

SOLUCION GENERAL DE LOS CAMPOS ELECTROMAGNETICOS EN SUPERFICIES RUGOSAS.

Shu Wang

Centro de Investigación en Física, Universidad de Sonora, Apartado Postal A-88, 83190 Hermosillo, Sonora, México.

W.Luis Mochán

Laboratorio de Cuernavaca, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 139-B, 62191 Cuernavaca, Morelos, México.

Rubén G. Barrera

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, 01000 México, Distrito Federal, México.

RESUMEN

Se utiliza el método de Rayleigh-Fano¹ para calcular los campos electromagnéticos dispersados por una superficie metálica rugosa. El metal está caracterizado por una función dieléctrica transversal, dada por el modelo de Drude con correcciones debidas a las transiciones interbandas y una función dieléctrica longitudinal (no local). Se obtiene la solución formal del problema en términos de una serie en potencias de un parámetro proporcional a la función de perfil de la rugosidad. Se propone un método de cálculo para determinar los coeficientes de la serie a orden arbitrario. Para ilustrar el uso del método, éste se aplica al caso de una rejilla periódica.

I. INTRODUCCION

En las superficies metálicas rugosas la reflexión de las ondas electromagnéticas produce ondas dispersadas, además de la onda reflejada especularmente, que es la única producida por superficies estrictamente planas. Algunos ejemplos de estos fenómenos son las ondas de radio dispersadas por la superficie del mar, la luz reflejada en una superficie metálica reconstruidas y la dispersión Raman por moléculas adsorbidas en una superficie de metal².

Recientemente un problema que ha mostrado gran interés, es el de el acoplamiento de fotones con los plasmones de superficie en superficies metálicas rugosas, el cual es permitido al desaparecer la simetría translacional a lo largo de la superficie. La mayoría de cálculos sobre este tema se han realizado para sistemas descritos por una respuesta dieléctrica local. Sin embargo, los metales son sistemas no locales, es decir, la polarización en un punto dado también depende del

campo eléctrico en los puntos vecinos.

En los sistemas con respuesta no local³⁻⁵ las ondas dispersadas (reflejadas y transmitidas) pueden tener modos longitudinales además de los modos transversales. Para obtener las amplitudes de las ondas es necesario utilizar las condiciones de contorno en el interface. Estas condiciones son obtenidas, en un sistema con respuesta local, a través de las ecuaciones de Maxwell. Sin embargo, para los sistemas con respuesta no local las ecuaciones de Maxwell no bastan para determinar todas las amplitudes. Por lo tanto, se recurre al uso de las llamadas condiciones adicionales a la frontera (ABC's).^{6,7}

Nuestro objetivo es desarrollar un formalismo general para calcular las propiedades ópticas de un metal con superficie rugosa, caracterizado por una función dieléctrica no local utilizando un modelo hidrodinámico⁸ para la descripción de la respuesta de los electrones. Hemos tomado en cuenta los efectos de las transiciones electrónicas interbandas, las cuales dan una contribución local a la función dieléctrica. En

nuestro trabajo se muestran, por primera vez, las circunstancias bajo las cuales los efectos no locales son importantes en el cálculo de los campos electromagnéticos cerca de superficies rugosas. Nuestros resultados se pueden entender en base al acoplamiento resonante entre los campos electromagnéticos dispersados y los modos propios de la superficie metálica.

II. TEORIA PERTURBATIVA DE LA DISPERSION DE LA LUZ POR UNA SUPERFICIE RUGOSA

En esta sección introducimos el formalismo perturbativo para calcular los campos difractados por una superficie rugosa con dispersión espacial, sobre la que incide una onda plana. El sistema a considerar es una interface entre el vacío y un medio semi-infinito con una superficie rugosa. El medio está descrita por una función dieléctrica no local dentro de la aproximación hidrodinámica.

