## IV. RESULTADOS NUMERICOS

En este capítulo se presentan los resultados numéricos obtenidos a partir de las expresiones encontradas en el capítulo III, para reflectancia, transmitancia y absortancia, en la región de resonancia del excitón $B_{(n=1)}$ de CdS. Para la comprobación con el caso límite $\phi \to 0$ se trabaja con los parámetros de Yu y Evangelisti(14). Las gráficas obtenidas en este caso son comparadas con algunas de las obtenidas por J. A. Gaspar(7). En el resto de las gráficas se utilizan los parámetros dados por Mahan y Hopfield(6).

Los parámetros obtenidos por Yu y Evangelisti, y por Mahan y Hopfield, que utilizamos en los cálculos se muestran en la siguiente tabla.

TABLA 4.1
PARAMETROS PARA CdS

| PARAMETROS | Excitón A<br>Yu - Evangelisti | Excitón B<br>Mahan y Hopfield |
|---|---|---|
| $\gamma$ | $4.86 \times 10^{-5}$ | $2.921 \times 10^{-5}$ |
| $\Omega_P$ | .1152 | .0838 |
| $\omega_T$ | $3.8782 \times 10^{15}$ | $3.9014 \times 10^{15}$ |
| $D/c^2$ | $5.3147 \times 10^{-6}$ | $4.18876 \times 10^{-6}$ |
| $\varepsilon_0$ | 9.1 | 7.2 |
| $\Psi$ | .01 | 13.55 |

### 4.1 JUSTIFICACION

Para probar el programa de computadora es necesario comparar resultados numéricos proporcionados por éste contra resultados confiables obtenidos en otros trabajos, los que vienen a ser casos límite para el programa.

1) ($\phi \to 0$). Un caso límite interesante se presenta cuando el parámetro de desdoblamiento excitónico $\phi$ tiende a cero. En este caso, la función dieléctrica $\epsilon$ se reduce a la correspondiente al excitón $A_{(n=1)}$ de CdS. Aunque la situación física no es la misma, los resultados numéricos deben coincidir con los obtenidos por J. A. Gaspar$_{(7)}$, usando los mismos parémetros. Debido al diseño del programa, el asumir $\psi = 0$ lleva a una división por cero en los cálculos. Este inconveniente se salva tomando $\psi$ igual a un número positivo aproximado a cero.

Se realizan barridos de frecuencia para obtener espectros de R, T y A en la región de resonancia del excitón A, con los parámetros mencionados, para una película delgada con espesor d = 1200A y capas muertas de $\ell$ = 100A. Tomando $\psi$ = 0.01 se consideran tres casos: a) Caso local (aproximación), con D pequeña ($D/c^2 = 8.0 \times 10^{-7}$), figuras 1.a y 1.b; b) ABC de Ting et al, figuras 2.a y 2.b; c) ABC de Pekar, figuras 3.a y 3.b. Además, usando los mismos parámetros, se hicieron barridos de espesor parar obtener graficas de reflectancia en la frecuencia $\omega = \omega_L$, con: a) ABC de Ting et al, fig. 4.a, y; b) ABC de Pekar, fig. 4.b. La comparación se hace marcando algunos puntos relevantes de las gráficas, en los cuales ambas coinciden.

2) ($d \to \infty$). Otro caso límite del que hacemos uso es en el cual el espesor d de la película se hace muy grande. Este corresponde al caso estudiado por Mahan y Hopfield donde calculan la reflectancia de una superficie (medio semi-infinito), considerando el excitón $B_{(n=1)}$ del CdS.

Limitaciones del programa de computadora no permiten considerar películas con espesores muy grandes y frecuencias menores de .99990 $\omega_T$, aproximadanente. Por esta razón se considera una película delgada de espesor d = 10,000A con capas muertas de $\ell$ = 70A, trabajando para frecuencias $\omega$ > .99990 $\omega_T$. Se calcula la reflectancia, figs. 5.a y 5.b, usando el ABC de Pekar con $\Psi$=13.55.

