



Universidad Autónoma de Baja California
Facultad de Ciencias

**Plasmones polaritones de superficie en superficies
metálicas rugosas**

Tesis profesional
que para obtener el título de

Físico

presenta:

Cristina Josefina Amaya Méndez

Director de Tesis:
Dr. Eugenio Rafael Méndez Méndez

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE CIENCIAS

**PLASMONES POLARITONES DE SUPERFICIE EN SUPERFICIES
METALICAS RUGOSAS**

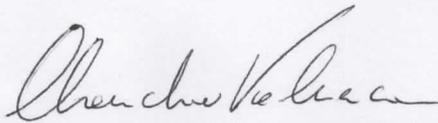
TESIS PROFESIONAL
QUE PRESENTA

CRISTINA JOSEFINA AMAYA MENDEZ

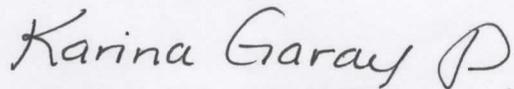
APROBADO POR:



DR. EUGENIO RAFAEL MENDEZ MENDEZ
PRESIDENTE DEL JURADO



DR. CLAUDIO ISMAEL VALENCIA YAVES
SECRETARIO



DRA. KARINA GARAY PALMETT
PRIMER VOCAL



DR. VICTOR RUIZ CORTES
SEGUNDO VOCAL

Resumen de la tesis de **Cristina Josefina Amaya Méndez** presentada como requisito parcial para la obtención de la **Licenciatura en Física**. Ensenada, Baja California, México. Septiembre de 2017.

Plasmones polaritones de superficie en superficies metálicas rugosas

Resumen aprobado:



_____ Eugenio Rafael Méndez Méndez

Se presenta un estudio numérico del esparcimiento de luz por superficies metálicas rugosas que soportan plasmones polaritones de superficie. El estudio está basado en la solución de las ecuaciones reducidas de Rayleigh, que para el caso periódico, se pueden escribir como ecuaciones matriciales. La solución de estas ecuaciones determina el espectro angular del campo esparcido, con el cual se pueden determinar otras cantidades de interés, como la reflectancia de la superficie, las eficiencias en los diferentes órdenes de difracción o los mapas de campo cercano.

Para los cálculos se consideraron rejillas sinusoidales de plata de diferentes períodos y profundidades, así como superficies conformadas por rejillas con secciones planas y rejillas con defectos gaussianos. En la mayoría de los casos, se supuso que las superficies eran iluminadas por ondas planas con polarización p . De los resultados de reflectancia y eficiencias es posible determinar las condiciones óptimas para la excitación de plasmones polaritones de superficie y visualizar, a través de los mapas de campo cercano, la intensificación del campo superficial cuando esto ocurre.

Al intentar encontrar una alternativa práctica para estudiar el esparcimiento de plasmones polaritones de superficie por defectos superficiales, se realizaron cálculos para el caso de rejillas con pozos gaussianos. Se encontró que, si las condiciones son adecuadas, es posible separar la contribución de interés, de las distribuciones de campo esparcido causadas por la interacción directa del campo incidente con el defecto o con la rejilla.

Se presentan también cálculos de campo lejano para una rejilla con una profundidad optimizada, que ilustran el comportamiento de las anomalías de Wood en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia.

Palabras clave: **plasmones polaritones de superficie, ecuaciones reducidas de Rayleigh, anomalías de Wood, esparcimiento, superficies rugosas.**

Abstract of the thesis presented by **Cristina Josefina Amaya Méndez** as partial fulfillment of the requirements for the **Bachelor of Science in Physics**. Ensenada, Baja California, Mexico. September 2017.

Surface plasmon polaritons on rough metal surfaces

Abstract approved by:



Eugenio Rafael Méndez Méndez

A numerical study of the scattering of light by rough metal surfaces that support surface plasmon polaritons is presented. The study is based on the solution of the reduced Rayleigh equations which, for the case of a periodic surface, can be written as matrix equations. The solution of these equations determine the angular spectrum of the scattered field, which can be used to calculate other quantities of interest, such as the reflectance of the surface, the diffraction order efficiencies or the near-field maps.

For the calculations we considered silver sinusoidal diffraction gratings with different periods and depths, as well as surfaces formed by gratings with plane sections and gratings with Gaussian defects. In most of cases, it was assumed that the surfaces were illuminated by p-polarized plane waves. From the results obtained for the reflectance and the efficiencies it is possible to determine the optimal conditions for the excitation of surface plasmon polaritons and visualize, through the near field maps, the intensification of the surface field when this occurs.

In our attempts to find a practical alternative to study the scattering of surface plasmons polaritons by surface defects, we carried out calculations for gratings with Gaussian grooves. We found that under the right conditions it is possible to separate the contribution of interest from the angular distribution of the scattered light caused by the direct interaction of the incident field with the defect or with the grating.

Using a grating with an optimized surface depth, far-field calculations that illustrate the behavior of the Wood anomalies as a function of the wavelength and incident angle are also presented and discussed.

Key words: surface plasmon polaritons, reduced Rayleigh equations, Wood's anomalies, scattering, rough surfaces.

Lista de Figuras

1.1	Pérdida de energía de electrones en una película delgada de magnesio en etapas progresivas de oxidación. (Powell y Swan, 1959).	4
1.2	Rejilla metálica periódica utilizada para la excitación de PPS (Zayats <i>et al.</i> , 2005).	6
1.3	Los PPS en una interfaz dieléctrico metal tienen un carácter de onda electromagnética y carga superficial (Barnes <i>et al.</i> , 2003).	7
1.4	Representación esquemática del decaimiento exponencial del campo eléctrico de los PPS en el medio dieléctrico y el metal en la dirección perpendicular a la superficie, donde δ_d es la longitud de decaimiento en el medio dieléctrico y δ_m la longitud de decaimiento en el metal (Barnes <i>et al.</i> , 2003).	8
2.1	Región de validez D de la representación del espectro angular.	20
2.2	Geometría considerada para la deducción de las condiciones bajo las cuales existen PPS en una superficie plana.	28
2.3	Relación de dispersión de los PPS en una interfaz vacío-metal (línea continua). La línea discontinua (- -) representa la dispersión de luz en el vacío, y la línea discontinua punteada (-·) la frecuencia del plasmón de superficie. La frecuencia del plasma del gas de electrones libres está representada por la línea punteada (· · ·).	33
2.4	Anomalías de Wood para una rejilla de aluminio de 1667 nm. Para cada uno de los ángulos de incidencia estudiados (de 0° a 46°), se muestra el espectro de difracción en el orden 1; las franjas oscuras son las anomalías observadas por Wood (Wood, 1935).	37
2.5	Arreglo experimental utilizado por Wood para estudiar el espectro de difracción de luz blanca sobre una rejilla de aluminio de 1667 nm (Wood, 1935).	37
2.6	Región de validez del campo reflejado esparcido y transmitido representados en términos de sus espectros angulares.	39

2.7	Geometría considerada, en la cual la superficie es invariante a lo largo del eje y y presenta variaciones a lo largo del eje x . El perfil de la superficie está descrito por $\zeta(x)$ y el plano de incidencia es el plano x - z . El ángulo de incidencia θ_0 es medido en contra de las manecillas del reloj, con respecto al eje z	41
2.8	Superficie conformada por la suma infinita de superficies con período $L \neq jT$, donde j es un número entero.	55
3.1	Reflectancia de una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 600 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$ cuando una onda plana de longitud de onda $\lambda = 550 \text{ nm}$ incide a un ángulo θ_0	62
3.2	Reflectancia de una rejilla de difracción senoidal de plata de período $T_{rej} = 600 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$ en función de la longitud de onda cuando es iluminada por una onda plana con un ángulo de incidencia a) $\theta_0 = 20^\circ$ y b) $\theta_0 = 30^\circ$	64
3.3	Comportamiento de los órdenes de difracción $m = 0, -1, 1, -2$ en función de la longitud de onda al iluminar la rejilla con una onda plana con polarización p y ángulos de incidencia $\theta_0 = 20^\circ$ y $\theta_0 = 30^\circ$. Se supone una rejilla senoidal de plata con período $T_{rej} = 600 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$	65
3.4	Reflectancia de una rejilla de difracción senoidal de plata de período $T_{rej} = 500 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 150 \text{ nm}$ cuando una onda plana de longitud de onda λ incide a un ángulo a) $\theta_0 = 10^\circ$ y b) $\theta_0 = 20^\circ$	67
3.5	Comportamiento de los órdenes de difracción $m = 0, -1, 1$ en función de la longitud de onda al iluminar la rejilla con una onda plana con polarización p y ángulos de incidencia $\theta_0 = 10^\circ$ y $\theta_0 = 20^\circ$. Se supone una rejilla senoidal de plata con período $T_{rej} = 500 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 150 \text{ nm}$	69
3.6	Reflectancia de una rejilla de difracción senoidal de plata de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$ cuando una onda plana de longitud de onda λ incide a un ángulo a) $\theta_0 = 4^\circ$, b) $\theta_0 = 10^\circ$ y b) $\theta_0 = 29^\circ$	71
3.7	Intensidad del campo magnético ($ H ^2$) que muestra la interferencia del campo incidente y reflejado al incidir con una onda plana de $\lambda = 652 \text{ nm}$ a un ángulo $\theta_0 = 0^\circ$ sobre una superficie plana de plata.	73
3.8	Intensidad del campo magnético cercano generado por una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$ al ser iluminada por una onda plana de longitud de onda $\lambda = 652 \text{ nm}$ con un ángulo de incidencia $\theta_0 = 4^\circ$	75
3.9	Mismos parámetros que la figura 3.8 pero con longitud de onda $\lambda = 587 \text{ nm}$ y ángulo de incidencia $\theta_0 = 10^\circ$. La intensidad está normalizada respecto al máximo de intensidad de la figura 3.8.	76

3.10	Mismos parámetros que la figura 3.8 pero con longitud de onda $\lambda = 422 \text{ nm}$ y ángulo de incidencia $\theta_0 = 29^\circ$. La intensidad está normalizada respecto al máximo de intensidad de la figura 3.8.	77
3.11	Campo reflejado esparcido de una onda plana de longitud de onda $\lambda = 653 \text{ nm}$ incidiendo a un ángulo $\theta_0 = 4^\circ$ sobre una superficie conformada por una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$, de longitud $25 T_{rej}$, y un plano de longitud $75 T_{rej}$	79
3.12	Mismos parámetros que la figura 3.11 pero con una onda plana de longitud de onda $\lambda = 587 \text{ nm}$ incidiendo con un ángulo $\theta_0 = 10^\circ$	80
3.13	Campo reflejado esparcido de una onda plana de longitud de onda $\lambda = 653 \text{ nm}$ incidiendo a un ángulo $\theta_0 = 4^\circ$ sobre una superficie conformada por una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$, de longitud $50 T_{rej}$, y un plano de longitud $50 T_{rej}$	81
3.14	Mismos parámetros que la figura 3.13 pero con una onda plana de longitud de onda $\lambda = 587 \text{ nm}$ incidiendo con un ángulo $\theta_0 = 10^\circ$	82
3.15	a) Campo reflejado esparcido por una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$ más un pozo gaussiano de profundidad $A_p = 150 \text{ nm}$ y ancho $a_p = 4A_p$ al ser iluminada por una onda plana de longitud de onda $\lambda = 587 \text{ nm}$ con ángulo de incidencia $\theta_0 = 10^\circ$. b) Campo reflejado de la misma onda plana por un plano con un pozo gaussiano de profundidad $A_p = 150 \text{ nm}$ y ancho $a_p = 4A_p$	84
3.16	Coefficiente diferencial de reflexión (sin componente especular y sin orden $m = -1$) para la figura 3.15 a), línea continua, y b), línea punteada.	86
3.17	Mismos parámetros que la figura 3.15 pero con $a_p = 2A_p$	87
3.18	Mismos parámetros que la figura 3.16 pero con $a_p = 2A_p$	88
3.19	Mismos parámetros que la figura 3.15 pero con $A_p = 200 \text{ nm}$ y $a_p = 6A_p$	89
3.20	Mismos parámetros que la figura 3.16 pero con $A_p = 200 \text{ nm}$ y $a_p = 6A_p$	90
3.21	Coefficiente diferencial de reflexión (sin componente especular) al iluminar con una onda plana de longitud de onda $\lambda = 603 \text{ nm}$ y a un ángulo de incidencia $\theta_0 = -10^\circ$ una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 500 \text{ nm}$ y altura $A_{rej} = 30 \text{ nm}$ con un pozo gaussiano de profundidad $A_p = 200 \text{ nm}$ y ancho $6A_p$ (línea continua), y un plano con un pozo gaussiano con las mismas características (línea discontinua).	92
3.22	Eficiencia de difracción para el orden $m = -1$ en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia para una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 31 \text{ nm}$	94
3.23	Mismos parámetros que la figura 3.22 pero para el orden $m = 1$	96

3.24	Sentido del movimiento de los órdenes de difracción al aumentar el ángulo de incidencia. Las flechas negras indican el sentido del movimiento al incrementar θ_0 . Los órdenes $m = 1, -1, -2$ se mueven en sentido de las manecillas de reloj cuando el ángulo de incidencia crece.	96
3.25	Mismos parámetros que la figura 3.22 pero para el orden $m = -2$. . .	97
3.26	Mismos parámetros que la figura 3.22 pero para el orden $m = 0$. La luz blanca en la dirección especular se descompone en las longitudes de onda que la constituyen.	98
3.27	Mismo espectro de difracción mostrado en la figura 3.22. Las curvas representan el ángulo de incidencia en función de la longitud de onda en donde aparecen las anomalías de Wood según la ecuación 2.58. . .	99
3.28	Reflectancia de una onda plana con longitud de onda λ incidiendo a un ángulo θ_0 , dado por la ecuación (2.58) (con $m = 1$), sobre una rejilla de difracción de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitud A_{rej}	101
3.29	Eficiencia del orden $m = -1$ del espectro de difracción de una onda plana con longitud de onda λ incidiendo a un ángulo θ_0 sobre una rejilla senoidal de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y altura $A_{rej} = 156 \text{ nm}$	102
3.30	Mismos parámetros que la figura 3.29 pero para el orden $m = 1$	103
3.31	Mismos parámetros que la figura 3.29 pero para el orden $m = -2$	104
3.32	Mismos parámetros que la figura 3.29 pero para el orden $m = 0$	105
3.33	Mismos parámetros que la figura 3.29 pero para el orden $m = -1$ y con las curvas teóricas del ángulo de incidencia.	106
3.34	Eficiencia de difracción de los órdenes $m = 0, 1, -1, -2$ en función de la longitud de onda para una rejilla con período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitudes a) $A_{rej} = 31 \text{ nm}$ y b) $A_{rej} = 156 \text{ nm}$. El ángulo de incidencia es $\theta_0 = 10^\circ$	108
3.35	Mismos parámetros que la figura 3.34 pero con $\theta_0 = 20.74^\circ$	109
3.36	Mismos parámetros que la figura 3.34 pero con $\theta_0 = 25^\circ$	110
3.37	Mismos parámetros que la figura 3.34 pero con $\theta_0 = 30^\circ$	111

Contenido

Resumen en Español	i
Resumen en Inglés	ii
Lista de Figuras	iii
1 Introducción	1
2 Marco Teórico	13
2.1 Ecuaciones Macroscópicas de Maxwell	15
2.2 Ecuación de Onda y Ecuación de Helmholtz	17
2.3 Ondas Planas y Evanescientes	18
2.4 Espectro Angular	19
2.5 Modelo para la Respuesta Óptica del Material	24
2.6 Relación de Dispersión de los Plasmones Polaritones de Superficie . .	27
2.7 Superficies Rugosas	34
2.7.1 Ecuación de la Rejilla	34
2.7.2 Anomalías de Wood	35
2.7.3 Hipótesis de Rayleigh	39
2.7.4 Ecuaciones Reducidas de Rayleigh	40
2.7.5 Superficies Periódicas	46
2.7.6 Eficiencia de Esparcimiento y Coeficiente Diferencial de Reflexión (CDR)	49
2.8 Implementación Numérica	53
2.8.1 Discretización de las Superficies	54
2.8.2 Relación entre la Longitud de la Superficie y las Componentes Espectrales	55
2.8.3 Determinación del Sistema de Ecuaciones y de los Campos Esparcidos	56
3 Resultados y Discusión	60
3.1 Excitación de PPS con Rejillas de Difracción	61

3.1.1	Campo Lejano	61
3.1.2	Campo Cercano	72
3.2	Excitación de PPS en Segmentos Planos por Medio de Rejillas	78
3.3	Esparcimiento de PPS por Estructuras Superficiales	83
3.4	Anomalías de Wood	93
3.4.1	Rejilla con Período $T_{rej} = 682$ nm y Altura $A_{rej} = 31$ nm . . .	93
3.4.2	Optimización del Acoplamiento a PPS	99
3.4.3	Reflectancia de los Órdenes de Difracción para las Anomalías de Wood	106
4	Conclusiones	112
	Referencias	117
	Apéndice A Solución Integral I_T	121
	Apéndice B Demostración Identidad $[2\pi\delta(q - q_m)]^2$	129

Capítulo 1

Introducción

En 1902, al estudiar el espectro de una fuente continua de luz formado por una rejilla metálica de difracción, R.W. Wood observó un fenómeno peculiar: bajo ciertas condiciones de incidencia, en un intervalo de longitudes de onda muy pequeño, en el patrón de difracción ocurría un cambio abrupto de intensidad con un mínimo pronunciado. La otra observación importante que hizo Wood es que el cambio en iluminación sólo se presentaba al usar luz con polarización p , i.e., cuando el campo magnético es paralelo a los surcos de la rejilla. Esta observación es también muy relevante, pues la polarización no se había tomado en consideración anteriormente en el estudio de la eficiencia de difracción de las rejillas. Wood no logró explicar el fenómeno y llamó a estas franjas oscuras "anomalías singulares" (Wood, 1902).

El descubrimiento de Wood despertó gran interés entre diferentes especialistas en el campo de la óptica, entre ellos Lord Rayleigh (Rayleigh, 1907a,b), quien propuso la primera explicación de la existencia de las anomalías: una anomalía en un orden dado ocurre a una longitud de onda en la cual un orden de difracción mayor emerge

de manera rasante a la rejilla. A partir de la ecuación de la rejilla, es posible calcular el ángulo de difracción al que se difracta el orden m :

$$\sin \theta_m = \sin \theta_0 \pm m\lambda/T, \quad (1.1)$$

donde θ_0 es el ángulo de incidencia (medido respecto a la normal de la rejilla y en contra de las manecillas del reloj), θ_m es el ángulo de difracción (medido en sentido de las manecillas de reloj), λ es la longitud de onda y T es el período de la rejilla.

El orden m emerge tangencialmente a la superficie cuando $\sin \theta_m = \pm 1$. Así, de la ecuación (1.1), las longitudes de onda a las que esto ocurre se pueden calcular a partir de:

$$\lambda = \frac{T}{m}(\pm 1 - \sin \theta_0), \quad m = \pm 1, \pm 2, \pm 3... \quad (1.2)$$

De esta manera, Rayleigh pudo evaluar la validez de su conjetura, encontrando una discrepancia del 5% entre sus predicciones y las posiciones de las anomalías observadas por Wood. Su hipótesis fue que esta diferencia era consecuencia del conocimiento impreciso del período de la rejilla y, por más de 30 años, la conjetura de Rayleigh permaneció incuestionable.

En 1936, J. Strong observó las anomalías de Wood utilizando diferentes rejillas metálicas del mismo período (Strong, 1936). El resultado evidenció la influencia del metal en la forma de las anomalías y, más aún, en su posición. Tomando en cuenta que la ecuación de la rejilla es una relación puramente geométrica y que el metal no tiene efecto alguno sobre la longitud de onda a la que los órdenes emergen de manera rasante, el resultado de Strong dio lugar a una reevaluación de la interpretación dada por Rayleigh.

Cinco años después, U. Fano (Fano, 1941) pudo explicar satisfactoriamente la discrepancia entre las predicciones teóricas de Rayleigh y los resultados experimentales de Wood, al distinguir que dichos trabajos hacían referencia a dos tipos diferentes de anomalías, que se pueden denominar como la anomalía fuerte y la anomalía difusa, respectivamente. Fano explicó la anomalía difusa como una "resonancia forzada" relacionada a las "ondas fugadas soportadas por la rejilla". En otras palabras, la excitación de ondas superficiales propagándose a lo largo de la rejilla. Sin embargo, en su trabajo no se estableció conexión alguna entre las "ondas fugadas" y los plasmones de superficie (Maystre, 2012).

En sus estudios sobre la pérdida de energía experimentada por haces de electrones de alta velocidad al atravesar hojas metálicas, D. Pines y D. Bohm (Pines y Bohm, 1952, Bohm y Pines, 1951) propusieron que había una relación entre éstas y la excitación de oscilaciones del plasma o "plasmones" en el mar de electrones de conducción. En 1957 R. Ritchie estudió teóricamente esta hipótesis (Ritchie, 1957), encontrando una pérdida de energía de $\hbar\omega_p/\sqrt{2}$, que es menor a la energía debida a la excitación de plasmones de volumen, $\hbar\omega_p$, donde ω_p es la frecuencia del plasma del metal. Al investigar experimentalmente la reflexión de electrones en películas de magnesio y aluminio, C. Powell y J. Swan observaron la pérdida de energía adicional descrita por Ritchie (Powell y Swan, 1959). A partir del cambio en el pico de energía durante la oxidación de las películas metálicas, se sugirió que éste estaba asociado a una excitación electromagnética en la interfaz metal-aire que, durante el experimento, fue evolucionando a una interfaz metal-óxido. Estos resultados se muestran en la figura 1.1. La pérdida de energía, $\hbar\omega_p/\sqrt{2}$, resultó ser debido a la excitación de plasmones de superficie (PS) (Maier, 2007).

Los plasmones de superficie pueden ser vistos como vibraciones colectivas no

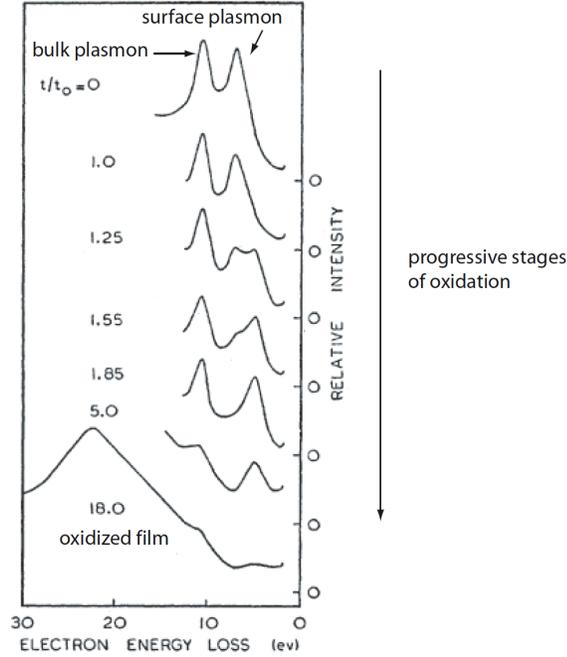


Figura 1.1: Pérdida de energía de electrones en una película delgada de magnesio en etapas progresivas de oxidación. (Powell y Swan, 1959).

propagantes del plasma de electrones cerca de la superficie del metal. Éstos también pueden entenderse como el límite electrostático de los plasmones polaritones de superficie (PPS). Los plasmones polaritones de superficie son ondas electromagnéticas acopladas a los plasmones de superficie, formando así ondas de densidad de carga superficial confinadas a una interfaz dieléctrico-metal. Los PPS se propagan a lo largo de la interfaz a frecuencias que van desde cero ($k=0$) hasta el valor asintótico $\omega_{sp} = \omega_p / \sqrt{1 + \epsilon_d}$, dependiendo del número de onda k , donde ϵ_d es la constante dieléctrica del dieléctrico que está en contacto con el metal (Pitarke *et al.*, 2006). Cuando la superficie metálica está en contacto con el vacío ($\epsilon_d = 1$), el vector de onda k tiende a infinito cuando la frecuencia del PPS se acerca a $\omega_p / \sqrt{2}$ y la velocidad de grupo $v_g \rightarrow 0$. Este límite electrostático de los PPS es el plasmón de superficie (Maier, 2007).

En la curva que representa la relación de dispersión de los PPS, el número de onda que corresponde a estas excitaciones se encuentra a la derecha de la línea de luz y, por lo tanto, el número de onda de los PPS es más grande que el de la luz propagándose en el dieléctrico con la misma energía $\hbar\omega$ (ver sección 2.6, figura 2.3). Por esta razón, no es posible acoplar directamente un haz propagante de luz a plasmones polaritones de superficie en una superficie plana metálica semi-infinita, puesto que el momento y la energía no pueden ser conservados simultáneamente. Es probable que, debido a esta dificultad intrínseca para excitar los PPS con luz, que los plasmones de superficie predichos por Ritchie se estudiaron inicialmente en el contexto de la interacción de cargas con películas metálicas. En este caso, la excitación de plasmones por electrones de alta velocidad es posible debido a la transferencia de momento k de los electrones que involucran su velocidad v , pues $k \approx \omega/v$, siendo ω la pérdida de energía experimentada por los electrones (Aizpurua y Hillenbrand, 2012).

