III. CALCULO DE LA REFLECTANCIA Y TRANSMITANCIA DE UNA PELICULA DELGADA.

INTRODUCCION

Hasta el momento se han introducido los conceptos fundamentales para entender los fenomenos de dispersión en semiconductores no-locales. En particular, se ha hecho énfasis en los estudios hasta ahora realizados sobre el CdS en su forma cristalina tipo Wurtzita. Mencionamos el trabajo de Hopfield y Thomas[15] (1959) donde identifican tres regiones de resonancia excitónicas principales. Una de estas, la serie $B_{(n=1)}$, tiene asociado un excitón con características especiales. Esto es, puede desdoblarse en dos nuevos excitones[16]. Este desdoblamiento excitónico es atribuido a los efectos del campo eléctrico cristalino sobre los electrones que forman los excitónes, produciendo un acoplamiento spin-órbita, y éste a su vez el desdoblamiento excitónico. Macroscópicamente, el efecto producido por los excitones de la serie $B_{(n=1)}$, cuando se da el desdoblamiento, se manifiesta en la función dieléctrica $\varepsilon(\omega,q)$ del semiconductor. Conocida la función dieléctrica, además de las condiciones adicionales en la frontera (ABC), pueden calcularse las propiedades ópticas de una película delgada de CdS en la región de resonancia del excitón $B_{(n=1)}$. El interés principal de este trabajo es conocer la repercución de los modos transversales adicionales (en este caso dos) sobre las reflectancia y transmitancia de la película. Esperamos de antemano estructuras más complicadas que en el caso local, e incluso que en el caso no-local con un modo transversal adicional.

III.1 GEOMETRIA.

En este capítulo se calculan las propiedades ópticas de una película delgada de CdS en la región de resonancia corresponiente al excitón $B_{(n=1)}$, cuando la luz incidente tiene una geometría tal que se logre el desdoblamiento de bandas con términos lineales en el vector de onda. Esto se logra solamente cuando tanto el vector de onda **q** como el campo eléctrico E de la luz incidente son perpendiculares al eje c del cristal ($E \perp c$ y, $q \perp c$).

Para el tratamiento escogemos una geometría que nos permita simplificar cálculos sin perder generalidad en la física del problema. Tomamos un sistema coordenado cartesiano de referencia de manera que el eje y sea paralelo al vector c del cristal, siendo además este último paralelo a la superficie del cristal. Por lo tanto, el plano de incidencia deberá ser paralelo al plano xz, ver figura I.5.

En el cálculo teórico se va asumir la existencia de capas libres de excitones (capas "muertas") de espesor ℓ a ambos lados de la película no-local. Así, podemos escoger el plano xy en $z = 0$ como la interfase vacío-capa muerta. En un plano paralelo, en $z = \ell$ se encontrará la interfase primera capa muerta medio no-local. La segunda interfase de este tipo se encuentra en $z = d-\ell$, y finalmente, en $z = d$, la interfase capa muerta-vacío Se tienen entonces cinco regiones: vacío $(-\infty < z < 0)$; primera capa muerta $(0 < z < \ell)$; medio no-local $(\ell < z < d-\ell)$; segunda capa muerta $(d-\ell < z < d)$; y vacío $(z > \infty)$. La figura I.6 es una representación esquemática de estas regiones.

III.2 CONDICIONES ADICIONALES EN LA FRONTERA.

De acuerdo con la geometría mencionada, suponemos que la luz incidente corresponde a ondas monocromáticas planas con incidencia normal a la superficie del cristal $(q_o = q_{oz})$, entonces los campos eléctricos debidos a esta radiación se expresan ,para cada región, de la siguiente manera:

$$E_x(z) = E_I e^{iq_{oz}z} + E_R e^{-iq_{oz}z} \qquad z \le 0 \qquad \text{(III.1)}$$

$$E_x(z) = E_{l1}^{(+)} e^{iq_l z} + E_{l1}^{(-)} e^{-iq_l z} \qquad 0 \le z \le \ell \qquad \text{(III.2)}$$