## IV.2 BARRIDO DE ESPESOR.

Se realizan barridos de espesor para obtener gráficas de reflectancia usando los parámetros de Mahan-Hopfield, para tres frecuencias: $\omega_1 = .99990\omega_T$, $\omega_2 = 1.00040\omega_T$ y $\omega_3 = 1.00090\omega_T$. En estos barridos se trabaja con los ABC's de Ting et al y de Pekar, para diferentes valores de $\gamma$ y considerando películas con y sin capas muertas. Se incluye el ABC de Ting et al con el fin de facilitar el entendimiento del comportamiento de R en las diferentes regiones de frecuencia, ya que para este ABC los efectos no locales son pequeños. En todos los casos donde se usa el ABC de Ting se considera $\gamma$ pequeño con el fin de reducir el amortiguamiento de las ondas, haciendose más apreciables los mínimos de reflectancia.

Las gráficas hechas son las siguientes:

1) Usando el ABC de Ting, parámetros Mahan-Hopfield (M-H) con $\gamma$ pequeña, con y sin capas muertas, para las frecuencias: $\omega_1$ (figs. 6.a y 6.b), $\omega_2$ (figs. 7.a y 7.b), y $\omega_3$ (figs. 8.a y 8.b).

2) Usando el ABC de Pekar, parámetros M-H, sin capas muertas, para las frecuencias: $\omega_1$ (fig. 9.a), $\omega_2$ (fig. 9.b), $\omega_3$ (fig. 9.c).

El análisis de las gráficas se hace usando la relación local para mínimos de reflectancia producidos por interferencias Fabry-Perot en una película de espesor $d-2\ell$ sumergida en un medio de índice de refracción diferente al de ésta. La condición es la siguiente:

$$q'_n (d - 2\ell) = n\,\pi \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4.1}$$

donde $q'_n$ es la parte real del vector de la onda que interfiere, y n el orden de interferencia. La posición de los mínimos de reflectancia, para q' fija, es dada por la expresión

$$d_n = n \left( \frac{\pi}{q'} \right) + 2\ell \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4.2}$$

La separación entre mínimos es igual a media longitud de onda, esto es

$$\frac{\lambda}{2} = \frac{\pi}{q'} \tag{4.3}$$

La ecuación 4.2 nos permite calcular la posición de los mínimos de reflectancia para un barrido de espesor.

Como en el medio no-local hay más de una onda, los mínimos pueden deberse, en principio, a cualquiera de éstas. Sin embargo, las predicciones de las ecuaciones anteriores no necesariamente tienen que coincidir con los resultados, ya que ésta no considera la posible interferencia entre las diferentes ondas.

En todas las figuras se señala la comparación de los mínimos obtenidos contra los predichos, y el orden de interferencia de la onda correspondiente. La notación empleada es de la forma $q_n$, donde q puede ser 1, 2 o 3 dependiendo de la onda que se trate, y n es el orden de interferencia. Las posiciones de mínimos de R predichas para las diferentes frecuencias son mostradas en las siguientes tablas.

TABLA 4.2

BARRIDO DE ESPESOR. FRECUENCIA $\omega_1 = .99990\ \omega_T$, $\ell = 0$ A.

| n | $d_n(q_1)^*$ | n | $d_n(q_1)$ |
|---|---|---|---|
| 1 | 248.98 A | 5 | 1244.91 A |
| 2 | 497.96 | 6 | 1493.89 |
| 3 | 746.94 | 7 | 1742.87 |
| 4 | 995.93 | 8 | 1991.85 |

* La separación entre mínimos es $\lambda_1/2$ = 248.98 A.