Sin embargo, existen técnicas para proveer el momento adicional que se requiere para excitar PPS con luz. En las configuraciones de Kretschmann (Kretschmann y Raether, 1968) y Otto (Otto, 1968) se utilizan prismas de material dieléctrico para generar ondas evanescentes y así tener una componente paralela a la superficie del vector de onda que es mayor que la de las ondas propagantes. Otro método consiste en modificar la superficie plana metálica por medio de una corrugación periódica que puede proveer el momento de "red" adicional (figura 1.2) (Zayats *et al.*, 2005). Así, la componente paralela a la superficie del vector de onda de la luz incidente, $k = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_1} \sin \theta_0$, donde θ_0 es el ángulo de incidencia, más un número entero de veces el "número de onda" de la rejilla puede igualar el número de onda del PPS, $k_{sp} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon(\omega)}{\epsilon_1 + \epsilon(\omega)}}$. Además, la luz incidente debe tener polarización p con frecuencia

igual a la de los PPS, lo cual se logra fácilmente mediante elementos polarizadores (Aizpurua y Hillenbrand, 2012)(Zayats *et al.*, 2005). No obstante, en casos en los que la profundidad de la rejilla es mucho más grande que la longitud de onda, también es posible excitar ondas superficiales por medio de luz con polarización *s* (Palmer, 1952).

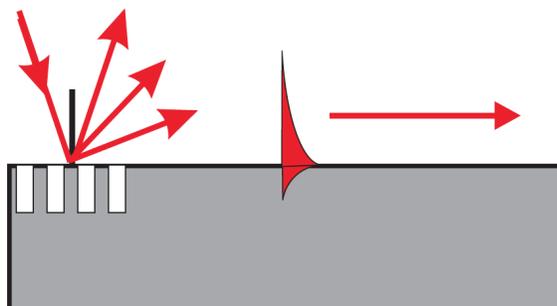


Figura 1.2: Rejilla metálica periódica utilizada para la excitación de PPS (Zayats *et al.*, 2005).

Una vez que los PPS son excitados, éstos se propagan por la superficie metálica plana y se atenúan gradualmente debido a pérdidas por absorción en el metal. Esta atenuación depende de la constante dieléctrica del metal a la frecuencia de oscilación de los PPS. La longitud de propagación δ_{sp} está dada por $1/\text{Im}(k_{sp})$. La plata es el metal que tiene pérdidas más bajas en el espectro visible; las distancias de propagación en superficies de este material se encuentran típicamente entre 10 y 100 μm , llegando hasta 1 mm al acercarse al infrarrojo cercano (Barnes *et al.*, 2003).

Los PPS son ondas viajeras del tipo transversal magnético y el campo eléctrico tiene componentes paralela y normal a la superficie (figura 1.3). Una consecuencia de la interacción entre cargas superficiales y el campo electromagnético es que, a diferencia de la naturaleza propagante de los PPS a lo largo de la superficie metálica, el campo eléctrico perpendicular a la superficie decae exponencialmente al alejarse

de ella. Se dice que el campo en esta dirección es evanescente, lo cual es resultado del confinamiento y naturaleza no-radiativa de los PPS, evitando así la fuga de radiación fuera de la superficie. La longitud de decaimiento en el medio dieléctrico, δ_d , es típicamente de una fracción de la longitud de onda de la luz involucrada, mientras que en el metal, δ_m , es uno o dos órdenes de magnitud más pequeño que la longitud de onda, como se ilustra en la figura 1.4 (Barnes *et al.*, 2003).

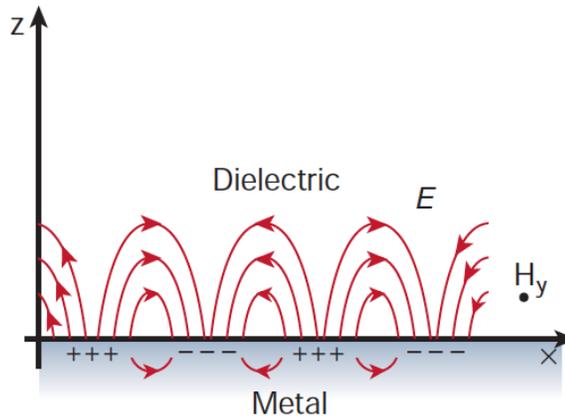


Figura 1.3: Los PPS en una interfaz dieléctrico metal tienen un carácter de onda electromagnética y carga superficial (Barnes *et al.*, 2003).

Debido a las propiedades únicas de los plasmones polaritones de superficie y a sus numerosas aplicaciones, el número de estudios sobre sus propiedades, así como su excitación y propagación, se ha incrementado significativamente en los últimos años. La idea de óptica integrada en dos dimensiones con plasmones polaritones de superficie ha sido propuesta e investigada experimentalmente, resultando en el desarrollo de elementos ópticos que permiten la manipulación y direccionamiento de los PPS de manera similar a como se hace con haces de luz en tres dimensiones (Zayats *et al.*, 2005). La longitud de propagación y la longitud de decaimiento en cada uno de los medios determinan la escala a la que pueden funcionar los dispositivos plasmónicos (Barnes *et al.*, 2003), y, con el perfeccionamiento de las técnicas para

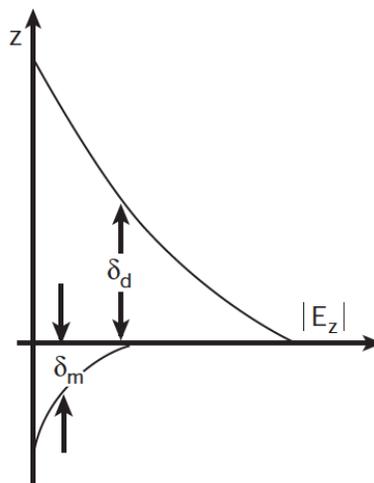


Figura 1.4: Representación esquemática del decaimiento exponencial del campo eléctrico de los PPS en el medio dieléctrico y el metal en la dirección perpendicular a la superficie, donde δ_d es la longitud de decaimiento en el medio dieléctrico y δ_m la longitud de decaimiento en el metal (Barnes *et al.*, 2003).

fabricar y caracterizar estructuras cada vez más pequeñas y el desarrollo de nuevos materiales, se abre la posibilidad de fabricar dispositivos plasmónicos más reducidos y sofisticados, superando además las limitantes en la propagación y decaimiento de los PPS. Por otro lado, también se sabe que los PPS en películas metálicas delgadas rodeadas por medios dieléctricos iguales exhiben longitudes de propagación mucho más grandes comparadas con los PPS en superficies semi-infinitas del mismo material. Estos PPS de largo alcance pueden tener longitudes de propagación de centímetros en el infrarrojo cercano (Zayats *et al.*, 2005).

Los PPS sólo existen en interfazs dieléctrico-metal y el campo electromagnético asociado a estas ondas superficiales está confinado a la cercanía de la frontera. Esta propiedad hace a los PPS extremadamente sensibles a condiciones superficiales (Zayats *et al.*, 2005). El confinamiento es ampliamente utilizado para el estudio de adsorbatos y rugosidades en la superficie, entre otros. En este contexto, es importante tener herramientas teóricas y numéricas para poder simular la interacción de

los PPS con la estructura de la superficie donde se propagan.

La excitación de PPS con estructuras superficiales y su interacción con defectos ha sido investigada numéricamente utilizando distintos métodos (De La Cruz *et al.*, 2012); una de las formas con las que el problema puede ser estudiado es a partir de las ecuaciones reducidas de Rayleigh. La excitación puede lograrse por medio de rejillas de difracción para posteriormente estudiar la interacción del PPS con defectos superficiales analizando el esparcimiento de la luz que resulta de la interacción. Sin embargo, en este caso, la interacción del campo incidente con la rejilla también produce un campo esparcido, lo cual tiene como consecuencia una aportación al esparcimiento de la luz que no provienen del defecto que se desea estudiar. Esto llevó a la búsqueda de una manera de poder distinguir entre las distintas aportaciones al esparcimiento.

Por otro lado, las anomalías de Wood estudiadas por primera vez hace más de un siglo son consecuencia de la excitación de plasmones polaritones de superficie en la rejilla utilizada, a la longitud de onda y ángulo de incidencia en los que la anomalía es observada. El trabajo de Wood condujo al descubrimiento de los PPS, dando lugar al nacimiento de la plasmónica. A pesar del gran interés que se ha tenido en esta área durante los últimos años, no existen contribuciones nuevas en lo que respecta a las anomalías de Wood; el trabajo publicado en 1935 por Wood (Wood, 1935) es el último en el que se muestran resultados experimentales de las anomalías. Más aún, no existen simulaciones detalladas de este fenómeno pese a la existencia de teorías que permiten calcular el campo reflejado esparcido por una rejilla de difracción que soporta PPS.

El objetivo de este trabajo es el de implementar computacionalmente las ecuaciones reducidas de Rayleigh para calcular la intensidad del campo reflejado espar-

cido, lejano y cercano, por rejillas de difracción que pudieran excitar plasmones polaritones de superficie bajo ciertas condiciones de incidencia. Al considerar la fuente de incidencia como monocromática, se pretende encontrar el ángulo de incidencia al cual la intensidad del campo reflejado sea mínima, para una rejilla dada. Es decir, encontrar el ángulo de incidencia con el cual es posible excitar PPS a esa longitud de onda. De manera similar, se pretende encontrar la longitud de onda en la que se excitan PPS dado un ángulo de incidencia fijo. En los dos casos anteriores, se busca también hacer simulaciones del campo cercano generado por los PPS. Además, al iluminar la rejilla con luz blanca se busca analizar el espectro que se obtiene en los diferentes órdenes de difracción formados para así poder simular situaciones como las observadas por Wood. Por otro lado, otra de las motivaciones de esta tesis es estudiar la interacción de PPS con defectos superficiales, de tal manera que se puedan superar las dificultades ya mencionadas.

En esta tesis se presentan resultados numéricos de la excitación de PPS por ondas planas con polarización p , incidiendo desde el vacío a un ángulo θ_0 sobre rejillas senoidales de plata de diferentes períodos, profundidades y longitudes, así como un estudio del campo cercano asociado a esta excitación. También se presentan resultados de la interacción de los PPS al encontrarse con pozos gaussianos de diferentes tamaños. Para este fin, se consideró un plano con el defecto y se incidió a un ángulo θ_0 con una onda plana de longitud de onda λ . El esparcimiento resultante se comparó con el esparcimiento al incidir con las mismas características una rejilla con un pozo de las mismas dimensiones, y con el esparcimiento de una rejilla. Así, las contribuciones que no correspondan a la rejilla ni al pozo, es el esparcimiento del PPS con el pozo. Además, se presenta un estudio de las anomalías de Wood para una rejilla con período de 682 nm , en el que se optimizó la profundidad para que las

anomalías fueran más visibles.

Los cálculos presentados en este trabajo se basan en las ecuaciones reducidas de Rayleigh (Toigo *et al.*, 1977). Éstas se deducen a partir del llamado espectro angular, que permite expresar el campo electromagnético como una superposición de ondas planas que se propagan en diferentes direcciones y que incluye a las componentes evanescentes. Este método permite la propagación del campo a partir de un plano, que en este caso es el plano definido por arriba (abajo) de las crestas (valles) de la superficie considerada. Sin embargo, para simplificar los cálculos matemáticos, se incluye a la región entre estos dos planos, que contiene a la rejilla. Esta suposición se conoce como la hipótesis de Rayleigh.

A pesar de que las ecuaciones reducidas de Rayleigh son una herramienta importante en el estudio de los PPS, es fundamental conocer sus limitantes y sus ventajas sobre otros métodos; por ejemplo, para la rejilla con período de 682 *nm* no fue posible exceder los 200 *nm* de profundidad, pues al sobrepasar este límite el método empezaba a fallar; esta restricción es fundamentalmente una cuestión numérica, pero también puede haber una relación con la hipótesis de Rayleigh. No obstante, debido a la consideración de condiciones de frontera periódicas, las superficies estudiadas pueden ser infinitamente grandes por lo que el método es apropiado para cálculos con ángulos de incidencia rasantes. Otro método utilizado para trabajos numéricos con superficies es el método integral (Maradudin *et al.*, 1990), el cual funciona aún si la topografía de la superficie presenta variaciones de altura grandes. Sin embargo, en la implementación más usual (superficies finitas), falla para incidencia a ángulos rasantes y, al considerar superficies muy largas, el tiempo de cómputo aumenta considerablemente.

Una de las razones por las que se eligieron las ecuaciones reducidas de Rayleigh

es que son apropiadas para el caso en el que la incidencia es rasante, por lo que se puede abordar el problema de la interacción de PPS con defectos en la superficie. Este método se puede catalogar como espacial-espectral, pues la superficie es fija en sus coordenadas espaciales, mientras que el campo esparcido está discretizado en coordenadas espectrales. El método de la ecuación integral y función de Green que se ha mencionado es un método espacial-espacial, pues lo que se calcula al resolver la ecuación no es directamente el campo esparcido, si no los valores del campo y su derivada normal en la superficie. También existen métodos de cálculo de naturaleza espectral-espectral. El método de cálculo utilizado aquí es apropiado para objetos periódicos que tienen un número pequeño de órdenes (componente espectrales del campo esparcido), pues esto reduce el orden de la ecuación matricial a resolver.

A continuación se describe la estructura de la tesis. En el capítulo II se presentan las bases teóricas del método propuesto. Se parte de la representación de los campos por su espectro angular y, al aplicar las condiciones de frontera, se obtienen dos ecuaciones integrales acopladas con las cuales, después de una manipulación algebraica, se obtiene una ecuación matricial cuya solución representa el campo reflejado esparcido.

En el capítulo III se presentan las consideraciones hechas para implementar numéricamente las ecuaciones reducidas de Rayleigh. Se describe la discretización de la superficie y la determinación y solución del sistema matricial. En el capítulo IV se presentan los resultados obtenidos para las superficies consideradas, así como también la discusión de los mismos. Por último, las conclusiones de esta tesis se presentan en el capítulo V.

Capítulo 2

Marco Teórico

En este capítulo se presenta una descripción general de las herramientas teóricas utilizadas en el desarrollo de esta tesis. Adoptando un modelo electromagnético para la luz, se basa el estudio en las ecuaciones macroscópicas de Maxwell, que describen el comportamiento de los campos eléctrico y magnético en medios materiales.

En el desarrollo teórico, se consideran superficies periódicas que son invariantes a lo largo del eje y , iluminadas por una onda que se propaga en el plano formado por los ejes x y z , que se le llamará plano de incidencia. Debido a esta invarianza de las superficies a lo largo de una dirección, las superficies utilizadas se consideran unidimensionales, es decir, que presentan variaciones de altura solamente a lo largo de la dirección x .

La geometría considerada consiste de la frontera rugosa entre dos medios, normalmente un dieléctrico transparente (medio I) y un metal (medio II), iluminada por el lado del dieléctrico por una onda plana. El problema consiste entonces en conocer el campo esparcido generado por la interacción entre la onda plana y la

superficie metálica rugosa. La respuesta óptica del metal en función de la frecuencia óptica se describe por medio del modelo de gas de electrones libres o utilizando tablas de valores experimentales.

La solución del problema se encuentra al representar los campos reflejado y transmitido en términos de sus espectros angulares y utilizar la hipótesis de Rayleigh para imponer las condiciones de frontera. De esta manera, se obtienen dos ecuaciones integrales acopladas que pueden ser manipuladas algebraicamente para obtener una ecuación integral para el campo esparcido reflejado. Evidentemente, la ecuación integral resultante involucra información tanto del campo incidente como del perfil de la superficie. El problema se simplifica considerablemente al suponer una superficie periódica, pues el sistema a resolver se convierte en una ecuación matricial, para la que solo es necesario considerar un período de la superficie.

El capítulo empieza con una revisión de algunos conceptos básicos de teoría electromagnética y termina con la descripción de la implementación numérica del problema.

2.1 Ecuaciones Macroscópicas de Maxwell

El comportamiento de los campos electromagnéticos en medios materiales puede describirse clásicamente por medio de las ecuaciones macroscópicas de Maxwell. En el sistema CGS (o sistema gaussiano) éstas toman la forma

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi\rho_{ext} \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}_{ext} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \quad (2.4)$$

Estas ecuaciones relacionan los cuatro campos macroscópicos \mathbf{D} (desplazamiento eléctrico), \mathbf{E} (campo eléctrico), \mathbf{H} (campo magnético) y \mathbf{B} (inducción magnética), con la carga externa y la densidad de corriente ρ_{ext} y \mathbf{J}_{ext} . Al escribir estas ecuaciones no se siguió el procedimiento usual de presentar las expresiones macroscópicas dividiendo las densidades de carga total, ρ_{tot} , y corriente total, \mathbf{J}_{tot} , en conjuntos libres y ligados. En lugar de esta separación, se distinguió entre densidades de carga y corriente externas (ρ_{ext} , \mathbf{J}_{ext}) e internas (ρ , \mathbf{J}), de tal manera que $\rho_{tot} = \rho_{ext} + \rho$ y $\mathbf{J}_{tot} = \mathbf{J}_{ext} + \mathbf{J}$. El conjunto externo estimula al sistema, mientras que el conjunto interno responde al estímulo externo.

Adicionalmente, los cuatro campos macroscópicos están ligados con la polari-

zación \mathbf{P} y la magnetización \mathbf{M} por medio de

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} \quad (2.5)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{B} - 4\pi\mathbf{M}. \quad (2.6)$$

Ya que en este trabajo sólo se tratarán medios no magnéticos, no es necesario considerar la respuesta magnética representada por \mathbf{M} y se limitará la descripción a considerar efectos relacionados con la polarización del material. Además, en un medio isotrópico la polarización $\mathbf{P} = \chi_e \mathbf{E}$, donde χ_e es un escalar. Así, la relación (2.5) se puede escribir como

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \quad (2.7)$$

donde $\epsilon = 1 + 4\pi\chi$, y χ es conocida como la susceptibilidad eléctrica (Maier, 2007).

2.2 Ecuación de Onda y Ecuación de Helmholtz

Combinando las ecuaciones macroscópicas de Maxwell (2.3) y (2.4) considerando un espacio libre de fuentes (ausencia de carga y densidad de carga externas), se llega a la ecuación de onda

$$\nabla^2 \mathbf{U}(\mathbf{r}, t) - \frac{\epsilon_{\mathcal{R}}}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{U}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = 0, \quad (2.8)$$

donde c es la velocidad de la luz en el vacío, $\epsilon_{\mathcal{R}}$ es la constante dieléctrica del medio \mathcal{R} y $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$ representa el vector de campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ o el campo magnético $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$.

Si se asume una dependencia temporal armónica monocromática del campo

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{U}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), \quad (2.9)$$

donde $\mathbf{U}(\mathbf{r})$ constituye la dependencia espacial y se sustituye en la ecuación (2.8), se encuentra que

$$\nabla^2 \mathbf{U}(\mathbf{r}) + \epsilon_{\mathcal{R}} \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{U}(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.10)$$

que es conocida como la ecuación de Helmholtz (Maier, 2007).

Para las polarizaciones elementales s y p , el campo puede ser escrito de la forma

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = (0, U(\mathbf{r}), 0) \exp(-i\omega t), \quad (2.11)$$

donde $U(\mathbf{r})$ representa la componente y del campo eléctrico o magnético en los casos de polarización s y p , respectivamente (Maradudin *et al.*, 1990).

2.3 Ondas Planas y Evanescentes

Considerando alguna de las polarizaciones elementales, una solución a la ecuación de Helmholtz (ecuación 2.10) está dada por una onda plana propagante de la forma

$$U(x, z) = U_0 \exp\left(i\sqrt{\epsilon_{\mathcal{R}}}\frac{\omega}{c}(x \sin \theta_0 - z \cos \theta_0)\right), \quad (2.12)$$

donde U_0 es la amplitud de la onda y $\epsilon_{\mathcal{R}}$ es la constante dieléctrica del medio donde la onda se propaga. Esta expresión representa una onda que viaja hacia abajo (z con signo negativo), propagándose a un ángulo θ_0 con respecto al eje z . Si se define $k = \sqrt{\epsilon_{\mathcal{R}}}\frac{\omega}{c} \sin \theta_0$ y $\alpha(k) = \left(\epsilon_{\mathcal{R}}\frac{\omega^2}{c^2} - k^2\right)^{1/2}$, se puede escribir la ecuación (2.12) de la forma

$$U(x, z) = U_0 \exp(ikx - i\alpha_0(k)z). \quad (2.13)$$

Esta ecuación es válida tanto para ondas propagantes como para ondas evanescentes, pues cuando $k < \sqrt{\epsilon_{\mathcal{R}}}\frac{\omega}{c}$, la onda se propaga en el plano $x - z$, pero si $k > \sqrt{\epsilon_{\mathcal{R}}}\frac{\omega}{c}$, $\alpha_0(k)$ es un número imaginario puro y la onda se propaga a lo largo de x , decayendo exponencialmente en la dirección z (Ruíz, 2012).

2.4 Espectro Angular

El punto de partida para la deducción de las ecuaciones reducidas de Rayleigh es la representación de los campos reflejado y transmitido por medio del espectro angular. La representación del espectro angular es una técnica matemática utilizada para estudiar los campos en medios homogéneos y es válida únicamente en un espacio delimitado por dos planos, paralelos, en el que no existen fuentes. Para deducir dicha representación en dos dimensiones, se considera un campo escalar monocromático de la forma

$$U(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), \quad (2.14)$$

donde $\mathbf{r} = (x, z)$, en una región D (figura 2.1) tal que $0 \leq z \leq Z$, en un medio homogéneo de índice de refracción $n(\omega) = \sqrt{\epsilon}$. Se asume que las fuentes del campo están localizadas afuera de D . Entonces, dentro de la región D , la parte espacial $U(x, z)$ de $U(x, z, t)$ satisface la ecuación de Helmholtz,

$$(\nabla^2 + k^2)U(x, z) = 0, \quad (2.15)$$

donde $k = n(\omega)k_0$ y $k_0 = \left(\frac{\omega}{c}\right)$ son los números de onda de la onda en el medio y en el vacío, respectivamente. Se asume que en cualquier plano $z=\text{constante}$ en la región D , el campo es conocido y puede ser representado como una integral de Fourier,

$$U(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} du \tilde{U}(u; z) \exp(iux), \quad (2.16)$$

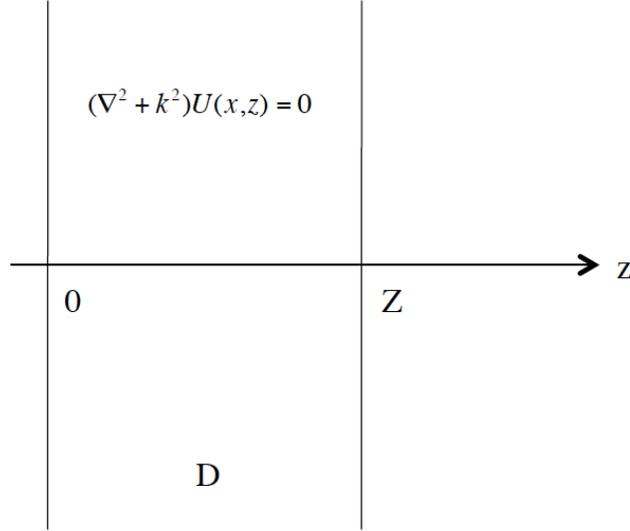


Figura 2.1: Región de validez D de la representación del espectro angular.

donde $\tilde{U}(u; z) = \mathcal{F}\{U(x, z)\}$ es la transformada de Fourier de $U(x, z)$. Esta ecuación se sustituye en la ecuación de Helmholtz, resultando

$$\int_{-\infty}^{\infty} du \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k^2 \right] \tilde{U}(u; z) \exp(iux) = 0. \quad (2.17)$$

Al calcular las derivadas parciales se obtiene

$$\int_{-\infty}^{\infty} du \left[-u^2 \tilde{U}(u; z) + \frac{\partial^2 \tilde{U}(u; z)}{\partial z^2} + k^2 \tilde{U}(u; z) \right] \exp(iux) = 0. \quad (2.18)$$

Entonces, esta ecuación integral se satisface si $\tilde{U}(u; z)$ satisface la ecuación diferencial

$$\frac{\partial^2 \tilde{U}(u; z)}{\partial z^2} = -(k^2 - u^2) \tilde{U}(u; z). \quad (2.19)$$

Ahora se define $v^2 = k^2 - u^2$ y se escribe la ecuación anterior como

$$\frac{\partial^2 \tilde{U}(u; z)}{\partial z^2} = -v^2 \tilde{U}(u; z). \quad (2.20)$$

Es importante diferenciar los valores que puede tomar v en función del valor de u ,

$$v = \begin{cases} \sqrt{k^2 - u^2}, & k^2 \geq u^2 \\ i\sqrt{u^2 - k^2}, & k^2 < u^2. \end{cases} \quad (2.21)$$

La solución a la ecuación diferencial (2.20) es

$$\tilde{U}(u; z) = A(u) \exp(ivz) + B(u) \exp(-ivz), \quad (2.22)$$

donde $A(u)$ y $B(u)$ son funciones arbitrarias. Al aplicar la transformada inversa de Fourier, $\mathcal{F}^{-1}\{\tilde{U}(u; z)\} = U(x, z)$, se obtiene

$$U(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} du A(u) \exp(i(ux + vz)) + \int_{-\infty}^{\infty} du B(u) \exp(i(ux - vz)). \quad (2.23)$$

Los términos exponenciales pueden expresarse como

$$\exp(i(ux \pm vz)) = \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}), \quad (2.24)$$

donde $\mathbf{K} = (u, \pm v)$. El módulo cuadrado de \mathbf{K} es $K^2 = u^2 + v^2$ y si se sustituye la definición de v mostrada en la ecuación (2.21), se concluye que $K^2 = k^2$.