$$E_x(z) = \sum_{k=1}^{3} \left[E_k^{(+)} e^{iq_k z} + E_k^{(-)} e^{-iq_k z} \right] \qquad \ell \le z \le d-\ell \qquad \text{(III.3)}$$

$$E_x(z) = E_{l2}^{(+)} e^{iq_l z} + E_{l2}^{(-)} e^{-iq_l z} \qquad d-\ell \le z \le d \qquad \text{(III.4)}$$

$$E_x(z) = E_T e^{iq_{oz}z} \qquad z \ge d \qquad \text{(III.5)}$$

donde $q_{oz} = q_o$ es el vector de onda incidente, $q_l = \sqrt{\epsilon_o}$ el vector de onda en las capas muertas, y q_k (k=1,2,3) son los vectores de onda asociados a los modos transversales de volumen debidos a los efectos de dispersión espacial.

Los campos magnéticos pueden calcularse a partir de los campos eléctricos usando la expresión de la ley de Faraday$_{(p)}$ para ondas planas:

$$B = -\frac{i}{q_o} \nabla \times E \tag{III.6}$$

que, para el caso de incidencia normal y polarización p ($E = E_x$ y $B = B_y$), se reduce a

$$B_y = -\frac{i}{q_o} \frac{\partial E_x}{\partial z} \tag{III.7}$$

Se asume que en ninguna de las cuatro interfases hay densidades de carga o corriente. Con ésto se tiene que los campos eléctricos y magnéticos totales (todos tangenciales a las interfases) son continuos:

$$E_x(z^-) = E_x(z^+) \quad \text{y} \quad B_y(z^-) = B_y(z^+) \tag{III.8}$$

donde z^- y z^+ representan la posición de la interfase en contacto con la región derecha o izquierda, respectivamente. Estas condiciones en la frontera, llamadas condiciones de Maxwell, dan lugar a ocho ecuaciones. Sin embargo, éstas no son suficientes para tener un sistema completo, ya que se tienen doce campos desconocidos. Esto aparece porque en el medio no-local se tienen tres ondas moviendose a la derecha y tres a la izquierda.

El problema se resuelve con la introducción de las condiciones adicionales en la frontera (ABC), las cuales son aplicadas sobre la polarización excitónica en las interfases del medio no-local. En general, los ABC's pueden expresarse como condiciones sobre combinaciones lineales de la polarización excitónica y de su primera derivada$_{(5)}$. La polarización excitónica $\mathcal{P}(z)$ es debida a los momentos dipolares excitónicos

$$\mathcal{P}(z) = P(z) - \frac{\epsilon_o - 1}{4\pi} E(z) \tag{III.9}$$

o sea, la polarización total menos la polarización de fondo dieléctrico.

Para medios lineales, la polarización P y el campo eléctrico E están relacionados por medio de la función X, llamada susceptibilidad dieléctrica

$$X = \frac{\epsilon - 1}{4\pi}, \qquad \text{(III.10)}$$

sustituyendo aquí la función dieléctrica para excitones $B_{(n=1)}$, se tiene

$$X = \frac{\epsilon_o - 1}{4\pi} + \frac{\omega_P^2}{8\pi}\left[\frac{1}{\omega_+^2 - \omega^2 - i\upsilon\omega} + \frac{1}{\omega_-^2 - \omega^2 - i\upsilon\omega}\right] \qquad \text{(III.11)}$$

o representada como

$$X = X_o + X_+ + X_- \qquad \text{(III.12)}$$

donde

$$X_o = \frac{\epsilon_o - 1}{4\pi}, \qquad X_{\pm} = \frac{\omega_P^2}{8\pi}\,\frac{1}{\omega_{\pm}^2 - \omega^2 - i\upsilon\omega} \qquad \text{(III.13)}$$

siendo X_o la susceptibilidad asociada a la polarización de fondo, y $X_{\pm}$ las susceptibilidades asociadas a la polarización excitónica. Por lo tanto, la polarización excitónica puede expresarse como

$$\mathcal{P}(z) = \mathcal{P}_+(z) + \mathcal{P}_-(z) \qquad \text{(III.14)}$$

donde

$$\mathcal{P}_{\pm}(z) = \sum_{k=1}^{3} X_{\pm}(q_k)\left[E_k^{(+)} e^{iq_k z} + E_k^{(-)} e^{-iq_k z}\right]. \qquad \text{(III.15)}$$