TABLA 4.3

BARRIDO DE ESPESOR. FRECUENCIA $\omega_2 = 1.00040\ \omega_T$, $\ell = 0$ A.

| n | $d_n(q_1)^*$ | $d_n(q_2)^{**}$ | n | $d_n(q_1)$ | $d_n(q_2)$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 108.69A | 269.35A | 8 | 869.55A | |
| 2 | 217.39 | 538.70 | 9 | 978.25 | |
| 3 | 326.08 | 808.05 | 10 | 1086.95 | |
| 4 | 434.79 | 1077.40 | 11 | 1195.64 | |
| 5 | 543.47 | 1346.75 | 12 | 1304.33 | |
| 6 | 652.17 | 1616.10 | 13 | 1413.03 | |
| 7 | 760.86 | | 14 | 1521.72 | |

* $\lambda_1/2$ = 108.69 A ** $\lambda_2/2$ = 269.35

**TABLA 4.4**

BARRIDO DE ESPESOR. FRECUENCIA $\omega_3 = 1.00090\ \omega_T$, $\ell = 0$ A.

| n | $d_n(q_1)^1$ | $d_n(q_2)^2$ | $d_n(q_3)^3$ | n | $d_n(q_1)$ | $d_n(q_2)$ | $d_n(q_3)$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 84.43A | 159.72A | 1336.7A | 13 | 1097.59 | 2076.38 | |
| 2 | 168.86 | 319.44 | | 14 | 1182.01 | | |
| 3 | 253.29 | 479.17 | | 15 | 1266.44 | | |
| 4 | 337.72 | 638.89 | | 16 | 1350.87 | | |
| 5 | 422.15 | 798.61 | | 17 | 1435.30 | | |
| 6 | 506.58 | 958.33 | | 18 | 1519.73 | | |
| 7 | 591.01 | 1118.06 | | 19 | 1604.16 | | |
| 8 | 675.43 | 1277.78 | | 20 | 1688.59 | | |
| 9 | 759.87 | 1437.5 | | 21 | 1773.02 | | |
| 10 | 844.30 | 1597.22 | | 22 | 1857.45 | | |
| 11 | 928.73 | 1756.95 | | 23 | 1941.88 | | |
| 12 | 1013.15 | 1916.67 | | 24 | 2026.37 | | |

$^1\ \lambda_1/2 = 84.43$, $^2\ \lambda_2/2 = 159.72$, $^3\ \lambda_3/2 = 1336.7$

### 4.3 CAMPOS EN EL MEDIO NO-LOCAL.

Con el fin de visualizar el comportamiento de las ondas en el medio no-local, se grafica la parte real de los campos eléctricos de las ondas correspondientes en toda la película para diferentes frecuencias y espesores. En estas gráficas se pretende observar las ondas que causan los mínimos de reflectancia, así como también el orden de interferencia correspondiente.

Las expresiones por graficarse son las siguientes:

$$\mathrm{Re}\ E_i(z) = \mathrm{Re}\left\{ E_i^{(+)}\, e^{iq_i z} + E_i^{(-)}\, e^{-iq_i z} \right\} \quad i = 1,\ 2,\ 3 \qquad (4.4)$$

$$\mathrm{Re}\ E(z) = \mathrm{Re}\left\{ \sum_{i=1}^{3} \left[ E_i^{(+)}\, e^{iq_i z} + E_i^{(-)}\, e^{-iq_i z} \right] \right\} \qquad (4.5)$$

donde las ecuaciones 4.4 vienen a ser la parte real de la suma de los campos eléctricos de la onda $i$ (= 1,2,3), y la ecuación 4.4 es la parte real de la suma total de todos los campos eléctricos dentros de la película.

Se escogen dos puntos mínimos para cada una de las figuras 6.a, 7.a y 8.a. Las figuras 10.a y 10.b muestran los campos eléctricos, parte real, para dos películas sin capas muertas de espesores d = 1018A y d = 1274 A, respectivamente, para frecuencia $\omega = \omega_1 = .99990\ \omega_T$. En las figuras 11.a y 11.b se presenta las gráficas de campo eléctrico para dos mínimos del barrido de espesor a la frecuencia $\omega = \omega_2 = 1.00040\ \omega_T$, con espesores sin capas muertas de d = 808 A y d= 978 A, respectivamente. Del barrido de espesor a la frecuencia $\omega = \omega_3 = 1.00090\ \omega_T$ se obtienen dos graficas para los espesores d = 1182 A y d = 1337 A, sin capas muertas. Las figuras correspondientes son 12.a y 12.b, respectivamente.