Primeramente seleccionamos al plano X-Y como plano nominal definido como

$$\int \xi(x,y) dz = 0,$$

donde $\xi(x,y)$ es la función del perfil y el eje z apunta hacia afuera del metal.

Denotamos a los vectores de onda de las ondas incidente, reflejada y transmitida como

$$q_i = (Q_{x1}, Q_{y1}, q_1), \quad (1)$$

$$q = (Q_x, Q_y, -q), \quad (2)$$

$$k = (Q_x, Q_y, k), \quad (3)$$

en donde $Q = (Q_x, Q_y, 0)$ es la proyección del vector de onda en el plano X-Y.

Escojemos al plano X-Z como plano de incidencia, i.e., $q_i = (Q_i, 0, q_i)$ y $Q_i = (Q_i, 0, 0)$, descomponemos los campos electromagnéticos en términos de ondas planas con polarización s, p y longitudinal, de tal manera que para las ondas transmitidas transversales

$$E_{st}(Q) = S_t(-Q_y, Q_x, 0) e^{i(Q_x x + Q_y y + kz)}, \quad (4)$$

$$B_{st}(Q) = (c/\omega) S_t(-kQ_x, -kQ_y, Q^2) e^{i(Q_x x + Q_y y + kz)}, \quad (5)$$

$$E_{pt}(Q) = (c/(\epsilon_t \omega)) P_t(kQ_x, kQ_y, -Q^2) e^{i(Q_x x + Q_y y + kz)}, \quad (6)$$

$$B_{pt}(Q) = P_t(-Q_y, Q_x, 0) e^{i(Q_x x + Q_y y + kz)}. \quad (7)$$

Los campos incidentes (reflejados) se pueden escribir de una manera similar tomando $\epsilon_t = 1$ y reemplazando k por $q_1(-q)$. Llamamos a $S_\alpha = S_\alpha(Q, \omega)$ y $P_\alpha = P_\alpha(Q, \omega)$, $\alpha = i, r, t$, las funciones de amplitud. Las Ecs. (4)→(7) garantizan que cada onda cumple las ecuaciones de Maxwell y tienen la polarización adecuada.

Como tenemos un metal espacialmente dispersivo descrito por una función dieléctrica, en la aproximación hidrodinámica, existen también ondas longitudinales (dentro del medio metálico exclusivamente) que se deben incluir en las ondas transmitidas y cuyos campos eléctricos y magnéticos están dados por

$$E_l(Q) = L(Q_x, Q_y, l) e^{i(Q_x x + Q_y y + lz)}, \quad (8)$$

$$B_l(Q) = 0, \quad (9)$$

Nos interesa encontrar S_r, P_r, S_t, P_t, L , las cuales son funciones de Q' y ω , que corresponden a las funciones de amplitudes de los campos de polarización s y p reflejados, los campos de

polarización s y p transmitidos y los campos longitudinales.

Sabemos que las ecuaciones de Maxwell proporcionan dos condiciones de frontera independientes: la continuidad de la proyección tangencial del campo eléctrico E,

$$F = E - (n \cdot E)n, \quad (10)$$

y la continuidad de la proyección tangencial del campo magnético B,

$$K = B - (n \cdot B)n, \quad (11)$$

en la interface, donde n es un vector unitario perpendicular a la superficie rugosa $\xi(x,y)$ dado por

$$n(\xi) = \frac{\nabla f}{|\nabla f|} = \frac{(-h\xi_x, -h\xi_y, 1)}{[(h\xi_x)^2 + (h\xi_y)^2 + 1]^{1/2}} \quad (12)$$

donde $f = z - h\xi(x,y)$, h es un parámetro que caracteriza la rugosidad y ξ_x, ξ_y son las derivadas parciales de $\xi(x,y)$ con respecto a x, y respectivamente.