Las condiciones adicionales en la frontera (ABC's) que usaremos para los cálculos son la debidas a Pekar, las cuales son:

$$\mathcal{P}_{\pm}(z_o) = 0 \qquad \text{(III.16)}$$

donde z_o es la posición de la frontera del medio no-local. Se tienen entonces cuatro ecuaciones más

$$\mathcal{P}_{\pm}(l) = \sum_{k=1}^{3} X_{\pm}(q_k) \left[E_k^{(+)} e^{iq_k l} + E_k^{(-)} e^{-iq_k l} \right] = 0 \qquad (III.17)$$

$$\mathcal{P}_{\pm}(d-l) = \sum_{k=1}^{3} X_{\pm}(q_k) \left[E_k^{(+)} e^{iq_k(d-l)} + E_k^{(-)} e^{-iq_k(d-l)} \right] = 0 \qquad (III.18)$$

Con estas cuatro ecuaciones completamos la doce necesarias para que el problema tenga solución.

III.3 REFLECTANCIA Y TRANSMITANCIA.

El cálculo de las reflectancia y transmitancia se hará siguiendo un método de escalafón de impedancias de superficie. Este método conciste en expresar la reflectancia en términos de la impedancia de la primera superficie. Esta a su vez se calcula como función de la impedancia de la segunda superficie en $z = \ell$. El método continua hasta llegar a la última superficie en $z = d$.

La impedancia de superficie para ondas electromagnéticas planas incidiendo con polarización p, se define como

$$Z_p(z_o) = \frac{E_x(z_o)}{B_y(z_o)}, \qquad (III.19)$$

donde z_o es la posición de la superficie.

Para la primera interfase se tiene

$$Z(z = 0) = \frac{E_x(0^-)}{B_y(0^+)} = \frac{E_I + E_R}{E_I - E_R} \qquad (III.20)$$

de donde

$$\frac{E_R}{E_R} = \frac{Z(0) - 1}{Z(0) + 1}, \qquad (III.21)$$

por lo tanto, la reflectancia es

$$R = \left| \frac{Z(0) - 1}{Z(0) + 1} \right|^2 . \qquad (III.22)$$

La impedancia en $Z(z = 0)$ puede calcularse a partir de los campos de la segunda región

$$Z(0^+) = \frac{q_o}{q_l} \frac{E_I + E_R}{E_I - E_R} \qquad (III.23)$$

por lo tanto en $z = \ell$

$$Z(\ell^+) = \frac{q_o}{q_l} \frac{E_{l1}^{(+)} e^{iq_l l} + E_{l1}^{(-)} e^{-iq_l l}}{E_{l1}^{(+)} e^{iq_l l} - E_{l1}^{(-)} e^{-iq_l l}} , \qquad (III.24)$$

de donde se obtiene

$$E_{l1}^{-} = E_{l1}^{+} \left[\frac{Z(\ell) - q_o/q_l}{Z(\ell) + q_o/q_l} \right] e^{2iq_l l} . \qquad (III.25)$$

sustituyendo en $Z(0)$, nos queda

$$Z(0) = \frac{q_o}{q_l} \left[\frac{Z(\ell) - i\, q_o/q_l \tan(q_l \ell)}{q_o/q_l - i\, Z(\ell) \tan(q_l \ell)} \right] . \qquad (III.26)$$

La impedancia $Z(\ell)$ se calcula empleando los campos de la región no-local:

$$Z(\ell) = \frac{\sum_{k=1}^{3} \left[E_k^{(+)} e^{iq_k l} + E_k^{(-)} e^{-iq_k l} \right]}{\sum_{k=1}^{3} \frac{q_k}{q_o} \left[E_k^{(+)} e^{iq_k l} - E_k^{(-)} e^{-iq_k l} \right]} \qquad (III.27)$$

Para encontrar una relación de $Z(\ell)$ con $Z(d-\ell)$ es necesario utilizar las condiciones adicionales en la frontera.

