75]. En las Refs. [76, 78, 82], se demostró teóricamente que los cristales fotónicos con excitaciones fonón-polaritón muestran una banda de paso de baja frecuencia así como bandas planas directamente debajo de la frecuencia del fonón óptico transversal ω_{TO} , las cuales se asocian a los modos de resonancia localizados en el material polaritónico que posee un índice de refracción alto por debajo de ω_{TO} . Precisamente arriba de ω_{TO} , el material polaritónico tiene una permitividad negativa con valor absoluto grande, comportándose como un metal, es decir, repele casi todo el campo de su interior. En este último caso, la presencia de las

bandas de paso por arriba de ω_{TO} pueden correlacionarse con la existencia de bandas en la dispersión fotónica de un cristal metalodieléctrico a tales frecuencias. Es también interesante la aparición de modos fotónicos tipo defecto [82] en la brecha prohibida polaritónica, por debajo de la frecuencia del fonón óptico longitudinal ω_{LO} , donde el índice de refracción del material polaritónico es pequeño. Además, los cristales fotónicos compuestos de materiales polares han sido propuestos como metamateriales para los THz. Así, compositos 2D compuestos de constituyentes materiales dieléctrico-polar y polar-polar se comportan como un medio homogéneo uniaxial con relación de dispersión hiperbólica en el rango de THz [87, 88]. Adicionalmente, los compositos de dos diferentes clases de esferas no traslapadas, una hecha de un material inherentemente no-magnético polaritónico y la otra de uno de respuesta tipo Drude, se comportan como metamateriales doblemente negativos a frecuencias de THz [89]. Según este trabajo, las esferas polaritónicas son responsables de la permeabilidad magnética efectiva negativa, mientras que las esferas con respuesta tipo Drude dan origen a la permitividad eléctrica efectiva negativa.

En esta sección estudiaremos un arreglo periódico de dos capas alternantes de dieléctrico con dispersión de frecuencia (resonante) y metal con dispersión espacial (Fig. 4.5). Supondremos que las componentes eléctrica y magnética de la onda de frecuencia ω , que se propaga a lo largo el eje x (dirección de crecimiento de la superred), están orientadas a lo largo de los ejes y y z , respectivamente (véa las expresiones (3.2)).

La respuesta óptica de las capas dieléctricas resonantes (capas i) se puede describir adecuadamente con la función dieléctrica dependiente de la frecuencia $\varepsilon_i(\omega)$ dada por el oscilador de Lorentz,

$$\varepsilon_i = \varepsilon_\infty \left(1 - \frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2}{\omega^2 - \omega_{TO}^2 + i\omega\nu_0} \right), \quad (4.11)$$

donde ε_∞ es la constante dieléctrica de alta frecuencia, que determina la contribución de los electrones de valencia a la función dieléctrica, ω_{TO} y ω_{LO} son respectivamente las frecuencias transversal y longitudinal de fonones ópticos, y ν_0 denota la constante de amortiguamiento. El modelo (4.11) define el índice de refracción complejo n_i , la impedancia Z_i , el número de onda k_i , y el corrimiento de fase φ_i de las capas i ,

$$n_i = \sqrt{\varepsilon_i}, \quad Z_i = n_i^{-1}, \quad k_i = kn_i, \quad \varphi_i = k_i d_i, \quad (4.12)$$

con $k = \omega/c$ y c siendo, correspondientemente, el número de onda y la velocidad de la luz en el vacío. De acuerdo con la geometría considerada, se puede aplicar el formalismo

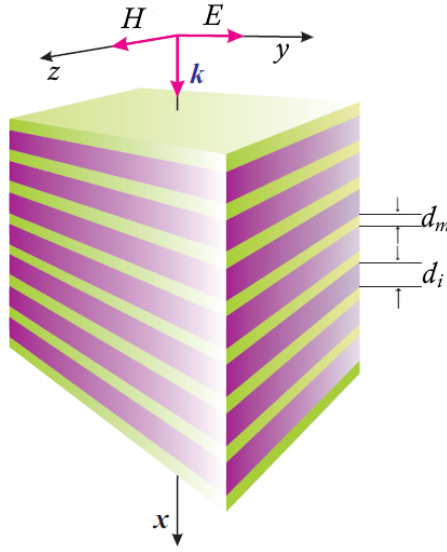


Figura 4.5: Esquema de la bi-capa

desarrollado en el Capítulo 3 para calcular la relación de dispersión de modos fotónicos, propagándose en una superred de metal no local y dieléctrico a lo largo de la dirección de crecimiento. Dicha de relación de dispersión está dada por la ecuación (3.84).

Al igual que en el caso considerado en la sección anterior, existe un gran contraste entre las impedancia de las capas del metal (capas “m”) y el dieléctrico resonante (capas “i”). Esto se deriva del hecho que la impedancia Z_i es mucho mayor que los valores absolutos de las impedancias metálicas Z_0 and Z_{d_m} ,

$$|Z_i| \gg \max(|Z_0|, |Z_{d_m}|), \quad (4.13)$$

incluso en frecuencias muy cercanas a la resonante, ω_{TO} . Por esta razón, la relación de dispersión (3.84) para los modos fotónicos puede tener soluciones para el número de onda de Bloch κ con $|\text{Re}\kappa| < \pi/d$ y $0 < \text{Im}\kappa < |\text{Re}\kappa|$ solamente en bandas de paso muy angostas, las cuales se atribuyen a resonancias de Fabry-Perot que ocurren en la capa “i”. En verdad, cuando $|Z_i/Z_0| \gg 1$ y $|Z_i/Z_{d_m}| \gg 1$ en la ecuación (3.84), tales bandas están muy cerca de las frecuencias ω_{j_i} donde la condición

$$\text{Re } \varphi_i \equiv \text{Re } kn_i d_i = j_i \pi, \quad j_i = 1, 2, 3, \dots, \quad (4.14)$$

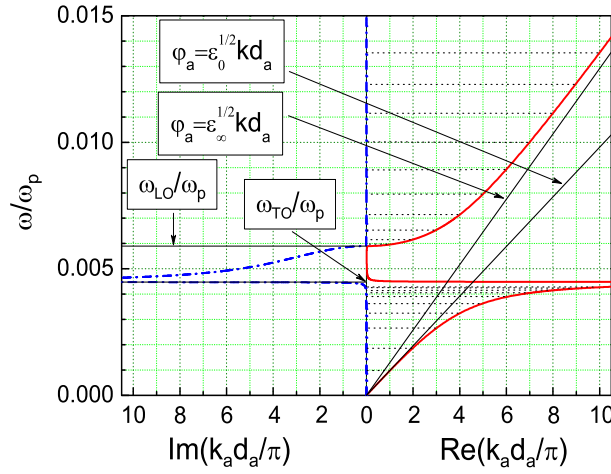


Figura 4.6: Espectro polaritónico de la capa “i” de GaN.

se satisface. Como se ha mostrado en las secciones anteriores, el efecto de dispersión espacial se manifiesta notablemente en el infrarrojo si $\nu < \omega < \pi v_F \omega_p / c$ (véase la ecuación (4.10)). Por consiguiente, el efecto no local en el espectro de los modos fotónicos para la superred de metal no local y dieléctrico resonante se observará en las bandas de Fabry-Perot que aparecen en ese intervalo de frecuencias.

Ahora analizaremos las bandas de resonancias Fabry-Perot de la dispersión fotónica para una superred de GaN y Al. En nuestros cálculos numéricos hemos utilizado para las capas “m” de aluminio: $\nu = 0.00025\omega_p$, la velocidad de Fermi $v_F = 2.03 \times 10^8 \text{ cm/s}$, $\omega_p = 3.82 \times 10^{15} \text{ Hz}$, $d_m = 4\delta$. La elección de GaN para las capas “i” se debe al hecho que su banda *reststrahlen* ($\omega_{TO} \leq \omega \leq \omega_{LO}$) está precisamente dentro del intervalo (4.10) de no localidad fuerte para el Al: las frecuencias de los fonones transversales y longitudinales son, respectivamente, $\omega_{TO} = 571 \text{ cm}^{-1}$ (17.12 THz) y $\omega_{LO} = 752 \text{ cm}^{-1}$ (22.54 THz) [90]. Otros parámetros del GaN que se usaron son: $\varepsilon_\infty = 8.9$, and $\nu_0 = 10^{-3}\omega_{TO}$. Para la capa de GaN, hemos elegido un espesor d_i tal que la frecuencia de la primera resonancia de Fabry-Perot $\omega_1 \approx 4\nu$, i.e. $d_i = \pi c / \omega_1 \text{Re } n_i(\omega_1)$.

La gráfica de la frecuencia de onda normalizada ω/ω_p versus el número de onda k_i , la cual describe el espectro del polaritón $k_i = kn_i(\omega)$ para la capa “i” de GaN, se presenta en la Fig. 4.6. Nótese que la parte real de k_i (líneas rojas) es mucho mayor que la parte imaginaria (líneas azules) en todas partes excepto dentro de la banda *reststrahlen* de GaN

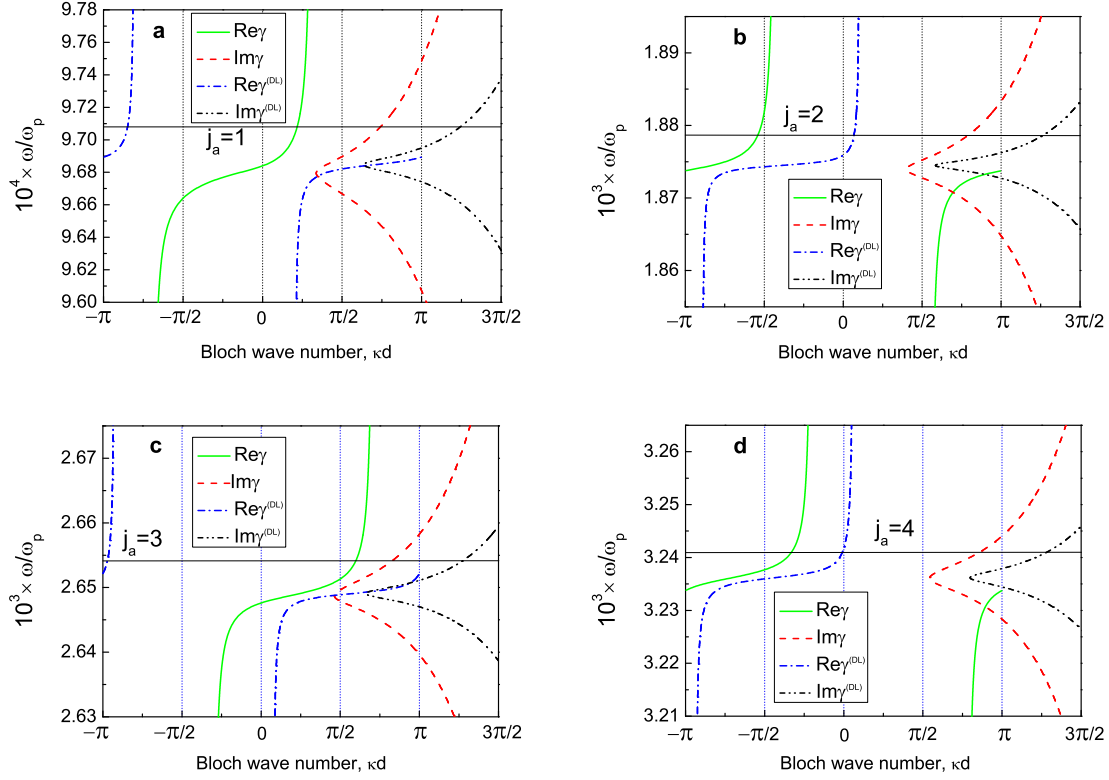


Figura 4.7: Estructura de bandas fotónicas en las vecindades de las cuatro resonancias de Fabry-Perot inferiores para la superred de GaN y Al, la cual es predicha por los formalismos no local (Boltzmann) y local (Drude-Lorentz).