Denotamos la contibución local debido a las transiciones interbanda con ϵ_b . Por lo tanto la

función dieléctrica longitudinal que utilizamos para el sistema no local es

$$\epsilon_1(k, \omega) = \epsilon_b - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau - \beta^2 k^2} \quad (13)$$

Como ϵ_b es discontinuo en la superficie, esto implica que E_{\perp} es también discontinuo. Es fácil demostrar que la condición de la frontera adecuada es la continuidad de $\epsilon_b E_{\perp}$ debido a la continuidad de la corriente de conducción j_{\perp} , es decir que

$$G = (n \cdot \epsilon_b E) n \quad (14)$$

sea continua.⁹

De las nueve condiciones de continuidad de las componentes del campo sólo cinco son independientes. Escojemos las componentes x y y de F y K, y la componente z de G sean continuas.

Expresando las ecuaciones anteriores en forma de matriz, se obtiene

$$\sum_{Q'} R(Q', \rho) S(Q_1, Q', \rho) e^{iQ' \cdot \rho} A(Q') = B(Q_1, \rho) e^{iQ_1 \cdot \rho}, \quad (15)$$

donde

$$A(Q') = [S_r(Q'), S_t(Q'), P_r(Q'), P_t(Q'), L(Q')]. \quad (16)$$

En la Ec.(15) la matriz $R(Q', \rho)$ depende de la orientación n de la superficie, la matriz $S(Q_1, Q', \rho)$ tiene la información sobre la altura $h\xi(\rho)$ exclusivamente y el vector $B(Q_1, \rho)$ caracteriza los campos incidentes que también dependen de la orientación de la superficie. Las expresiones explícitas de R , S y B están dadas en la Ref.(1).

Ahora podemos desarrollar todas las cantidades en la Ec.(15) en potencias de h :

$$R(Q', \rho) = \sum_{j,k} R^{(jk)}(Q') \xi_x^j(\rho) \xi_y^k(\rho) h^{j+k}, \quad (17)$$

$$S(Q_1, Q', \rho) = \sum_l S^{(l)}(Q_1, Q') \xi^l(\rho) h^l, \quad (18)$$

$$B(Q_1, \rho) = \sum_{j,k} B^{(jk)}(Q_1) \xi_x^j(\rho) \xi_y^k(\rho) h^{j+k}, \quad (19)$$

$$A(Q') = \sum_m A^{(m)}(Q') h^m. \quad (20)$$

Las expresiones explícitas de los coeficientes de h^n de estas cantidades, hasta segundo orden, se muestran en el Apéndice A2 de la Ref.(1). Nótese que hemos extraído de $R(Q', \rho)$, $S(Q_1, Q', \rho)$ y $B(Q_1, \rho)$ toda la información que depende del

perfil de la superficie. Por lo tanto $R^{(jk)}(Q')$, $S^{(l)}(Q_1, Q')$ y $B^{(jk)}(Q_1)$ son independientes de la estructura geométrica de la superficie.

Sustituyendo las Ecs.(17)-(20) en la Ec.(15) y tomando la transformada de Fourier, obtenemos

$$\sum_{Q', j, k, l, m \geq 0} \zeta^{(jkl)}(Q-Q') R^{(jk)}(Q') S^{(l)}(Q') A^{(m)}(Q') h^{j+k+l+m} = \sum_{j,k} \zeta^{(jko)}(Q-Q_1) B^{(jk)}(Q_1) h^{j+k}, \quad (21)$$

donde $\zeta^{(jkl)}(Q)$ es la transformada de Fourier de

$$\zeta^{(jkl)}(\rho) = \xi_x^j(\rho) \xi_y^k(\rho) \xi^l(\rho). \quad (22)$$

Igualamos los coeficientes de la misma potencia de h en ambos lados de la Ec.(21) y haciendo notar que $S^{(0)}(Q') = 1$ y $\zeta^{(000)}(Q-Q') = \delta_{Q, Q'}$, que corresponde a la conservación de la proyección del momento paralela a la superficie plana, resolvemos la Ec.(21) para $A(Q)$ iterativamente:

$$A^{(n)}(Q) = (R^{(00)}(Q))^{-1} \left\{ \sum_{\substack{0 \leq j \leq n \\ k = n-j}} \zeta^{(jko)}(Q-Q_1) B^{(jk)}(Q_1) - \sum_{\substack{Q', j, k, l \geq 0 \\ n \geq j+k+l > 0}} \zeta^{(jkl)}(Q-Q') R^{(jk)}(Q') S^{(l)}(Q_1, Q') A^{(n-j-k-l)}(Q') \right\}. \quad (23)$$

La solución a orden cero corresponde a la dispersión por una superficie plana. Observamos que los polos de $R^{(00)}(Q)$ satisfacen la relación de dispersión de plasmón-polaritón de superficie (SPP) de una superficie plana

$$\epsilon_t q(Q) + k(Q) + \frac{Q^2}{l(Q)} \left(1 - \frac{\epsilon_t}{\epsilon_b} \right) = 0 \quad (24)$$

Entonces, de la Ec.(23) podemos ver que la solución al primer orden tiene dispersiones resonantes en las frecuencias donde $Q_1 \neq g$ satisface a la Ec.(24). Estas soluciones resonantes del primer orden están fuera del cono de luz, por lo tanto son no radiativos y no contribuyen a la luz reflejada directamente. Pero podemos detectarlos, por ejemplo, a través de los campos radiados por moléculas adsorbidas en la superficie. Por otro lado, existe una

contribución al segundo orden de la luz reflejada especular ($Q = Q_1$) la cual se puede detectar experimentalmente.

En la siguiente sección se interpretan estos efectos, comparando la posición de los picos de resonancia de los factores de amplificación del campo electromagnético con la relación de dispersión de los modos de una superficie plana, para distintos ordenes de dispersión. Además, hay regiones de frecuencia en donde se observa una gran diferencia entre el cálculo local y el no local. Presentamos también el cálculo de la anisotropía en la reflectancia en condición de incidencia normal para el caso de una cara reconstruida de oro, modelando esto con el caso de una rejilla.

III. RESULTADO Y DISCUSION

En esta sección presentamos los resultados numéricos para una rejilla metálica senoidal usando las fórmulas deducidas anteriormente.

De los resultados que obtenemos que a primer orden no existe la onda especular ($Q=Q_1$) y las dispersiones ocurren en $Q = Q_1 \pm g$. A segundo orden existe un haz especular y dos no-especulares con $Q = Q_1$, $Q_1 \pm 2g$. Nótese que las resonancias aparecen cuando el vector de onda Q ó cualquier de los vectores de onda intermediarios Q' (ver la Ec.(23)) satisface la relación de dispersión de los plasmones-polaritones de superficie (Ec.(24))

De aquí en adelante utilizamos las respuestas dieléctricas dadas por la Ec.(13) con $\omega_p \tau = 100$ y $\beta = 0.00361c$, y tomamos $\epsilon_b = 1$ (por la simplicidad). Para Q 's pequeñas ($Q \ll \omega_p / \beta$) no existen diferencias apreciables con el caso local, el cual corresponde a $\beta = 0$. El efecto de la no-localidad se manifiesta para los valores grandes de Q donde aparecen desviaciones significativas cuando se compara con los resultados locales. Usaremos esta figura para interpretar la estructura de las curvas que se describen adelante.