Resolveremos el sistema de ecuaciones formado por las condiciones adicionales de manera que podamos expresar los campos $E_k^{(+)}$ y $E_k^{(-)}$ $(k=2,3)$ en terminos de $E_k^{(+)}$ y $E_k^{(-)}$, de la siguiente manera.

$$E_k^{\pm} = \alpha_k^{\pm}\, E_1^{(+)} + \beta_k^{\pm}\, E_1^{(-)} \qquad k=2,3 \qquad \text{(III.28)}$$

Tenemos el sistema de cuatro ecuaciones (III.17 y III.18):

$$\sum_{k=1}^{3} X_{\pm}(q_k) \left[E_k^{(+)} e^{iq_k l} + E_k^{(-)} e^{-iq_k l} \right] = 0,$$

$$\sum_{k=1}^{3} X_{\pm}(q_k) \left[E_k^{(+)} e^{iq_k (d-l)} + E_k^{(-)} e^{-iq_k (d-l)} \right] = 0.$$

Asumiendo la notación (con k=2,3)

$$a_{\pm}(k) = X_{\pm}(q_k)\; e^{iq_k l} \qquad y \qquad b_{\pm}(k) = X_{\pm}(q_k)\; e^{-iq_k l} \qquad \text{(III.29)}$$

$$c_{\pm}(k) = X_{\pm}(q_k)\; e^{iq_k (d-l)} \qquad y \qquad d_{\pm}(k) = X_{\pm}(q_k)\; e^{-iq_k (d-l)}$$

y suponiendo conocidos $E_1^{(+)}$ y $E_1^{(-)}$, tendremos en forma matricial

$$\begin{bmatrix} a_+(2) & b_+(2) & a_+(3) & b_+(3) \\ a_-(2) & b_-(2) & a_-(3) & b_-(3) \\ c_+(2) & d_+(2) & c_+(3) & d_+(3) \\ c_-(2) & d_-(2) & c_-(3) & d_-(3) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_2^{(+)} \\ E_2^{(-)} \\ E_3^{(+)} \\ E_3^{(-)} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} a_+(3) & b_+(3) \\ a_-(3) & b_-(3) \\ c_+(3) & d_+(3) \\ c_-(3) & d_-(3) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_1^{(+)} \\ E_1^{(-)} \end{bmatrix}$$

o en forma compacta

$$\mathbb{A}\, \mathbb{E} = \mathbb{B}\, \mathbb{E}_1 \qquad \text{(III.30)}$$

donde $\mathbb{A}$ es la matriz formada por los coeficientes de los campos incognitas, $\mathbb{B}$ la matriz de coeficientes de los campos "conocidos", $\mathbb{E}$ el vector campos-incognitas y $\mathbb{E}_1$ el vector campos conocidos.

El vector campos conocidos puede desarrollarse como

$$\begin{bmatrix} E_2^{(+)} \\ E_2^{(-)} \\ E_3^{(+)} \\ E_3^{(-)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_2^{+} & \beta_2^{+} \\ \alpha_2^{-} & \beta_2^{-} \\ \alpha_3^{+} & \beta_3^{+} \\ \alpha_3^{-} & \beta_3^{-} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_1^{(+)} \\ E_1^{(-)} \end{bmatrix}.$$

Llamandole a la primera columna vector-α y a la segunda vector-β, entonces podemos representar el sistema de ecuaciones anterior como dos sistemas de las componentes de los campos incognitas:

$$\mathbb{A}\, \alpha = \mathbb{B}^{+} \qquad y \qquad \mathbb{A}\, \beta = \mathbb{B}^{-}, \qquad \text{(III.31)}$$

donde $\mathbb{B}^{+}$ y $\mathbb{B}^{-}$ son los vectores primera y segunda columna de $\mathbb{B}$.

Las incognitas $\alpha_k^{\pm}$ y $\beta_k^{\pm}$ (k=2,3) se calculan facilmente por medio del método de Kramer.