($\omega_{TO} \leq \omega \leq \omega_{LO}$) donde la parte real es despreciable con respecto a la imaginaria. Las líneas a trazos negras en la Fig. 4.6 indican las frecuencias ω_{j_i} correspondientes a las resonancias de Fabry-Perot (4.14). Como puede verse, para un número dado j_i hay dos frecuencias de resonancia ω_{j_i} , una de ellas es menor que ω_{TO} mientras que la segunda está por encima de ω_{LO} . Además, las frecuencias ω_{j_i} inferiores se concentran notoriamente por debajo de la frecuencia de resonancia ω_{TO} .

La Fig. 4.7 exhibe cuatro de las bandas de resonancia Fabry-Perot situadas dentro del rango de bajas frecuencias (THz)

$$0 \lesssim \omega \lesssim \omega_{TO}. \quad (4.15)$$

Las líneas verdes sólidas y las curvas rojas a trazos en la Fig. 4.7 corresponden a la dispersión fotónica predicha por el formalismo de la ecuación cinética de Boltzmann, mientras que las

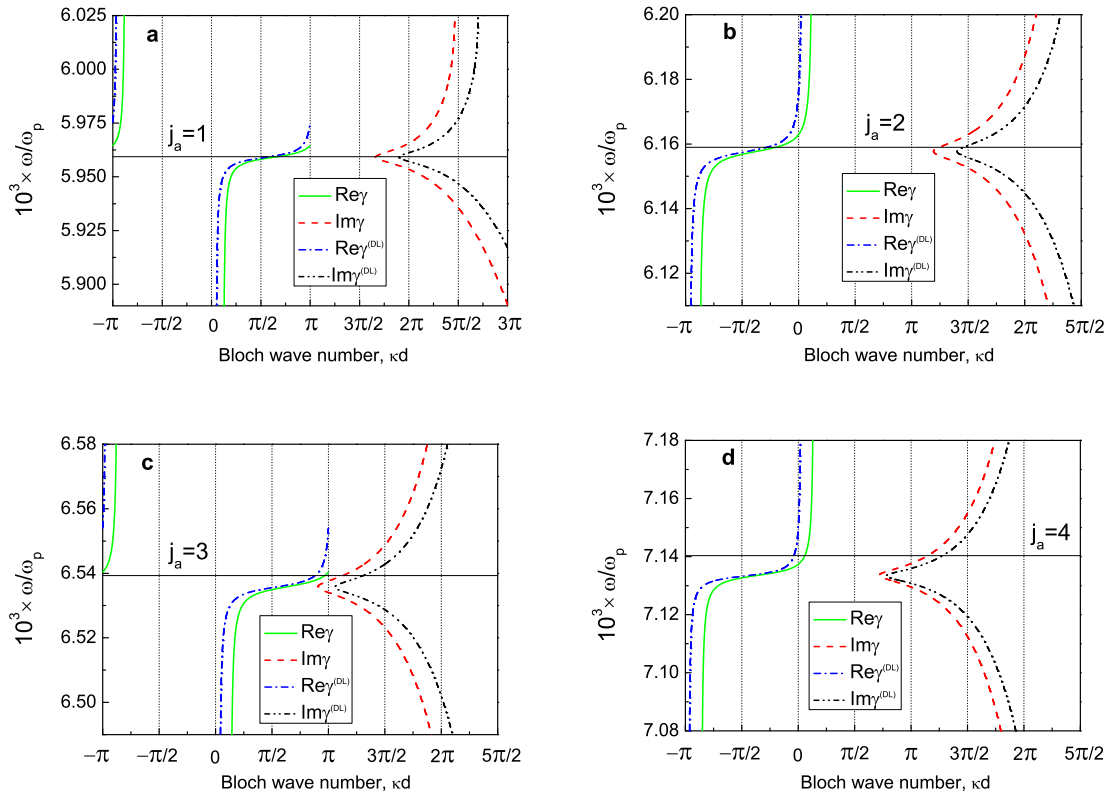


Figura 4.8: Estructura de bandas fotónicas en las vecindades de las primeras cuatro resonancias de Fabry-Perot por encima de ω_{LO} para una superred de GaN y Al como en la Fig. 4.7.

líneas azules de trazo-punto al igual que las negras de trazo-punto-punto se obtienen con el modelo de Drude-Lorentz. De acuerdo con la Fig. 4.7, la j_i -ésima banda de resonancia aparece por debajo de la frecuencia de resonancia $\omega_{j_i} = j_i \pi c / \text{Re} n_i d_i$. En las Figs. 4.7, las bandas de paso cinéticas y locales son claramente distinguibles y podemos observar tres efectos principales de la dispersión espacial sobre la estructura de bandas fotónicas. Primero que todo, no sólo la magnitud sino también el signo de la parte real $\text{Re}\kappa$ del vector de onda de Bloch cambia en comparación con las predicciones del modelo local. Segundo, los saltos de $\text{Re}\kappa$, los cuales ocurren porque $\text{Re}\kappa$ está limitado a la primera zona de Brillouin, se predicen en diferentes bandas de resonancia Fabry-Perot por los modelos no local y local. Tercero, el valor mínimo de la parte imaginaria $\text{Im}\kappa$ en las bandas de resonancia prácticamente no varía de banda a banda según del formalismo no local.

La Fig. 4.8 presenta las primeras cuatro bandas de resonancia Fabry-Perot que están por encima de la frecuencia del fonón óptico longitudinal ω_{LO} ,

$$\omega_{LO} \lesssim \omega. \quad (4.16)$$

Nótese que las predicciones de la aproximación cinética de Boltzmann y del modelo local de Drude-Lorentz son ligeramente distintas en contraste con las primeras bandas fotónicas mostradas en la Fig. 4.7. Estos resultados demuestran que el efecto de la dispersión espacial del metal sobre las bandas fotónicas se manifiesta bien en las resonancias angostas de Fabry-Perot si las frecuencias correspondientes ω_{j_i} están en el intervalo donde la diferencia entre las impedancias superficiales Z_0 y Z_{d_m} , predichas tanto por el modelo no local como por el local, son máximas. Como se ve en la Fig. 4.6, en el caso de capas de Al con $d_m = 4\delta$, tal diferencia es considerable en el intervalo $0.001\omega_P \lesssim \omega \lesssim 0.005\omega_P$.

Capítulo 5

Respuesta efectiva no local

El sistema más simple para el diseño de metamateriales es la heteroestructura periódica (el cristal fotónico unidimensional, CF 1D) compuesta de capas alternantes de metal y dieléctrico [65–67]. En el régimen de grandes longitudes de onda, comparadas con el periodo d del CF, sus propiedades ópticas pueden describirse mediante el uso de un tensor de permitividad efectivo. Si las componentes de la permitividad son de signo diferente, tal medio anisótropo puede dar lugar a la refracción negativa sin requerir que la permeabilidad sea también negativa [65–67], en contraste con los metamateriales doblemente negativos (de permitividad y permeabilidad negativas simultáneamente). Usualmente, las componentes de la permitividad se calculan con la teoría de medio efectivo desarrollada originalmente por Rytov [91]. De acuerdo con ella, si los materiales de las capas de la superred son locales e isotrópicos, el tensor de permitividad es diagonal con valores principales [91]:

$$\varepsilon_y = \varepsilon_z = \varepsilon_m f + \varepsilon_i(1 - f), \quad (5.1)$$

$$\frac{1}{\varepsilon_x} = \frac{1 - f}{\varepsilon_i} + \frac{f}{\varepsilon_m}. \quad (5.2)$$

Aquí, las capas de metal y dieléctrico se caracterizan con sus permitividades, ε_m and ε_i , y espesores, d_m and d_i , respectivamente; $f = d_m/d$ es la fracción de llenado del metal ($d = d_m + d_i$), y x denota la dirección perpendicular a los planos de las capas en la superred. Las fórmulas (5.1) and (5.2) son válidas en el caso de ondas muy largas [91], y han sido obtenidas con diferentes métodos de homogeneización (véase, por ejemplo, [66, 92] y los trabajos ahí citados).

Al emplear el modelo de Drude-Lorentz (2.1) para la función dieléctrica, dependiente de la frecuencia ω , del metal (i.e. $\varepsilon_m = 1 - \omega_p^2/(\omega(\omega + i\nu))$), las componentes ε_y y

ε_z (5.1) adquieren una forma similar:

$$\varepsilon_y = \varepsilon_z = \bar{\varepsilon} \left(1 - \frac{\omega_{p,\text{ef}}^2}{\omega(\omega + i\nu)} \right), \quad (5.3)$$

donde $\bar{\varepsilon} = f + \varepsilon_i(1 - f)$ y $\omega_{p,\text{ef}}$ denota una frecuencia de plasma efectiva,

$$\omega_{p,\text{ef}} = \omega_p \sqrt{\frac{f}{\bar{\varepsilon}}}. \quad (5.4)$$

Esta fórmula resulta ser una buena aproximación cuando los valores de la fracción de llenado no son muy pequeñas ($f \leq 1$). Si $f \ll 1$ y el espesor de la capa metálica es comparable con la profundidad de piel ($d_m \sim c/\omega_p$), la frecuencia de corte $\omega_{p,\text{ef}}$ tiene un valor cercano al determinado en la Ref. [68]:

$$\omega_{p,\text{ef}} = \pi c/n_i d_i, \quad (5.5)$$

donde $n_i = \sqrt{\varepsilon_i}$ es el índice de refracción del dieléctrico. Nótese que $\omega_{p,\text{ef}}$ en la ecuación (5.5) no depende de la permitividad del metal, al igual que en el caso de arreglos periódicos de alambres metálicos muy delgados [93]. Las diferencias entre los modelos (5.4) y (5.5) se analizaron en profundidad en los trabajos [68,94]. Cabe mencionar que, en principio, los dos regímenes pueden describirse con la teoría perturbativa en el parámetro $kd \ll 1$ (k es la magnitud del vector de onda de Bloch) que fue propuesta por Rytov [91]. Sin embargo, el cálculo de la permitividad efectiva requiere de la solución numérica de la ecuación exacta para la dispersión ($\mathbf{k}(\omega)$), particularmente en el caso de modos electromagnéticos que se propagan a lo largo del eje x [91] y que se caracterizan por tener una banda prohibida de baja frecuencia en su estructura de bandas fotónicas.

Expresiones analíticas para las componentes del tensor de permitividad, las cuales pueden predecir los resultados de Rytov (5.1) y del trabajo [68], así como del régimen de transición entre ellos, se derivaron en la Ref. [70]. En este último trabajo se calculó el tensor de permitividad efectiva para una superred binaria de metal y dieléctrico en el marco de la teoría de homogeneización desarrollada en la Ref. [48] la cual hemos comentado en el primer capítulo. Enfatizamos que esta teoría tiene la ventaja de proporcionar expresiones explícitas para los parámetros efectivos de la respuesta electromagnética. Las expresiones analíticas para las componentes ε_y y ε_z de la permitividad efectiva, en el régimen de grandes longitudes de onda, y que fueron derivadas en la Ref. [70] se escriben como

$$\varepsilon_y = \varepsilon_z = \varepsilon_i \left(1 - \frac{1}{1 - \frac{(\omega d/2c)\sqrt{\varepsilon_i}}{\tan[(\omega d/2c)\sqrt{\varepsilon_i}]} - \frac{\varepsilon_i}{f(\varepsilon_m - \varepsilon_i)}} \right), \quad (5.6)$$

bajo la condición $k_i d_m \ll 1$. Por otro lado, el resultado para la componente ε_x se reduce a la fórmula (5.2) sin que se requiera ninguna condición adicional.