Con el fin de analizar nuestros resultados para las dispersiones resonantes, definimos un

factor de amplificación dado por

$$r_1 = \frac{1}{gh} \frac{|hE_{pr}^{(1)}(Q_1+g)|}{|E_{pi}^{(0)}(Q_1)|}$$

para el campo a primer orden, y

$$r_2 = \frac{1}{(gh)^2} \frac{|h^2 E_{pr}^{(2)}(Q_1)|}{|E_{pi}^{(0)}(Q_1)|}$$

para el campo especular a segundo orden. Aquí $|q(Q_1+g)|^2$ significa $q(Q_1+g) \cdot q^*(Q_1+g)$. Hemos introducido el desarrollo $E = \sum_n h^n E^{(n)}$ y utilizado las Ecs.(4-7) para expresar E_{pr} en función de P_r . La dependencia del campo a primer y a segundo orden en h se ha sustraído en la definición de r_1 y r_2 , y la magnitud del vector de onda g se usa solamente para obtener cantidades adimensionales.

En las Figs.1, 2 y 3 mostramos los resultados para los casos local y no local, para r_1 y r_2 como función de g , cuando la luz con polarización p incide sobre la superficie con un ángulo $\theta = 30^\circ$ para tres frecuencias diferentes: $\omega/\omega_p = 0.4, 0.5$ y 0.8 . En la Fig.1 el cálculo no local a primer orden muestra un mínimo profundo en R^+ para un

valor de g que corresponde a una raíz de r_1 . No es estrictamente un cero por lo que las raíces son complejas debido al valor finito de τ . En el caso local estos mínimos obedecen la relación

$$\epsilon_t Q_i (Q_1+g) k(Q_1) k(Q_1+g) = 0, \quad (25)$$

la cual se puede resolver analíticamente y se muestra en el recuadro de la Fig.1, junto con las raíces que corresponden al cálculo no local las cuales han sido obtenidas numéricamente. Nótese que cuando $g \rightarrow \infty$ el cálculo local se aproxima a una frecuencia dada por una (la más pequeña) de las raíces de

$$\left(\frac{\omega}{\omega_p}\right)^4 - (2\sin^2\theta + 1) \left(\frac{\omega}{\omega_p}\right)^2 + 1 = 0 \quad (26)$$

(despreciando la disipación); esta tendencia no existe en el cálculo no local. Se puede ver en el recuadro de la Fig.1 que para $\omega < 0.44\omega_p$ existe raíces tanto en el caso local (línea punteada) como en el caso no local (línea continua), pero para $\omega > 0.44\omega_p$ sólo existe una raíz para el caso no local y para un valor grande de g . Este comportamiento también aparece en las Figs.2 y 3, donde los resultados no locales muestran mínimos

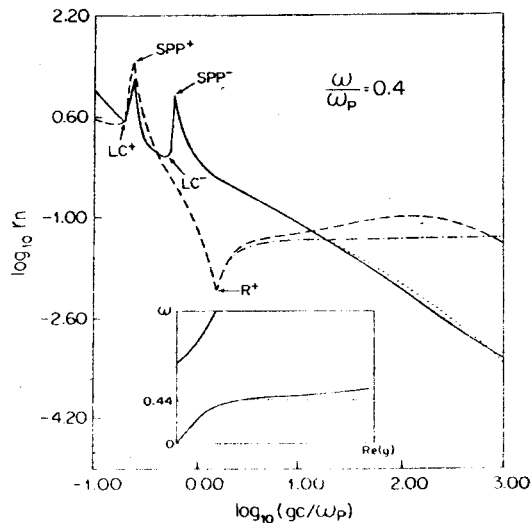


Fig.1. El factor de amplificación r_1 (línea quebrada) y r_2 (línea continua) para la luz con polarización p , como función de gc/ω_p para una frecuencia fija $\omega/\omega_p = 0.4$ y un ángulo de incidencia de 30° . Los cálculos locales correspondientes se muestran con líneas quebrada-punteadas y punteadas. Se indican también los vectores de onda que conectan $Q_1 \pm g$ con la relación de dispersión de SPP, con el cono de luz (LC), y con la raíz (R) del campo dispersado a primer orden. En el recuadro mostramos una figura esquemática de la parte real de las raíces de r_1 como una función de ω ; la curva con línea continua representa el caso no local y la curva con línea punteada representa el caso local.

profundos que están ausentes en el caso local.