Por lo tanto, podemos expresar

$$\sum_{k=1}^{3}\left[E_k^{(+)} e^{iq_k l} + E_k^{(-)} e^{-iq_k l} \right] = g\, E_1^{(+)} + h\, E_1^{(-)} \qquad \text{(III.32)}$$

$$\sum_{k=1}^{3} \frac{q_k}{q_o}\left[E_k^{(+)} e^{iq_k l} + E_k^{(-)} e^{-iq_k l} \right] = j\, E_1^{(+)} + f\, E_1^{(-)} \qquad \text{(III.33)}$$

donde

$$g = e^{iq_1 l} + \sum_{k=2}^{3}\left[\alpha_k^{+} e^{iq_k l} + \alpha_k^{-} e^{-iq_k l} \right] \qquad \text{(III.34)}$$

$$h = e^{-iq_1 l} + \sum_{k=2}^{3}\left[\beta_k^{+} e^{iq_k l} + \beta_k^{-} e^{-iq_k l} \right] \qquad \text{(III.35)}$$

$$j = \frac{q_1}{q_o} e^{iq_1 l} + \sum_{k=2}^{3} \frac{q_k}{q_o}\left[\alpha_k^{+} e^{iq_k l} - \alpha_k^{-} e^{-iq_k l} \right] \qquad \text{(III.36)}$$

$$f = -\frac{q_1}{q_o} e^{-iq_1 l} + \sum_{k=2}^{3} \frac{q_k}{q_o}\left[\beta_k^{+} e^{iq_k l} - \beta_k^{-} e^{-iq_k l} \right] \qquad \text{(III.37)}$$

La impedancia de superficie en $z = \ell$ queda

$$Z(\ell) = \frac{g\, E_I + h\, E_R}{j\, E_I - f\, E_R}, \qquad \text{(III.38)}$$

Los campos $E_1^{(+)}$ y $E_1^{(-)}$ los calculamos usando la impedancia de superficie en $z = d-\ell$, para la región no-local, ésto es

$$Z(d-\ell) = \frac{\sum_{k=1}^{3}\left[E_k^{(+)} e^{iq_k (d-l)} + E_k^{(-)} e^{-iq_k (d-l)} \right]}{\sum_{k=1}^{3} \frac{q_k}{q_o}\left[E_k^{(+)} e^{iq_k (d-l)} - E_k^{(-)} e^{-iq_k (d-l)} \right]} \qquad \text{(III.39)}$$

Análogamente, podemos expresar todos los campos en términos de $E_1^{(+)}$ y $E_2^{(-)}$

$$\sum_{k=1}^{3}\left[E_k^{(+)} e^{iq_k(d-l)} + E_k^{(-)} e^{-iq_k(d-l)} \right] = s\, E_1^{(+)} + t\, E_1^{(-)} \qquad \text{(III.40)}$$

$$\sum_{k=1}^{3} \frac{q_k}{q_o}\left[E_k^{(+)} e^{iq_k(d-l)} + E_k^{(-)} e^{-iq_k(d-l)} \right] = u\, E_1^{(+)} + v\, E_1^{(-)} \qquad \text{(III.41)}$$

donde

$$s = e^{iq_1(d-l)} + \sum_{k=2}^{3}\left[\alpha_k^{+} e^{iq_k(d-l)} + \alpha_k^{-} e^{-iq_k(d-l)} \right] \qquad \text{(III.42)}$$

$$t = e^{-iq_1(d-l)} + \sum_{k=2}^{3}\left[\beta_k^{+} e^{iq_k(d-l)} + \beta_k^{-} e^{-iq_k(d-l)} \right] \qquad \text{(III.43)}$$

$$u = \frac{q_1}{q_o} e^{iq_1(d-l)} + \sum_{k=2}^{3} \frac{q_k}{q_o}\left[\alpha_k^{+} e^{iq_k(d-l)} - \alpha_k^{-} e^{-iq_k(d-l)} \right] \qquad \text{(III.44)}$$

$$v = -\frac{q_1}{q_o} e^{-iq_1(d-l)} + \sum_{k=2}^{3} \frac{q_k}{q_o}\left[\beta_k^{+} e^{iq_k(d-l)} - \beta_k^{-} e^{-iq_k(d-l)} \right] \qquad \text{(III.45)}$$

obteniendose

$$Z(d-l) = \frac{s\, E_I + t\, E_R}{u\, E_I - v\, E_R}, \qquad \text{(III.46)}$$

de donde

$$E_1^{(-)} = E_1^{(+)} \left[\frac{Z(d-l)u - s}{Z(d-l)v - t} \right], \qquad \text{(III.47)}$$

sustituyendo en $Z(l)$, se tiene

$$Z(l) = \left[\frac{Z(d-l)(gv - hu) + (hs - gt)}{Z(d-l)(jv - ku) + (fs - jt)} \right]. \qquad \text{(III.48)}$$

