

Shu Wang^a y G. H. Coccoletzi^b

a. CIFUS, Apartado Postal 5-088, Hermosillo, Sonora 83190 México

b. DSICUAP, Apartado Postal 1651, Puebla, 72000 México

Se desarrolla un formalismo para estudiar los efectos de dispersión espacial en una superficie corrugada, caracterizada por una función dieléctrica de un medio excitónico. Se calcula el factor de amplificación hasta el primer orden de la rugosidad. Se discuten los resultados comparando con diferentes condiciones adicionales a la frontera.

I. Introducción

Las propiedades ópticas de superficies rugosas se han estudiado extensamente por medio de la dispersión de ondas electromagnéticas. Varios métodos aproximativos se han desarrollado con el fin de caracterizar estas superficies. Por ejemplo, Elson y Ritchie¹ calcularon el campo electromagnético dispersado por una superficie rugosa metálica. En el tratamiento aplicaron la transformación de coordenadas a la ecuación de ondas que satisface el vector de Hertz y obtuvieron la sección transversal. Maradudin y Mills² desarrollaron un método perturbativo para estudiar la superficie rugosa de un metal de Drude. Estos autores calcularon el vector de Poynting e hicieron la comparación con el resultado de Elson y Ritchie, encontrando resultados similares. El teorema de extinción se ha usado por Agarwal³ para estudiar superficies rugosas de medios cuya función dieléctrica de volumen tiene una dependencia en la frecuencia y el vector de onda. Recientemente, Wang, Barrera y Mochán⁴ hicieron uso del método de Rayleigh-Fano, y el modelo hidrodinámico para estudiar la superficie rugosa de un metal, tomando en cuenta la dispersión espacial.

Los efectos de dispersión espacial o efectos no-locales son importantes tanto en el estudio de medios metálicos como en el de medios semiconductoras. En el último caso están relacionados con la creación de pares electrón-hueco en estado ligado, es decir, de excitones. Debido a la existencia de modos longitudinales, las ecuaciones de Maxwell no son suficientes para describir los campos en estos medios. El problema de las condiciones adicionales a la frontera (CAF's) se ha discutido ampliamente. Por ejemplo, Agranovich *et al.*⁵, Halevi *et al.*⁶

y Ruppin *et al.*⁷ han hecho un desarrollo acerca de las CAF's apropiados. Sel'kin y colaboradores⁸ estudiaron tanto teórico como experimentalmente los efectos de la rugosidad aleatoria en los campos electromagnéticos dispersados cerca de un semiconductor excitónico. Estos autores incluyeron una capa superficial libre de excitones, capa muerta, y consideraron las condiciones adicionales a la frontera de Pekar⁹. En el presente reporte estudiamos una superficie de perfil sinusoidal, caracterizada por una función dieléctrica excitónica. Utilizamos el método de Rayleigh-Fano, y la aproximación perturbativa para calcular las amplitudes de los campos dispersados. Discutimos los resultados numéricos comparando con diferentes condiciones adicionales a la frontera.

II. Teoría

Consideramos el sistema que consiste de una superficie definida por la ecuación

$$f(x, z) \equiv z + h\xi(x) = 0, \quad (1)$$

donde h es la altura de la rugosidad y $\xi(x)$ es la función del perfil.

Supongamos que la región $z > -h\xi(x)$ está ocupada por un semiconductor excitónico que está caracterizado por la función dieléctrica de Hopfield y Thomas⁸

$$\epsilon(\omega, \vec{q}) = \epsilon_0 + \frac{\omega_p^2}{\omega_T^2 - \omega^2 + Dq^2 - i\omega\nu}, \quad (2)$$

donde ϵ_0 es la constante dieléctrica del trasfondo, ω_p es la medida de la intensidad del oscilador, ω_T es la frecuencia de la transición excitónica, ν es la frecuencia de amor-

tiguamiento, \vec{q} es el vector de onda, $D = \hbar\omega_T/(m_e + m_h)$, m_e y m_h son las masas del electrón y el hueco. En la región $z < -h\xi(x)$ consideramos vacío.