Nótese que la expresión de Rytov (5.1) para ε_y y ε_z se obtiene de la ecuación (5.6) en el límite $k_i d \rightarrow 0$ ($k_i = n_i \omega / c$), así como en el caso de pequeñas fracciones de llenado del metal ($f \ll 1$) y contraste dieléctrico relativamente moderado (i.e. $\varepsilon_i / f |\varepsilon_m - \varepsilon_i| \gg 1$). Sin embargo, cuando el contraste dieléctrico es suficientemente grande, a saber, cuando $d_m \sim c / \omega_p \ll d$ (i.e. $\varepsilon_i / f |\varepsilon_m - \varepsilon_i| \sim (\omega / \omega_p)(\omega d / c) \ll 1$), la fórmula (5.6) tiende a la permitividad (5.3) con la frecuencia de plasma (5.5) propuesta por Xu *et al* [68].

Todas las fórmulas anteriores para la permitividad describen a un cristal fotónico homogeneizado en el régimen de grandes longitudes de onda ($kd \ll 1$). En este capítulo, por el contrario, propondremos un método para calcular la permitividad efectiva para modos electromagnéticos que se propagan a lo largo de la dirección de crecimiento de la superred metalodieléctrica en el caso no local, es decir, los resultados serán válidos incluso cuando $kd \sim 1$.

5.1 Respuesta dieléctrica no local

Consideremos una superred que esté compuesta de capas alternantes con respuesta tanto dieléctrica como magnética. Los campos electromagnéticos que se propaguen a través de esa red deben satisfacer las ecuaciones de Maxwell,

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (5.7a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \quad (5.7b)$$

Las ecuaciones constitutivas están dadas por

$$\mathbf{D} = \varepsilon(x) \mathbf{E}(x), \quad (5.8a)$$

$$\mathbf{B} = \mu(x) \mathbf{H}(x), \quad (5.8b)$$

donde $\varepsilon(x)$ y $\mu(x)$ son funciones periódicas de la coordenada x . En el caso de campos \mathbf{E} y \mathbf{H} de la forma (3.2), sus componentes no nulas satisfacen

$$\frac{\partial H_z}{\partial x} = i \frac{\varepsilon \omega}{c} E_y, \quad (5.9a)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} = i \frac{\omega}{c} B_z. \quad (5.9b)$$

La solución al sistema de ecuaciones (5.9a, 5.9b), tiene la forma de ondas de Bloch:

$$E(x) = E_p(x) \exp(ik_x x), \quad (5.10a)$$

$$H(x) = H_p(x) \exp(ik_x x), \quad (5.10b)$$

donde $E_p(x)$ y $H_p(x)$ son funciones periódicas con el mismo periodo de la superred. Sustituyendo estas funciones en las ecuaciones (5.9a, 5.9b), se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\partial H_p}{\partial x} + ik_x H_p = i\frac{\omega}{c}\varepsilon(x)E_p(x). \quad (5.11)$$

$$\frac{\partial E_p}{\partial x} + ik_x E_p = i\frac{\omega}{c}\mu(x)H_p(x), \quad (5.12)$$

Promediamos estas ecuaciones sobre el periodo de la superred. Después de introducir el símbolo $\langle \dots \rangle$ para dicho promedio, podemos reescribir las ecuaciones anteriores como

$$\left\langle \frac{\partial H_p}{\partial x} \right\rangle + ik_x \langle H_p \rangle = i\frac{\omega}{c} \langle \varepsilon E_p \rangle. \quad (5.13)$$

$$\left\langle \frac{\partial E_p}{\partial x} \right\rangle + ik_x \langle E_p \rangle = i\frac{\omega}{c} \langle \mu H_p \rangle. \quad (5.14)$$

Dado que $\left\langle \frac{\partial E_p}{\partial x} \right\rangle = 0$ y $\left\langle \frac{\partial H_p}{\partial x} \right\rangle = 0$, las ecuaciones (5.13, 5.14), se reducen a

$$k_x \langle H_p \rangle = \frac{\omega}{c} \langle \varepsilon E_p \rangle. \quad (5.15)$$

$$k_x \langle E_p \rangle = \frac{\omega}{c} \langle \mu H_p \rangle. \quad (5.16)$$

Estas ecuaciones se pueden reescribir de la siguiente manera

$$k_x \langle H_p \rangle = \frac{\omega}{c} \varepsilon_{\text{ef}} \langle E_p \rangle, \quad (5.17)$$

$$k_x \langle E_p \rangle = \frac{\omega}{c} \mu_{\text{ef}} \langle H_p \rangle. \quad (5.18)$$

donde ε_{ef} y μ_{ef} representan las permitividad y permeabilidad efectivas de la superred:

$$\varepsilon_{\text{ef}}(k_x, \omega) = \frac{\langle \varepsilon E_p \rangle}{\langle E_p \rangle}. \quad (5.19)$$

$$\mu_{\text{ef}}(k_x, \omega) = \frac{\langle \mu H_p \rangle}{\langle H_p \rangle}. \quad (5.20)$$

Cabe destacar que los parámetros efectivos (5.19) y (5.20), los cuales dependen del vector de onda de Bloch (k_x), se han obtenido sin ninguna restricción para éste. Por tanto, la

relación de dispersión de los modos electromagnéticos, dentro de toda la primera zona de Brillouin, puede recuperarse mediante el uso de los parámetros efectivos (5.19) y (5.20):

$$k_x = \frac{\omega}{c} n_{\text{ef}}(k_x, \omega), \quad (5.21)$$

donde

$$n_{\text{ef}}(k_x, \omega) = \sqrt{\varepsilon_{\text{ef}}(k_x, \omega) \mu_{\text{ef}}(k_x, \omega)}. \quad (5.22)$$

En el cálculo de ε_{ef} y μ_{ef} resulta conveniente expresar las funciones periódicas $E_p(x)$ y $H_p(x)$, respectivamente, como los productos $E(x) \exp(-ik_x x)$ y $H(x) \exp(-ik_x x)$, donde $E(x)$ y $H(x)$ son soluciones de las ecuaciones de Maxwell (5.9) que en cada capa pueden expresarse en la forma (3.10). La aplicación de las condiciones de frontera para estos campos permite eliminar tres de las cuatro amplitudes (dos para cada capa) y, consecuentemente, que cada uno los promedios sobre el periodo de la superred ($\langle \varepsilon E_p \rangle$, $\langle E_p \rangle$, $\langle \mu H_p \rangle$, y $\langle H_p \rangle$) resulte proporcional a la amplitud despejada, la cual también se elimina al simplificar los cocientes de los promedios en (5.19) y (5.20).

5.1.1 Visible e infrarrojo cercano

Calculemos los parámetros efectivos (5.19) y (5.20) para una superred de metal y dieléctrico, con los parámetros de las capas dados en la Ref. [70]: el espesor de la capa metálica es $d_m = 0.5\delta$ ($\delta = c/\omega_p$), y el de la capa dieléctrica $d_i = 10\delta$. El índice de refracción del medio dieléctrico es $n_i = 1.5$ ($\varepsilon_i = 2.25$). En nuestros cálculos utilizaremos el modelo local de Drude-Lorentz con la frecuencia de plasma ω_p del Al y una constante de amortiguamiento $\nu = 0.00025\omega_p$ para las capas metálicas. En este caso, los componentes de la superred son materiales no magnéticos ($\mu_m = \mu_i = 1$) y según la definición de la permeabilidad magnética efectiva μ_{ef} (5.20), ésta también es igual a la unidad ($\mu_{\text{ef}} = 1$).

En la Fig. 5.1 se presenta la dependencia de la permitividad efectiva no local, ε_{ef} , en función de la frecuencia (panel a) calculada a partir de la expresión (5.19). Con estos resultados y las fórmulas (5.21) y (5.22) se obtuvo la relación de dispersión $k_x(\omega)$ (panel b) y el índice de refracción efectivo n_{ef} (panel c) dependiente de la frecuencia. Como se esperaba, en el rango de bajas frecuencias la permitividad efectiva ε_{ef} es, en una buena aproximación, real y negativa ($|\text{Re}\varepsilon_{\text{ef}}| \gg |\text{Im}\varepsilon_{\text{ef}}|$). En el panel (a) en la Fig. 5.1 se ve que la parte real de la permitividad efectiva (línea azul en la figura) tiene un cero que corresponde a la frecuencia de corte (o frecuencia de plasma efectiva) $\omega_{p,\text{ef}} = 0.121\omega_p$. Esta frecuencia de

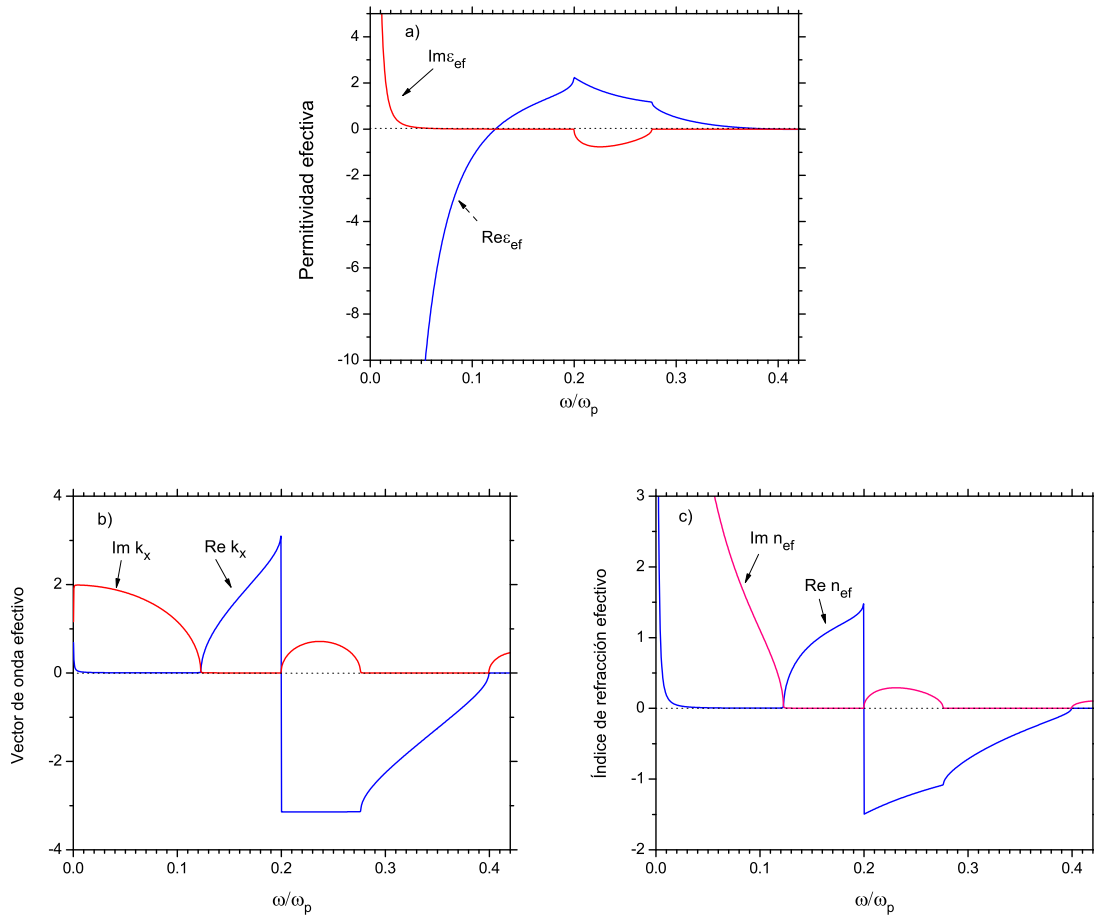


Figura 5.1: Permitividad, vector de onda, e índice de refracción efectivos versus frecuencia para una superred de aluminio y dieléctrico

corresponding to the top or width of the low-frequency bandgap ($0 < \omega < \omega_{p,\text{ef}}$) in the photonic band structure for the modes that propagate along the direction of growth of the superlattice (panel b). It is important to highlight that, unlike local homogenization theories, the dispersion relation $k_x(\omega)$ (panel b) calculated with the formula (5.21) and the effective parameters $\epsilon_{\text{ef}}(\omega)$ (panel a) and $\mu_{\text{ef}} = 1$ describes not only the low-frequency bandgap, characteristic for metalodielectric superlattices, but also its entire photonic band structure. In Fig. 5.1 one can observe the two first pass bands where the wave vector is real and takes values within the first Brillouin zone. In the frequency interval between these two pass bands, there is a bandgap where k_x is complex with a significant imaginary part. The

panel (c) de la Fig. 5.1 muestra la dependencia del índice de refracción efectivo n_{ef} respecto de la frecuencia ω , la cual es congruente con la relación de dispersión (panel b). La primera banda de paso para la superred metalodieléctrica considerada aparece en el intervalo de frecuencias que corresponde a los rangos del infrarrojo cercano y del visible, muy por arriba del lejano infrarrojo donde la no localidad del metal se manifiesta (véase la ecuación (4.10)), por lo que el uso del modelo local de Drude-Lorentz resulta justificable. Nótese que en la segunda banda fotónica tanto k_x como n_{ef} son ambos negativos con pérdidas de energía prácticametne nulas.