Una de las características predominantes de las Fig.1 y 2 es el pico de r_1 debido a la excitación de SPP en $Q_1 + g$ (SPP^+) y dos picos en r_2 debido a la excitación en $Q_1 \pm g$ (SPP^+ y SPP^-). Los procesos de excitación muestran en los recuadros de las Figs.2 y 3. En estos recuadros señalamos la relación de dispersión de plasmón de superficie (SPP) y el cono de luz (LC), y Q_1 corresponde al ángulo de incidente. Para un valor ω fijo, la excitación se ocurre cuando los vectores de onda se intersectan con los modos de SPP. Como vemos en las Figs.1 y 2, existe una diferencia notable entre los resultados de los cálculos local y de no local para valores grandes de g . Sin embargo, para

frecuencias pequeñas, esta diferencia es despreciable cerca de la resonancia de SPP. Por otro lado, para $\omega/\omega_p > 1/\sqrt{2}$ (Fig.3) no existen picos de SPP para valores grandes de g en el caso local, sin embargo se observan las resonancias de SPP en el caso no local. Como en este caso $Q_1 \ll g$, los dos picos de segundo orden en $Q_1 \pm g$ (SPP^\pm) se acercan tanto el uno al otro que no podemos distinguir la

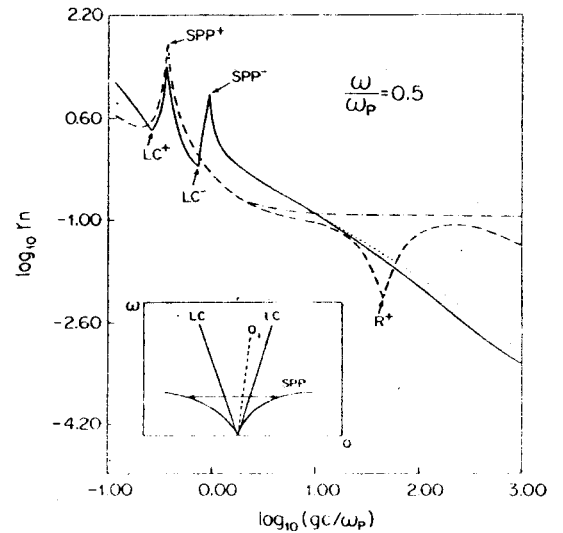


Fig.2. El factor de amplificación r_1 (línea quebrada) y r_2 (línea continua) como función de gc/ω_p para una frecuencia fija $\omega/\omega_p = 0.5$. La notación es lo mismo que los de la Fig.1. En el recuadro mostramos el proceso de la excitación de SPP en $Q_1 + g$ ó $Q_1 - g$. La proyección Q_1 del vector de onda incidente está representada por una curva con línea quebrada a través del origen dentro del cono de luz (LC) y la superficie no-plana proporciona el momento adicional $\pm g$.

diferencia en la figura. (El acercamiento de estos dos picos puede ser utilizado para cuantificar la curvatura en la relación de dispersión de SPP).

En las figuras 1, 2 y 3 podemos también observar que existen una ó dos discontinuidades en