Entonces

$$u = k_x \quad (2.25)$$

y

$$v = k_z, \quad (2.26)$$

donde k_x y k_z son las componentes x y z del vector de onda. La ecuación (2.23) representa el campo dentro de la región D como una superposición lineal de contribuciones

de la forma $\exp(i\mathbf{K}^+ \cdot \mathbf{r})$ y $\exp(i\mathbf{K}^- \cdot \mathbf{r})$, donde $\mathbf{K}^\pm = (u, \pm v)$. Este resultado implica que cada término de los integrandos de la ecuación (2.23) satisfacen la ecuación de Helmholtz, al igual que el campo $U(x, z)$.

Ahora se analiza el significado físico de la ecuación (2.23) en función de los casos presentados en la ecuación (2.21). Existen dos posibilidades que deben ser consideradas:

1. $A(u) \exp(iux + ivz)$ cuando $k^2 \geq u^2$: se trata de una onda plana que se propaga desde $z = 0$ hasta $z = Z$; es decir, en el sentido positivo de las x .
2. $A(u) \exp(iux - |v|z)$ cuando $k^2 < u^2$: es una onda evanescente que decae desde $z=0$ hasta $z = Z$.

Entonces al variar u , v toma diferentes valores, lo que significa que la dirección de propagación está cambiando, generando así ondas planas propagantes y también ondas evanescentes. Además, si Z se considera muy grande, por la llamada condición de radiación de Sommerfeld no habrá ondas que viajen a la derecha (segundo término de la ecuación (2.23)), por lo que

$$U(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} du A(u) \exp(i(ux + vz)) \quad (2.27)$$

puede ser considerada como la representación del campo por medio de su espectro angular. Si ahora se evalúa $U(x, z)$ en $z = 0$, se obtiene

$$U(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} du A(u) \exp(iux). \quad (2.28)$$

Al aplicar la transformada de Fourier

$$\mathcal{F}\{U(x, 0)\} = A(u), \quad (2.29)$$

se encuentra que $A(u)$ es la transformada de Fourier del campo en el plano $z = 0$, donde $A(u)$ es conocido como el espectro angular de $U(x, z)$ (Mandel y Wolf, 1995). Por lo tanto, la representación de un campo en términos de su espectro angular puede entenderse como la superposición de ondas planas, cuyas amplitudes están dadas por $A(u)$. Las contribuciones de ondas propagantes se pueden entonces interpretar como ondas planas que viajan en direcciones diferentes, pero es necesario recalcar que, para que la representación sea completa, en general es necesario incluir a las contribuciones de las ondas evanescentes.

2.5 Modelo para la Respuesta Óptica del Material

En un rango amplio de frecuencias las propiedades ópticas de los metales pueden ser explicados considerando el medio como un "plasma"; es decir, como un gas de electrones que se mueven libremente sobre un fondo fijo de iones positivos.

Los electrones oscilan en respuesta al campo electromagnético aplicado y su movimiento es amortiguado por colisiones que ocurren a una frecuencia característica del metal $\gamma = 1/\tau$, donde τ es conocida como el tiempo de relajación del gas de electrones libres. Se puede escribir una ecuación de movimiento para un electrón en el mar de electrones sujeto a un campo eléctrico externo \mathbf{E} como

$$m\ddot{\mathbf{x}} + m\gamma\dot{\mathbf{x}} = -e\mathbf{E}, \quad (2.30)$$

donde m es la masa del electrón en reposo y e es la carga del electrón. Al asumir una dependencia temporal armónica del campo externo $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$, una solución particular de la ecuación que describe el movimiento del electrón es $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0 \exp(-i\omega t)$. Al insertar la expresión del campo eléctrico y la solución particular en la ecuación diferencial (2.30), se encuentra que

$$\mathbf{x}_0 = \frac{e}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} \mathbf{E}_0. \quad (2.31)$$

Los electrones desplazados contribuyen a la polarización macroscópica $\mathbf{P} = -n e \mathbf{x}$, explícitamente representada por

$$\mathbf{P} = -\frac{ne^2}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} \mathbf{E}, \quad (2.32)$$

donde n es el número de electrones por unidad de volumen. Al insertar la expresión de \mathbf{P} en la relación (2.5), da como resultado

$$\mathbf{D} = \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \right) \mathbf{E}, \quad (2.33)$$

donde $\omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}$ es la frecuencia del plasma del gas de electrones libres. De esta manera, al comparar la ecuación (2.7) con el resultado anterior, se llega a la función dieléctrica del gas de electrones libres

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}. \quad (2.34)$$

Si la frecuencia es tal que $\omega \gg \gamma$, el amortiguamiento es despreciable y la parte real de $\epsilon(\omega)$ es entonces mucho mayor que la parte imaginaria, por lo que

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (2.35)$$

puede ser considerada como la función dieléctrica del plasma de electrones libres no-amortiguado. En este modelo se tiene que si $\omega = \omega_p$ entonces

$$\epsilon(\omega) = 0, \quad (2.36)$$

la cual es una condición válida para tener ondas longitudinales en un medio homogéneo. Por otro lado, si $\omega < \omega_p$ entonces

$$\epsilon(\omega) < 0, \quad (2.37)$$

condición que es satisfecha por metales. Por otro lado, si $\omega > \omega_p$ entonces

$$\epsilon(\omega) > 0 \tag{2.38}$$

es un número real positivo, lo cual significa que el medio es un dieléctrico. La frecuencia del plasma, ω_p , es el punto de "transición" en donde el medio se comporta como metal o dieléctrico (Maier, 2007).

2.6 Relación de Dispersión de los Plasmones Polaritones de Superficie

Los plasmones polaritones de superficie son excitaciones electromagnéticas que se propagan en la interfaz entre un dieléctrico y un metal, las cuales decaen en la dirección perpendicular a la dirección de propagación. Estas ondas electromagnéticas de superficie aparecen cuando el campo electromagnético externo se acopla a las oscilaciones del plasma de electrones del metal.

Es de interés entonces determinar las condiciones de existencia de estas ondas superficiales, así como su relación de dispersión en una interfaz plana. Se comienza definiendo la geometría considerada, con referencia a un sistema de coordenadas cartesiano. La interfaz se encuentra en el plano $z=0$, que es el plano de separación entre los medios I y II , con constantes dieléctricas ϵ_I y ϵ_{II} , respectivamente. Dado que ni los campos ni la superficie tienen dependencia con la coordenada y , el problema es esencialmente bidimensional. La situación se ilustra en la figura 2.2.

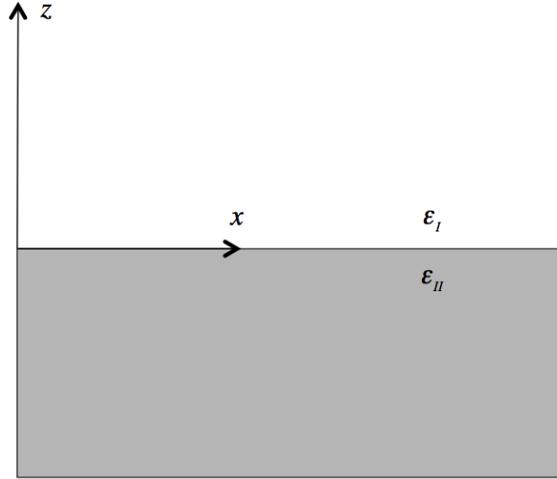


Figura 2.2: Geometría considerada para la deducción de las condiciones bajo las cuales existen PPS en una superficie plana.

Se asume una dependencia armónica del campo asociado a los PPS de la forma $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{U}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$, donde $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$ puede ser el campo eléctrico, $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, ó magnético, $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$. Así, la parte espacial del campo puede ser representada como $\mathbf{U}(x, z) = \mathbf{U}_0 \exp(ik_{sp}x)$, donde k_{sp} es conocida como la constante de propagación y corresponde a la componente del vector de onda en la dirección x .

Una vez definida la geometría del problema, es necesario encontrar soluciones de la ecuación de Helmholtz (ecuación 2.10) en el medio I y II e igualar las condiciones de continuidad en la frontera entre los dos medios. Para esto, es necesario encontrar expresiones de las componentes de \mathbf{E} y \mathbf{H} a partir de las ecuaciones de Maxwell; la ecuación del rotacional del campo eléctrico (ecuación 2.3) tiene la forma

$$\frac{\partial E_y}{\partial z} = -i\frac{\omega}{c}H_x \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - ik_{sp}E_z = i\frac{\omega}{c}H_y \quad (2.40)$$

$$ik_{sp}E_y = i\frac{\omega}{c}H_z. \quad (2.41)$$

Similarmente, de la ecuación rotacional del campo magnético (ecuación 2.4) se encuentra lo siguiente

$$\frac{\partial H_y}{\partial z} = i\frac{\omega}{c}\epsilon E_x \quad (2.42)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - ik_{sp}H_z = -i\frac{\omega}{c}\epsilon E_y \quad (2.43)$$

$$ik_{sp}H_y = -i\frac{\omega}{c}\epsilon E_z. \quad (2.44)$$

Para encontrar estas relaciones entre las componentes de los campos, se consideró la invarianza del sistema a lo largo de y , de manera que los operadores $\frac{\partial}{\partial y} = 0$ y $\frac{\partial}{\partial x} = ik_{sp}$. Estas ecuaciones admiten dos tipos de soluciones, que representan las dos polarizaciones elementales de la onda propagante. El primer caso son los modos transversales eléctricos (TE), donde las componentes H_x , H_z y E_y (ecuaciones 2.39, 2.41 y 2.43) son diferentes de cero. El otro caso son los modos transversales (TM) magnéticos, en donde las únicas componentes diferentes de cero son H_y , E_x y E_z (ecuaciones 2.40, 2.42 y 2.44). Nótese que en el primer caso es suficiente conocer E_y para determinar el resto de las componentes, mientras que en el segundo caso, de H_y se determina el resto.

Se analiza primero el caso transversal magnético. A partir del sistema de ecuaciones (2.40), (2.42) y (2.44), la ecuación de onda para estos modos resulta

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} + \left(\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon - k_{sp}^2 \right) H_y = 0. \quad (2.45)$$

Se buscan soluciones del tipo de ondas propagantes que decaigan en la dirección

z . Las soluciones se pueden escribir entonces como

$$H_y(x, z) = A_I \exp\{ik_{sp}x - \alpha_I(k_{sp})z\}, \quad (2.46)$$

$$E_x(x, z) = -\frac{c}{\omega\epsilon_I}\alpha_I(k_{sp})A_I \exp\{ik_{sp}x - \alpha_I(k_{sp})z\}, \quad (2.47)$$

$$E_z(x, z) = -\frac{c}{\omega\epsilon_I}k_{sp}A_I \exp\{ik_{sp}x - \alpha_I(k_{sp})z\}, \quad (2.48)$$

para $z > 0$, y

$$H_y(x, z) = A_{II} \exp\{ik_{sp}x + \alpha_{II}(k_{sp})z\}, \quad (2.49)$$

$$E_x(x, z) = \frac{c}{\omega\epsilon_{II}}\alpha_{II}(k_{sp})A_{II} \exp\{ik_{sp}x + \alpha_{II}(k_{sp})z\}, \quad (2.50)$$

$$E_z(x, z) = -\frac{c}{\omega\epsilon_{II}}k_{sp}A_{II} \exp\{ik_{sp}x + \alpha_{II}(k_{sp})z\}, \quad (2.51)$$

para $z < 0$, donde $\alpha_{\mathcal{R}}(k_{sp}) = \sqrt{k_{sp}^2 - \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_{\mathcal{R}}}$ y \mathcal{R} corresponde al medio I o II .

La continuidad de las componentes tangenciales de los campos a través de la interfaz plana implica que

$$U^I(x, z)|_{z=0} = U^{II}(x, z)|_{z=0} \quad (2.52)$$

y

$$\frac{1}{\epsilon_I} \frac{\partial}{\partial z} U^I(x, z) \Big|_{z=0} = \frac{1}{\epsilon_{II}} \frac{\partial}{\partial z} U^{II}(x, z) \Big|_{z=0}, \quad (2.53)$$

donde $U^{\mathcal{R}}(x, z)$ representa $E_x(x, z)$ ó $H_y(x, z)$ en cada uno de los medios. Al aplicar estas condiciones se encuentra que $A_I = A_{II}$ y que

$$\epsilon_{II}\alpha_I(k_{sp}) + \epsilon_I\alpha_{II}(k_{sp}) = 0, \quad (2.54)$$

la cual es una condición para la existencia de PPS en una interfaz plana. Ya que $\text{Re}\{\alpha(k_{sp})\} > 0$, para satisfacer el decaimiento cerca de la interfaz ϵ_I y ϵ_{II} deben tener signos contrarios. Como se vio en la sección 2.5, esto se cumple para un dieléctrico con $\epsilon_I > 0$ y un metal con $\text{Re}\{\epsilon_{II}\} < 0$, donde $|\text{Re}\{\epsilon_{II}\}| \gg \text{Im}\{\epsilon_{II}\}$.

Por último, al sustituir los valores de $\alpha_{\mathcal{R}}(k_{sp})$ en la ecuación (2.54), se llega a

$$k_{sp} = \pm \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_I \epsilon_{II}}{\epsilon_I + \epsilon_{II}}}, \quad (2.55)$$

que es la relación de dispersión de los plasmones polaritones de superficie. Es importante recordar que la constante dieléctrica de los metales muestra una dependencia en la frecuencia, por lo que $\epsilon_{II} = \epsilon_{II}(\omega)$. Como ya se ha mencionado, $\epsilon_{II}(\omega) < 0$ a frecuencias menores que la frecuencia de plasma ω_p , que es también la frecuencia de resonancia del plasmón de volumen del metal.

El número de onda de un plasmón polariton de superficie es más grande que la componente del vector de onda a lo largo de la interfaz de una onda plana que se propaga en el medio I (el dieléctrico). Esto aún para ángulos de incidencia rasantes. Debido a esto, no es posible excitar PPS sobre una superficie plana con una onda propagante. Sin embargo, es posible excitarlos utilizando rejillas de difracción, algún tipo de rugosidad en la superficie o prismas acopladores.

A pesar de que en principio la relación (2.55) sólo es válida para superficies planas, ésta constituye una buena aproximación para superficies rugosas. Por otro lado, al analizar el problema para el caso de polarización elemental s , se encuentra que no se pueden cumplir las condiciones para la existencia de PPS (Maier, 2007, Ruíz, 2012).

Al insertar la constante dieléctrica del gas de electrones libres (ecuación 2.35)

en la ecuación (2.55), suponiendo que el medio I es el vacío ($\epsilon_I = 1$) y, haciendo los cambios de variable $x = kc/\omega_p$ y $y = \omega/\omega_p$, se obtiene la relación de dispersión de los PPS en función de la frecuencia angular y de la frecuencia del plasma del gas de electrones libres. El resultado se ilustra con la curva de línea continua en la figura 2.3. En línea discontinua se muestra la línea de luz, que es la dispersión de la luz en el medio dieléctrico (vacío). La línea punteada representa el punto en donde $\omega = \omega_p$, es decir, el punto de transición en donde el medio se comporta como metal o dieléctrico. Por último, la línea discontinua punteada simboliza la frecuencia angular de los plasmones de superficie, $\omega = \omega_p/\sqrt{2}$.

Como se aprecia en la figura, la relación de dispersión de los PPS se encuentra del lado derecho de la línea de luz, lo cual implica que luz incidiendo desde el medio dieléctrico no puede ser acoplada directamente a PPS. Además, la relación de dispersión es asintótica al valor $\omega = \omega_p/\sqrt{2}$ para vectores de onda grandes, lo que significa que cuando el vector de onda incrementa, la velocidad de grupo de los PPS tiende a cero, resultando en el modo electrostático de los PPS, el llamado plasmón de superficie.

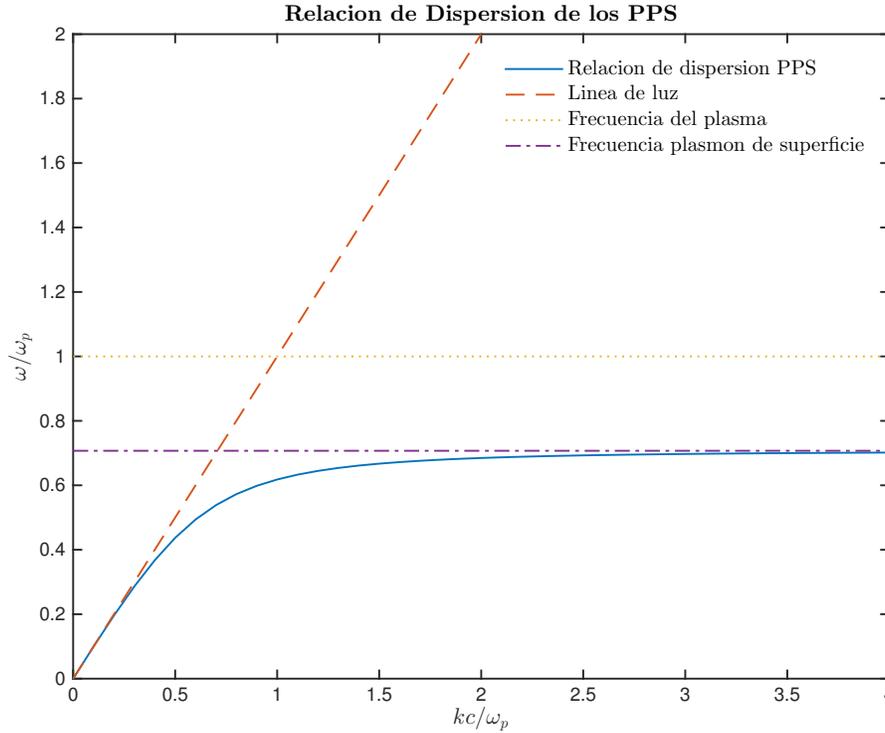


Figura 2.3: Relación de dispersión de los PPS en una interfaz vacío-metal (línea continua). La línea discontinua (- -) representa la dispersión de luz en el vacío, y la línea discontinua punteada (-·-) la frecuencia del plasmon de superficie. La frecuencia del plasma del gas de electrones libres está representada por la línea punteada (· · ·).

Por otro lado, la relación de dispersión puede ser estudiada utilizando mediciones experimentales de la constante dieléctrica. En este caso, para vectores de onda grandes la relación no es asintótica al valor $\omega = \omega_p/\sqrt{2}$, sino que toma valores entre $\omega = \omega_p/\sqrt{2}$ y $\omega = \omega_p$, fenómeno que no se observa al utilizar la constante dieléctrica del gas de electrones libres. Además, por arriba de $\omega = \omega_p$ el medio también puede soportar ondas, pero en este caso el medio se comporta como un dieléctrico y no se trata de ondas superficiales.

2.7 Superficies Rugosas

De especial interés en este trabajo son las superficies con rugosidades periódicas, pues a partir de la rugosidad es posible excitar PPS en superficies metálicas. Además, con el método de cálculo que se utiliza en esta tesis, las superficies periódicas facilitan el estudio del campo generado por los PPS, pues el problema se reduce en este caso a solucionar un problema matricial.

2.7.1 Ecuación de la Rejilla

Al incidir luz sobre una rejilla de difracción, ésta es difractada en diferentes direcciones hacia el medio de incidencia. Es bien conocido en teoría de difracción que la relación que cumplen los ángulos de incidencia y refracción están dados por la ecuación de la rejilla (ecuación 1.1). Esta expresión representa una condición de interferencia constructiva para la luz esparcida por la estructura de la superficie en diferentes direcciones.

En el caso del orden 0, el ángulo de difracción $\theta_{m=0}$ es igual al ángulo de incidencia θ_0 . Esta dirección es conocida como la dirección especular. Dependiendo de los parámetros de incidencia y de las características de la rejilla, se tiene adicionalmente un cierto número de órdenes propagantes, los cuales cumplen la condición $|\sin \theta_m| < 1$. Sin embargo, de acuerdo a la ecuación (1.1) existen números m para los cuales $|\sin \theta_m|$ tendría que ser mayor a 1, siendo los órdenes evanescentes los que estarían en esta situación (Loewen y Popov, 1997). En este trabajo precisamente los órdenes evanescentes que son de mayor interés son aquellos que ocurren más allá de los órdenes rasantes a la rejilla, es decir a $\theta_m \approx \pm 90^\circ$, pues son los que pueden

excitar PPS.

Al utilizar una rejilla de difracción, la energía de la luz incidente es redistribuida en los diferentes órdenes. Para superficies de amplitud pequeña, es normalmente el orden cero el que concentra la mayor parte de la energía reflejada. Cuando un PPS es excitado, parte de la energía de la luz incidente es transmitida al plasmón y la intensidad de los órdenes propagantes disminuye, dando lugar a las anomalías de Wood.

Al multiplicar la ecuación (1.1) por ω/c , la ecuación de la rejilla puede ser reescrita de la forma

$$q_m = k + mk_r, \quad m = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.56)$$

donde $k_r = 2\pi/T$. Esta ecuación puede ser interpretada como la conservación de momento en una dirección paralela a la interfaz promedio. La cantidad mk_r representa un cierto "momento" que puede ser suministrado por la rejilla para que q_m , el número de onda de la luz esparcida, iguale el número de onda del PPS. Ya que el número de onda de un PPS, k_{sp} , es sólo un poco mayor que ω/c , el número de onda de la luz incidente a lo largo de la interfaz más el "número de onda" de la rejilla debe ser mayor a ω/c , por lo que esto se cumple prácticamente cuando el orden difractado es rasante a la superficie (Ruíz, 2012).

2.7.2 Anomalías de Wood

Para calcular el ángulo al que debe incidir un haz con cierta longitud de onda proveniente del vacío sobre una rejilla de difracción para excitar un PPS, es necesario encontrar el número de onda del orden difractado que coincida con el número de onda del plasmón polariton de superficie. Esto se logra al igualar la ecuación (2.56)

con la relación de dispersión de los PPS (ecuación 2.55),

$$\frac{\omega}{c} \left(\sin \theta_0 \pm m \frac{\lambda}{T} \right) = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_{II}(\omega)}{\epsilon_{II}(\omega) + 1}}, \quad m = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \quad (2.57)$$

resultando en

$$\theta_0 = \text{asin} \left(\frac{m}{|m|} \sqrt{\frac{\epsilon_{II}(\omega)}{\epsilon_{II}(\omega) + 1}} - m \frac{\lambda}{T} \right). \quad (2.58)$$

Ya que las anomalías de Wood aparecen cuando se presenta la excitación de plasmones polaritones de superficie, el ángulo de incidencia en función de la longitud de onda en donde éstas aparecen se puede calcular conociendo el orden de difracción, m , que excita al PPS.

Adicional al trabajo publicado en 1902 (Wood, 1902), Wood estudió en 1935 el espectro de difracción de luz blanca sobre una rejilla de aluminio con un período de 1667 nm ; sus resultados para el orden de difracción 1 se muestran en la figura 2.4. Los ángulos de incidencia, medidos en sentido de las manecillas del reloj, están representados en el eje vertical y van de 0° a 46° . El eje horizontal representa la longitud de onda. El arreglo experimental utilizado consistía en luz blanca que atravesaba un colimador, la cual incidía sobre la rejilla, colocada sobre una base rotadora para cambiar el ángulo de incidencia, y de una configuración de un espejo y de un detector para medir el espectro del orden 1, como se muestra en la figura 2.5.

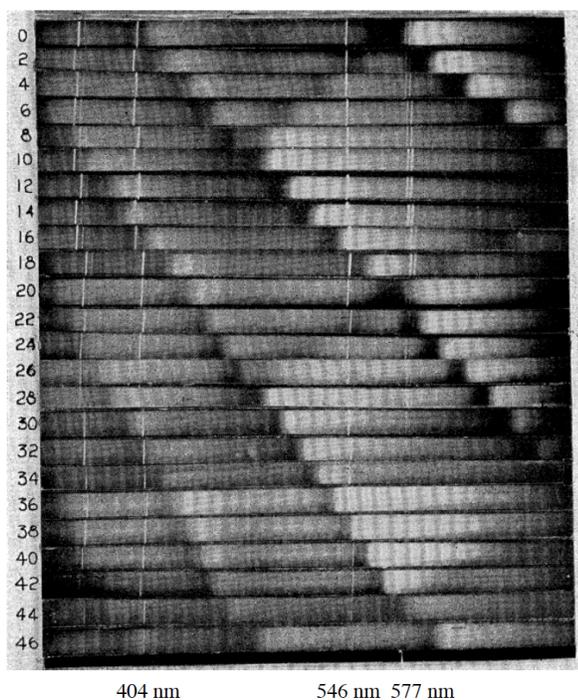


Figura 2.4: Anomalías de Wood para una rejilla de aluminio de 1667 nm . Para cada uno de los ángulos de incidencia estudiados (de 0° a 46°), se muestra el espectro de difracción en el orden 1; las franjas oscuras son las anomalías observadas por Wood (Wood, 1935).