Aunque en el rango del visible y del infrarrojo cercano los efectos de la no localidad del metal no se manifiestan, se debe tomar en cuenta que si el medio dieléctrico es un semiconductor, entonces este último podría tener una respuesta dieléctrica cerca de las resonancias excitónicas (vea la sección 2.2). La respuesta efectiva de estos sistemas puede calcularse con el formalismo aquí desarrollado y con las expresiones para los campos eléctrico y magnético en las placas semiconductoras. Tales expresiones se han reportado, por ejemplo, en los trabajos [37, 95].

5.1.2 Infrarrojo lejano

Apliquemos ahora las fórmulas (5.19) y (5.20) al mismo sistema de capas metálicas y dieléctricas que fue estudiado en en la sección 4.2. En virtud de que los materiales que componen la superred son Al y vacío, la permeabilidad efectiva del sistema es $\mu_{\text{ef}} = 1$. La respuesta dieléctrica no local del sistema se calculará utilizando el modelo local de Drude-Lorentz (2.1) para describir la permitividad dependiente de la frecuencia de las capas metálicas con espesor $d_m = 4\delta$ y constante de amortiguamiento $\nu = 0.00025\omega_p$. El espesor de las capas de vacío es $d_i = \omega_1/\pi c$, donde $\omega_1 = 9.708 \times 10^{-4}\omega_p$.

Las paneles (a) de las figuras 5.2 y 5.3 exhiben la dependencia de la permitividad efectiva (no local) ε_{ef} de la superred metalodieléctrica en las cercanías de las cuatro primeras resonancias ($j = 1, 2, 3, 4$) de Fabry-Perot que ocurren dentro de la placa dieléctrica. Estas resonancias aparecen el rango de frecuencias del lejano infrarrojo. Con la permitividad efectiva ε_{ef} calculada y $\mu_{\text{ef}} = 1$, se obtuvo la relación de dispersión $k_x(\omega)$ para los modos electromagnéticos que se propagan a lo largo de la dirección de crecimiento de la superred (véa los paneles (b) en las Figs. 5.2 y 5.3). Es destacable que la relación de dispersión $k_x(\omega)$, obtenida a partir de la permitividad y permeabilidad efectivos, coincide plenamente

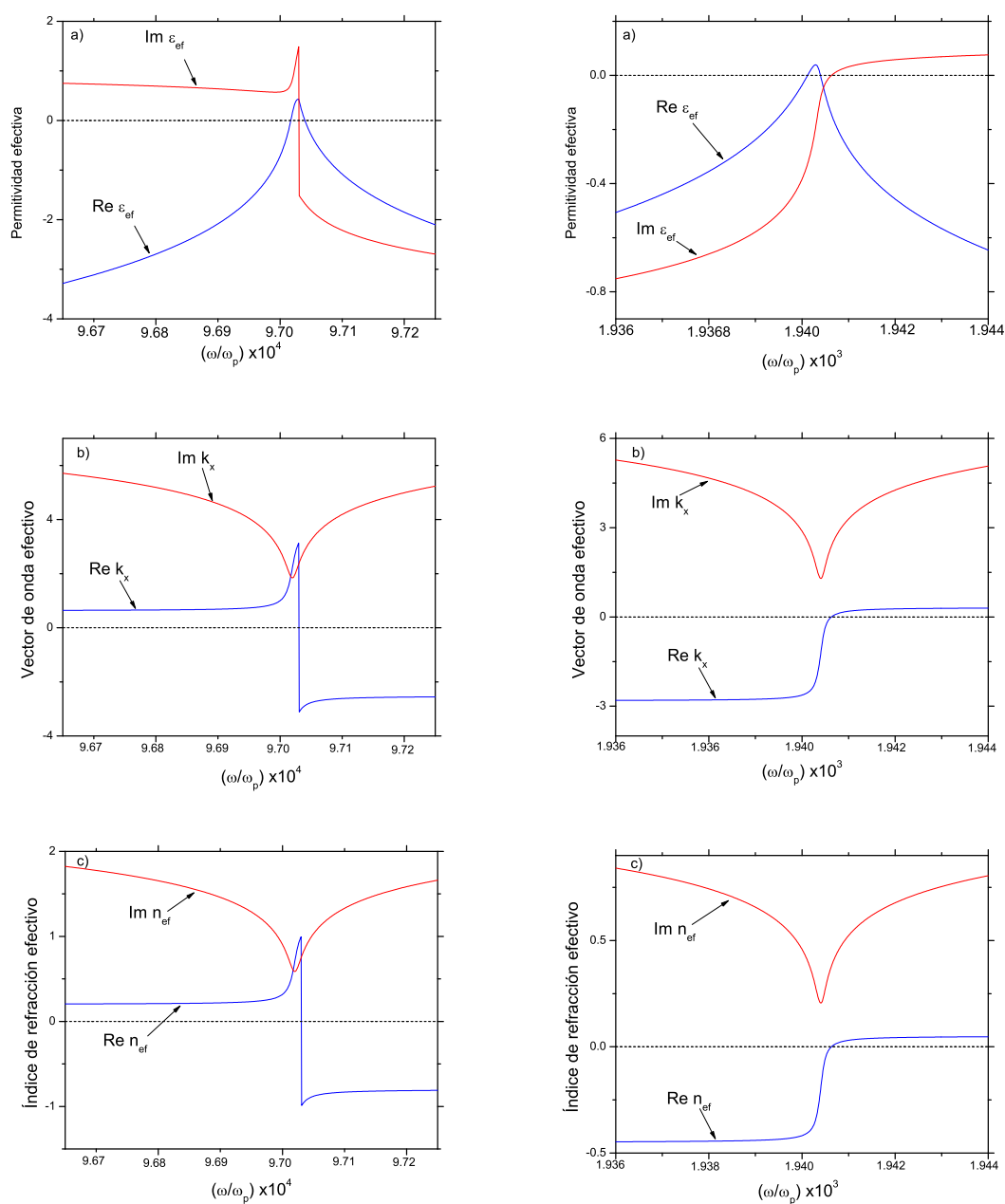


Figura 5.2: Permittividad, vector de onda, e índice de refracción efectivos versus frecuencia para una superred de alúmina y vacío como en la Fig. 4.4. El panel izquierdo (derecho) corresponde al intervalo de frecuencias alrededor de la resonancia Fabry-Pot $j = 1$ ($j = 2$).

con la relación de dispersión dada por la ecuación (3.86). Esto es evidente si se comparan las gráficas presentadas en los paneles (b) de las Figs. 5.2 y 5.3 con las curvas, predichas

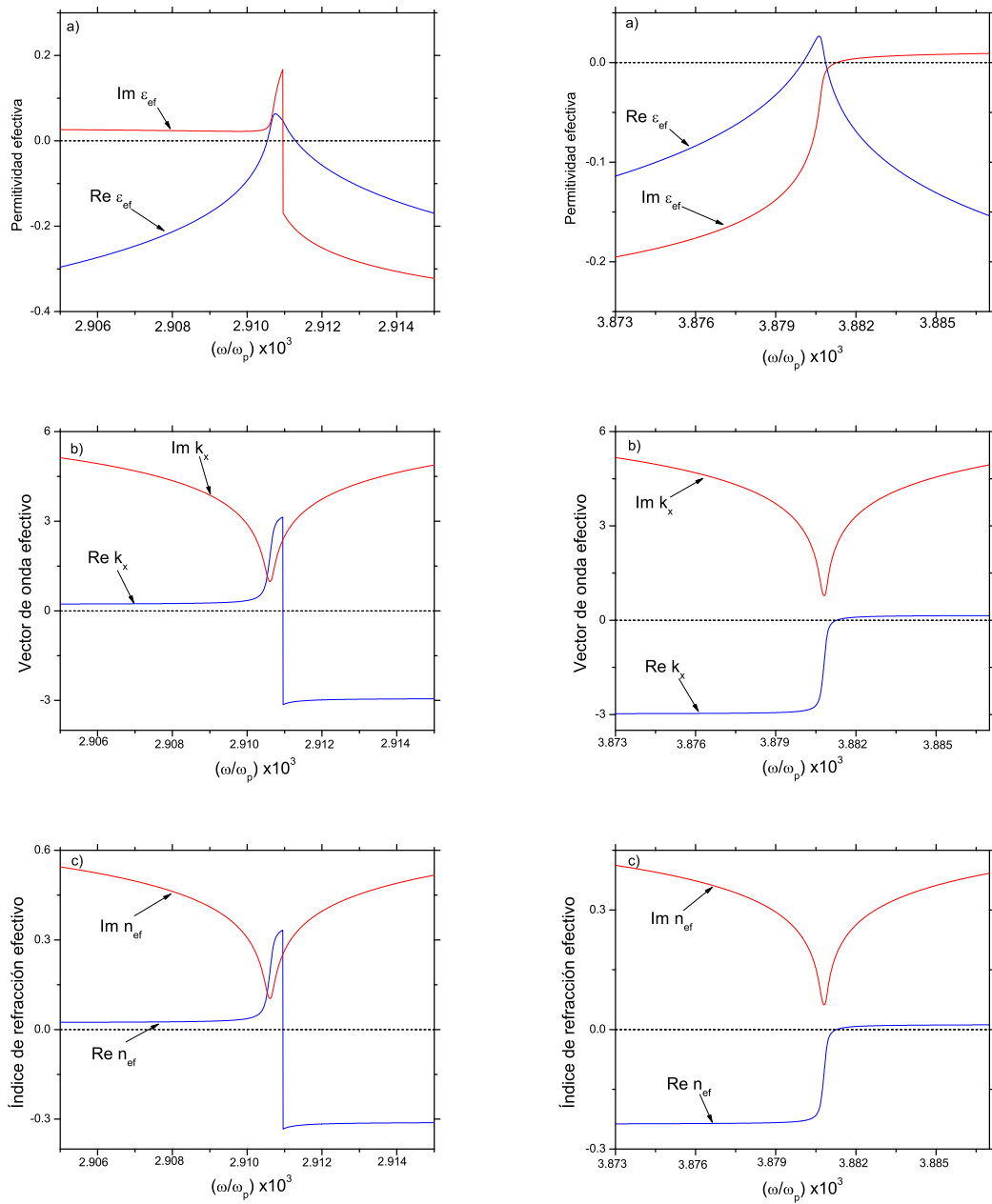


Figura 5.3: Permitividad, vector de onda, e índice de refracción efectivos versus frecuencia para una superred de aluminio y vacío como en la Fig. 4.4. El panel izquierdo (derecho) corresponde al intervalo de frecuencias alrededor de la resonancia Fabry-Pot $j = 3$ ($j = 4$).