El vector normal a la superficie está definida por

$$\vec{n}(\xi) = \frac{\nabla f}{|\nabla f|} = \frac{(-h\xi_x, -h\xi_y, 1)}{[(h\xi_x)^2 + (h\xi_y)^2 + 1]^{1/2}}, \quad (3)$$

y la derivada normal es

$$\frac{\partial}{\partial \vec{n}} = \vec{n} \cdot \nabla. \quad (4)$$

Las condiciones a la frontera para la superficie rugosa son la continuidad de las componentes tangenciales de los campos \vec{E} y \vec{B} , que escriben como

$$\vec{F} = \vec{E} - (\vec{n} \cdot \vec{E})\vec{n}, \quad (5a)$$

$$\vec{K} = \vec{B} - (\vec{n} \cdot \vec{B})\vec{n}. \quad (5b)$$

Debemos hacer notar que la dependencia de la frecuencia así como del vector de onda de la función dieléctrica da origen a la excitación de ondas adicionales. Estos son las ondas excitónicas. Debido a las ondas adicionales a la del fotón, para determinar las amplitudes de los campos reflejados y transmitidos se necesitan condiciones adicionales a la frontera, dos para ondas de polarización p y una para ondas de polarización s . En este trabajo consideramos las CAF's que tienen la forma

$$\alpha \vec{P} + \frac{\partial \vec{P}}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (6)$$

en la superficie, donde α es un parámetro y \vec{P} es la polarización excitónica. Las componentes x e y de los campos eléctricos y magnéticos para la onda incidente se puede escribir como

$$E_{xi}(\vec{r}, t) = E_x(Q_i)e^{i(Qx+q_iz-\omega t)}, \quad (7a)$$

$$B_{yi}(\vec{r}, t) = Y(Q_i)E_x(Q_i)e^{i(Qx+q_iz-\omega t)}, \quad (7b)$$

para la onda reflejada

$$E_{xr}(\vec{r}, t) = \sum_Q E_x(Q)e^{i(Qx-qz-\omega t)}, \quad (8a)$$

$$B_{yr}(\vec{r}, t) = \sum_Q Y(Q)E_x(Q)e^{i(Qx-qz-\omega t)}, \quad (8b)$$

y para la onda transmitida

$$E_{xt}(\vec{r}, t) = \sum_{n=1}^3 \sum_Q E_n(Q)e^{i(Qx+q_nz-\omega t)}, \quad (9a)$$

$$B_{yt}(\vec{r}, t) = \sum_{n=1}^2 \sum_Q Y_n(Q)E_n(Q)e^{i(Qx+q_nz-\omega t)}. \quad (9b)$$

Las componentes del vector de polarización excitónica son

$$P_x(\vec{r}, t) = \sum_{n=1}^3 \sum_Q X_n(Q)E_n(Q)e^{i(Qx+q_nz-\omega t)}, \quad (10a)$$

$$P_z(\vec{r}, t) = \sum_{n=1}^3 \sum_Q X_n D_n(Q)E_n(Q)e^{i(Qx+q_nz-\omega t)}, \quad (10b)$$

donde hemos definido $Y(Q) = 1/q(Q)$, $Y_n(Q) = c_n(Q)/q_n(Q)$, $Y(Q_i) = 1/q(Q_i)$, $D_n(Q) = Q/q_n(Q)$, $n = 1, 2$, $D_3(Q) = -q_3(Q)/Q$ y $X_n(Q) = 1/(q_n^2(Q) - \Gamma^2)$,

Ahora utilizamos el método de Rayleigh-Fano y aplicando las condiciones a la frontera, obtenemos

$$\sum_Q \vec{A}(Q, x) \vec{T}(Q, x) \vec{E}(Q)e^{iQx} = \vec{B}(Q_i, x)e^{iQ_i x}, \quad (11)$$

donde

$$\vec{A}(Q, x) = \begin{pmatrix} a & a_1 & a_2 & a_3 \\ Y & -Y_1 & -Y_2 & 0 \\ 0 & c_1 & c_2 & c_3 \\ 0 & D_1 c_1 & D_2 c_2 & D_3 c_3 \end{pmatrix}, \quad (12)$$

con $c_i = b_i(Q, x)X_i(Q)$, $i = 1, 2, 3$

$$\vec{T} = \text{diag} \left(e^{-i(q+q_i)z_0}, e^{i(q_1-q_i)z_0}, e^{-i(q_2-q_i)z_0}, e^{-i(q_3-q_i)z_0} \right), \quad (13)$$

$$\vec{E}(Q) = \begin{pmatrix} E_x(Q) \\ E_1(Q) \\ E_2(Q) \\ E_3(Q) \end{pmatrix}, \quad (14)$$

y

$$\vec{B}(Q_i, x) = \begin{pmatrix} a_i(Q_i, x) \\ -Y_i \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