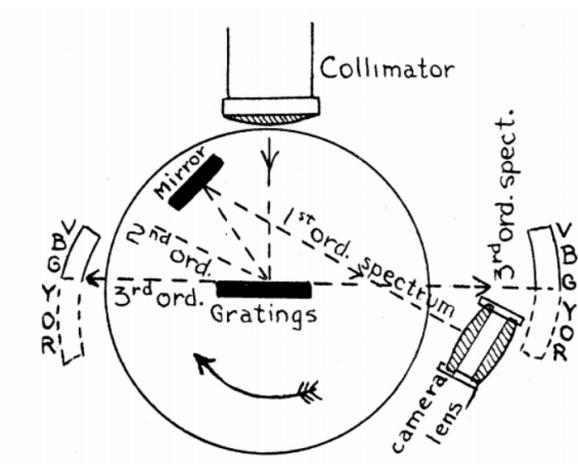


Figura 2.5: Arreglo experimental utilizado por Wood para estudiar el espectro de difracción de luz blanca sobre una rejilla de aluminio de 1667 nm (Wood, 1935).

En cada uno de los espectros se observan las anomalías de Wood como franjas

obscuras. Por ejemplo, para el ángulo de incidencia $\theta_0 = 0$, el espectro de los órdenes 3 y 4 emergen simultáneamente de manera rasante a la rejilla; además, los órdenes -3 y -4 también son rasantes a la superficie. Las anomalías entonces aparecen cuando estos órdenes excitan plasmones polaritones de superficie, provocando una redistribución de la luz en el espectro de difracción, manifestándose en este caso como la ausencia de una longitud de onda. Como se muestra en la figura 2.4, existen visiblemente dos anomalías en el espectro del orden 1 para $\theta_0 = 0$: la primera de ellas, a 416 nm , es debida a la excitación de dos PPS por los órdenes de difracción 4 y -4; la segunda, a aproximadamente 555 nm , se genera por la excitación de PPS por los órdenes de difracción 3 y -3. Es decir, dos anomalías se "traslapan" alrededor de $\lambda=416 \text{ nm}$ y $\lambda=555 \text{ nm}$.

Al incrementar el ángulo de incidencia en dos grados, los espectros de los órdenes 3 y 4 giran en el sentido de las manecillas del reloj provocando que las anomalías se recorran hacia el lado derecho de la imagen de la figura 2.4. Por otro lado, el orden -3 también se mueve en esa dirección, haciendo que la longitud de onda donde aparece la anomalía se desplace hacia el lado izquierdo, por lo que las anomalías que se encontraban en la misma longitud de onda para $\theta_0 = 0$ empiezan a diverger.

El cambio en el ángulo de incidencia ocasiona que la posición angular de los órdenes de difracción cambie, lo que se traduce en la excitación de plasmones polaritones de superficie a diferentes longitudes de onda y en la aparición de las anomalías de Wood. Entonces, las observaciones de Wood de hace aproximadamente 100 años pueden ser explicadas hoy en día por medio de la plasmónica. Sin embargo, como se aprecia en la discusión anterior no es fácil interpretar y visualizar con claridad los resultados de la figura 2.4.

2.7.3 Hipótesis de Rayleigh

La representación de un campo por medio de su espectro angular es válida únicamente en una región delimitada por dos planos, como se explicó en la sección 2.4. Ya que en esta tesis el campo reflejado esparcido y el campo transmitido fueron representados por medio de esta técnica, la región de validez se encuentra por arriba de las crestas y por debajo de los valles de las rejillas que se estudiaron; es decir, la representación es válida por encima de un plano $z > \zeta_{max}(x)$ y por debajo del plano $z < \zeta_{min}(x)$, como se ilustra en la figura 2.6. A pesar de que esta representación está limitada sólo a una región del espacio, la hipótesis de Rayleigh consiste en suponer que los campos son también válidos en la región $\zeta_{min}(x) < z < \zeta_{max}(x)$.

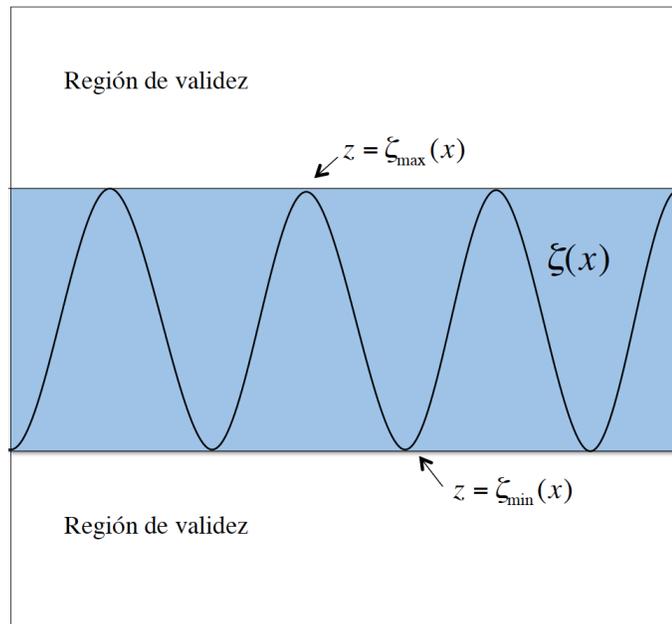


Figura 2.6: Región de validez del campo reflejado esparcido y transmitido representados en términos de sus espectros angulares.

A pesar de que existen algunos trabajos donde se discuten criterios de validez de esta hipótesis (Maystre y Petit, 1971, Burrows, 1969, Millar, 1969, 1973), aún

no es claro hasta qué punto esta hipótesis representa una limitante para describir fielmente problemas de esparcimiento por superficies rugosas.

Esta suposición es necesaria para la deducción de las llamadas ecuaciones reducidas de Rayleigh, que constituyen el punto de partida de los cálculos numéricos que se presentan en este trabajo.

2.7.4 Ecuaciones Reducidas de Rayleigh

Como ya se ha mencionado, el trabajo aquí presentado está basado en las ecuaciones reducidas de Rayleigh. A partir de su solución numérica, es posible calcular el campo cercano difractado, la eficiencia de difracción en cada orden, el coeficiente diferencial de reflexión y la posición y características de las anomalías de Wood y de Rayleigh. En esta sección se derivan dichas ecuaciones utilizando las técnicas de espectro angular discutidas en la sección 2.4 y la hipótesis de Rayleigh descrita en la sección 2.7.3.

Se considera una superficie que presenta variaciones de altura en una dirección (x) y es constante a lo largo de una dirección perpendicular a la primera (y). Es decir, que se trata de una "superficie unidimensional". El perfil de la superficie está descrito por la expresión $z = \zeta(x)$. Se asume que las regiones semi-infinitas I y II son medios isotrópicos y homogéneos, caracterizados ópticamente por las constantes dieléctricas $\epsilon_I(\omega)$ y $\epsilon_{II}(\omega)$, y que el medio de incidencia es la región I . Esto se ilustra en la figura 2.7.

El eje z es perpendicular al plano medio de la superficie y también se asume que el plano de incidencia es el plano $x - z$. Se sabe que bajo estas condiciones, los estados elementales de polarización s (campo eléctrico perpendicular al plano

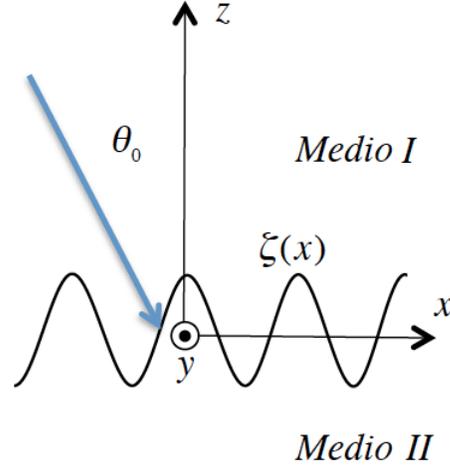


Figura 2.7: Geometría considerada, en la cual la superficie es invariante a lo largo del eje y y presenta variaciones a lo largo del eje x . El perfil de la superficie está descrito por $\zeta(x)$ y el plano de incidencia es el plano x - z . El ángulo de incidencia θ_0 es medido en contra de las manecillas del reloj, con respecto al eje z .

de incidencia) y p (campo eléctrico paralelo al plano de incidencia) conservan sus estados de polarización al interactuar con la superficie y, así, el problema se reduce a un problema de naturaleza escalar.

En los dos casos de polarización elemental, el campo electromagnético es de la forma

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = (0, U(\mathbf{r}), 0) \exp(-i\omega t), \quad (2.59)$$

donde $\mathbf{r} = (x, z)$, y $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$ representa el vector de campo eléctrico $E(\mathbf{r}, t)$ en el caso de polarización s y el vector de campo magnético $H(\mathbf{r}, t)$ para polarización p . Esto ilustra el hecho de que solo se tiene que lidiar con la componente y independiente del tiempo del campo eléctrico o magnético.

Se considera que el campo incidente es una onda plana, representada por la expresión:

$$U_{inc}(x, z) = U_0 \exp[ikx - i\alpha_I(k)z], \quad (2.60)$$

donde U_0 es la amplitud del campo eléctrico en el caso de polarización s y del campo magnético para polarización p , $k = (\omega/c) \sin \theta_0$ y $\alpha_I(k) = (\omega/c) \cos \theta_0$ son las componentes x y z del vector de onda incidente.

La componente y del campo reflejado y transmitido pueden ser escritas en términos de su espectro angular como

$$U_R(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) \exp[iqx + i\alpha_I(q)z], \quad z \geq \zeta(x), \quad (2.61)$$

y

$$U_T(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} T(q|k) \exp[iqx - i\alpha_{II}(q)z], \quad z \leq \zeta(x), \quad (2.62)$$

donde $R(q|k)$ es el espectro angular del campo reflejado en la región I , $T(q|k)$ es el espectro angular del campo transmitido en la región II , y $\alpha_{\mathcal{R}}(q) = (\epsilon_{\mathcal{R}}(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} - q^2)^{1/2}$, donde \mathcal{R} indica cantidades que corresponden a la región I y II .

El campo total en la región I está dado por la suma del campo incidente y el campo reflejado esparcido,

$$U^I(x, z) = U_{inc}(x, z) + U_R(x, z), \quad (2.63)$$

mientras que en la región II solo se tiene el campo transmitido

$$U^{II}(x, z) = U_T(x, z). \quad (2.64)$$

La continuidad de las componentes paralelas de \mathbf{E} y \mathbf{H} a través de la interfaz $\zeta(x)$, implica que

$$U^I(x, \zeta(x)) = U^{II}(x, \zeta(x)), \quad (2.65)$$

$$\frac{1}{\nu_I} \frac{\partial}{\partial n} U^I(x, z) \Big|_{z=\zeta(x)} = \frac{1}{\nu_{II}} \frac{\partial}{\partial n} U^{II}(x, z) \Big|_{z=\zeta(x)}, \quad (2.66)$$

donde

$$\frac{\partial}{\partial n} = \frac{1}{\left(1 + (\zeta'(x))^2\right)^{1/2}} \left(-\zeta(x) \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (2.67)$$

es el operador de derivada a lo largo de la normal, y $\nu_{\mathcal{R}} = 1$ para polarización s y $\nu_{\mathcal{R}} = \epsilon_{\mathcal{R}}(\omega)$ para polarización p .

Usando las expansiones de ondas planas (2.61) y (2.62), las ecuaciones de continuidad (2.65) y (2.66), y utilizando la hipótesis de Rayleigh, se obtiene el siguiente par de ecuaciones acopladas

$$\begin{aligned} & U_0 \exp\{ikx - i\alpha_I(k)\zeta(x)\} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) \exp\{iqx + i\alpha_I(q)\zeta(x)\} \\ = & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} T(q|k) \exp\{iqx - i\alpha_{II}(q)\zeta(x)\}, \end{aligned} \quad (2.68)$$

$$\begin{aligned} & \frac{-1}{\nu_I} [\zeta'(x)k + \alpha_I(k)] U_0 \exp\{ikx - i\alpha_I(k)\zeta(x)\} + \\ & + \frac{1}{\nu_I} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} [-\zeta'(x)q + \alpha_I(q)] R(q|k) \exp\{iqx + i\alpha_I(q)\zeta(x)\} \\ = & \frac{-1}{\nu_{II}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} [\zeta'(x)q + \alpha_{II}(q)] T(q|k) \exp\{iqx - i\alpha_{II}(q)\zeta(x)\}. \end{aligned} \quad (2.69)$$

Estas ecuaciones pueden ser reacomodadas de manera que se obtenga una ecuación integral para $R(q|k)$ y otra para $T(q|k)$. Para esto, se multiplica la primera ecuación por

$$[\zeta'(x)p - \alpha_{II}(p)] \exp\{-ipx - i\alpha_{II}(p)\zeta(x)\},$$

y la segunda por

$$-\nu_{II} \exp\{-ipx - i\alpha_{II}(p)\zeta(x)\}.$$

Al integrar las ecuaciones resultantes respecto a x y sumarlas se obtiene la ecuación

$$-U_0 I_0(k|p) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) I_R(q|p) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} T(q|k) I_T(q|p). \quad (2.70)$$

Al escribir esta ecuación se definieron las funciones

$$I_0(k|p) = - \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\zeta'(x) \left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} k \right) - \alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(k) \right] \times \quad (2.71)$$

$$\times \exp \left\{ i(k-p)x - i(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)) \zeta(x) \right\},$$

$$I_R(q|p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\zeta'(x) \left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} q \right) - \alpha_{II}(p) - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(q) \right] \times \quad (2.72)$$

$$\times \exp \left\{ i(q-p)x - i(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)) \zeta(x) \right\},$$

y

$$I_T(q|p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\zeta'(x) (q+p) + \alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p) \right] \times \quad (2.73)$$

$$\exp \left\{ i(q-p)x - i(\alpha_{II}(p) + \alpha_{II}(q)) \zeta(x) \right\}.$$

En el apéndice A se demuestra que

$$I_T(q|p) = 0, \quad (2.74)$$

$$I_R(q|p) = \left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right) (pq + \alpha_{II}(p)\alpha_I(q)) - \sigma}{\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)} \right] I(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)|p - q), \quad (2.75)$$

$$I_0(k|p) = \left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right) (\alpha_{II}(p)\alpha_I(k) - kp) + \sigma}{(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k))} \right] I(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)|p - k). \quad (2.76)$$

Donde

$$I(\gamma|Q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-iQx} e^{-i\gamma\zeta(x)}, \quad (2.77)$$

$\sigma = 0$ para polarización p y $\sigma = (\omega/c)^2(\varepsilon_{II}(\omega) - \varepsilon_I(\omega))$ para polarización s . Entonces la ecuación puede ser escrita como

$$U_0 I_0(k|p) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) I_R(q|p), \quad (2.78)$$

ó

$$\begin{aligned} & U_0 \left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right) (\alpha_{II}(p)\alpha_I(k) - kp) + \sigma}{(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k))} \right] I(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)|p - k) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right) (pq + \alpha_{II}(p)\alpha_I(q)) - \sigma}{\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)} \right] I(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)|p - q) \times \\ & \quad \times R(q|k). \end{aligned} \quad (2.79)$$

Para el caso de polarización p se tiene que

$$\begin{aligned} & -U_0 (kp - \alpha_{II}(p)\alpha_I(k)) \left[\frac{I(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)|p - k)}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)} \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} (pq + \alpha_{II}(p)\alpha_I(q)) \left[\frac{I(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)|p - q)}{\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)} \right] R(q|k), \end{aligned} \quad (2.80)$$

mientras que para polarización s

$$-U_0 \left[\frac{I(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)|p - k)}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)} \right] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \left[\frac{I(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)|p - q)}{\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)} \right] \times \quad (2.81)$$

$$\times R(q|k).$$

Estas ecuaciones constituyen las ecuaciones reducidas de Rayleigh.

2.7.5 Superficies Periódicas

Si ahora se asume que la superficie es periódica y con período L , se tiene que $\zeta(x + jL) = \zeta(x)$. Entonces, la ecuación (2.77) es

$$I(\gamma|Q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-iQx} e^{-i\gamma\zeta(x)}$$

$$= \dots + \int_{-L-L/2}^{-L+L/2} dx e^{-iQx} e^{-i\gamma\zeta(x)} + \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-iQx} e^{-i\gamma\zeta(x)} + \int_{L-L/2}^{L+L/2} dx e^{-iQx} e^{-i\gamma\zeta(x)} + \dots$$

$$= \dots + \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-iQ(x-L)} e^{-i\gamma\zeta(x-L)} + \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-iQx} e^{-i\gamma\zeta(x)} + \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-iQ(x+L)} e^{-i\gamma\zeta(x+L)} + \dots$$

$$= \left[\dots + e^{iQL} + 1 + e^{-iQL} + \dots \right] \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-iQx} e^{-i\gamma\zeta(x)}$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-inQL} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-iQx} e^{-i\gamma\zeta(x)}. \quad (2.82)$$

Usando la relación

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-iQnL} = \frac{2\pi}{L} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \delta\left(Q - \frac{2\pi j}{L}\right), \quad (2.83)$$

y definiendo

$$\hat{I}(\gamma|Q) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-iQx} e^{-i\gamma\zeta(x)}, \quad (2.84)$$

se puede escribir

$$I(\gamma|Q) = \hat{I}(\gamma|Q) 2\pi \sum_{j=-\infty}^{\infty} \delta\left(Q - \frac{2\pi j}{L}\right). \quad (2.85)$$

Se tiene entonces que para polarización s

$$\begin{aligned} & -U_0 \left[\frac{\hat{I}(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)|p-k)}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)} 2\pi \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(p-k - \frac{2\pi n}{L}\right) \right] \\ = & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \left[\frac{\hat{I}(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)|p-q)}{\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)} 2\pi \sum_{j=-\infty}^{\infty} \delta\left(p-q - \frac{2\pi j}{L}\right) \right] R(q|k). \end{aligned} \quad (2.86)$$

Definiendo $p_n = k + 2\pi n/L$, se puede escribir

$$\begin{aligned} & -U_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\frac{\hat{I}(\alpha_{II}(p_n) + \alpha_I(k)|p_n-k)}{\alpha_{II}(p_n) + \alpha_I(k)} \delta(p-p_n) \right] \\ = & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \left[\frac{\hat{I}(\alpha_{II}(p_n) - \alpha_I(q)|p_n-q)}{\alpha_{II}(p_n) - \alpha_I(q)} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \delta\left(p_n-q - \frac{2\pi j}{L}\right) \right] R(q|k). \end{aligned} \quad (2.87)$$

Ahora, si $q_m = p_n - 2\pi j/L = k + 2\pi(j-n)/L = k + 2\pi m/L$, se encuentra que

$$\begin{aligned} & -U_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\frac{\hat{I}(\alpha_{II}(p_n) + \alpha_I(k)|p_n-k)}{\alpha_{II}(p_n) + \alpha_I(k)} \delta(p-p_n) \right] \\ = & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \left[\frac{\hat{I}(\alpha_{II}(p_n) - \alpha_I(q_m)|p_n-q_m)}{\alpha_{II}(p_n) - \alpha_I(q_m)} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(q_m-q) \right] R(q|k). \end{aligned} \quad (2.88)$$

Definiendo

$$R_m = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \delta(q_m - q) R(q|k), \quad (2.89)$$

o, equivalentemente,

$$R(q|k) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} 2\pi \delta(q - q_m) R_m, \quad (2.90)$$

se encuentra que

$$U_0 \frac{\hat{I}(\alpha_{II}(p_n) + \alpha_I(k)|p_n - k)}{\alpha_{II}(p_n) + \alpha_I(k)} = - \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{\hat{I}(\alpha_{II}(p_n) - \alpha_I(q_m)|p_n - q_m)}{\alpha_{II}(p_n) - \alpha_I(q_m)} R_m. \quad (2.91)$$

Para polarización p se procede de manera similar para obtener

$$\begin{aligned} & U_0 (kp_n - \alpha_{II}(p_n)\alpha_I(k)) \left[\frac{\hat{I}(\alpha_{II}(p_n) + \alpha_I(k)|p_n - k)}{\alpha_{II}(p_n) + \alpha_I(k)} \right] \\ &= - \sum_{m=-\infty}^{\infty} (p_n q_m + \alpha_{II}(p_n)\alpha_I(q_m)) \left[\frac{\hat{I}(\alpha_{II}(p_n) - \alpha_I(q_m)|p_n - q_m)}{\alpha_{II}(p_n) - \alpha_I(q_m)} \right] R_m. \end{aligned} \quad (2.92)$$

Las ecuaciones (2.91) y (2.92) constituyen las ecuaciones reducidas de Rayleigh para el caso de superficies periódicas. En estas ecuaciones se tiene que

$$q_m = k + \frac{2\pi m}{L} = \frac{\omega}{c} \sin \theta_m, \quad (2.93)$$

$$k = \frac{\omega}{c} \sin \theta_0. \quad (2.94)$$

Se observa que estas ecuaciones son de la forma $U_n = M_{nm} R_m$, por lo que el problema se reduce a solucionar un sistema matricial.

El cálculo del campo reflejado se hace a partir de la ecuación (2.61), donde se expresa el campo $U_R(x, z)$ en términos de su espectro angular $R(q|k)$. La expresión

(2.90) representa el espectro angular del campo en función de la amplitud de cada una de las ondas planas en las que se descompone. Si ésta se sustituye en la ecuación de $U_R(x, z)$ resulta

$$U_R(x, z) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} R_m \exp\{iq_m x + i\alpha_I(q_m)z\}, \quad (2.95)$$

donde $\alpha_I(q_m) = \left(\frac{\omega^2}{c^2} - q_m^2\right)^{1/2}$. Así, al solucionar el problema matricial, el campo reflejado en un punto (x, z) puede calcularse conociendo el conjunto R_m .

2.7.6 Eficiencia de Esparcimiento y Coeficiente Diferencial de Reflexión (CDR)

Para obtener una expresión de la eficiencia de esparcimiento, que representa la fracción de la potencia total incidente que es esparcida en todos los órdenes de difracción, es necesario calcular el flujo total incidente y el flujo total esparcido. La componente en z del vector de Poynting promedio está dada por

$$S_z^c = -i \frac{c^2}{8\pi\epsilon\omega} \frac{\partial U(x, z)}{\partial z} U^*(x, z), \quad (2.96)$$

donde U es el campo eléctrico para el caso de polarización s y el campo magnético para polarización p , y ϵ_R es la constante dieléctrica del medio en el que se calcula el vector de Poynting. Se considera el vacío como el medio de incidencia y se toma el campo incidente como $U_{inc}(x, z) = U_0 \exp(ikx - i\alpha_0(k)z)$, donde $k = \frac{\omega}{c} \sin(\theta_0)$, $\alpha(k) = \frac{\omega}{c} \cos(\theta_0)$, θ_0 es el ángulo de incidencia y U_0 es la amplitud del campo depen-

diendo el tipo de polarización. Así, la potencia incidente sobre la superficie es

$$\begin{aligned} P_{inc} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \operatorname{Re}\{S_z^{inc}\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \operatorname{Re} \left\{ -i \frac{c^2}{8\pi\omega} (-i\alpha_0(k)) |U_{inc}(x, z)|^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.97)$$

Evaluando las integrales se encuentra que

$$P_{inc} = -L_1 L_2 \frac{c^2 \alpha_0(k)}{8\pi\omega} U_0^2, \quad (2.98)$$

donde S_z^{inc} es el vector de Poynting promedio de la luz incidente, y L_1 y L_2 son las longitudes de la superficie en la dirección x y y , respectivamente. El signo negativo indica que el flujo viaja hacia abajo.