Estas graficas están basadas en los barridos de espesor hechos considerando el ABC de Ting, para películas sin capas muertas y parámetro de amortiguamiento pequeño.

También se hacen graficas de la parte real del campo eléctrico para algunos mínimos de reflectancia de los barridos de espesor donde se considera el ABC de Pekar. Las figuras hechas son: 13.a y 13.b para dos películas de espesor d =915A y d = 1415A sin capas muertas, respectivamente, a la frecuencia $\omega_1$. 14.a y 14.b para las películas sin capas muertas con espesores d = 865 A y d = 1045 A, respectivamente, a la frecuencia $\omega_2$. Y para la frecuencia $\omega_3$, las figuras 15.a y 15.b correspondientes a las películas sin capas muertas con espesor d = 1160 A y d = 1335 A, respectivamente.

### 4.4. BARRIDO DE FRECUENCIA

Calculando R, T y A se realiza un barrido de frecuencia pa una película delgada de espesor d = 1500 A con capas muertas de $\ell$ = 100 A, figuras 16.a y 16.b. Para la predicción aproximada de los mínimos de reflectancia se usa la fórmula para interferencias Fabry-Perot mencionada antes. La posición de los mínimos sera

$$q'_n = n \left( \frac{\pi}{d-2\ell} \right) \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad (4.6)$$

donde $q'_n$ es la parte real del vector de la onda que interfiere y n el orden de interferencia. La tabla 4.5 proporciona las frecuencias para las cuales R será mínima de acuerdo a la ecuación 4.6, señalando la onda causante de la interferancia y el orden conrrespondiente.

TABLA 4.5

BARRIDO DE FRECUENCIA. ESPESOR D = 1500 A, $\ell$ = 100 A

$(\omega / \omega_T)$

| n | $\omega_n(q_1)^1$ | $\omega_n(q_2)^2$ | $\omega_n(q_3)^3$ | n | $\omega_n(q_1)$ | $\omega_n(q_2)$ | $\omega_n(q_3)$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 1.00019 | 0.99999 | 1.00094 | 11 | 1.00020 | 1.00147 | |
| 2 | | 1.00006 | | 12 | 1.00040 | 1.00167 | |
| 3 | | 1.00017 | | 13 | 1.00053 | 1.00190 | |
| 4 | | 1.00029 | | 14 | 1.00068 | 1.00215 | |
| 5 | 0.99991 | 1.00043 | | 15 | 1.00083 | | |
| 6 | 0.99993 | 1.00057 | | 16 | 1.00101 | | |
| 7 | 0.99998 | 1.00071 | | 17 | 1.00119 | | |
| 8 | 1.00003 | 1.00080 | | 18 | 1.00139 | | |
| 9 | 1.00010 | 1.00105 | | 19 | 1.00161 | | |
| 10 | 1.00019 | 1.00124 | | 20 | 1.00184 | | |

Con el fin de ver el comportamiento de los mínimos de R en las tres regiones $\omega < \omega_T$, $\omega_T < \omega < \omega_L$ y $\omega > \omega_L$, se grafican la parte real de los campos eléctricos para algunos de ellos: 17.a, 17.b, 17.c y 17.d.

CONCLUSIONES:

1) <u>De la justificación:</u>

En la comparación de las gráficas obtenidas para R, T y A (figuras 1.a, 1.b, 2.a, 2.b, 3.a, 3.b, 4.a y 4.b) contra las de J.

A. Gaspar, se encuentra una gran coincidencia, como puede observarse en los puntos comparativos señalados en las figuras.

Asi mismo, al comparar con la grafica de R de Mahan-Hopfield, observamos que en la región $\omega_T < \omega < \omega_L$ las gráficas coinciden punto a punto. Sin embargo, para $\omega > \omega_L$ aparece una estructura adicional. Esta estructura es atribuida a interferencias Fabry-Perot de la onda con vector $q_3$, principalmente. Una tabla de los mínimos predichos por la fórmula F-P es mostrada abajo.