En las ecuaciones (11-15) hemos definido

$$a(Q, x) = 1 + n_x^2 + n_x n_z Q/q, \quad (16a)$$

$$a_n(Q, x) = 1 - (n_x^2 - n_x n_z Q/q_n), \quad (16b)$$

$$a_i(Q_i, x) = 1 - (n_x^2 - n_x n_z Q_i/q_i), \quad (16c)$$

y

$$b_n(Q, x) = \alpha - \frac{i(\hbar Q \xi_x + q_n)}{(1 + \hbar^2 \xi_x^2)^{1/2}}, \quad (16d)$$

donde $\xi_x = \partial \xi(x)/\partial x$.

Ahora aplicamos el método perturbativo⁴ para escribir todas las funciones en potencias de la altura h de la rugosidad,

$$\vec{A}(Q, x) = \sum_j \vec{A}^{(j)}(Q) \xi_x^j(x) h^j, \quad (17a)$$

$$\vec{T}(Q, x) = \sum_j \vec{T}^{(j)}(Q) \xi_x^j(x) h^j, \quad (17b)$$

$$\vec{B}(Q, x) = \sum_j \vec{B}^{(j)}(Q) \xi_x^j(x) h^j, \quad (17c)$$

y

$$\vec{E}(Q) = \sum_m \vec{E}^{(m)}(Q) h^m. \quad (17d)$$

Sustituyendo las ecs. (17) en (11) se obtienen las amplitudes de los campos dispersados, a orden arbitrario en el parámetro perturbativo. Aquí restringimos el estudio al cálculo de las amplitudes de los campos hasta primer orden. A orden cero se tiene

$$\vec{E}^{(0)}(Q) = [\vec{A}^{(0)}(Q)]^{-1} B^{(0)} \delta_{Q,Q_i} \quad (18)$$

y a primer orden

$$\begin{aligned} \vec{E}^{(1)}(Q) = & \frac{1}{2} [\vec{A}^{(0)}(Q)]^{-1} \times \\ & (ig(B^{(1)}(Q) - A^{(1)}(Q_i) \vec{E}^{(0)}(Q_i)) \times \\ & [\delta_{Q,Q_i+g} - \delta_{Q,Q_i-g}] \\ & - \vec{A}^{(0)}(Q_i) \vec{T}^{(1)}(Q_i) \vec{E}^{(0)}(Q_i) [\delta_{Q,Q_i+g} - \delta_{Q,Q_i-g}]), \quad (19) \end{aligned}$$

Para obtener las formulas (18) y (19) hemos considerado un perfil sinusoidal de longitud de onda $\lambda = 2\pi/g$, donde g es la magnitud del vector de onda unidimensional de la red reciproca.

III. Resultados y discusión

En esta sección presentamos los resultados numéricos para el perfil sinusoidal de un semiconductor excitónico. Usamos la formación de la sección anterior para calcular los campos a cero y primer orden en el parámetro perturbativo h y la aplicamos a la superficie del CdS para el excitón $A_{n=1}$. Enfocamos nuestra atención a los campos dispersados, cuyo vector de onda en la dirección x es: $Q = Q_i$ para el orden cero y $Q = Q_i + g$ para el orden uno. Los parámetros que usamos son: $\hbar\omega_T = 2.552eV$, $\nu = 10^{-6}\omega_T$, $\omega_p = 0.11517\omega_T$, $D = 6.17 \times 10^{-5}c^2$.

La Fig.1 muestra dos condiciones adicionales a la frontera las cuales se obtienen como casos particulares de la ecuación (6). Para los CAF's de Pekar, $\alpha = \infty$, por

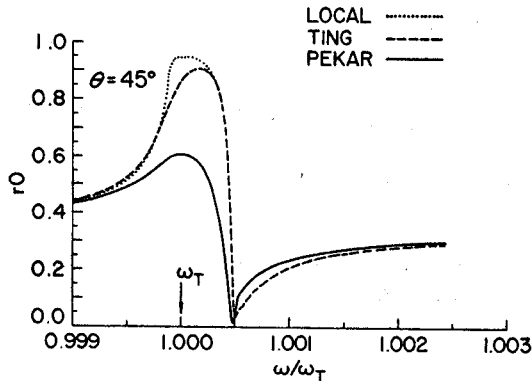


Fig.1. Reflectancia de luz por una superficie plana de semiconductor CdS. Las curvas 1 y 2 corresponden a las CAF's de Ting *et. al* y de Pekar respectivamente. La línea punteada el caso local.