con el modelo de Drude-Lorentz para la permitividad del Al, en los cuatro paneles de la Fig. 4.4. Como se había comentado anteriormente, la solución $k_x(\omega)$ se elige imponiendo

que su parte imaginaria sea positiva ($\text{Im}k_x > 0$). Debido a que la parte *real* del número de onda k_x está limitada a la primera zona de Brioullin, ésta experimenta saltos en la vecindad de las frecuencias de resonancia de Fabry-Perot. Para el caso del modelo de Drude-Lorentz, estos saltos se observan cerca de las resonancias $j = 1$ y $j = 3$. Es interesante que la parte *imaginaria* de la permitividad efectiva ε_{ef} exhibe saltos en las mismas frecuencias que $\text{Re}k_x$ (compare los paneles (a) y (b) para las resonancias $j = 1, 3$). Los paneles (c) de las Figs. 5.2 y 5.3 muestran la dependencia del índice de refracción como función de la frecuencia en las cercanías de las primeras cuatro resonancias de Fabry-Perot. En general, el índice n_{ef} es una cantidad compleja. Su parte imaginaria, $\text{Im}n_{\text{ef}}$ es mínima en las bandas fotónicas de “paso”, las cuales están por debajo de las frecuencias de resonancia ω_j ($j = 1, 2, 3, 4$). El hecho de que $\text{Im}n_{\text{ef}}$ sea notable se debe a que las bandas fotónicas de resonancia Fabry-Perot aparecen en frecuencias no mucho mayores que la tasa de relajación de los electrones, ν . Por ejemplo, la frecuencia de la primera resonancia, ω_1 , es apenas cuatro veces mayor que ν ($\omega_1 \approx 4\nu$). Al igual que $\text{Re}k_x$, la parte real del índice de refracción, $\text{Re}n_{\text{ef}}$ experimenta saltos en las bandas correspondientes a $j = 1$ y $j = 3$. Por esta razón, en intervalos de frecuencia relativamente angostos y cercanos al mínimo de $\text{Im}n_{\text{ef}}(\omega)$, la parte real del índice de refracción efectivo ($\text{Re}n_{\text{ef}}$) para la superred metalodieléctrica resulta ser negativa. Cerca de las frecuencias de la segunda ($j = 2$) y cuarta ($j = 4$) resonancias de Fabry-Perot también se observan intervalos angostos donde ambos $\text{Re}k_x$ y $\text{Re}n_{\text{ef}}$ son negativos, mientras que las partes imaginarias $\text{Re}k_x$ y $\text{Im}n_{\text{ef}}$ están cerca de su valor mínimo. A diferencia de las resonancias impares ($j = 1, 3$), las tres cantidades efectivas, ε_{ef} , k_x , y n_{ef} son funciones continuas de la frecuencia ω en los alrededores de las resonancias $j = 2, 4$.

Los resultados obtenidos en esta subsección ilustran la respuesta dieléctrica efectiva no local de una superred metalodieléctrica en el rango de frecuencias del infrarrojo lejano. En particular, se ha demostrado que a pesar de utilizar un modelo local para la respuesta dieléctrica de las capas metálicas y dieléctricas, la respuesta efectiva de la superred depende fuertemente tanto de la frecuencia como del vector de onda. Por otro lado, como se ha comentado en los capítulos previos, precisamente en el rango de frecuencias del infrarrojo lejano los efectos de dispersión espacial en el metal pueden alterar la relación de dispersión de los modos electromagnéticos. Consecuentemente, la respuesta dieléctrica efectiva de la superred también se verá modificada. El cálculo de los parámetros efectivos se puede llevar a cabo con las fórmulas (5.19) y (5.20), considerando que los campos en las capas metálicas están dados por las expresiones (3.69). Finalmente, otro aspecto que debe considerarse

en el infrarrojo lejano es la posibilidad de que el medio dieléctrico sea resonante. En este caso, los parámetros efectivos se calculan con el método de homogeneización propuesto aquí introduciendo una función dieléctrica resonante que puede ser modelada con el oscilador de Lorentz (4.11).

5.2 Respuesta metamaterial

En la sección anterior hemos derivado y aplicado las fórmulas (5.19)-(5.22) para el cálculo de parámetros efectivos de superredes. Estos parámetros dependen explícitamente tanto de la frecuencia ω como del vector de onda k_x de los modos electromagnéticos. Dado que los componentes considerados fueron materiales no magnéticos, la respuesta efectiva de las superredes fue meramente dieléctrica no local. Por otro lado, en el Capítulo 2 hemos comentado que la respuesta dieléctrica no local puede reescribirse, en general, en una respuesta bianisótropa efectiva, si los campos auxiliares (campos magnético \mathbf{H} y de desplazamiento \mathbf{D}) son redefinidos como se hizo, por ejemplo, en el trabajo [12] comentado en la sección 2.4. En esta sección derivaremos fórmulas explícitas para los parámetros de una respuesta metamaterial efectiva no local de la superred tal que ésta exhiba un comportamiento magnético incluso cuando sus componentes no sean materiales magnéticos. A diferencia del trabajo [12], los parámetros efectivos permitirán recuperar la relación de dispersión exacta de los modos electromagnéticos en toda la primera zona de Brioullin.

Según los resultados de la sección anterior (véase las Figs. 5.1, 5.2, y 5.3), en algunos intervalos de frecuencia la parte imaginaria de la permitividad efectiva, $\text{Im}\varepsilon_{\text{ef}}$, resulta ser negativa. Dado que esta cantidad se asocia con las pérdidas de energía en el medio, su signo debería ser positivo. Esto se puede lograr si redefinimos los campos auxiliares, a saber, el campo magnético y el de desplazamiento a nivel “macro” como

$$\langle \tilde{H}_p \rangle \equiv \eta \langle H_p \rangle, \quad (5.23)$$

$$\langle \tilde{D}_p \rangle \equiv \eta \langle \varepsilon E_p \rangle, \quad (5.24)$$

donde

$$\eta \equiv \text{sgn} \left[\text{Im} \left(\frac{\langle \varepsilon E_p \rangle}{\langle E_p \rangle} \right) \right]. \quad (5.25)$$

Con esta redefinición de los campos magnético y de desplazamiento las ecuaciones de

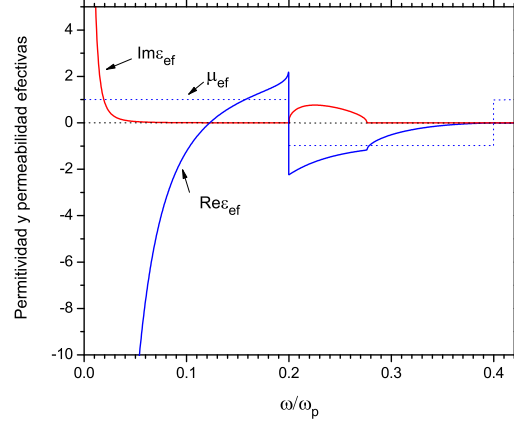


Figura 5.4: Parámetros efectivos para una superred de Al y dieléctrico

Maxwell (5.15) y (5.16) se pueden reescribir como

$$k_x \langle \tilde{H}_p \rangle = \frac{\omega}{c} \varepsilon_{\text{ef}} \langle E_p \rangle, \quad (5.26)$$

$$k_x \langle E_p \rangle = \frac{\omega}{c} \mu_{\text{ef}} \langle \tilde{H}_p \rangle. \quad (5.27)$$

donde ε_{ef} y μ_{ef} representan otra pareja de permitividad y permeabilidad efectivas de la superred:

$$\varepsilon_{\text{ef}}(k_x, \omega) = \eta \frac{\langle \varepsilon E_p \rangle}{\langle E_p \rangle}. \quad (5.28)$$

$$\mu_{\text{ef}}(k_x, \omega) = \frac{1}{\eta} \frac{\langle \mu H_p \rangle}{\langle H_p \rangle}. \quad (5.29)$$

Esta nueva pareja de parámetros efectivos permite recuperar la relación de dispersión exacta de los modos electromagnéticos, así como el mismo índice de refracción efectivo n_{ef} mediante el uso de las ecuaciones (5.21) y (5.22). Este resultado demuestra que la cantidad física relevante en el caso dinámico es el índice de refracción ya que existen múltiples soluciones al problema de la determinación de los parámetros efectivos para los metamateriales.

En la figura 5.4 se muestra la dependencia de los parámetros efectivos (permitividad y permeabilidad) en función de la frecuencia, los cuales fueron calculados con las fórmulas (5.28) y (5.29) para una superred de Al y dieléctrico como la considerada en la subsección 5.1.1 (figura 5.1). Los parámetros materiales utilizados se dan en dicha subsección. Como se comentó ahí, el modelo local de Drude-Lorentz es apropiado para describir la

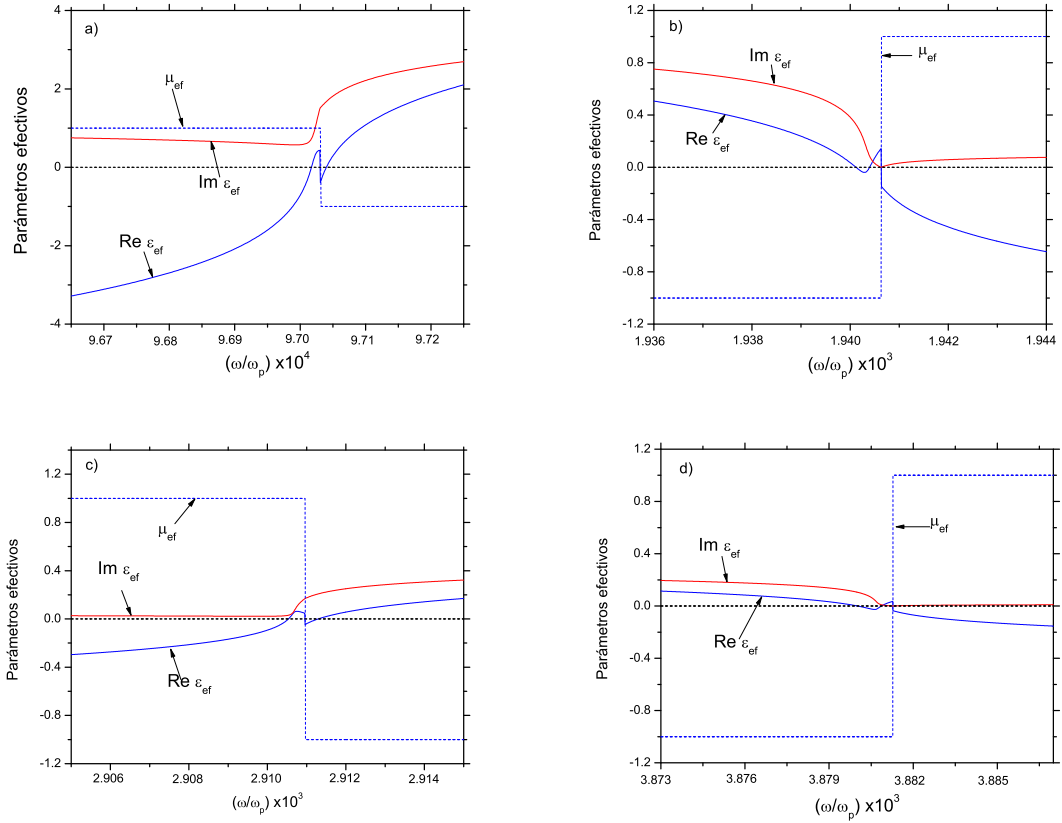


Figura 5.5: Parámetros efectivos para una superred de Al y vacío

respuesta dieléctrica del metal en el visible y el infrarrojo cercano. Las dos primeras bandas fotónicas de paso para la superred de Al y dieléctrico, aquí considerada, están precisamente en esos rangos de frecuencias (véase $k_x(\omega)$ en el panel (b) de la figura 5.1). Según la definición (5.28) de la permitividad efectiva ϵ_{ef} de la respuesta metamaterial, su parte imaginaria es positiva para cualquier frecuencia ω (vea la figura 5.4). Sin embargo, esta redefinición de la permitividad efectiva conduce a que la permeabilidad efectiva μ_{ef} (5.29) tenga que ser negativa (de hecho, $\mu_{\text{ef}} = -1$) en ciertos rangos de frecuencia para que puedan calcularse el vector de onda k_x y el índice de refracción n_{ef} con las fórmulas (5.21) y (5.22) para un medio homogéneo. Nótese que la primera (segunda) banda fotónica de paso se caracteriza por tener permitividad y permeabilidad efectivas simultáneamente positivas (negativas). En conclusión, con la nueva definición de la permitividad y permeabilidad efectivas, en la segunda banda fotónica de paso la superred metalodieléctrica se comporta

como un metamaterial doblemente negativo con índice de refracción también negativo (vea el panel (c) de la figura 5.1).