Se tiene, de manera similar, que la potencia esparcida es

$$P_{sc} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \operatorname{Re}\{S_z^{sc}\}, \quad (2.99)$$

donde S_z^{sc} es el vector de Poynting del campo reflejado esparcido. Expresando el campo reflejado en términos de su espectro angular,

$$U_R(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) \exp[iqx + i\alpha_I(q)z], \quad z \geq \zeta(x), \quad (2.100)$$

donde $q = \frac{\omega}{c} \sin \theta_s$, y $\alpha_I(q) = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - q^2}$, se tiene que

$$\begin{aligned} P_{sc} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \operatorname{Re} \left\{ -i \frac{c^2}{8\pi\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} i\alpha_I(q) R(q|k) \exp(iqx + i\alpha_I(q)z) \right. \\ &\quad \left. \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq'}{2\pi} R^*(q'|k) \exp(-iq'x - i\alpha_I^*(q')z) \right\}. \end{aligned} \quad (2.101)$$

Esta expresión se puede reacomodar para escribir

$$P_{sc} = L_2 \frac{c^2}{8\pi\omega} \operatorname{Re} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq'}{2\pi} \alpha_I(q) R(q|k) R^*(q'|k) \exp[i(\alpha_I(q) - \alpha_I^*(q'))z] \right. \\ \left. \times \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(i(q - q')x) \right\}. \quad (2.102)$$

La integral sobre x es una delta de Dirac, con lo que

$$P_{sc} = L_2 \frac{c^2}{8\pi\omega} \operatorname{Re} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \alpha_I(q) |R(q|k)|^2 \exp[-2 \operatorname{Im}\{\alpha_I(q)\}z] \right\}. \quad (2.103)$$

Dado que $\alpha_I(q) = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - q^2}$, el término $\operatorname{Im}\{\alpha_I(q)\}$ es diferente de cero cuando $-\frac{\omega}{c} < q < \frac{\omega}{c}$, pero como se desea calcular la potencia esparcida en el campo lejano (z grande), se puede escribir

$$P_{sc} = L_2 \frac{c^2}{8\pi\omega} \int_{-\omega/c}^{\omega/c} \frac{dq}{2\pi} \alpha_I(q) |R(q|k)|^2. \quad (2.104)$$

Para evaluar esta integral es necesario encontrar una expresión conveniente para $|R(q|k)|^2$. Se parte entonces de la definición dada en la ecuación (2.90)

$$R(q|k) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} 2\pi\delta(q - q_m) R_m, \quad (2.105)$$

y de la relación (ver apéndice) (Maradudin y Méndez, 1993)

$$[2\pi\delta(q - q_m)]^2 = L_1 2\pi\delta(q - q_m), \quad (2.106)$$

resultando en

$$|R(q|k)|^2 = \sum_{m=-\infty}^{\infty} L_1 2\pi \delta(q - q_m) |R_m|^2. \quad (2.107)$$

De esta manera, la potencia esparcida está dada por

$$P_{sc} = L_1 L_2 \frac{c^2}{8\pi\omega} \sum_{m=-\infty}^{\infty} |R_m|^2 \alpha_I(q_m). \quad (2.108)$$

La eficiencia de esparcimiento es entonces

$$\frac{P_{sc}}{P_{inc}} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{\alpha_I(q_m)}{\alpha_0(k) U_0^2} |R_m|^2, \quad (2.109)$$

donde la suma es sobre los canales abiertos (ondas propagantes). Se define entonces la eficiencia de esparcimiento en el orden de difracción m como

$$e_m = \frac{\alpha_I(q_m)}{\alpha_0(k) U_0^2} |R_m|^2, \quad (2.110)$$

donde

$$\frac{P_{sc}}{P_{inc}} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e_m \leq 1. \quad (2.111)$$

El coeficiente diferencial de reflexión es la fracción del flujo de energía incidente en la superficie que es esparcida en un intervalo angular $d\theta_s$ alrededor de la dirección de esparcimiento definida por el ángulo θ_s (Maradudin *et al.*, 1990). Para incidencia θ_0 el coeficiente diferencial de reflexión es

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial \theta_m} &= \frac{L_1 \cos \theta_m}{\lambda} e_m = \frac{L_1 \cos \theta_m \cos \theta_m}{\lambda \cos \theta_0} |R_m|^2 = \frac{L_1 \cos^2 \theta_m}{\lambda \cos \theta_0} |R_m|^2 \\ &= \frac{|r(q_m, \omega)|^2}{8\pi(\omega/c) L_1 \cos \theta_0}. \end{aligned} \quad (2.112)$$

2.8 Implementación Numérica

Los cálculos que se presentan en esta tesis están basados en la solución numérica de las ecuaciones reducidas de Rayleigh. Para esto, se utilizó un programa escrito en el lenguaje de programación Fortran 77, en una computadora con procesador 3.1 GHz Intel Core i7 y 16 GB de memoria RAM.

Para plantear la ecuación matricial es necesario definir en primer lugar el perfil de la superficie, $\zeta(x)$, y el ángulo de incidencia. Posteriormente se definieron tres parámetros, a partir de los cuales todas las variables del problema numérico pueden ser declaradas. Uno de ellos es M_{max} , establece el número máximo de componentes espectrales que se consideran para calcular el campo esparcido; este número es muy importante, pues su valor y la longitud de la superficie, L , están estrechamente relacionados, como se explica en la sección 2.8.2. Otro de los parámetros es el número N , que es el número de puntos que se utiliza para discretizar la función continua $\zeta(x)$. Y por último, el parámetro G , que define el número de términos que se toman de la expansión en series de Taylor de la integral $\hat{I}(\gamma|Q)$ (ecuación 2.84), como se expone en la sección 2.8.3.

Como se mencionó en la sección 2.7.5, el problema numérico se centra en encontrar los coeficientes R_m a partir del sistema matricial $U_n = M_{nm}R_m$ que surge de la ecuación (2.92). Esto se logra al factorizar la matriz M_{nm} en una matriz triangular inferior, \mathbf{L} , y una matriz superior, \mathbf{U} . Este método se conoce como el método de descomposición \mathbf{LU} y es el que requiere más tiempo computacional en la solución del problema. Cada uno de los elementos del vector U_n y de la matriz M_{nm} involucra la evaluación de la integral $\hat{I}(\gamma|Q)$ por medio de la transformada rápida de Fourier

(FFT). Estos procedimientos se explican en la sección 2.8.3.

Una vez conocido el conjunto R_m es posible calcular la eficiencia de esparcimiento, el coeficiente diferencial de reflexión, y realizar cálculos de campo cercano.

2.8.1 Discretización de las Superficies

La función $\zeta(x)$ es una función continua que describe el perfil de la superficie. Para poder implementarla dentro de las simulaciones, es necesario discretizarla. Esto se logra tomando primeramente N puntos de x en el rango $(-L/2, L/2)$, con espaciamiento Δx entre cada uno de ellos, de tal forma que

$$\Delta x = L/N, \quad (2.113)$$

donde L es la longitud de la superficie y N es un número entero positivo. El conjunto resultante es

$$\{x_i\} = \left[\frac{\Delta x - L}{2}, \frac{3\Delta x - L}{2}, \frac{5\Delta x - L}{2}, \dots, \frac{L - 5\Delta x}{2}, \frac{L - 3\Delta x}{2}, \frac{L - \Delta x}{2} \right], \quad (2.114)$$

donde la componente $x_i = \Delta x(i - \frac{1}{2}) - L/2$, con $i = 1, 2, \dots, N$. Posteriormente, se evalúa la función $\zeta(x)$ en los puntos $\{x_i\}$, resultando en el conjunto $\{\zeta_i\}$.

El uso de las ecuaciones reducidas de Rayleigh para una superficie periódica implica que la superficie debe ser de longitud infinita, conformada por el conjunto infinito de superficies con período L . Para solucionar estas ecuaciones numéricamente, es necesario dar como valor de entrada la longitud L , que en este trabajo se tomó como $L = jT$, donde T es el período de la rejilla y j es un número entero positivo. L debe ser entonces un múltiplo entero de T , pues de no ser así podría

presentarse una situación como la mostrada en la figura 2.8. Este tipo de situaciones conduce al esparcimiento de los PPS por defectos formados al "unir" dos superficies con período L . Por otro lado, la experiencia dice que para obtener resultados confiables el espaciamento Δx debe ser de alrededor de $\lambda/20$.

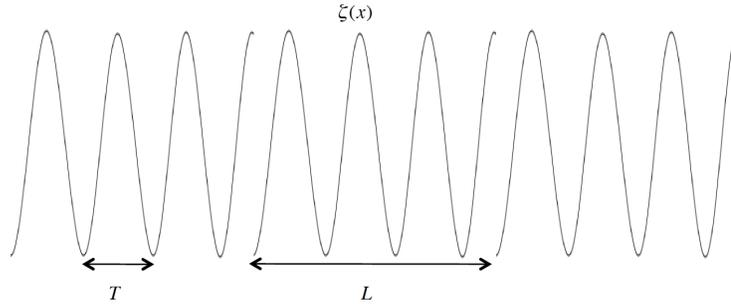


Figura 2.8: Superficie conformada por la suma infinita de superficies con período $L \neq jT$, donde j es un número entero.

2.8.2 Relación entre la Longitud de la Superficie y las Componentes Espectrales

Como se vio en la sección 2.6, el número de onda de los PPS es mayor a ω/c . El momento faltante puede ser entonces suministrado por la rugosidad de la superficie. Para poder implementar el problema numéricamente, fue necesario tomar componentes espectrales del campo esparcido que fueran mayores a $|\frac{\omega}{c}|$. En general, se tomaron componentes con valor máximo de

$$q_{max} = n_{\omega} \left| \frac{\omega}{c} \right|, \quad (2.115)$$

donde n_{ω} es un número entero positivo.

A partir de la ecuación (2.93), se tiene que existe una separación de $\frac{2\pi}{L}$ entre

las componentes x del vector de onda de las ondas planas que determinan el campo esparcido. Para el caso de incidencia normal, $k = 0$, se tiene que

$$-\frac{2\pi}{L}M_{max} < q_m < \frac{2\pi}{L}M_{max}, \quad (2.116)$$

donde M_{max} es el número máximo de componentes espectrales que se toman de un lado del espectro para calcular el campo esparcido, por lo que $2M_{max} + 1$ es el número total de componentes. A partir de esta ecuación y de la ecuación (2.115), y tomando en cuenta que $\frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$, la relación que existe entre el número M_{max} y la longitud de la superficie, L , es

$$\frac{M_{max}}{n_\omega} = \frac{L}{\lambda}, \quad (2.117)$$

por lo cual L debe ser un múltiplo entero de λ . Ya que para los cálculos hechos el valor de λ tenía que cambiar repetidamente, se fijaron los valores de L y M_{max} , y se definió una λ promedio que cumpliera con la relación (2.117).

2.8.3 Determinación del Sistema de Ecuaciones y de los Campos Esparcidos

La ecuación (2.92) representa la ecuación reducida de Rayleigh para el campo reflejado esparcido, para una superficie periódica entre dos medios semiinfinitos y polarización p . Ésta puede ser vista como una ecuación matricial de la forma

$$U_n = M_{nm}R_m, \quad (2.118)$$

donde U_n y R_m son vectores de $(2M_{max} + 1)$ elementos y M_{nm} es una matriz cuadrada con $(2M_{max} + 1)$ renglones y $(2M_{max} + 1)$ columnas. El vector U_n y la matriz M_{nm}

contienen información sobre el campo incidente y el perfil de la superficie, mientras que el vector R_m es el espectro angular del campo esparcido en reflexión.

Para encontrar cada uno de los elementos de U_n y M_{nm} , es necesario solucionar la integral $\hat{I}(\gamma|Q)$ (ecuación 2.84). Para esto, $\hat{I}(\gamma|Q)$ se representa como

$$\hat{I}(\gamma|Q) = \mathcal{F}_L\{\exp(-i\gamma\zeta(x))\}, \quad (2.119)$$

donde $\mathcal{F}_L\{\}$ es el operador transformada de Fourier truncada en una longitud L . El argumento de este operador puede ser desarrollado en la serie

$$\exp(-i\gamma\zeta(x)) = 1 - i\gamma\zeta(x) - \frac{\gamma^2\zeta^2(x)}{2!} + \frac{\gamma^3\zeta^3(x)}{3!} + \dots, \quad (2.120)$$

y, ya que \mathcal{F}_L es un operador lineal, se tiene

$$\mathcal{F}_L\{\exp(-i\gamma\zeta(x))\} = \mathcal{F}_L\{1\} + \mathcal{F}_L\{-i\gamma\zeta(x)\} + \mathcal{F}_L\left\{-\frac{\gamma^2\zeta^2(x)}{2!}\right\} + \mathcal{F}_L\left\{\frac{\gamma^3\zeta^3(x)}{3!}\right\} + \dots \quad (2.121)$$

Como γ no depende de x , entonces

$$\hat{I}(\gamma|Q) = \mathcal{F}_L\{1\} - i\gamma\mathcal{F}_L\{\zeta(x)\} + \frac{i^2\gamma^2}{2!}\mathcal{F}_L\{\zeta^2(x)\} - \frac{i^3\gamma^3}{3!}\mathcal{F}_L\{\zeta^3(x)\} + \dots \quad (2.122)$$

Al discretizar el perfil de la superficie, el operador \mathcal{F}_L se convierte en una transformada de Fourier discreta (FFT), por lo que al conocer la FFT del conjunto $\{\zeta_i\}$ y de sus potencias, la integral $\hat{I}(\gamma|Q)$ puede ser calculada al evaluar el polinomio (2.122).

Numéricamente, la evaluación de la ecuación (2.122) puede llevar a errores cuando se toman términos de orden alto en la expansión, pues es necesario calcular

el número factorial que aparece en el denominador. Para solucionar este problema, el polinomio se evalúa recursivamente definiendo

$$a_0 = \mathcal{F}_L \{1\}, \quad (2.123)$$

$$a_1 = i\gamma \mathcal{F}_L \{\zeta(x)\}, \quad (2.124)$$

$$a_2 = \frac{i^2 \gamma^2}{2!} \mathcal{F}_L \{\zeta^2(x)\}, \quad (2.125)$$

$$a_n = \frac{i^n \gamma^n}{n!} \mathcal{F}_L \{\zeta^n(x)\} = \frac{i^n \gamma^n}{n!} \mathcal{F}_L \{\zeta^n(x)\} = \frac{i^n \gamma^n}{n!} \mathcal{F}_L \{\zeta^n(x)\}. \quad (2.126)$$

Utilizando este método se logra reducir el error numérico al calcular el valor de $\hat{I}(\gamma|Q)$. Para casos en los que $F_L \{\zeta^{n-1}(x)\} = 0$, se evalúa el término a_n de manera directa. Se tiene entonces que

$$\hat{I}(\gamma|Q) = a_0 + a_1 + a_2 + \dots + a_n. \quad (2.127)$$

Al conocer cada uno de los elementos de U_n y M_{nm} , es posible solucionar el problema matricial para encontrar el vector R_m (ecuación 2.118) por medio del método de la descomposición **LU**. El procedimiento consiste en factorizar la matriz

$$M_{nm} = \mathbf{LU}, \quad (2.128)$$

donde **L** es una matriz triangular inferior y **U** una matriz triangular superior. Si la ecuación (2.118) se representa como

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \quad (2.129)$$

donde $\mathbf{A} = M_{nm}$, $\mathbf{x} = R_m$ y $\mathbf{b} = U_n$, se tiene entonces que

$$\mathbf{LUx} = \mathbf{b}. \quad (2.130)$$

Si ahora se define $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$, se tiene que resolver primero el sistema

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{b} \quad (2.131)$$

y después el sistema

$$\mathbf{Ux} = \mathbf{y}. \quad (2.132)$$

La ventaja de resolver un sistema matricial de esta forma es que al tratarse de matrices triangulares, su solución se encuentra fácilmente por sustitución hacia adelante. Para resolver el problema, se utilizó la subrutina `cgesv` de la librería LAPACK de Fortran.

La eficiencia de esparcimiento se calcula a partir de los valores de R_m , según la ecuación (2.111). Al sumar sobre los canales abiertos, $q_m < \left| \frac{\omega}{c} \right|$, se establece un indicador de la validez de la solución (Ruíz, 2012).

Capítulo 3

Resultados y Discusión

Utilizando las ecuaciones reducidas de Rayleigh es posible analizar el esparcimiento por superficies unidimensionales que soportan la excitación de PPS. En este capítulo se presentan algunos de los resultados obtenidos utilizando este método, demostrando sus capacidades en problemas de esparcimiento.

Primero, se examinan los resultados de la excitación de plasmones polaritones de superficie por rejillas senoidales de plata y se discute cómo se dio la excitación. También se presentan cálculos del campo cercano cuando ocurre la excitación en rejillas senoidales y en superficies conformadas por rejillas y planos. Asimismo, se analiza el campo cercano y el coeficiente diferencial de reflexión (CDR) cuando se incide sobre una superficie compuesta por una rejilla y un pozo gaussiano. Por último, se presentan las simulaciones de las anomalías de Wood al utilizar igualmente una rejilla senoidal de plata. Se discute la profundidad óptima de la rejilla para obtener anomalías más oscuras y se analizan los órdenes de difracción que excitan los PPS, que a su vez causan la aparición de las anomalías.

3.1 Excitación de PPS con Rejillas de Difracción

3.1.1 Campo Lejano

La excitación de plasmones polaritones de superficie en una muestra, tiene consecuencias en las propiedades de reflectancia de ésta. Se define la reflectancia como la potencia reflejada hacia el medio I , dividida por la potencia incidente sobre la superficie; su valor sirve entonces como indicador de la excitación de PPS. Para ejemplificar en qué medida la reflectancia de una superficie cambia en función de su geometría y de las propiedades de incidencia, se presentan los resultados obtenidos al estudiar tres rejillas senoidales de plata, cada una con un cierto período y profundidad.

La primera de ellas es una rejilla de período $T_{rej} = 600 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$, que al ser iluminada por una onda plana de longitud de onda $\lambda = 550 \text{ nm}$ ($\epsilon(\omega) = -12.96 + i0.43$) a diferentes ángulos de incidencia θ_0 , resulta en la reflectancia mostrada en la figura 3.1. Se muestra en línea continua la reflectancia cuando la onda tiene polarización p y en línea discontinua ($-\cdot$) para polarización s . Se observa que para polarización p , a un ángulo $\theta_0 = 7.2^\circ$, la reflectancia disminuye hasta el valor de 0.23, lo cual significa que hubo excitación de PPS. Además, en $\theta_0 = 52.2^\circ$ aparece un mínimo local con valor de 0.97. A partir de la ecuación de la rejilla se puede calcular el orden de difracción que excita los PPS; para $\theta_0 = 7.2^\circ$, el ángulo de esparcimiento, θ_s , calculado para el orden $m = 1$ es mayor a 90° , pues $\sin \theta_s = 1.04$, por lo tanto es este orden el causante de la excitación. Por otro lado, el mínimo en $\theta_0 = 52.2^\circ$ se debe a que el orden $m = -2$ también es evanescente, pues para este caso $\sin \theta_s = -1.04$. Para los parámetros de incidencia y de la rejilla utilizados, el número de onda de la luz incidente es $\omega/c = 10.47$ y el número de onda

de los PPS excitados es $k_{sp} = 10.81 = 1.04\omega/c$, lo cual ilustra el hecho de que la rejilla aporta un momento adicional para igualar el número de onda del PPS.

Al utilizar polarización s la reflectancia es prácticamente 1 para todos los ángulos de incidencia, lo que significa que los PPS sólo pueden ser excitados con polarización p .

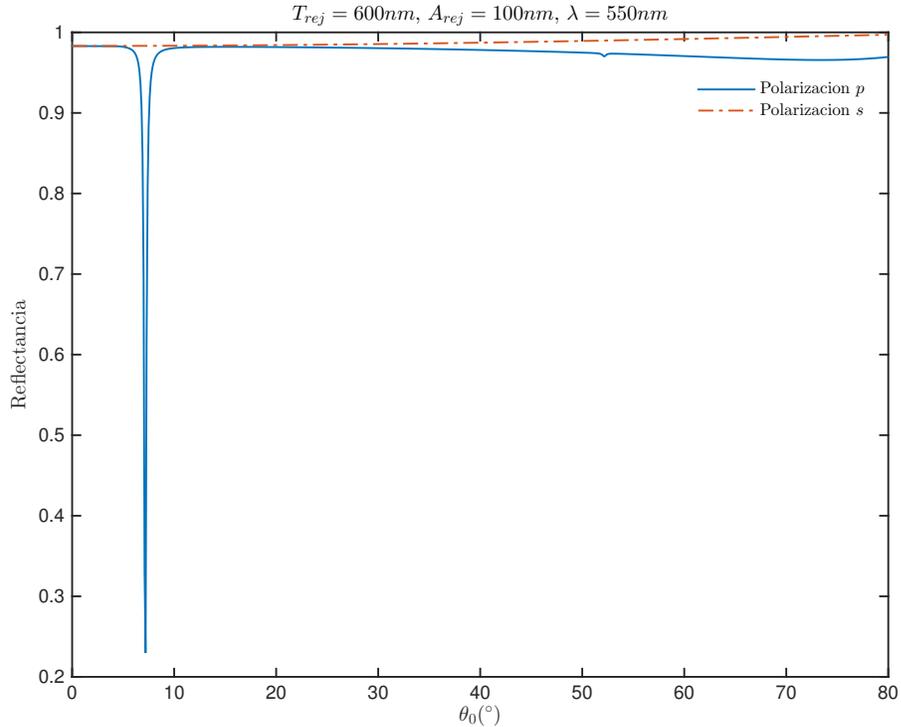


Figura 3.1: Reflectancia de una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 600 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$ cuando una onda plana de longitud de onda $\lambda = 550 \text{ nm}$ incide a un ángulo θ_0 .

Para la rejilla mencionada con anterioridad, se observa que existen dos ángulos de incidencia con los que es posible excitar PPS. Es decir, para la misma longitud de onda pueden encontrarse más de un ángulo con el que se exciten PPS. Esto sucede porque al aumentar el ángulo de incidencia, los órdenes de difracción cambian de

posición angular y un poco después de que alguno de ellos se vuelve evanescente se puede presentar la excitación. Sin embargo, para rejillas con otros parámetros se puede presentar el caso en el que sólo exista un valor de θ_0 en donde la reflectancia disminuya, por ejemplo, cuando el período de la rejilla es más pequeño que la longitud de onda utilizada.

En el caso anterior, se fijó un valor de λ y se varió θ_0 para encontrar el mínimo de reflectancia. Ya que existen dos parámetros de incidencia, es de interés analizar también el caso en el que se fija el ángulo de incidencia y se varía la longitud de onda. En la figura 3.2 se muestran los resultados de la reflectancia al incidir luz sobre la misma rejilla con ángulos de incidencia de a) $\theta_0 = 20^\circ$ y b) $\theta_0 = 30^\circ$ como función de la longitud de onda. Para el caso de polarización p y con ángulo de incidencia de $\theta_0 = 20^\circ$, la excitación ocurre en $\lambda = 445 \text{ nm}$ y la reflectancia en ese punto tiene un valor de 0.41. Para $\theta_0 = 30^\circ$ hay dos mínimos de reflectancia; uno de ellos tiene un valor de 0.73 y ocurre a una longitud de onda de $\lambda = 392 \text{ nm}$. El otro tiene un valor de 0.97 y se presenta en $\lambda = 471 \text{ nm}$. Estos valores indican la excitación de PPS sobre la rejilla. Al aumentar el ángulo de incidencia de 20° a 30° , la longitud de onda para la cual la excitación se presenta se vuelve más pequeña, y aparece otra excitación de PPS. La explicación de este comportamiento se presenta en los siguientes párrafos.

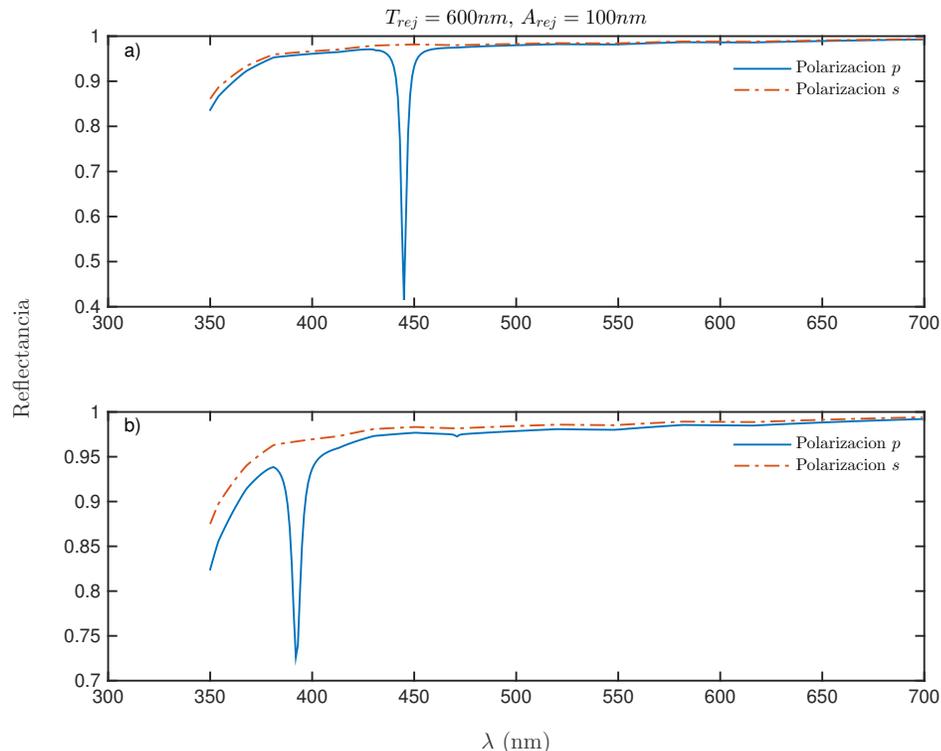


Figura 3.2: Reflectancia de una rejilla de difracción senoidal de plata de período $T_{rej} = 600 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$ en función de la longitud de onda cuando es iluminada por una onda plana con un ángulo de incidencia a) $\theta_0 = 20^\circ$ y b) $\theta_0 = 30^\circ$.

Conociendo la reflectancia total es posible encontrar los valores de λ y θ_0 para los cuales se presenta la excitación de PPS. No obstante, puede suceder que los PPS se desacoplen y se conviertan a ondas de volumen debido a la rugosidad de la superficie, por lo que la excitación no siempre se refleja en los valores de la reflectancia. Por este motivo es necesario analizar detenidamente los órdenes que son rasantes a la superficie y, así, tener otra manera de verificar la excitación de PPS.