TABLA 4.6

BARRIDO DE FRECUENCIA. D = 10,000 A, $\ell$ = 70 A.

| n | $q'_n$ $(10^{-5}\ A^{-1})$ | $\omega_n(q_3)$ $(\omega/\omega_T)$ |
|---|---|---|
| 1 | .31862 | 1.00048 |
| 2 | .63724 | 1.000497 |
| 3 | .95586 | 1.000527 |
| 4 | 1.2745 | 1.000565 |
| 5 | 1.5937 | 1.00062 |
| 6 | 1.9117 | 1.000705 |
| 7 | 2.2303 | 1.000835 |

En la figura 5.b se señalan las posiciones de los puntos predichos por la tabla anterior. Podemos ver que estos puntos corresponden a máximos de R, y no a mínimos como se espera en principio. Este comportamiento de la reflectancia se presenta para frecuencias mayores de $\omega_L$, donde coexisten las tres ondas. Puede ser que la explicación de esta anomalía este en que la fórmula de interferencias Fabry-Perot no considera el efecto de más de una onda, ya que podrían existir interferencas entre las ondas.

Las comparaciones hechas nos permiten asegurar que el programa de computadora funciona correctamente en los rangos de frecuencia y espesor trabajados en las pruebas, dandonos un buen margen de confiabilidad.

2) <u>De los barridos de espesor:</u>

Las figuras 6, 7 y 8 (a y b), muestran el comportamiento de la reflectancia para las tres diferentes regiones de frecuencia, cuando se trabaja con el ABC de Ting et al y $\gamma$ pequeña. Puede verse en estas graficas el efecto producido por una, dos y tres ondas en el medio no-local. Las predicciones de mínimos por la fórmula de Fabry-Perot son muy aproximadas. También se observa claramente un corrimiento de $2\ell$ = 200 A en la posición de los mínimos cuando se considera la existencia de capas muertas en las superficies de la película.

Usando los parámetros reales (figuras 9.a, 9.b y 9.c), los efectos no-locales se hacen muy notorios. Las posiciones de los mínimos varían considerablemente de los predichos por F-P. Para la frecuencia $\omega_3$ algunos mínimos predichos se presentan como máximos de reflectancia. Este es el mismo fenómeno observado en el barrido de frecuencia y en el caso del excitón $A_{(20)}$.

3) <u>De los campos en el medio no-local:</u>

En las gráficas de real de campo eléctrico para los mínimos de R, figuras 10, 11 y 12 (a y b), donde se trabaja con el ABC de Ting y amortiguamiento pequeño se observa que una de las ondas tiene una longitud de onda $\lambda$, tal que un número entero de medias longitudes de onda es muy aproximado al espesor d-$2\ell$ del medio no local, lo cual está de acuerdo con las predicciones de F-P.

En las figuras 13, 14 y 15 (a y b), los efectos no-locales son muy notorios debido a que se trabaja con el ABC de Pekar. Se observa que ninguna de las ondas concuerda con el comportamiento predicho. Esto es, el mínimo de R corresponde a una aproximación de un número entero de medias longitudes de onda de alguna de las ondas. En algunos casos, el comportamiento parece indicar que el mínimo es debido más bién a dos (o tres) ondas, quedando ubicado entre dos mínimos esperados cecanos.

4) <u>Del barrido de frecuencia:</u>

Las predicciones de F-P para mínimos de reflectancia son aproximadas, salvo por algunos pequeños corrimientos, a los obtenidos por el programa de computadora. Sin embargo, algunos mínimos no aparecen en la gráfica de reflectancia. El comportamiento de R para $\omega > \omega_L$ cambia para algunos mínimos, obteniendose en lugar de éstos máximos. También se observa que se presentan en su mayoría solo ordenes pares de interferencia. Igual que en los barridos de espesor, el comportamiento de la parte real de los campos eléctricos indica una aproximación con las predicciones de la fórmula de Fabry-Perot.