Se calcularon también los parámetros efectivos, dados por las fórmulas (5.28) y (5.29), para una superred de Al y vacío como la que se estudió en la subsección 5.1.2 (figuras 5.2 y 5.3). Al igual que ahí, se aplicó el modelo de Drude-Lorentz para describir la permitividad del componente metálico. Otros parámetros del sistema se indican en dicha subsección. Los parámetros efectivos calculados se muestran en la figura 5.5 y corresponden a las primeras cuatro bandas fotónicas. Como ya se había mostrado en los paneles (b) de las figuras 5.2 y 5.3, las bandas fotónicas de paso son poco dispersivas y aparecen en el rango del infrarrojo lejano donde el efecto del parámetro de amortiguamiento es importante. En concordancia con la nueva definición para la permitividad efectiva (5.28), su parte imaginaria es positiva en cada banda de paso y disminuye conforme se incrementa la frecuencia (compare los paneles de la figura 5.5). El requerimiento de que la parte imaginaria de la permitividad efectiva sea positiva conduce a que la permeabilidad efectiva sea negativa ($\mu_{\text{ef}} = -1$) en ciertos intervalos de frecuencia. Esto, además, permite aplicar las fórmulas (5.21) y (5.22) para el cálculo del vector de onda y el índice de refracción de la superred homogeneizada. Note que en las bandas de paso, donde las pérdidas son pequeñas, la partes reales de la permitividad y la permeabilidad son positivas (negativas) en la primera y tercera (segunda y cuarta) bandas fotónicas. Es decir, en la segunda y cuarta banda fotónica de paso la superred se comporta como un metamaterial doblemente negativo. En esas mismas bandas, la parte real del índice de refracción es también negativo (vea los paneles (c) de las figuras 5.2 y 5.3).

Capítulo 6

Conclusiones

Del estudio de los *Efectos de Dispersión Espacial en Sistemas Metalodieléctricos Periódicos* que condujo a los resultados presentados en los capítulos previos de esta tesis se derivan las siguientes conclusiones finales.

1. El espectro fotónico de una superred de placas de material polar y capas metálicas suficientemente delgadas exhibe bandas de paso angostas como resultado del fuerte contraste entre las impedancias de los componentes. Estas bandas fotónicas angostas se atribuyen a resonancias de Fabry-Perot en la placa del material polar relativamente gruesa. Hay una banda prohibida debido a la existencia de la brecha polaritónica. Una diferencia fundamental con la situación ordinaria, cuando el dieléctrico tiene una relación de dispersión lineal del fotón, consiste en que en el caso de un material polar las resonancias de Fabry-Perot están dadas por la relación de dispersión no lineal del polaritón.
2. En conformidad con el formalismo de la ecuación cinética de Boltzmann, la no localidad del metal se manifiesta claramente en el rango de los THz y, por consiguiente, el efecto de la dispersión espacial sobre la estructura de bandas fotónicas de la superred puede ser fuerte cuando las bandas de resonancia de Fabry-Perot están en ese rango de frecuencias.
3. Además del efecto de la dispersión espacial, el efecto de tamaño (i.e. el efecto de la relación entre el espesor de la placa metálica y la profundidad de piel) altera notablemente las impedancias superficiales de la placa metálica y, por tanto, la estructura de bandas fotónicas de la superred metalodieléctrica.

4. Los resultados para el espectro fotónico de una superred de metal no local y dieléctrico difieren notablemente de las predicciones del modelo local de Drude-Lorentz. Las diferencias se observan no sólo en la magnitud, sino también en el signo de la parte real del número de onda de Bloch en las bandas de resonancia de Fabry-Perot.
5. En el espectro fotónico de una superred metalodieléctrica se observan saltos de la parte real del número de onda de Bloch, $\text{Re}\kappa$, los cuales ocurren debido a que $\text{Re}\kappa$ está limitado a la primera zona de Brillouin y el requerimiento de que la parte imaginaria $\text{Im}\kappa$ sea positiva. Estos saltos se predicen en diferentes bandas de resonancia Fabry-Perot por los modelos no local y local.
6. El valor mínimo de la parte imaginaria del número de onda de Bloch, $\text{Im}\kappa$, en las bandas de resonancia prácticamente no varía de banda a banda según del formalismo no local.
7. Ya que la superred está compuesta de un metal no local y un dieléctrico *resonante* (ya sea un cristal iónico o un semiconductor heteropolar), la estructura de bandas fotónicas se altera en frecuencias correspondientes a la banda prohibida (*reststrahlen*), la cual aparece precisamente en el rango de los THz. En el espectro fotónico aparece una banda prohibida que coincide con la banda prohibida polaritónica. Por otro lado, las bandas de paso angostas (bandas de resonancia de Fabry-Perot) que se observan por arriba y debajo de la banda *reststrahlen* son fuertemente alteradas por la dispersión espacial del metal si estas aparecen en frecuencias donde la diferencia entre las impedancias superficiales de la placa metálica, predichas por los modelos cinético y local, es máxima.
8. La respuesta óptica de una superred de metal y dieléctrico puede describirse con una función dieléctrica efectiva no local, a saber, una permitividad efectiva dependiente del vector de onda, con la cual se puede reproducir la estructura de bandas fotónicas en toda la primera zona de Brillouin.
9. A partir de la redefinición del campo magnético y del vector de desplazamiento, la respuesta dieléctrica no local de una superred de metal y dieléctrico puede transformarse en una respuesta metamaterial no local, o sea, el sistema puede caracterizarse por una respuesta dieléctrico-magnética. En las bandas de dispersión negativa de la

estructura de bandas fotónicas de la superred metalodiélectrica, la permitividad y la permeabilidad efectivas son ambas negativas, al igual que el índice de refracción efectivo.

Bibliografía

- [1] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, J. N. Winn, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light* (Princeton University Press, Princeton, 2008).
- [2] P. Markos and C. M. Soukoulis, *Wave Propagation. From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials* (Princeton University Press, Princeton, N J, 2008).
- [3] V. G. Veselago, Usp. Fiz. Nauk. **92**, 517 (1967) [V. G. Veselago, Sov. Phys.—Usp. **10**, 509 (1968)].
- [4] J. B. Pendry, A.J. Holden, D.J. Robbins, W.J. Stewart, IEEE Trans. Microwave Theory Tech. **47**, 2075 (1999).
- [5] D. Smith, W. Padilla, D. Vier, S. Nemat-Nasser and S. Schultz, Phys. Rev. Lett. **84**, 4184 (2000).
- [6] P. V. Parimi, W. T. Lu, P. Vodo, S. Sridhar, Nature **426**, 404 (2003).
- [7] E. Cubukcu, K. Aydin, E. Ozbay, S. Foteinopolou, C. M. Soukoulis, Phys. Rev. Lett. **91**, 207401 (2003).
- [8] V. Kuzmiak and A. A. Maradudin, Phys. Rev. B **55**, 7427 (1997).
- [9] P. Halevi, A. A. Krokhin and J. Arriaga, Phys. Rev. Lett. **82**, 719 (1999).
- [10] D. Soto-Puebla, M. Xiao, F. Ramos-Mendieta, Phys. Lett. A **326**, 273 (2004).
- [11] S. Datta, C. T. Chan, K. M. Ho, and C. M. Soukoulis, Phys. Rev. B **48**, 14936 (1993).
- [12] J. A. Reyes-Avenidaño, U. Algreto-Badillo, P. Halevi and F. Pérez-Rodríguez, New J. Phys. **13**, 073041 (2011).

-
- [13] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (John Wiley & Sons 1975).
- [14] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media* (Elsevier Butterworth-Heinemann 2004).
- [15] V. M. Shalaev, W. Cai, U. K. Chettiar, H. K. Yuan, A. K. Sarychev, V. P. Drachev and A. V. Kildishev, *Opt. Lett.* **30**, 3356.
- [16] S. Zhang, W. Fan, B. K. Minhas, A. Frauenglass, K. J. Malloy and S. R. J. Brueck, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 037402.
- [17] V. M. Agranovich, V. L. Ginzburg, *Crystal Optics with Spatial Dispersion, and Excitons* (*Springer Series in Solid State Sciences* vol 42) (Berlin: Springer).
- [18] E. U. Condon, *Rev. Mod. Phys.* **9**, 432 (1937).
- [19] R. M. Hornreich and S. Shtrikman, *Phys. Rev.* **171**, 1065 (1968)
- [20] J. A. Reyes-Avenidaño, M. P. Sampedro, E. Juárez-Ruiz and F. Pérez-Rodríguez, *J. Opt.* **16**, 065102 (2014).
- [21] A. A. Abrikosov, *Fundamentals of the Theory of Metals* (Elsevier, Amsterdam, 1988).
- [22] E. A. Kaner, A. A. Krokhin, N. M. Makarov, *Spatial dispersion and surface electromagnetic absorption in metals*, en el libro *Spatial Dispersion in Solids and Plasmas*, Editado por P. Halevi (Elsevier, Amsterdam, 1992) Vol. 1, Capítulo 2.
- [23] G. E. Reuter and E. H. Sondheimer, *Proc. Roy. Soc.* **195A**, 336 (1948).
- [24] A. B. Pippard, *Proc. Roy. Soc.* **191A**, 385 (1947).
- [25] A. B. Pippard, *Proc. Roy. Soc.* **1224A**, 273 (1954).
- [26] S. I. Pekar, *Soviet Phys.- JETP* **6**, 785 (1958)
- [27] S. I. Pekar, *Soviet Phys.- Solid State* **4**, 953 (1962).
- [28] J. J. Hopfield and D. G. Thomas, *Phys. Rev.* **132**, 563 (1963).
- [29] G. H. Cocoletzi, W. Luis Mochán, *Surface Science Reports*, **57** (2005).

- [30] P. Halevi, *Exciton-Polaritons and optical properties of direct-gap semiconductors*, en el libro *Spatial Dispersion in Solids and Plasmas*, Editado por P. Halevi (Elsevier, Amsterdam, 1992) Vol. 1, Capítulo 6.
- [31] M. F. Deigen, M. D. Glinchuk, *Fiz, Tverd. Tela*, **5**, 3250 (1963) [M. F. Deigen, M. D. Glinchuk, *Sov. Phys. Solid State*, **5**, 2377 (1964)].
- [32] S. Sakoda, *J. Phys. Soc. Jpn.* **40**, 152 (1976).
- [33] I. Balslev, *Phys. Status Solidi B* **88**, 155 (1978).
- [34] R. Ruppin, *Phys. Rev. B* **29**, 2232 (1983).
- [35] B. Flores-Desirena, F. Pérez-Rodríguez and P. Halevi, *Phys. Rev. B* **50**, 5404 (1994).
- [36] B. Flores-Desirena, A. Silva-Castillo, F. Pérez-Rodríguez, *J. Appl. Phys.* **93**, 3308 (2003).
- [37] R. Márquez-Islas, B. Flores-Desirena, and F. Pérez-Rodríguez, *Photonics and Nanostructures – Fundamentals and Applications* **10**, 69 (2012).
- [38] A. A. Krokhin, P. Halevi and J. Arriaga, *Phys. Rev. B* **65**, 115208 (2002).
- [39] D. R. Smith, D. C. Vier, T. H. Koschny and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. E* **71**, 036617 (2005).
- [40] X. Chen, B. Wu, J. Kong and T. M. Grzegorzcyk, *Phys. Rev. E* **71**, 046610 (2005).
- [41] C. R. Simovski and S. A. Tretyakov, *Phys. Rev. B* **75**, 195111 (2007).
- [42] C. Menzel, C. Rockstuhl, T. Paul and F. Lederer, *Phys. Rev. B* **77**, 195328 (2008).
- [43] D. R. Smith, D. C. Vier, N. Kroll and S. Schultz, *Appl. Lett.* **77**, 2246 (2000).
- [44] D. R. Smith and J. B. Pendry, *J. Opt. Soc. Am. B* **23**, 391 (2006).
- [45] I. Tsukerman, *J. Opt. Soc. Am. B* **28**, 577 (2011).
- [46] G. P. Ortiz, B. E. Martínez-Zérega, B. S. Mendoza and W. L. Mochán, *Phys. Rev. B* **79** 245132 (2009).
- [47] W. L. Mochán and R. G. Barrera, *Phys. Rev. B* **32**, 4984 (1985).