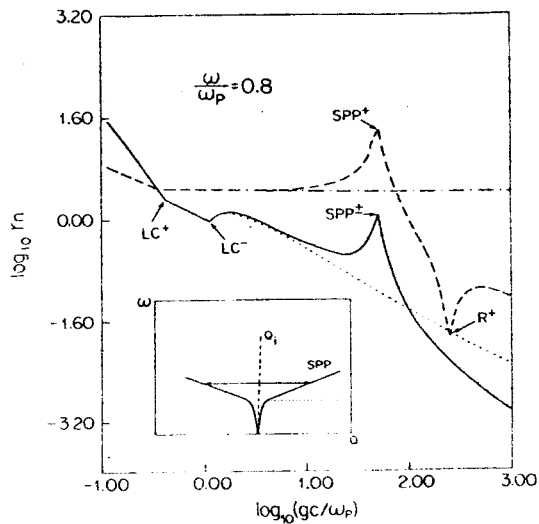


Fig. 3. El factor de amplificación r_1 (línea quebrada) y r_2 (línea continua) como función de gc/ω_p para una frecuencia fija $\omega/\omega_p=0.8$ y un ángulo de incidencia de 30° . Los cálculos locales correspondientes se muestran con curvas quebrada-punteadas y punteadas. Las notaciones son las mismas que la Fig. 1. En el recuadro mostramos el proceso de la excitación de SPP en Q_1+g ó Q_1-g las cuales sólo son posibles en el caso no local. La curva con línea punteada corresponde al caso local.

la pendiente en las curvas de r_1 y r_2 respectivamente. Ellas corresponden al valor de g referente a la intersección de Q_1+g con la superficie del cono de luz (LC^+ y LC^-).

En la Fig. 4 se muestra la diferencia de la reflectancia cuando el factor de polarización de la luz incidente está a lo largo de las hileras ausentes y cuando está en la dirección perpendicular. Esto da lugar a una anisotropía en la reflexión la cual, convenientemente normalizada, es presentada como función de la frecuencia para una rejilla con periodo fijo ($g=10\omega_p/c$) y la altura fija ($h=0.00667c/\omega_p$). Los valores de ϵ_b se obtienen sustituyendo los valores experimentales¹⁰ de las respuestas dieléctricas del oro. Observamos que g en este caso es pequeño, por lo tanto los cálculos locales y no locales difieren muy poco.

Las curvas en la Fig. 5 corresponden a los resultados no locales para la anisotropía en la reflectancia sobre la superficie reconstruida del oro, caracterizada por la ausencia de hileras completas de átomo, para $g\omega_p/c=165, 110,$ y 82 ; estos valores se relacionan a los diferentes periodos de la rejilla: $\lambda=2a, 3a,$ y $4a$ ($a=4\text{Å}$) respectivamente, correspondientes a la ausencia de 1, 2 ó 3 hileras consecutivas de átomo.

V. CONCLUSIONES

En este trabajo hemos obtenido la solución formal de los campos electromagnéticos dispersados, en términos de una serie de potencias de un parámetro proporcional a la función de perfil de la rugosidad. Se propone un método de cálculo para determinar los coeficientes de la serie a orden arbitrario. Para ilustrar el uso del método, éste se aplica al caso de una rejilla periódica y se presentan resultados numéricos para el primer y segundo orden.

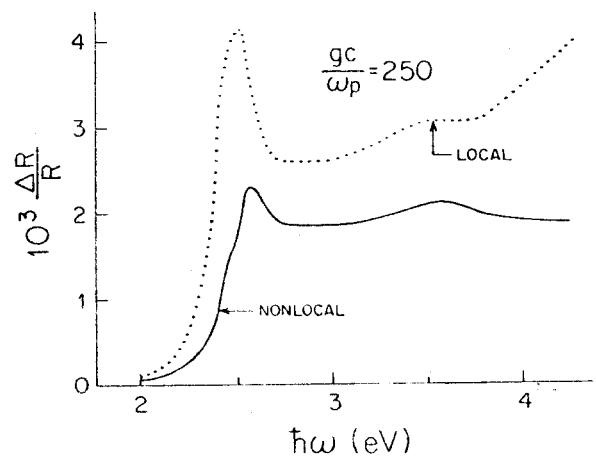


Fig. 4. La anisotropía en la reflexión a incidencia normal por una superficie Au(110) en sistema con respuesta no local. La superficie se modeló por una rejilla con vector de onda $gc/\omega_p=250$ y una altura $h\omega_p/c=0.00667$. Los cálculos locales correspondientes se muestran con las líneas punteadas.