En la figura 3.3 se muestra el comportamiento de la eficiencia de difracción en los diferentes órdenes de la misma rejilla en función de la longitud de onda para los dos ángulos de incidencia. Para facilitar la visualización de los resultados, la

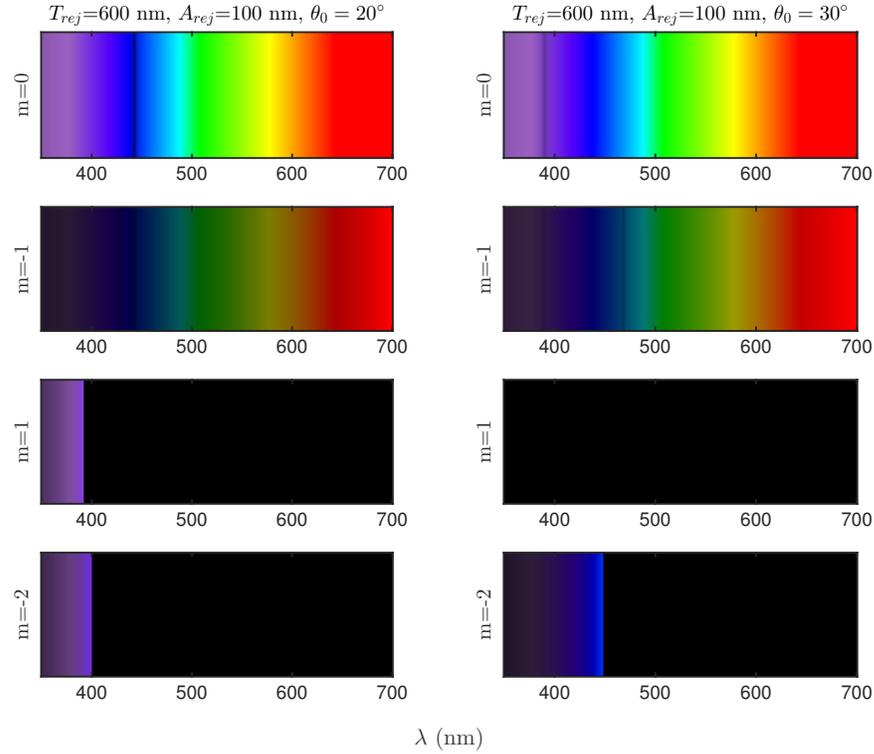


Figura 3.3: Comportamiento de los órdenes de difracción $m = 0, -1, 1, -2$ en función de la longitud de onda al iluminar la rejilla con una onda plana con polarización p y ángulos de incidencia $\theta_0 = 20^\circ$ y $\theta_0 = 30^\circ$. Se supone una rejilla senoidal de plata con período $T_{rej} = 600 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$.

longitud de onda se representa por su color RGB y la eficiencia por la intensidad o luminosidad. En el caso $\theta_0 = 20^\circ$, los órdenes $m = 1$ y $m = -2$ son evanescentes para la mayoría de las longitudes de onda y en el orden $m = -1$ es posible observar dos líneas oscuras que ocurren a $\lambda = 431 \text{ nm}$ y $\lambda = 445 \text{ nm}$. Estos dos mínimos en la eficiencia del orden $m = -1$ corresponden a la excitación de PPS por los órdenes $m = -2$ y $m = 1$, respectivamente. La franja oscura en $\lambda = 445 \text{ nm}$ corresponde al mínimo de reflectancia de la figura 3.2 a), que también aparece y se ve claramente en el orden $m = 0$. Por otro lado, la franja oscura en $\lambda = 431 \text{ nm}$ no aparece en la gráfica de la reflectancia. Esto muestra que al acoplarse un orden a un PPS hay

una redistribución de energía entre los modos, pero en algunos casos no se produce una disminución de energía. El PPS excitado puede desacoplarse en alguno de los órdenes de difracción y las consecuencias de estos efectos de esparcimiento múltiple son difíciles de predecir.

Los resultados que se obtienen al cambiar el ángulo de incidencia a $\theta_0 = 30^\circ$, se muestra en la figura 3.2 b). En este caso, hay un mínimo en $\lambda = 392 \text{ nm}$ en el que la eficiencia adquiere un valor de 0.73 y otro, apenas discernible, en $\lambda = 471 \text{ nm}$ con valor de 0.97. En la figura 3.3 se observa que para este ángulo de incidencia en el orden $m = 1$ siempre es evanescente y que para el orden $m = -2$ el intervalo de longitudes de onda en los que el orden es propagante es mayor que en el caso anterior. Éstos dos órdenes excitan PPS que se reflejan en dos mínimos de intensidad en el orden $m = -1$, en $\lambda = 392 \text{ nm}$ y en $\lambda = 471 \text{ nm}$, que corresponden a mínimos de reflectancia. Sin embargo, el PPS excitado por el orden $m = -2$ tampoco se refleja en la eficiencia del orden $m = 0$.

Ahora se toma una rejilla con período menor a la anterior para comparar cómo es la intensidad de los órdenes de difracción y la reflectancia total. Se estudia entonces una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 500 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 150 \text{ nm}$.

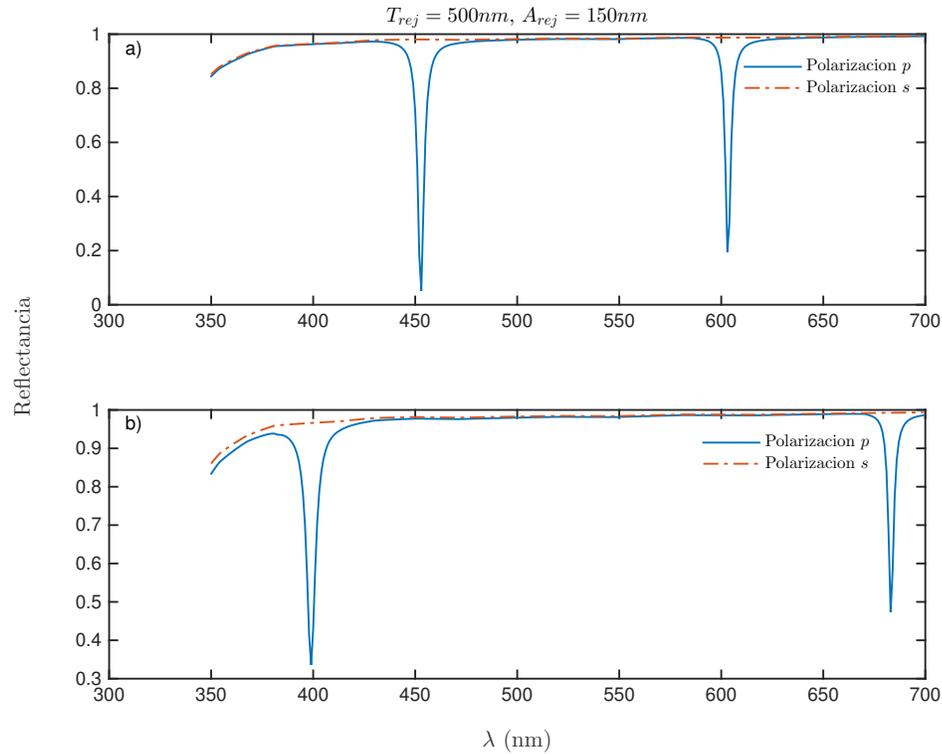


Figura 3.4: Reflectancia de una rejilla de difracción senoidal de plata de período $T_{rej} = 500 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 150 \text{ nm}$ cuando una onda plana de longitud de onda λ incide a un ángulo a) $\theta_0 = 10^\circ$ y b) $\theta_0 = 20^\circ$.

En la figura 3.4 se presenta la reflectancia de esta rejilla cuando se ilumina con una onda plana y ángulos de incidencia a) $\theta_0 = 10^\circ$ y b) $\theta_0 = 20^\circ$. Para $\theta_0 = 10^\circ$ hay dos mínimos de reflectancia correspondientes a $\lambda = 453 \text{ nm}$, con valor de 0.05, y a $\lambda = 603 \text{ nm}$, con valor de 0.19. Al incrementar el ángulo de incidencia a $\theta_0 = 20^\circ$, los mínimos de reflectancia se encuentran ahora en $\lambda = 399 \text{ nm}$, con valor 0.33, y en $\lambda = 683 \text{ nm}$ con valor 0.47. Este desplazamiento de los mínimos hacia lados opuestos indica un cambio angular de los órdenes de difracción que excitan los PPS. Para esta rejilla, se muestran en la figura 3.5 los órdenes de difracción $m = 0, -1, 1$. Para $\theta_0 = 10^\circ$ se observan dos franjas oscuras en el orden $m = 0$ en las mismas posiciones donde se ubican los mínimos de reflectancia de la figura 3.4; en el orden

$m = -1$ también está presente el mínimo de intensidad en $\lambda = 453 \text{ nm}$, que aparece en la reflectancia total. El orden $m = -1$ es el que excita el PPS en $\lambda = 603 \text{ nm}$ y el orden $m = 1$ excita el PPS en $\lambda = 453 \text{ nm}$. Al incrementar el ángulo de incidencia a $\theta_0 = 20^\circ$, el orden $m = -1$ se vuelve propagante para longitudes de onda más grandes, pero sigue siendo evanescente a más de 675 nm ; este orden es entonces el que excita el PPS a $\lambda = 683 \text{ nm}$ y el que causa la franja oscura en la misma posición en el orden $m = 0$. Por otro lado, el orden $m = 1$ es evanescente en todas sus longitudes de onda, y es éste el que excita el PPS en $\lambda = 399 \text{ nm}$. La franja correspondiente a esta excitación se observa en la misma longitud de onda en el orden $m = 0$. Ambas franjas oscuras se observan como mínimos de reflectancia en la figura 3.4, por lo que en este caso el análisis de la reflectancia concuerda con los PPS excitados. Una de las razones por las que esto sucede es porque sólo uno de los órdenes es totalmente propagante (orden $m = 0$), por lo que los PPS excitados por los órdenes $m = 1$ y $m = -1$ se manifiestan principalmente en este orden. Ya que el orden $m = 0$ es el que contribuye más a la reflectancia, una franja oscura en éste se traduce en un mínimo acentuado en la curva de la reflectancia.

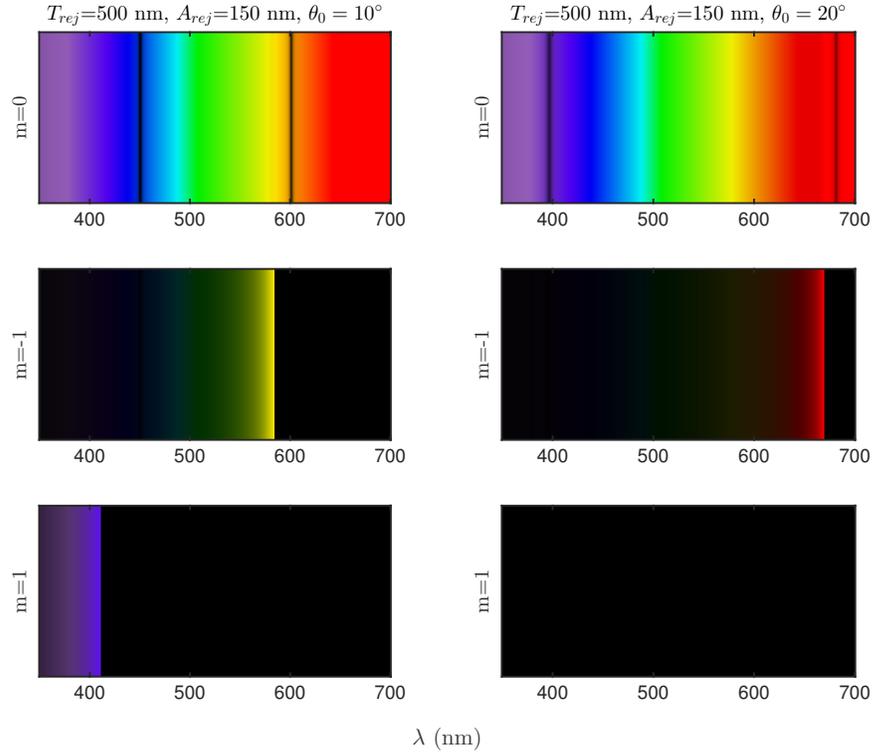


Figura 3.5: Comportamiento de los órdenes de difracción $m = 0, -1, 1$ en función de la longitud de onda al iluminar la rejilla con una onda plana con polarización p y ángulos de incidencia $\theta_0 = 10^\circ$ y $\theta_0 = 20^\circ$. Se supone una rejilla senoidal de plata con período $T_{rej} = 500 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 150 \text{ nm}$.

En la rejilla de período $T_{rej} = 600 \text{ nm}$, los órdenes $m = 0$ y $m = -1$ son propagantes en todas sus longitudes de onda. La excitación de PPS se observa en ambos como franjas oscuras. Sin embargo, a diferencia de la rejilla de período $T_{rej} = 500 \text{ nm}$, en la curva de reflectancia se observa sólo el mínimo que corresponde a la franja oscura en el orden $m = 0$. Similarmente, esto sucede porque el orden $m = 0$ hace una aportación mucho mayor a la reflectancia en comparación con el orden $m = -1$. Ya que el período $T_{rej} = 500 \text{ nm}$ es menor a la mayoría de las longitudes de onda utilizadas, se tiene una cantidad menor de órdenes propagantes que con la rejilla de período $T_{rej} = 600 \text{ nm}$.

Por último, se presenta la reflectancia al utilizar una rejilla de difracción de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y profundidad $A_{rej} = 100 \text{ nm}$. Este período es más grande que el de las dos rejillas estudiadas con anterioridad y mayor a casi todas las longitudes de onda utilizadas, por lo que se espera que los órdenes sean propagantes en más longitudes de onda. En la figura 3.6 se muestra la reflectancia al iluminar esta rejilla con una onda plana con un ángulo $\theta_0 = 4^\circ$ y variando la longitud de onda. En b) se presenta igualmente la reflectancia al iluminar con una onda plana con un ángulo $\theta_0 = 10^\circ$, y en c) al incidir con un haz con un ángulo de incidencia $\theta_0 = 29^\circ$. El valor del mínimo de reflectancia para el primer caso es de 0.16 y se presenta a la longitud de onda $\lambda = 653 \text{ nm}$. Para el segundo ángulo de incidencia el mínimo se encuentra en $\lambda = 587 \text{ nm}$ con valor de 0.19 y para el tercer caso el mínimo de reflectancia tiene un valor de 0.63 y aparece a una longitud de onda $\lambda = 422 \text{ nm}$. Como ya se ha mencionado, estos mínimos de reflectancia indican la excitación de PPS en la superficie utilizada.

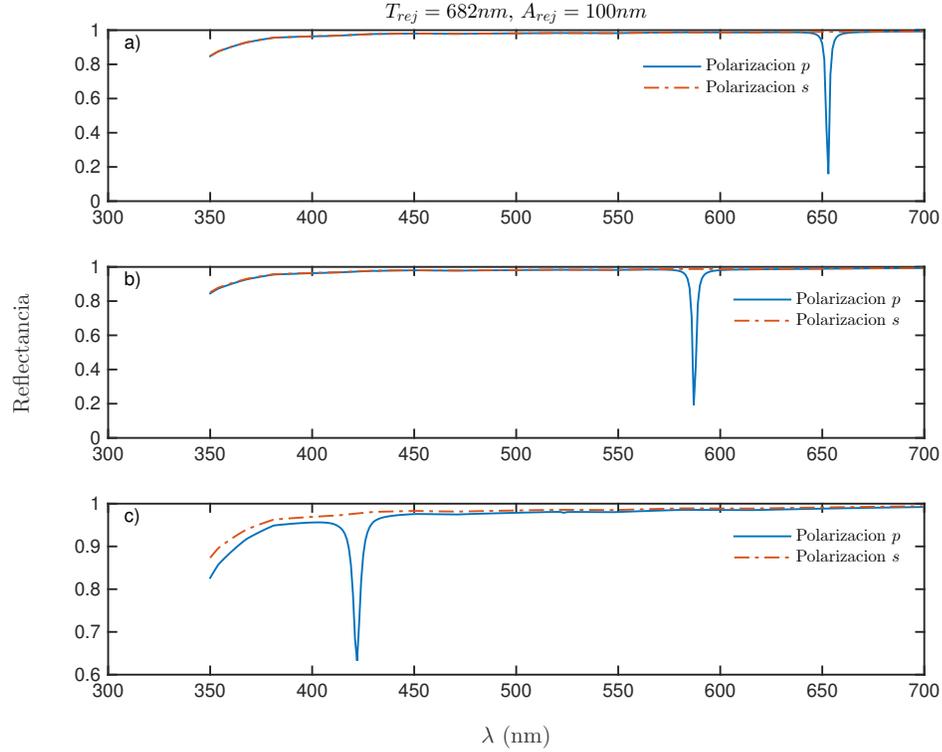


Figura 3.6: Reflectancia de una rejilla de difracción senoidal de plata de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$ cuando una onda plana de longitud de onda λ incide a un ángulo a) $\theta_0 = 4^\circ$, b) $\theta_0 = 10^\circ$ y b) $\theta_0 = 29^\circ$.

El orden que excita los PPS para los ángulos de incidencia $\theta_0 = 4^\circ$ y $\theta_0 = 10^\circ$ es el orden $m = 1$, cuyo ángulo de esparcimiento es $\theta_s > 90^\circ$, pues para $\lambda = 652 \text{ nm}$ y $\theta_0 = 4^\circ$, $\sin \theta_s = 1.03$ y para $\lambda = 587 \text{ nm}$ y $\theta_0 = 10^\circ$, $\sin \theta_s = 1.03$. Al incidir a la misma rejilla con $\lambda = 422 \text{ nm}$ y $\theta_0 = 29^\circ$, se excita un PPS debido a que el orden $m = -2$ es rasante a la superficie, pues $\sin(\theta_s) = -1.05$. En la sección 3.4 se presentan las simulaciones de los órdenes de difracción para una rejilla del mismo período pero con profundidad $A_{rej} = 31 \text{ nm}$. A pesar de que la profundidad es diferente a la discutida, la posición de los órdenes de difracción no cambia, por lo que se pueden tomar estos resultados para una explicación cualitativa.

En las siguientes secciones se presentarán principalmente resultados utilizando la rejilla con período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$, por lo que una discusión más exhaustiva se presentará a continuación.

3.1.2 Campo Cercano

Una vez calculado el espectro angular del campo esparcido, además de las propiedades del campo en la región del campo lejano, también es posible calcular la intensidad del campo cercano. La intensidad se define en el campo lejano como el módulo al cuadrado del campo magnético o del campo eléctrico. Sin embargo, en el campo cercano sí existe una diferencia entre ambos casos. Por ejemplo, al utilizar polarización p el campo magnético se maximiza en la superficie de un metal, mientras que el campo eléctrico se minimiza. Esto se puede entender al considerar un metal como la plata como una aproximación cercana a un conductor perfecto. En este caso, el campo eléctrico debe ser cero en la superficie (componentes E_x y E_z), pues de no ser así se generarían, por ejemplo, corrientes infinitas. Por el contrario, el campo magnético debe ser máximo en la superficie, como se puede ver de las ecuaciones (2.42) y (2.44). El campo cercano mostrado en las siguientes figuras es entonces el campo magnético, y se referirá a la intensidad como el módulo al cuadrado de este campo.

Para iniciar la discusión, se presenta el caso de reflexión por una superficie plana. En la figura 3.7 se muestra la intensidad del campo magnético ($|H|^2$) en la vecindad del plano. Se incide con una onda plana de $\lambda = 652 \text{ nm}$ y un ángulo $\theta_0 = 0^\circ$ sobre una superficie de plata. Se observa un patrón de franjas de interferencia llamadas franjas de Wiener, debido a la interferencia entre los campos incidente y

reflejado, que tienen amplitudes similares y viajan en direcciones opuestas. Para un conductor perfecto el campo eléctrico total debe ser cero en la superficie, indicando que los campos incidente y reflejado están fuera de fase. Por otro lado, el campo magnético es proporcional a la derivada del campo eléctrico a lo largo de la normal a la superficie. En consecuencia el campo magnético se maximiza sobre la superficie. Se observa que para el caso de la plata, la superficie se encuentra en una franja brillante del patrón de interferencia. Los máximos de intensidad tienen una periodicidad de $\lambda/2$ en la dirección z , como se aprecia en la figura.

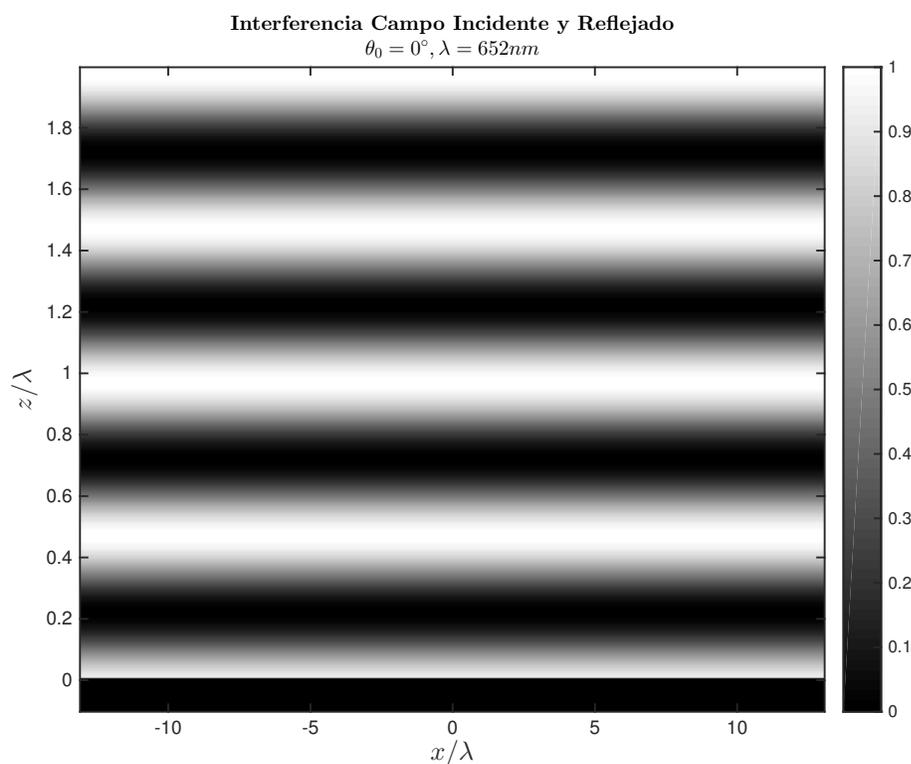


Figura 3.7: Intensidad del campo magnético ($|H|^2$) que muestra la interferencia del campo incidente y reflejado al incidir con una onda plana de $\lambda = 652 \text{ nm}$ a un ángulo $\theta_0 = 0^\circ$ sobre una superficie plana de plata.

En las siguientes figuras se presentan cálculos de campo cercano para rejillas de difracción, en situaciones en las que se excitan PPS. Estos cálculos corresponden al

campo cercano de la rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$ que se estudió en la sección 3.1.1. De acuerdo a la figura 3.6 a), al iluminar esta rejilla con una onda plana con un ángulo de incidencia $\theta_0 = 4^\circ$, se excita un PPS a una longitud de onda $\lambda = 652 \text{ nm}$. En la figura 3.8 se presenta la intensidad del campo magnético en la vecindad de la rejilla al ser iluminada con estas características. En la figura 3.9, se presentan cálculos del campo cercano para la misma rejilla, pero para una longitud de onda de $\lambda = 587 \text{ nm}$ y un ángulo de incidencia $\theta_0 = 10^\circ$, pues según los cálculos de reflectancia mostrados en la figura 3.6 b) con estos parámetros hay excitación de PPS. Similarmente, en la figura 3.10 se muestra el campo cercano al iluminar la rejilla con una onda plana de longitud de onda de $\lambda = 422 \text{ nm}$ y con un ángulo de incidencia $\theta_0 = 29^\circ$. La intensidad en cada punto (x, z) de las tres figuras se normalizó respecto al valor máximo de intensidad, el cual se presentó para $\lambda = 653 \text{ nm}$ y $\theta_0 = 4^\circ$, para hacer una comparación relativa entre los campos.

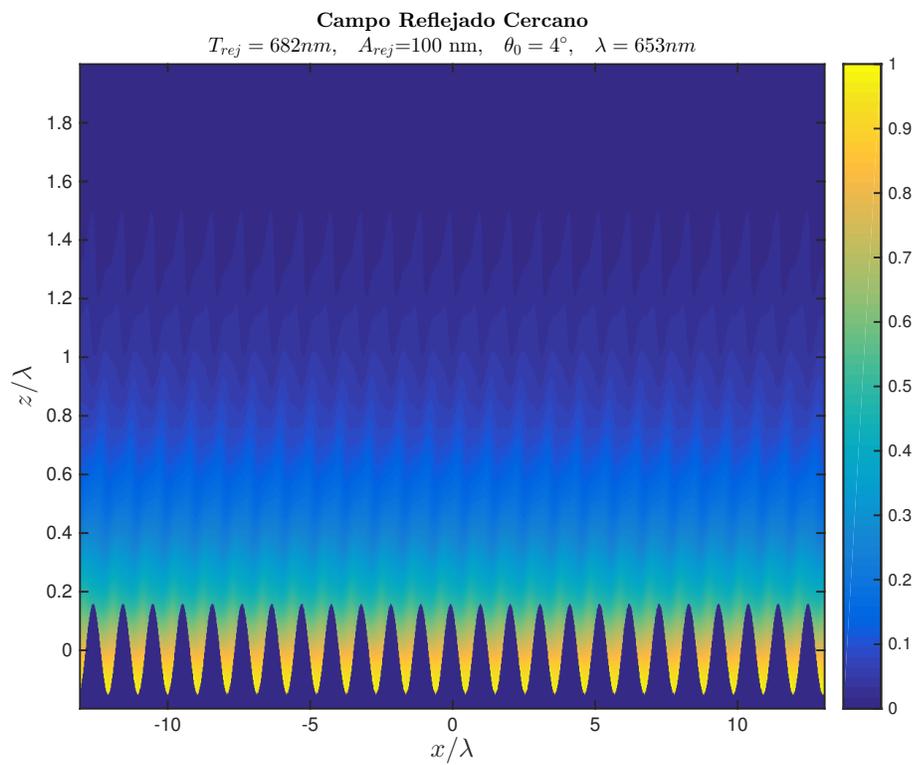


Figura 3.8: Intensidad del campo magnético cercano generado por una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 682 nm$ y amplitud $A_{rej} = 100 nm$ al ser iluminada por una onda plana de longitud de onda $\lambda = 652 nm$ con un ángulo de incidencia $\theta_0 = 4^\circ$.