- [48] V. Cerdán-Ramírez, B. Zenteno-Mateo, M. P. Sampedro, M. A. Palomino-Ovando, B. Flores-Desirena, and F. Pérez-Rodríguez, *J. Appl. Phys.* **106**, 103520 (2009).
- [49] I. M. Lifshits, M. Ya. Azbel, and M. Kaganov, *Electron Theory of Metals* (Consultants Bureau, New York, 1973).
- [50] K. L. Kliewer and R. Fuchs, *Phys. Rev.* **172**, 607 (1968).
- [51] R. Fuchs and K. L. Kliewer, *Phys. Rev.* **185**, 905 (1969).
- [52] G. Mukhopadhyay and S. Lundqvist, *Physica Scripta.* **17**, 69 (1978).
- [53] R. R. Gerhardts, *Physica Scripta.* **28**, 235 (1983).
- [54] P. Markoš and C. M. Soukoulis, *Wave Propagation. From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials* (Princeton University Press, Princeton, NJ, 2008).
- [55] F. Bloch, *Über die Quantenmechanik der Electron in Kristallgittern*, *Z. Physik* **52**, 555 (1928).
- [56] G. Floquet, *Sur les Équations Differentielles Lineaires à Coefficients Periodiques*, *Ann. de l'Ecole Normale* **12**, 47 (1883).
- [57] A. Yariv and P. Yeh, *Optical Waves in Crystals. Propagation and Control of Laser Radiation* (Wiley, NY, 1984).
- [58] R. M. Walser, *Proc. SPIE* **4467**, 1 (2001).
- [59] F. Capolino, *Theory and phenomena of metamaterials* (Boca Raton: CRC Press) (2009).
- [60] V. M. Shalaev, *Nature Photonics* **1**, 41 (2007).
- [61] C. M. Soukoulis and M. Wegener, *Nature Photonics* **5**, 523 (2011).
- [62] Z. Li, M. Mutlu and E. Ozbay, *J. Opt.* **15**, 023001 (2013).
- [63] R. A. Shelby, D. R. Smith, S. Schultz, *Science* **292**, 77 (2001).
- [64] J. Zhou, L. Zhang, G. Tuttle, T. Koschny, C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **73**, 041101 (2006).

- [65] V. A. Podolskiy and E. E. Narimanov, *Phys. Rev. B* **71**, 201101 (2005).
- [66] B. Wood, J. B. Pendry and D. P. Tsai, *Phys. Rev. B* **74**, 115116 (2006).
- [67] A. L. Rakhmanov, A. L. Yampol'skii, V.A., Fan, J. A. Fan, F. Capasso and F. Nori, *Phys. Rev. B* **81**, 075101 (2010).
- [68] X. Xu, Y. Xi, D. Han, X. Liu, J. Zi and Z. Zhu, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 091112 (2005).
- [69] J. Elser, V. A. Podolskiy, I. Salakhutdinov, and I. Avrutsky, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 191109 (2007).
- [70] B. Zenteno-Mateo, V. Cerdán-Ramírez, B. Flores-Desirena, M. P. Sampedro, E. Juárez-Ruiz, and F. Pérez-Rodríguez, *PIER Lett.*, **22**, 165 (2011).
- [71] A. Orlov, I. Iorsh, P. Belov, and Y. Kivshar, *Opt. Express* **21**, 1593 (2013).
- [72] A. Paredes-Juárez, F. Díaz-Monge, N. M. Makarov, and F. Pérez-Rodríguez, *JETP Letters* **90**, 623 (2009).
- [73] A. Paredes-Juárez, D. A. Iakushev, B. Flores-Desirena, N. M. Makarov, F. Pérez-Rodríguez, *Opt. Express* **22**, 7581 (2014).
- [74] M. Sigalas, C. M. Soukoulis, E. N. Economou, C. T. Chan, and K. M. Ho, *Phys. Rev. B* **48**, 14121 (1993).
- [75] M. M. Sigalas, C. M. Soukoulis, C. T. Chan, and K. M. Cho, *Phys. Rev. B* **49**, 11080 (1994).
- [76] W. Zhang, A. Hu, X. Lei, N. Xu, and N. Ming, *Phys. Rev. B* **54**, 10280 (1996).
- [77] W. Zhang, A. Hu and N. Ming, *J. Phys.: Condens. Matter* **9** 541 (1997).
- [78] V. Kuzmiak, A. A. Maradudin, and A. R. McGurn, *Phys. Rev. B* **55**, 4298 (1997).
- [79] W. Zhang, Z. Wang, A. Hu and N. Ming, *J. Phys.: Condens. Matter* **12**, 5307 (2000).
- [80] A. Y. Sivachenko, M. E. Raikh, and Z. V. Vardeny, *Phys. Rev. A* **64**, 013809 (2001).
- [81] K. C. Huang, P. Bienstman, J. D. Joannopoulos, K. A. Nelson and S. Fan, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 196402 (2003).

-
- [82] K. C. Huang, P. Bienstman P, J. D. Joannopoulos, K. A. Nelson and S. Fan, *Phys. Rev. B* **68**, 075209 (2003).
- [83] Ovidiu Toader and Sajeew John, *Phys. Rev. E* **70**, 046605 (2004).
- [84] G. Gantzounis and N. Stefanou, *Phys. Rev. B* **75**, 193102 (2007).
- [85] A. H. Baradaran-Ghasemi, S. Mandegarian, H. Kebriti, and H. Latifi, *J. Opt.* **14**, 055103 (2012).
- [86] Gandhi Alagappan and Alexei Deinega, *Progress In Electromagnetics Research B* **52**, 1 (2013).
- [87] S. Foteinopoulou, M. Kafesaki, E. N. Economou, and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **84**, 035128 (2011).
- [88] A. Reyes-Coronado, M. F. Acosta, R. I. Merino, V. M. Orera, G. Kenanakis, N. Katsarakis, M. Kafesaki, Ch. Mavidis, J. García de Abajo, E. N. Economou, and C. M. Soukoulis, *Opt. Express* **20**, 14663 (2012).
- [89] V. Yannopapas and A. Moroz, *J. Phys.:Condens. Matter* **17**, 3717 (2005).
- [90] T. Ruf, J. Serrano, M. Cardona, P. Pavone, M. Pabst, M. Krisch, M. D'Astuto, T. Suski, I. Grzegory, and M. Leszczynski, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 906 (2001).
- [91] S. M. Rytov, *Sov. Phys. JETP* **2**, 466 (1956).
- [92] D. J. Bergman and D. Stroud, *Solid State Phys.* **46**, 147 (1992).
- [93] J. B. Pendry, A. J. Holden, W. J. Stewart, and I. Youngs, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4773 (1996).
- [94] J. Manzanarez-Martínez, *Progress In Electromagnetics Research M* **13**, 189 (2010).
- [95] R. Márquez-Islas, B. Flores-Desirena, and F. Pérez-Rodríguez, *J. Nanosci. Nanotechnol.* **8**, 6584 (2008).



MEMORANDUM

Para: Dr. Yuri Genrijovich Gurevich. (Presidente)
Dr. Gregorio Hernández Cocholetzi.
Dra. Xóchitl Inés Saldaña Saldaña.
Dr. Octavio Meza Espinoza.
Dr. Felipe Pérez Rodríguez. (Asesor)

De: Dr. Juan Francisco Rivas Silva, Director.

Asunto: Se cita al Examen de Grado de Doctorado del M.C. Fernando Díaz Monge (DCM).

Fecha: Lunes 8 de Diciembre de 2014

CC: Expediente.

Me permito informarles que el Comité Académico los ha designado integrantes del Comité del Examen de Grado de Doctorado en Ciencias (en la especialidad de Ciencia de Materiales) del M.C. FERNANDO DÍAZ MONGE con su tesis titulada: "Efectos de Dispersión Espacial en Sistemas Metalodieléctricos Periódicos", que presentará el próximo día VIERNES 12 DE DICIEMBRE DEL PRESENTE A LAS 16:00hrs. EN EL AUDITORIO DEL IFUAP.

Dr. Juan Francisco Rivas Silva
DIRECTOR



/LAEmhr

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

SPATIAL-DISPERSION EFFECTS IN ONE-DIMENSIONAL PHOTONIC CRYSTALS WITH METALLIC INCLUSIONS

F. Pérez-Rodríguez¹, F. Díaz-Monge¹, N. M. Makarov², R. Márquez-Islas³, B. Flores-Desirena³

¹*Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla,*

Apdo. Post. J-48, Puebla, Pue., 72570, Mexico,

Tel. +52(222)2295610, Fax +52(222)2295611, E-mail: fperez@sirio.ifuap.buap.mx

²*Instituto de Ciencias, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla,*

Priv. 17 Norte No. 3417, Puebla, Pue., 72050, Mexico,

E-mail: makarov@siu.buap.mx

³*Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla,*

Apdo. Post. 1152, Puebla, Pue., 72000, Mexico,

E-mail: bflores@fcfm.buap.mx

Abstract

The spectral properties of metal-dielectric and metal-semiconductor 1D photonic crystals (PCs) are theoretically investigated, considering spatial dispersion in the metal and in the semiconductor, respectively. In the case of 1D PCs, composed of alternating metallic and dielectric slabs, we apply the classical formalism of the Boltzmann's kinetic equation for the distribution function of the conduction electrons in order to determine the nonlocal constitutive equation for the metallic slabs. Afterwards, we calculate the dispersion relation for the bulk modes in the 1D PC and compare it with that obtained within the Drude-Lorentz model, which is implicitly local. Another kind of nonlocal effects are studied by considering a metal-semiconductor 1D PC. In this case, the frequency-dependent dielectric function of the metallic component is described by the local Drude-Lorentz model, whereas for the semiconductor we use a Hopfield-Thomas dielectric function, which describes its nonlocal behavior near exciton resonance. The polariton dispersion curves for *s*-polarized modes in the metal-semiconductor photonic crystal are compared with those for a metal-dielectric PC. Because of the coupling of light with excitons, which undergo size quantization inside the thin semiconductor slabs, many photonic small bands appear. We study the changes in the photonic dispersion curves for the resonant 1D PC as the filling fraction of the metal is varied.

Introduction

At present, photonic crystals (PCs) having metallic and dielectric (or semiconductor) inclusions inside the unit cell are intensively investigated (see, for example, Refs. [1-6]). This kind of PC may exhibit extraordinary optical properties as, for example, the negative refraction [4,5]. Until now, periodic metallo-dielectric arrays with inclusions of relatively large size in comparison with the wave penetration depth (skin depth) and the electron mean free path, have been mostly studied. The optical properties of those metal components are commonly described within the simple Drude-Lorentz model for the permittivity. However, as the size of the metallic inclusion is reduced, the size effects associated with such lengths alter the spectral properties, namely the dispersion relation of the electromagnetic modes propagating in the bulk of the PC. On the other hand, the effects of spatial dispersion in the metallic composite, which depend on the relation of skin depth and the electron mean free path should be taken into account even in the case of the normal skin effect, that is, even when the electron mean free path is the smallest parameter. Drude-Lorentz model does not describe spatial dispersion effects and, therefore, the spectral and optical properties of metal-dielectric PCs should be revised.