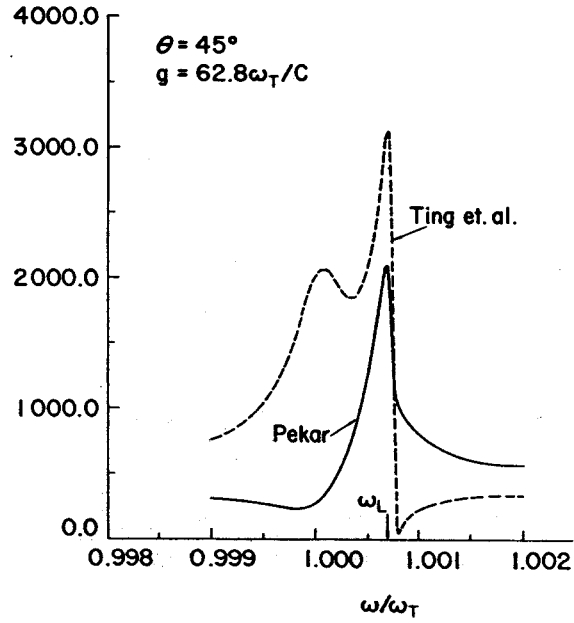


Fig.2. Campo eléctrico reflejado a primer orden por una regilla semiconductor CdS cuando $g = 62.8\omega_T/c$, con el ángulo de incidencia $\theta = 45^\circ$. Las curvas 1 y 2 corresponden a las CAF's de Ting *et. al* y de Pekar respectivamente.

lo que la ecuación se reduce a $\vec{P} = 0$ en la superficie y para las CAF's de Ting *et. al.*¹¹, $\alpha = 0$, y la ecuación toma la forma $\partial\vec{P}/\partial\vec{n} = 0$ en la superficie. Los resultados mostrados en esta figura se conocen bien, por lo que comentamos brevemente al respecto. La curva de Ting *et. al.* es la que experimenta los efectos no locales menos fuertes, comparando con la curva local. Mientras que en el caso de Pekar los efectos son más importantes. Se ha demostrado de la comparación de teoría con el experimento que las CAF's apropiadas, para experimentos de reflexión especular, son las de Pekar⁹.

En la Fig.2 comparamos los amplitudes de los campos

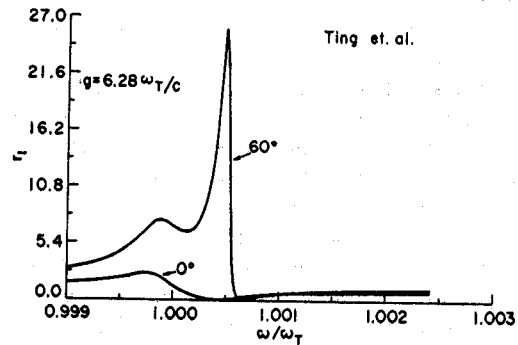


Fig.3. Campo eléctrico reflejado a primer orden por una regilla semiconductor CdS para las CAF's de Ting cuando $g = 6.28\omega_T/c$. Las curvas corresponden a $\theta = 0^\circ$ y 60° respectivamente.

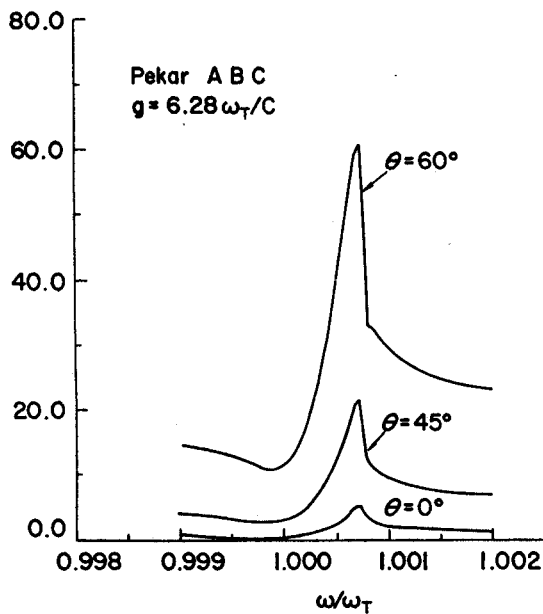


Fig.4. Campo eléctrico reflejado a primer orden por una regilla semiconductor CdS para las CAF's de Pekar cuando $g = 6.28\omega_T/c$. Las curvas corresponden a $\theta = 0^\circ, 15^\circ$, y 60° respectivamente.