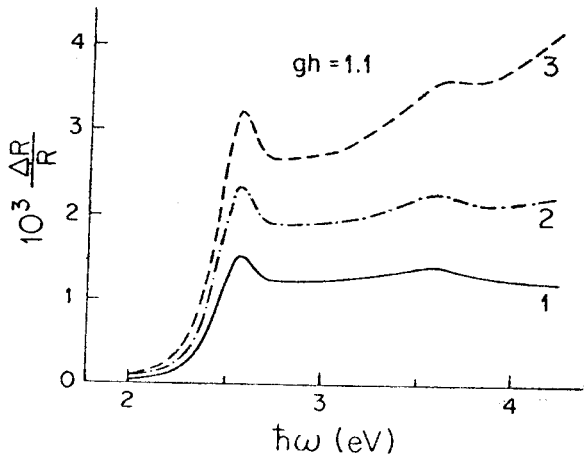


Fig.5. La anisotropía en la reflexión a incidencia normal por una superficie Au(110) en el sistema no local para vectores de onda de rejilla $gc/\omega_p=165$ (línea continua), 110 (línea quebrada-punteada), y 82 (línea quebrada) con $gh=1.1$ fija. El significado de los números 1, 2, y 3 aparecen en el texto.

La presencia de la rugosidad destruye la simetría translacional a lo largo de la superficie y esto hace posible que el campo electromagnético externo pueda excitar plasmones-polaritones de superficie (SPP). Nuestros resultados muestran claramente la amplificación del campo electromagnético cerca de la superficie debido al acoplamiento resonante con los plasmones-polaritones de superficie. Presentamos curvas de estos factores de amplificación a primer y segundo orden como función de la frecuencia y del vector de onda que caracteriza la periodicidad de la rejilla. Estas curvas muestran una estructura muy variada y son analizados en términos de los distintos procesos de excitación de los modos de superficie y de bulto correspondientes al sistema con una superficie plana.

La parte más notable de la estructura de las curvas corresponde a la excitación resonante de los SPP. A bajas frecuencias la posición de esta resonancia en el caso no local difiere de la correspondiente a la del caso local; esta diferencia se hace más evidente cuando la

periodicidad de la rejilla es de escala microscópica. A altas frecuencias esta resonancia ya no aparece en el caso local y sólo aparece en el caso no local.

Dado que los efectos de la dispersión espacial (caso no local) son mayores cuando menor es la periodicidad espacial de la rejilla, hemos aplicado nuestra teoría al cálculo de la reflexión de luz sobre una superficie reconstruida de una de las caras del oro cristalino (Au(110)). Nuestros resultados representan una predicción de tres distintos tipos de reconstrucción. Se encuentran diferencias claras entre ellos, así como en los cálculos correspondientes a un modelo local para la función dieléctrica del oro.

REFERENCIAS

1. Shu Wang, tesis doctoral, Universidad Nacional Autónoma de México (1989).
2. A.A. Maradudin, en *Surface Polaritons*, ed. por V.M. Agranovich y D.L. Mills (North-Holland, Amsterdam, 1982) p. 405.
3. K.L. Kliewer, *Surface Sci.* 101, 57 (1980).
4. W.L. Mochán y Rubén G. Barrera, *Phys. Rev.* B23, 5707 (1981).
5. W.L. Mochán, Rubén G. Barrera, y Ronald Fuchs, *Phys. Rev.* B33, 5350 (1986).
6. A.D. Boardman y R. Ruppín, *Surface Sci.* 112, 153 (1981).
7. P. Halevi y R. Fuchs, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 17, 3869 (1984).
8. L. Kleinman, *Phys. Rev.* B7, 2288 (1973).
9. R. Kötz, D.M. Kolb, y F. Forstmann, *Surface Sci.* 91, 489 (1980).
10. John Harris, *Phys. Rev.* B4, 1022 (1971).