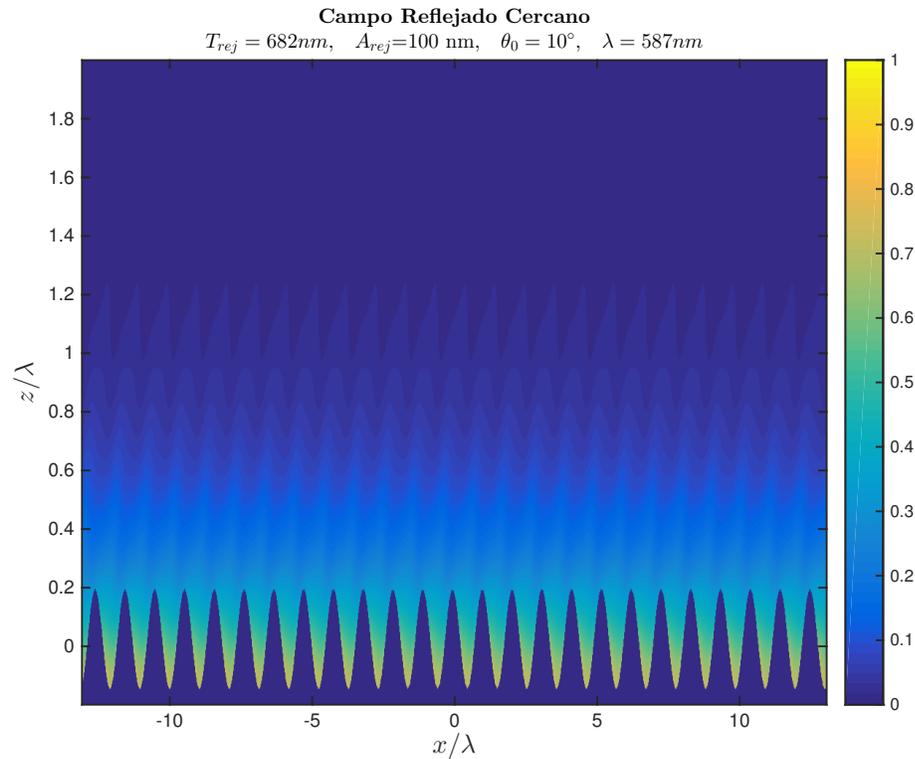


Figura 3.9: Mismos parámetros que la figura 3.8 pero con longitud de onda $\lambda = 587 nm$ y ángulo de incidencia $\theta_0 = 10^\circ$. La intensidad está normalizada respecto al máximo de intensidad de la figura 3.8.

De acuerdo a la figura 3.6, para $\lambda = 653 nm$ y $\theta_0 = 4^\circ$ la reflectancia es de 0.16 y es la más pequeña de los tres tipos de incidencia que se utilizaron, por lo que el campo cercano es más intenso debido a la excitación más eficiente de PPS. Por otro lado, para $\lambda = 587 nm$ y $\theta_0 = 10^\circ$, la reflectancia es mayor (0.19) y el campo cercano es menos fuerte en comparación con el otro caso. Por último, para $\lambda = 422 nm$ y $\theta_0 = 29^\circ$ la reflectancia es 0.63. En este último caso el PPS es más débil que las otras excitaciones, como se observa en la figura 3.10. En los tres casos el campo es más intenso en las cercanías de la superficie y decae al alejarse de ella, lo que ilustra el hecho de que los PPS se propagan en la interfaz dieléctrico-metal.

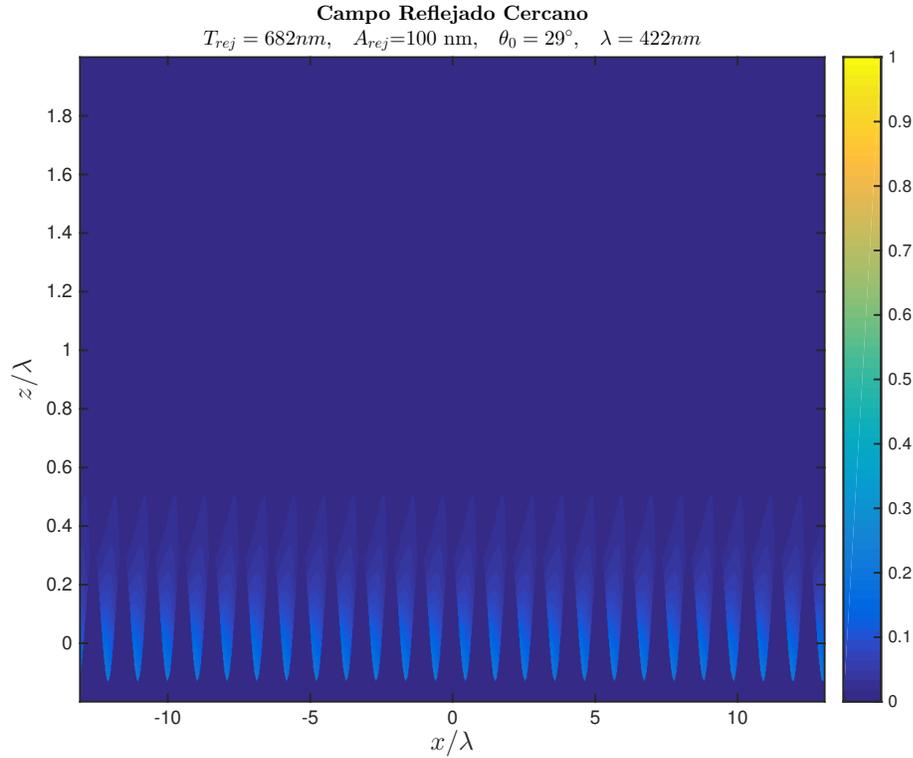


Figura 3.10: Mismos parámetros que la figura 3.8 pero con longitud de onda $\lambda = 422 nm$ y ángulo de incidencia $\theta_0 = 29^\circ$. La intensidad está normalizada respecto al máximo de intensidad de la figura 3.8.

Para $\lambda = 653 nm$ y $\theta_0 = 4^\circ$ el orden $m = 1$ es el que excita los PPS pues según la ecuación de la rejilla, $\sin \theta_s = 1.03$, y el ángulo de esparcimiento es $\theta_s > 90^\circ$. Para $\lambda = 587 nm$ y $\theta_0 = 10^\circ$, $\sin \theta_s = 1.03$. Por el contrario, para $\lambda = 522 nm$ y $\theta_0 = 29^\circ$ se excita un PPS debido a que el orden $m = -2$ es rasante a la superficie, pues $\sin(\theta_s) = -1.05$. Ya que, en general, el orden de difracción $m = 1$ es el que transporta la mayor energía, la excitación de PPS con éste es mejor que con el orden $m = -2$, lo cual se observa en los valores de la reflectancia y en los cálculos del campo cercano.

3.2 Excitación de PPS en Segmentos Planos por Medio de Rejillas

En esta sección se estudia el campo cercano al excitarse PPS en superficies conformadas por una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 682nm$ y amplitud $A_{rej} = 100 nm$, y un plano. La longitud total de la superficie es igual a cien veces el período de la rejilla, y la longitud de la rejilla que ayuda a excitar los PPS tiene longitudes de $25 T_{rej}$ y $50 T_{rej}$, es decir, un cuarto y la mitad de la longitud de la rejilla que se utilizó en las secciones anteriores. Estos cálculos sirven para analizar cómo cambia la excitación de PPS al cambiar la longitud de la rejilla y también para observar cómo es el campo cercano de los PPS en un plano. Los parámetros de incidencia son algunos de los utilizados en la sección 3.1.2, por lo que se podrán comparar los resultados obtenidos al cambiar la longitud de la rejilla.

En la figura 3.11 se muestra el campo esparcido por una superficie conformada por la rejilla antes mencionada pero de longitud $25 T_{rej}$, y un plano de longitud $75 T_{rej}$ al ser iluminada por una onda plana de longitud de onda $\lambda = 653 nm$ con un ángulo de incidencia $\theta_0 = 4^\circ$. La reflectancia resultante es 0.91. Similarmente, en la figura 3.12 se presenta el campo cercano de la misma superficie al ser iluminada por una onda plana de longitud de onda $\lambda = 587 nm$ con un ángulo de incidencia $\theta_0 = 10^\circ$. En este caso, la reflectancia es 0.89. Como ya se mencionó en la sección 3.1.2, se excitan PPS debido a que el orden $m = 1$ es rasante a la superficie. Ambos mapas de intensidad están normalizados respecto a la intensidad máxima resultante, que se obtuvo cuando se utilizó $\lambda = 587 nm$ y $\theta_0 = 10^\circ$.

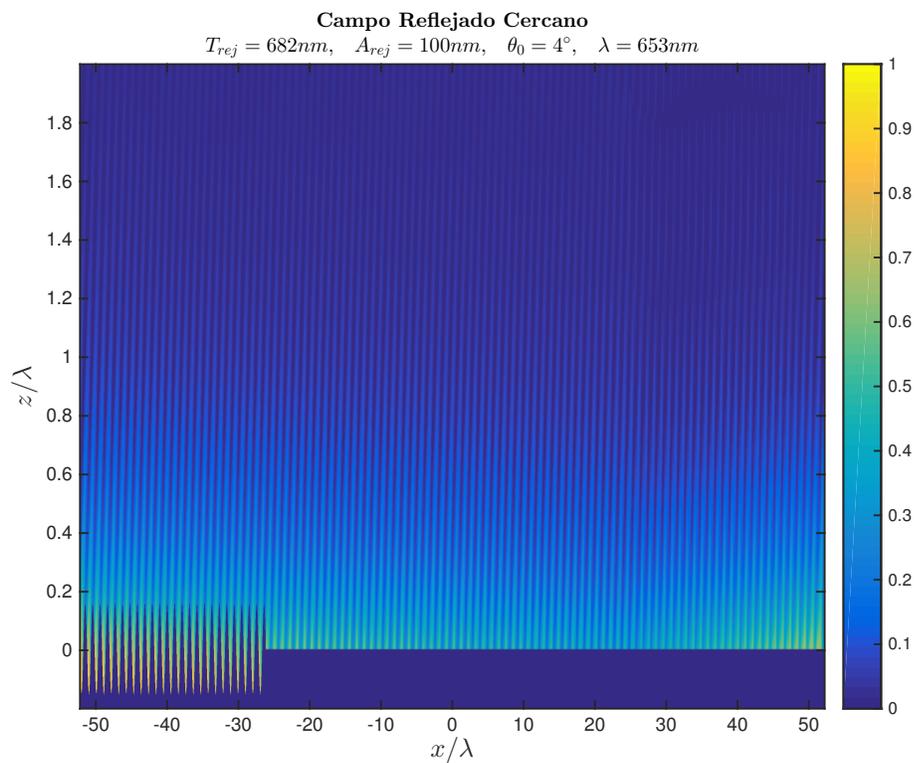


Figura 3.11: Campo reflejado esparcido de una onda plana de longitud de onda $\lambda = 653 \text{ nm}$ incidiendo a un ángulo $\theta_0 = 4^\circ$ sobre una superficie conformada por una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$, de longitud $25 T_{rej}$, y un plano de longitud $75 T_{rej}$.

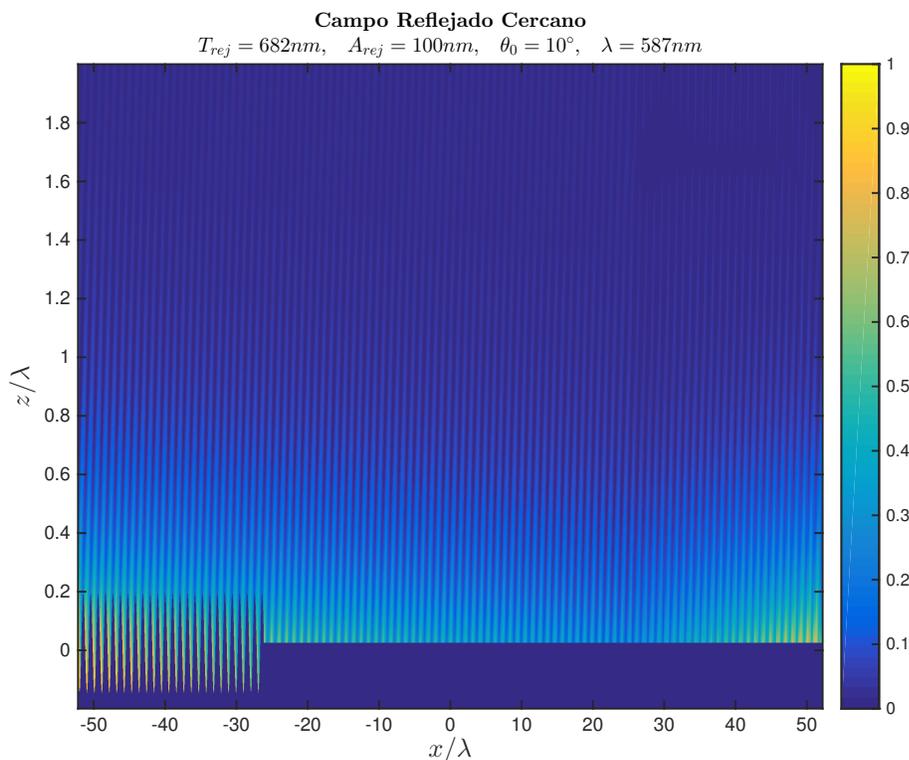


Figura 3.12: Mismos parámetros que la figura 3.11 pero con una onda plana de longitud de onda $\lambda = 587 \text{ nm}$ incidiendo con un ángulo $\theta_0 = 10^\circ$.

Al observar ambas figuras (3.11 y 3.12), no se puede establecer fácilmente cuál de las dos excitaciones es más intensa en el campo cercano. Esto se debe a que las reflectancias para ambos casos son similares, por lo que la excitación también lo es. En ambas figuras se observa que al final del plano, el campo es más intenso que a sus alrededores. Ya que la superficie se repite infinitamente, lo que se observa es la excitación del PPS debido a la rejilla de la superficie adyacente.

Ahora se presenta el caso en el que la longitud de la rejilla es de $50 T_{rej}$ y la del plano $50 T_{rej}$. En la figura 3.13 se muestra el campo generado al incidir con una longitud de onda $\lambda = 653 \text{ nm}$ con un ángulo de incidencia $\theta_0 = 4^\circ$, y en la figura 3.14 se presenta el campo al iluminar con una onda plana de longitud de onda $\lambda = 587$

nm con un ángulo de incidencia $\theta_0 = 10^\circ$. La reflectancia para el primer caso es de 0.71 y para el segundo 0.68. A pesar de que la reflectancia más pequeña se dio para $\lambda = 587 nm$ y $\theta_0 = 10^\circ$, el máximo de intensidad de los dos campos cercanos se presentó para $\lambda = 653 nm$ y $\theta_0 = 4^\circ$, por lo que la normalización se hizo con respecto a éste.

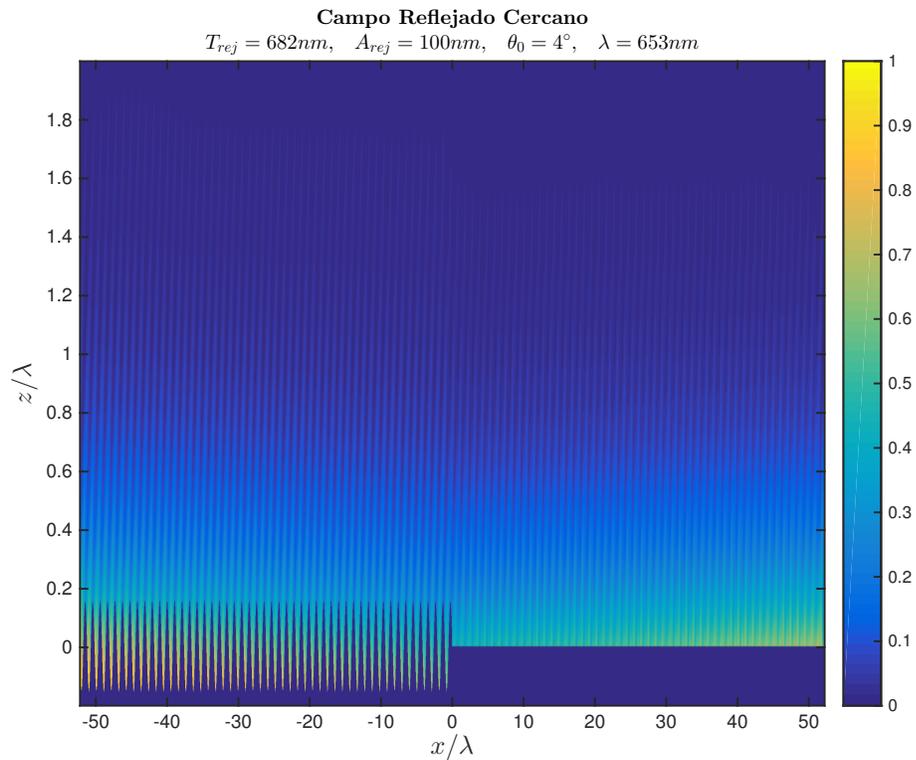


Figura 3.13: Campo reflejado esparcido de una onda plana de longitud de onda $\lambda = 653 nm$ incidiendo a un ángulo $\theta_0 = 4^\circ$ sobre una superficie conformada por una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 682 nm$ y amplitud $A_{rej} = 100 nm$, de longitud $50 T_{rej}$, y un plano de longitud $50 T_{rej}$.

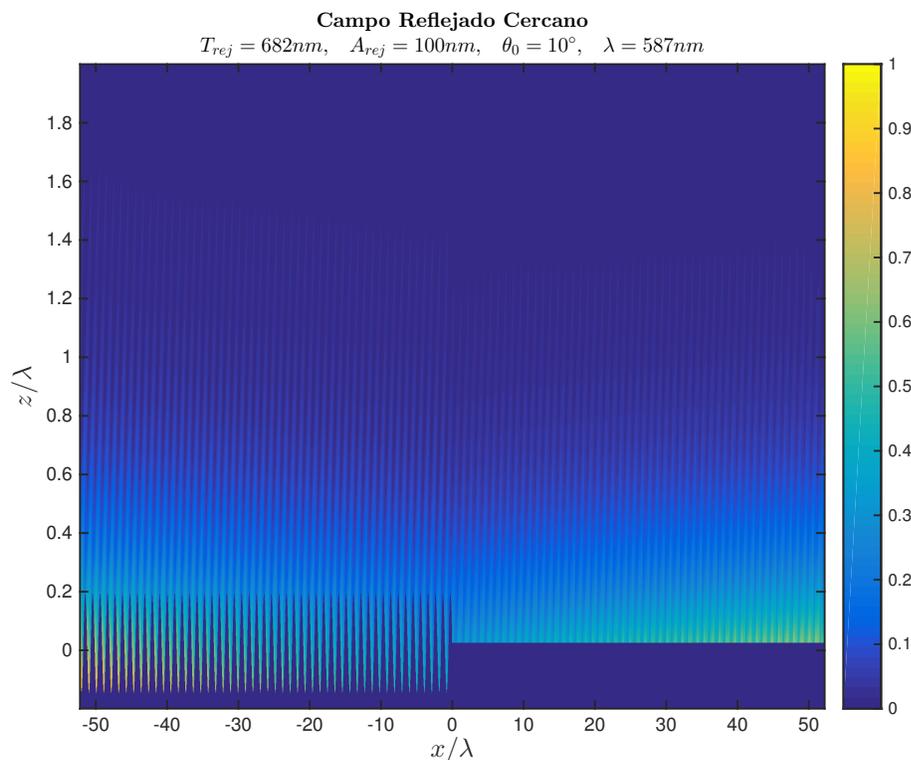


Figura 3.14: Mismos parámetros que la figura 3.13 pero con una onda plana de longitud de onda $\lambda = 587 \text{ nm}$ incidiendo con un ángulo $\theta_0 = 10^\circ$.

En ambas figuras (3.13 y 3.14) se sigue observando el campo del PPS de la superficie adyacente al finalizar el plano de propagación, pero para esta longitud es más intenso pues de acuerdo a la reflectancia la excitación es mejor que para la longitud de $25 T_{rej}$.

De acuerdo a las reflectancias resultantes para las longitudes $25 T_{rej}$, $50 T_{rej}$ y $100 T_{rej}$ (sección 3.1.2) la longitud de la rejilla juega un papel importante en la excitación pues, en general, entre más larga sea ésta, la excitación es mejor.

3.3 Esparcimiento de PPS por Estructuras Superficiales

La rugosidad de una rejilla de difracción puede aportar el momento necesario para la excitación de PPS por ondas planas incidiendo desde el vacío a un cierto ángulo θ_0 . Un perfil superficial más general se puede considerar, por medio del análisis de Fourier, como una superposición de perfiles senoidales. Podemos ver entonces que, si el perfil tiene estructura comparable con λ , habrá alguna componente que sustituya las condiciones para excitar PPS. De la misma forma, por reciprocidad, es posible concluir que las estructuras superficiales comparables con λ también pueden desacoplar PPS, convirtiéndolos a ondas de volumen.

Para estudiar este desacoplamiento, se consideran superficies que contienen, tanto rejillas de difracción que permiten acoplar luz a PPS, como estructuras que desacoplan y permiten observar este esparcimiento en el campo lejano.

Se considera el caso de una superficie conformada por una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$ más un pozo gaussiano de profundidad $A_p = 150 \text{ nm}$ y ancho $a_p = 4A_p$. La superficie se ilumina desde el vacío con una onda plana de longitud de onda $\lambda = 587 \text{ nm}$ y polarización p , con un ángulo $\theta_0 = 10^\circ$. La reflectancia total que se tiene en este caso es de 0.193, lo cual indica que se tiene una buena excitación de PPS. La reflectancia cuando se incide la misma rejilla sin defecto es 0.191, como se vio en la sección 3.1.1. La diferencia entre ambas reflectancias indica que el pozo está esparciendo parte de la luz incidente y del PPS. Como se ha discutido en las secciones anteriores, para esta rejilla y parámetros de incidencia, los PPS están siendo excitados por el orden $m = 1$. La intensidad

del campo cercano asociada al campo magnético para esta situación se muestra en la figura 3.15 a). Se observa que adentro del pozo el campo es más intenso, lo cual indica que hay una concentración del campo. En el inciso b) de la misma figura se muestra la intensidad del campo cercano correspondiente a una superficie formada por un plano y un pozo gaussiano con las mismas dimensiones ($A_p = 150 \text{ nm}$ y ancho $a_p = 4A_p$) e iluminada de la misma forma que la superficie considerada en a). La reflectancia para este caso es 0.99, es decir, casi toda la luz incidente es reflejada. En la misma posición del pozo gaussiano existe una franja brillante, resultado de la interferencia del campo reflejado por el plano y la luz esparcida por el pozo.

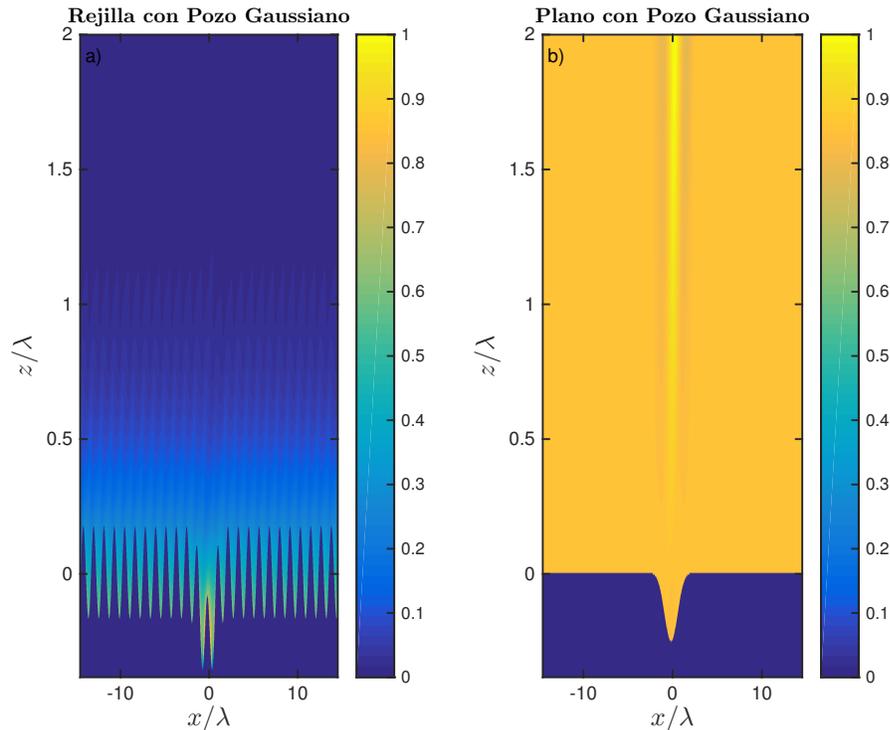


Figura 3.15: a) Campo reflejado esparcido por una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 100 \text{ nm}$ más un pozo gaussiano de profundidad $A_p = 150 \text{ nm}$ y ancho $a_p = 4A_p$ al ser iluminada por una onda plana de longitud de onda $\lambda = 587 \text{ nm}$ con ángulo de incidencia $\theta_0 = 10^\circ$. b) Campo reflejado de la misma onda plana por un plano con un pozo gaussiano de profundidad $A_p = 150 \text{ nm}$ y ancho $a_p = 4A_p$.