In PCs with metal inclusions, another source of nonlocal effects may be the medium in which the metal is embedded. Indeed, if one of the components of the photonic crystal is a semiconductor, then nonlocal effects appear near exciton resonance. This is well known from the studies [7-9] of spectral and optical properties of resonant dielectric-semiconductor PCs. According to those studies, because of the coupling of photons with excitons in dielectric-semiconductor PCs, the lower and upper excitonic polariton bands split in many small bands. Besides, when the thickness of the semiconductor slab in the unit cell of a 1D PC is sufficiently small, the band energy values coincide with the size-quantized exciton levels [8]. Evidently, dispersion curves and, consequently, optical properties of metal-semiconductor PCs should also be determined by the coupling of light with excitons, but this topic has not investigated yet.

In the present work, we will investigate the spectral properties of 1D photonic crystals with metallic components, considering the spatial dispersion either in the metal or in the background medium. In Section 2, we shall study a metal-dielectric 1D PCs and apply the classical formalism of the Boltzmann's kinetic equation

Nonlocal Effects in the Electrodynamics of Metallic Slabs

A. Paredes-Juárez, F. Díaz-Monge, N. M. Makarov, and F. Pérez-Rodríguez

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72000 Puebla, México

e-mail: makarov@siu.buap.mx

Received September 18, 2009; in final form, October 5, 2009

The influence of spatial dispersion and size on the interaction of a metallic slab with electromagnetic radiation has been studied in the model of the Boltzmann kinetic equation. It has been shown that the results are qualitatively different from those obtained in the Drude–Lorentz approximation. In particular, in the high-frequency region, the absorption oscillates with the radiation frequency and sample thickness. The absorption becomes sensitive to the Fermi velocity of electrons and depends nontrivially on the electron relaxation rate. The results may be useful for the analysis of the electromagnetic response of metal–dielectric micro- and nanostructures in the terahertz and/or infrared frequency range.

PACS numbers: 42.25.Bs, 72.15.-v, 78.20.-e, 78.40.Kc, 78.66.Bz

DOI: 10.1134/S0021364009210073

INTRODUCTION

One of the topical problems of photonics and plasmonics is the fabrication and investigation of structures that include a metal as one of the elements of the unit cell (see, e.g., [1–8] and references therein). The reason is that such metamaterials (periodic or disordered) exhibit unusual properties inherent, in particular, in the left-handed media [9–10], and are candidates for use in a new class of optical and suboptical devices. The number of works on this subject is increasing, many of the results are discussed in modern review articles [11–13], and some of them are already included in specialized monographs and textbooks [14, 15].

On the other hand, it should be mentioned that the theoretical works describe the metallic element of the structure with a quite rough physical model. In some works, its relative permittivity is set to either infinity or a negative constant taken from the tables for bulk samples. In other works, the metal is described in more detail by the conductivity σ_{cl} and the corresponding relative permittivity ε_{cl}

$$\sigma_{cl} = \frac{\omega_p^2}{4\pi(\nu - i\omega)} \longrightarrow \varepsilon_{cl}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\nu)}, \quad (1)$$

which follow from the Drude–Lorentz theory. Here, ω is the frequency of the electromagnetic field and ω_p and ν are the plasma frequency and relaxation rate of the conduction-band electrons, respectively. Strictly speaking, these models may be adequate for bulk samples. However, it is known that the effects of spatial dispersion (or nonlocal effects), which are caused by the inhomogeneity of the electromagnetic field and are manifested in the anomalous skin effect, should be taken into account even in these samples under certain

conditions. In addition, it is necessary to take into account the size effect in modern micro- and nanostructures, in which the size of the metallic inclusion is comparable with the skin depth of the electromagnetic wave in this inclusion. The skin effect (normal, anomalous, and “infrared”) described in all monographs on the physics of metals [16–18] was mainly studied in the model of a metallic half-space. At the same time, the size effect (both classical and quantum-mechanical) in the conductivity of a metallic slab was studied as a response to the electrostatic field [19]. Thus, the problem of the interaction of a metallic sample with electromagnetic radiation, which self-consistently includes the skin effect and size effect in the high-frequency conductivity of metal, is of special interest.

In this work, we propose an analytical solution of the problem of a high-frequency (including the optical range) size effect in a metallic slab, which is convenient for both analytical and numerical analysis. The expression for the electromagnetic field is obtained in a closed form for an arbitrary (symmetric, antisymmetric or unilateral) excitation. Although we considered only the normal incidence of the electromagnetic wave on the slab surface, the solution may be generalized for a more complex geometry of the oblique incidence of both TE and TM modes.

FORMULATION OF THE PROBLEM. ELECTRIC FIELD DISTRIBUTION

We consider a metallic slab with the thickness d excited by a plane electromagnetic wave with the frequency ω . The slab occupies the space region $0 \leq x \leq d$. The wave propagates along the x axis normal to the slab plane, its electric $\mathbf{E}(x, t) = \{0, E(x), 0\}\exp(-i\omega t)$ and magnetic $\mathbf{H}(x, t) = \{0, 0, H(x)\}\exp(-i\omega t)$ compo-

IS THE DRUDE-LORENTZ MODEL ADEQUATE FOR A METALLIC SLAB WITHIN TERAHERTZ/INFRARED FREQUENCY RANGE?

Makarov N.M., Paredes-Juárez A., Díaz-Monge F., Pérez-Rodríguez F.
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla,
Calle 4 Sur, No 104, Col. Centro, Puebla, Pue., 72000, México
Tel./Fax +52 (222) 242-10-72, E-mail makarov@siu.buap.mx

Abstract

The effect of spatial dispersion and size-effect in the electrodynamics of metallic slabs, having been studied with the formalism of the Boltzmann kinetic equation, turns out to be qualitatively different from that predicted by the widely-used Drude-Lorentz model. In particular, within the high-frequency region, the absorption oscillates as a function of wave frequency and sample thickness. Besides, the absorption becomes sensitive to the value of the electron Fermi velocity and nontrivially depends on the electron relaxation rate. The results may be very useful for the analysis of the electromagnetic response of metal-dielectric micro- and nanostructures in the terahertz and/or infrared frequency range.

Introduction

In recent years, in the topical problems of photonics and plasmonics, special attention is paid to the fabrication and the study of structures that include metal as one of the elements of the unit cell (see, e.g., Ref. [1] and references therein). The reason is that such metamaterials (periodic or disordered) exhibit unusual properties inherent in the left-handed media, and are perspective candidates for the creation of a new class of optical and suboptical devices. In this respect, it should be mentioned that in the corresponding theoretical works, the metallic element of the structure is described with the use of a quite rough physical model. In some works, its permittivity is regarded to be of either infinite value or negative constant taken from tables for bulk samples. In other works, the metal is described in more detail by the frequency-dependent conductivity σ_{cl} and the corresponding permittivity ε_{cl} , according to the Drude-Lorentz theory,

$$\sigma_{cl} = \omega_p^2 / 4\pi(\nu - i\omega) \rightarrow \varepsilon_{cl}(\omega) = 1 - \omega_p^2 / \omega(\omega + i\nu). \quad (1)$$

Here, ω is the frequency of the electromagnetic wave, ω_p and ν are the plasma frequency and relaxation rate of the conduction electrons, respectively. Strictly speaking, these models may be adequate for bulk samples only. On the other hand, it is known that the effect of spatial dispersion (or nonlocal effect), which is due to inhomogeneity of the electromagnetic field, manifests itself in the form of the anomalous skin effect and should be taken into account even in bulk samples under certain conditions. Moreover, in modern micro- and nanostructures, it is necessary to take into account the size effect, when the size of the metallic inclusion is comparable with the skin depth of the electromagnetic field in this inclusion. Thus, the problem of the interaction of a metallic sample with electromagnetic radiation, which self-consistently involves the skin effect and size effect in the high-frequency conductivity of metal, is of special interest.

We present an analytical solution of the problem of high-frequency (including the optical range) size effect in a metallic slab of thickness d , which is appropriate for both analytical and numerical analysis [2]. With the use of the Boltzmann kinetic equation we obtained the integral relation between the current density and the electric field in the slab. The kernel of conductivity operator turned out to have physically clear and relatively simple form that allowed us to solve Maxwell equations. As a result, the expression for the electromagnetic field was obtained in a closed form for arbitrary (symmetric, antisymmetric or unilateral) electromagnetic excitation. Although we only consider the normal incidence of the electromagnetic wave on the slab surface, the solution may be generalized to more complex geometries of the oblique incidence of both TE and TM light modes.

Transmission through a Metallic Slab

It can be shown that the transmission t and reflection r amplitudes are specified by the relation

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \quad (2)$$

THz photonic bands of periodic stacks composed of resonant dielectric and nonlocal metal

Fernando Díaz-Monge¹, Alejandro Paredes-Juárez²,
Denis A. Iakushev³, Nykolay M. Makarov³, Felipe Pérez-Rodríguez^{1*}

¹ Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla, Pue. 72570, Mexico

² Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal 1152, Puebla, Pue. 72000, Mexico

³ Instituto de Ciencias, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Privada 17 Norte No. 3417, Col. San Miguel Hueyotlipan, Puebla, Pue. 72050, Mexico

*fjperz@ifuap.buap.mx

Abstract: The photonic band structure of superlattices composed of spatially-dispersive metal and polaritonic dielectric are theoretically investigated. The nonlocal relation between the electric current density and the electric field inside the metal layers is defined within the formalism of the Boltzmann kinetic equation, whereas the frequency dependent permittivity of the polar layers is modeled by a Lorentz-oscillator. Due to the large dielectric contrast between metal and polar components, the photonic band structure exhibits flat pass bands associated with Fabry-Perot resonances in the dielectric layers. There is also a wide stop band because of the existence of the polaritonic gap. We have compared our results with the predictions of the Drude-Lorentz model for the frequency-dependent metal permittivity. It is found that the nonlocal effect on the Fabry-Perot resonance bands is strong if their corresponding frequencies are in the interval where the difference between the impedances at both metal surfaces, predicted by the nonlocal and local formalisms, is maximal.

© 2014 Optical Society of America

OCIS codes: (160.3918) Metamaterials; (160.4760) Optical properties; (260.2030) Dispersion; (260.3060) Infrared; (350.4238) Nanophotonics and photonic crystals.

References and links

1. R. M. Walser, "Electromagnetic metamaterials," *Proc. SPIE* **4467**, 1–15 (2001).
2. F. Capolino, *Theory and phenomena of metamaterials* (CRC Press, Boca Raton, 2009).
3. V. M. Shalaev, "Optical negative-index metamaterials," *Nat. Photonics* **1**, 41–48 (2007).
4. C. M. Soukoulis and M. Wegener M, "Past achievements and future challenges in the development of three-dimensional photonic metamaterials," *Nat. Photonics* **5**, 523–530 (2011).
5. J. A. Reyes-Avendaño, U. Algreto-Badillo, P. Halevi, F. Pérez-Rodríguez, "From photonic crystals to metamaterials: the bianisotropic response," *New J. Phys.* **13**, 073041 (2011).
6. Z. Li, M. Mutlu, and E. Ozbay, "Chiral metamaterials: from optical activity and negative refractive index to asymmetric transmission," *J. Opt.* **15**, 023001 (2013).
7. A.V. Goncharenko, V.U. Nazarov, and K.R. Chen, "Nanostructured metamaterials with broadband optical properties," *Opt. Mater. Express* **3**, 143–156 (2013).
8. J. A. Reyes-Avendaño, M. P. Sampedro, E. Juárez-Ruiz, F. Pérez-Rodríguez, "Bianisotropic metamaterials based on twisted asymmetric crosses," *J. Opt.* **16**, 065102 (2014).