Para la región correspondiente a la segunda capa muerta se tiene

$$Z(d-\ell) = \frac{q_o}{q_l} \frac{E_{l2}^{(+)} e^{iq_l(d-l)} + E_{l2}^{(-)} e^{-iq_l(d-l)}}{E_{l2}^{(+)} e^{iq_l(d-l)} - E_{l2}^{(-)} e^{-iq_l(d-l)}}, \qquad (III.49)$$

y

$$Z(d) = \frac{q_o}{q_l} \frac{E_{l2}^{(+)} e^{iq_l d} + E_{l2}^{(-)} e^{-iq_l d}}{E_{l2}^{(+)} e^{iq_l d} - E_{l2}^{(-)} e^{-iq_l d}}, \qquad (III.50)$$

combinandolas se obtiene

$$Z(d-\ell) = \frac{q_o}{q_l} \left[\frac{Z(d) - i\, q_o/q_l \ \mathrm{tan}(q_l \ell)}{q_o/q_l - i\, Z(d)\ \mathrm{tan}(q_l \ell)} \right]. \qquad (III.51)$$

Finalmente, la impedancia de la última superficie en $z = d$

$$Z(d) = \frac{q_o}{q_{oz}} \frac{E_T\, e^{iq_{oz}d}}{E_T\, e^{iq_{oz}d}} \qquad (III.52)$$

La transmitancia se define como el cuadrado del valor absoluto de la transmitividad t, la que a su vez se define como el cociente del campo eléctrico E_T transmitido y el campo incidente E_I.

$$T = |\, t\, |^2 = \left| \frac{E_T}{E_I} \right|^2 \qquad (III.53)$$

Una manera de calcular la transmitividad es la siguiente:

$$t = \frac{E_T}{E_I} = \frac{E_T}{E_{l2}^{(+)}} \frac{E_{l2}^{(+)}}{E_1^{(+)}} \frac{E_1^{(+)}}{E_{l1}^{(+)}} \frac{E_{l1}^{(+)}}{E_I}. \qquad (III.54)$$

A partir de las condiciones de continuidad de los campos, usando algunas de las identidades encontradas anteriormente, y después de cierta algebra se obtiene:

$$\frac{E_T}{E_{l2}^{(+)}} = \frac{2\, e^{id(q_l - q_o)}}{1 + q_o/q_l} \qquad (III.55)$$

$$\frac{E_{l2}^{(+)}}{E_1^{(+)}} = \frac{1}{2}\left[\left(j + \frac{u}{q_l}\right) - \left(t + \frac{v}{q_l}\right)\left(\frac{Z(d-l)u - s}{Z(d-l)v - t}\right)\right] e^{-iq_l(d-l)} \qquad \text{(III.56)}$$

$$\frac{E_{l1}^{(+)}}{E_1^{(+)}} = \frac{1}{2}\left[\left(g + \frac{j}{q_l}\right) - \left(h + \frac{k}{q_l}\right)\left(\frac{Z(d-l)u - s}{Z(d-l)v - t}\right)\right] e^{-iq_l l} \qquad \text{(III.56)}$$

$$\frac{E_{l1}^{(+)}}{E_I} = 2\left[\left(1 + q_l\right) + \left(1 - q_l\right)\left(\frac{Z(l) - q_o/q_l}{Z(l) + q_o/q_l}\right) e^{iq_l l}\right]^{-1} \qquad \text{(III.57)}$$

La absortancia A se calcula en términos de la reflectancia R y de la transmitancia T por medio de la relación

$$A = 1 - R - T \qquad \text{(III.58)}$$