dispersados a primer orden h . El ángulo de incidencia es $\theta = 45^\circ$ y la magnitud del vector de onda de la red recíproca asociado al perfil sinusoidal es $g = 62.8\omega_T/c$. La curva con dos picos corresponde a las CAF's de Ting *et al.*, mientras que la curva con un pico es para las CAF's de Pekar. Notamos que ambas curvas exhiben un pico a la frecuencia del excitón longitudinal, $\omega_l = 1.0007\omega_T$. Sin embargo, para las CAF's de Ting, la curva exhibe además un pico en la frecuencia de la transición excitónica ω_T . La Fig.3 muestra dos espectros también a primer orden para las CAF's de Ting, con dos ángulos de incidencia diferentes. Se observa que no existen picos para el ángulo de incidencia normal. Sin embargo, existen dos picos para ángulos de incidencia oblicua. Por último, en la Fig.4 presentamos la comparación de los espectros dispersados para $g = 6.28\omega_T/c$ y tres diferentes ángulos de incidencia de la luz. Se nota claramente que el pico de cada curva está a la misma frecuencia ω_l , aunque a medida que aumenta el ángulo de incidencia el pico se hace más grande. Se observa que todos los espectros exhiben un pico a la frecuencia ω_l , el cual se debe a la dispersión de luz por el polaritón excitón. A medida que aumenta el ángulo de incidencia el pico se hace más grande.

En publicaciones recientes, Sel'kin y colaboradores han reportado resultados experimentales de los campos dispersados por una superficie rugosa de CdS, en la región espectral de la transición excitónica $A_{n=1}$. La comparación con la teoría la llevaron a cabo tomando las CAF's de Pekar y una capa muerta. El pico que aparece en la frecuencia longitudinal del excitón se ha reproducido teóricamente. Sin embargo, el pico a la frecuencia

de la transición excitónica ω_T no ha podido ser explicado. Los autores han argumentado que en la comparación entre teoría y experimento, las CAF's apropiados dependen de la preparación de la muestra y de la superficie.

Los resultados del presente trabajo muestran que los efectos de la dispersión espacial modifican los resultados locales, estos efectos son mayores cuando menor es la periodicidad espacial de la superficie rugosa. Dado que la presencia de rugosidad en la superficie permite excitar los excitones directamente con luz, nuestro trabajo muestra la posibilidad de observar los efectos no-locales en una regilla semiconductor. Además, nuestra teoría también es útil para estudiar las CAF's adecuadas en la interface de dos medios uno excitónico y otro local.

Referencias

- 1 J. M. Elson y R. H. Ritchie, Phys. Stat. Sol. (b) **62**, 461(1974).
- 2 A. A. Maradudin y D. L. Mills, Phys. Rev. B **11**, 1392(1975); Phys. Rev. B **7**, 2787(1973).
- 3 G. S. Agarwal, Phys. Rev. B **15**, 2371(1977); K. V. Sobha y G. S. Agarwal, Solid State Commun. **43**, 99(1982).
- 4 S. Wang, R. G. Barrera y W. L. Mochán, Phys. Rev. B **40**, 1571(1989); S. Wang, W. L. Mochán y R. G. Barrera, Phys. Rev. B **42**, 9155(1990).
- 5 V. M. Agranovich, V. E. Kravtsov, T. A. Leskova, A. G. Mal'shukov, G. Hernández-Cocolezzi y A. A. Maradudin, Phys. Rev. B **29**, 976(1984).
- 6 P. Halevi y G. Hernández-Cocolezzi, Phys. Rev. Lett. **48**, 1500(1982).
- 7 R. Ruppin y R. Englman, Phys. Rev. Lett. **53**, 1688(1984).
- 8 V. A. Kosobukin y A. V. Sel'kin, Solid State Commun. **66**, 313(1988)
- 9 S. I. Pekar, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **33**, 1022(1957). [Soc.Phys. JETP **6**, 785(1958)].
- 10 J. J. Hopfield y D. G. Thomas, Phys. Rev. B **2**, 563(1963).
- 11 C. S. Ting, M. J. Frankel, y J. L. Birman, Solid State Commun. **17**, 1285(1975).