La superficie de la figura 3.15 a) puede ser vista como la suma de un pozo gaussiano (misma figura, inciso b)) más una rejilla (figura 3.9). En primera aproximación, se podría entonces considerar que la intensidad esparcida en el campo lejano (CDR) contiene una contribución de cada una de estas componentes del perfil superficial. Sin embargo, debido a la fuerte excitación de PPS por la rejilla, también debe aparecer una contribución debido a la interacción entre el PPS y el pozo gaussiano.

En la figura 3.16 se muestra el CDR para los dos casos mostrados en la figura 3.15. Para ambas curvas del CDR se omitieron la componente especular y el orden $m = -1$. El resto del CDR para la rejilla es prácticamente cero. La curva punteada ($-\cdot$) representa el esparcimiento de la luz incidente por el pozo gaussiano; si esto se observara experimentalmente, se vería la luz esparcida alrededor de la componente especular ($\theta_s = 10^\circ$), en un rango de -20° a 40° , aproximadamente. La curva en línea continua representa el CDR de la rejilla con el pozo; similarmente, el esparcimiento alrededor de la componente especular en el mismo rango angular está presente, lo que significa que este pico representa el esparcimiento de la luz incidente por el defecto. Adicionalmente, aparece un pico gaussiano entre el rango de 20° y 90° . Esta curva representa el esparcimiento del PPS por el defecto. Si se realizara este experimento en el laboratorio se observaría, además de la componente especular y del orden $m = -1$ (en -43°), el esparcimiento del PPS hacia el lado derecho de la componente especular.

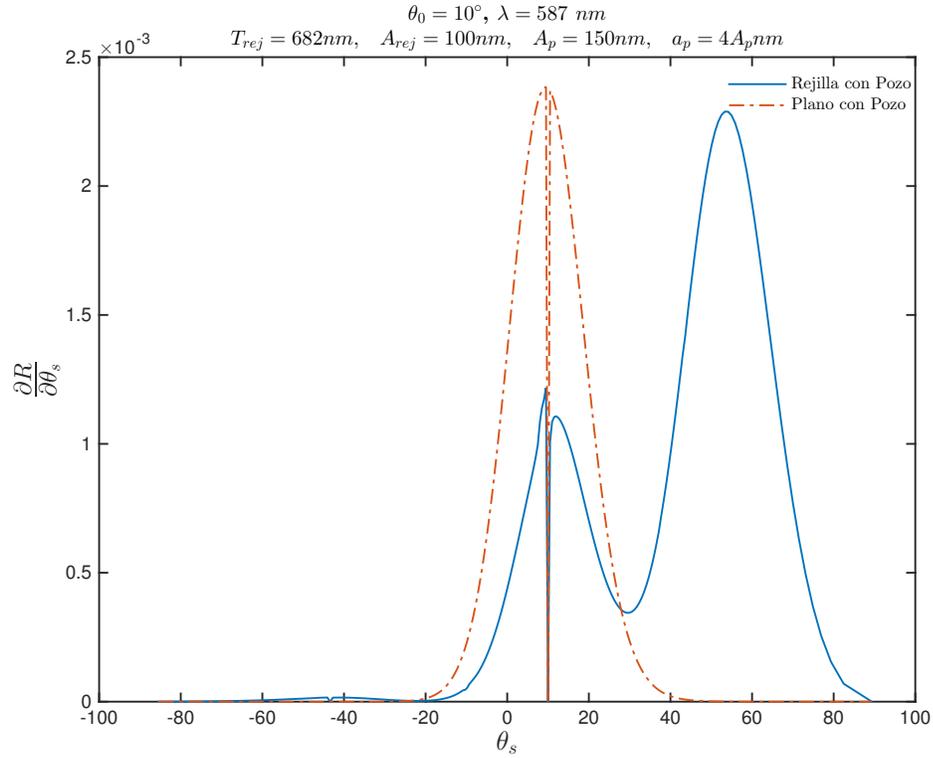


Figura 3.16: Coeficiente diferencial de reflexión (sin componente especular y sin orden $m = -1$) para la figura 3.15 a), línea continua, y b), línea punteada.

En la curva continua el pico alrededor de la componente especular es menor al pico de la curva punteada. Esto podría indicar que la luz incidente sobre la rejilla con el defecto se esparce poco, pues parte de la luz se acopla a PPS, que a su vez se desacopla al encontrarse con el defecto.

Se muestra en la figura 3.17 el campo esparcido por superficies similares a las del ejemplo anterior, pero con el ancho del pozo $a_p = 2A_p$. En a), el campo también es más intenso dentro del defecto, y la reflectancia tiene un valor de 0.195, es decir, más grande que cuando el pozo es más ancho. Debido a que el ancho del pozo es menor a la longitud de onda incidente, este defecto puede excitar PPS. En b) se muestra el campo esparcido por el pozo. Se observa el resultado de la interferencia

del campo causado por los PPS y el campo reflejado.

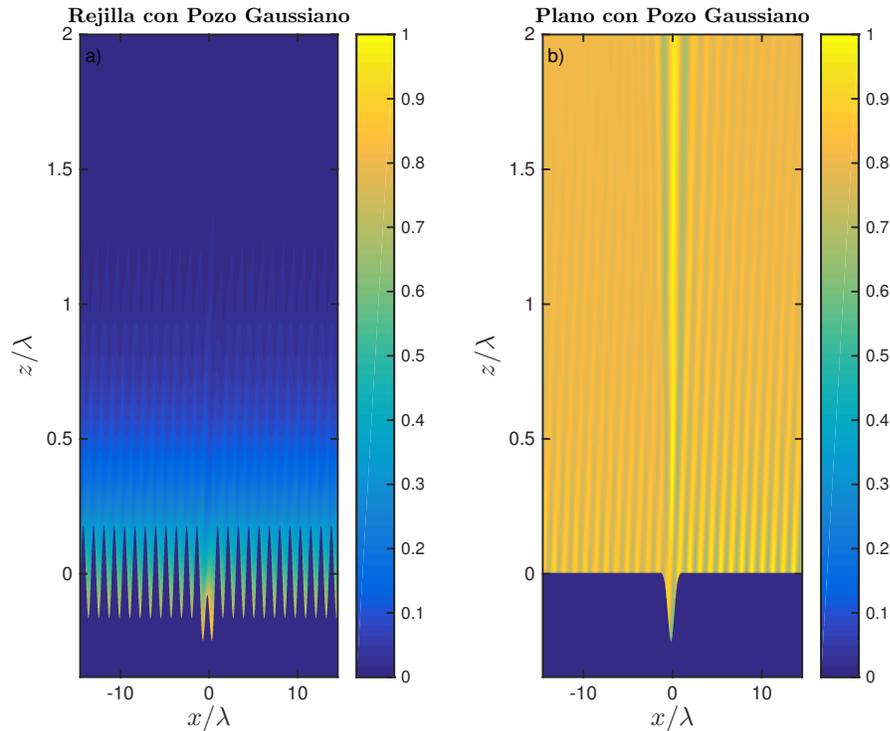


Figura 3.17: Mismos parámetros que la figura 3.15 pero con $a_p = 2A_p$.

En la figura 3.18 se ilustra el CDR para ambas superficies. En este caso, el esparcimiento de la luz incidente por el pozo (curva punteada) se extiende en un rango angular más amplio. Por otro lado, en la curva de línea continua se muestra el CDR para la rejilla con el defecto. Alrededor de 30° se extiende una sola curva gaussiana, en vez de dos curvas como cuando el pozo es el doble de ancho, lo que sugiere que la luz incidente esparcida y el esparcimiento del PPS se traslapan (desde -40° hasta 80°) y se pueden observar sin poder diferenciar la una de la otra.

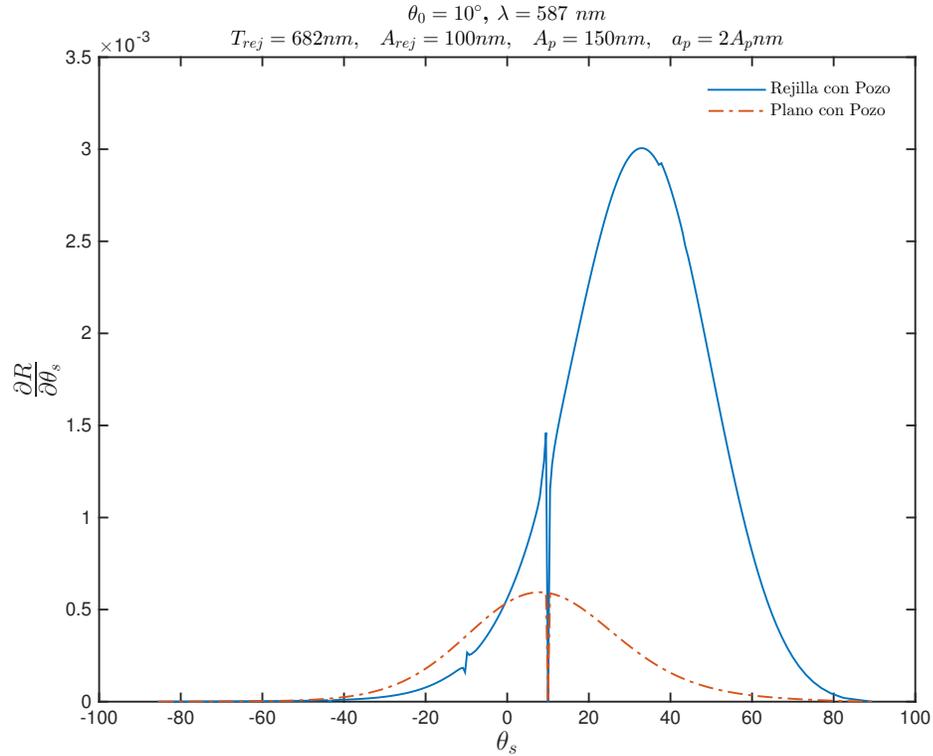


Figura 3.18: Mismos parámetros que la figura 3.16 pero con $a_p = 2A_p$.

Por último, se analiza el esparcimiento de la misma onda plana sobre la misma rejilla utilizada en los dos ejemplos anteriores, pero con un pozo de altura $A_p = 200 \text{ nm}$ y ancho $a_p = 6A_p$. Los campos cercanos reflejados se muestran en la figura 3.19. Para la rejilla con el defecto, la reflectancia es 0.194 y para el plano con el defecto, 0.99. En la figura 3.20 se presenta el CDR calculado para ambas superficies. Para el plano con el pozo, el CDR se extiende en un rango muy corto de ángulos. Para la rejilla con el pozo, se presenta una curva en la misma posición que para un plano y un pozo, y se extiende en un rango angular similar. Adicionalmente, alrededor de 70° se observa otra curva que representa el esparcimiento del PPS por el pozo. Las dos curvas están suficientemente separadas, lo que permite identificar fácilmente la contribución de la interacción del PPS con el surco.

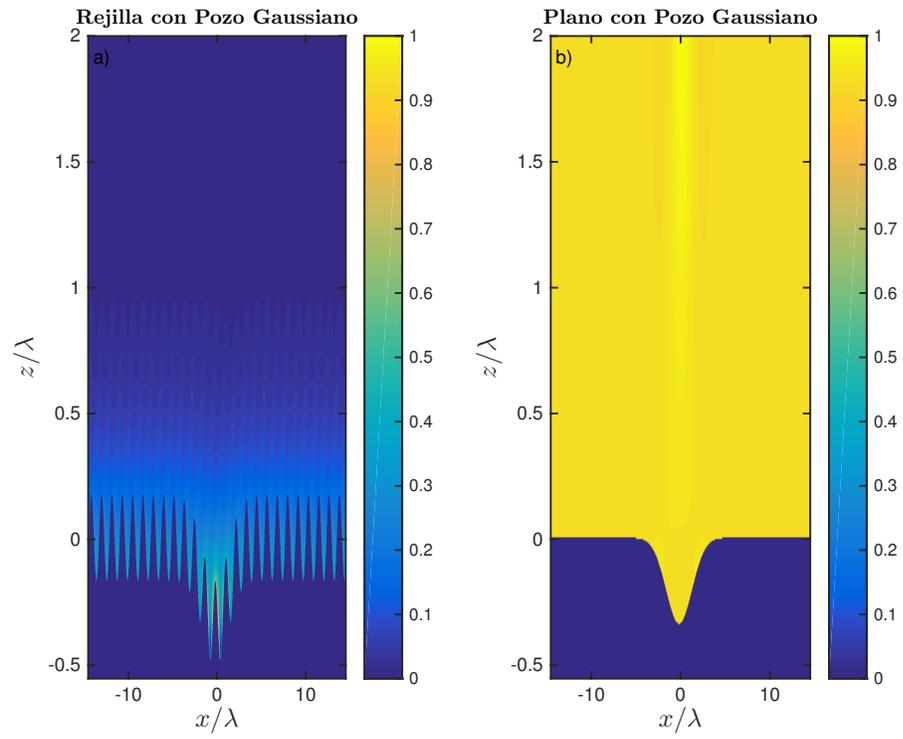


Figura 3.19: Mismos parámetros que la figura 3.15 pero con $A_p = 200 \text{ nm}$ y $a_p = 6A_p$.

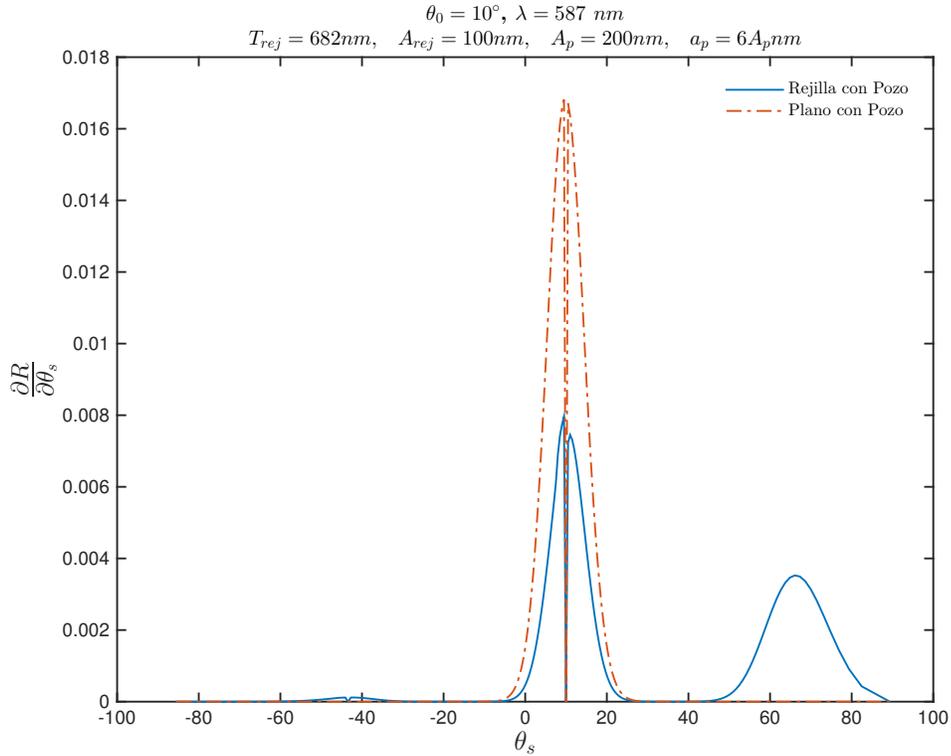


Figura 3.20: Mismos parámetros que la figura 3.16 pero con $A_p = 200 \text{ nm}$ y $a_p = 6A_p$.

De los tres diferentes tipos de pozos gaussianos utilizados, el de profundidad $A_p = 200 \text{ nm}$ y ancho $a_p = 6A_p$ es el que permite discriminar más fácilmente entre las aportaciones del esparcimiento de la luz incidente y del PPS.

También es posible separar más estas curvas modificando el período de la rejilla de tal forma que la longitud de onda a la cual se excitan los PPS sea mayor que éste, y cambiando el ángulo de incidencia. De esta manera, si se elige un ángulo de incidencia negativo, la componente especular y la aportación al CDR debida al esparcimiento de la luz incidente por el pozo, aparecerán en ángulos de esparcimiento negativos. Por otro lado, la aportación al CDR por el desacoplamiento del PPS se presentará en ángulos de esparcimiento positivos. Como ejemplo, se presenta en la

figura 3.21 el coeficiente diferencial de reflexión al iluminar una rejilla de período $T_{rej} = 500 \text{ nm}$ y altura $A_{rej} = 30 \text{ nm}$ con un defecto gaussiano de profundidad $A_p = 200 \text{ nm}$ y ancho $6A_p$, con una onda plana de longitud de onda $\lambda = 603 \text{ nm}$ y a un ángulo de incidencia $\theta_0 = -10^\circ$. Estos parámetros de incidencia son los que excitan PPS. El ángulo de esparcimiento, θ_s , del orden de difracción $m = -1$ es tal que $\sin \theta_s = -1.38$, mientras que para el orden $m = 1$, $\sin \theta_s = 1.03$. Este último valor coincide con el número de onda del PPS, por lo que el orden $m = 1$ es el que excita PPS. En la figura se observa que la luz incidente esparcida por el pozo abarca, en su mayoría, ángulos de esparcimiento negativos (de -25° a 5°). Por otro lado, la aportación al CDR del esparcimiento del PPS abarca los ángulos desde 50° hasta 85° . La separación angular entre ambas aportaciones es entonces aproximadamente de 45° . Así, al elegir una rejilla tal que su período sea menor que la longitud de onda a la cual se excitan PPS, y al elegir adecuadamente el defecto, es posible separar aún más las aportaciones al CDR.

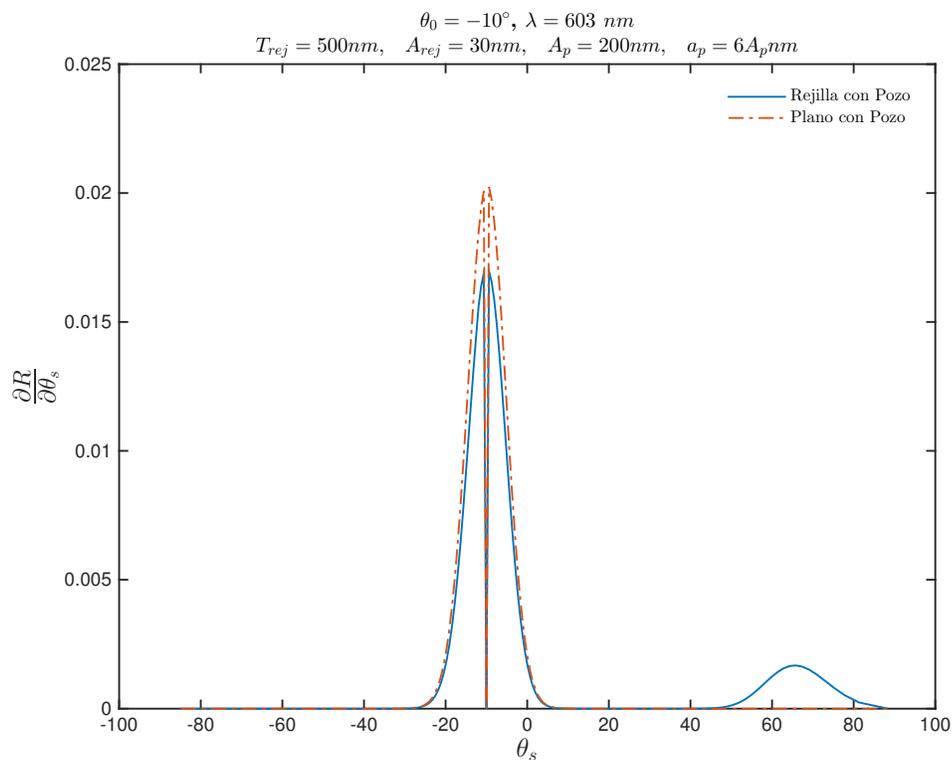


Figura 3.21: Coeficiente diferencial de reflexión (sin componente especular) al iluminar con una onda plana de longitud de onda $\lambda = 603 \text{ nm}$ y a un ángulo de incidencia $\theta_0 = -10^\circ$ una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 500 \text{ nm}$ y altura $A_{rej} = 30 \text{ nm}$ con un pozo gaussiano de profundidad $A_p = 200 \text{ nm}$ y ancho $6A_p$ (línea continua), y un plano con un pozo gaussiano con las mismas características (línea discontinua).

3.4 Anomalías de Wood

En esta sección se analizan las anomalías de Wood que aparecen en los órdenes de difracción al incidir luz de diferentes longitudes de onda y a diferentes ángulos sobre una rejilla de plata de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 31 \text{ nm}$. Como ya se ha mencionado, las anomalías aparecen cuando se excitan PPS en la interfaz. Para mejorar la excitación y así poder observar las anomalías más fácilmente, se optimizó la profundidad de la rejilla a partir del cálculo de la reflectancia para los parámetros en donde se excitan PPS. Estos resultados se presentan en la sección 3.4.2, junto con los cálculos de las anomalías con la rejilla optimizada. Por último, en la sección 3.4.3 se analiza la eficiencia de difracción en función del ángulo de incidencia y de la longitud de onda para cada uno de los órdenes de las dos rejillas consideradas.

3.4.1 Rejilla con Período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y Altura $A_{rej} = 31 \text{ nm}$

En la figura 3.22 se muestra la eficiencia de difracción del orden $m = -1$, al incidir una onda plana de longitud de onda λ a un ángulo de incidencia θ_0 , sobre una rejilla de difracción de plata de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 31 \text{ nm}$. Los resultados se obtuvieron con base en las ecuaciones reducidas de Rayleigh variando el ángulo de incidencia en pasos de 0.1 grados y la longitud de onda en pasos de 1 nm. Las eficiencias obtenidas se normalizaron respecto al máximo de intensidad para cada ángulo de incidencia.

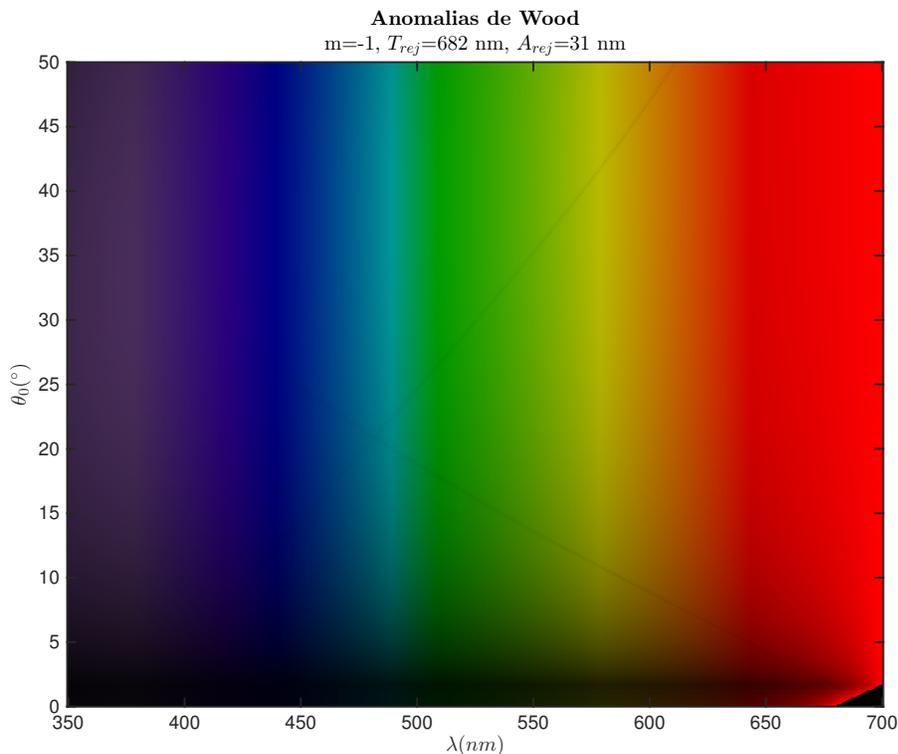


Figura 3.22: Eficiencia de difracción para el orden $m = -1$ en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia para una rejilla senoidal de plata de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y amplitud $A_{rej} = 31 \text{ nm}$.

Cada línea horizontal de los cálculos presentados en la figura 3.22 representa el espectro que se obtendría experimentalmente si se iluminara una rejilla con estas características con luz blanca a un ángulo θ_0 ; debido a la periodicidad de la superficie, la luz incidente se descompone en las diferentes longitudes de onda que la conforman, resultando en los espectros de difracción mostrados. En la misma figura se pueden observar las anomalías de Wood como líneas oscuras que se desvanecen para longitudes de onda cortas y que son más visibles en el rango de 450 nm a 700 nm . Los valores de θ_0 y λ en los que aparecen las anomalías son los parámetros de incidencia en los que se excitan PPS. Para la excitación de PPS, un orden de difracción debe ser evanescente (casi rasante a la superficie). En este caso, hay dos

órdenes que pueden acoplarse a PPS; los órdenes $m = 1$ y $m = -2$. Como se aprecia en la figura 3.23, para $\theta_0 = 0^\circ$ el orden $m = 1$ se vuelve evanescente para longitudes de onda mayores a 680 nm . Conforme el ángulo de incidencia aumenta, el orden se vuelve evanescente a longitudes de onda aún menores. Como se ilustra en la figura 3.24, conforme el ángulo de incidencia crece (en contra de las manecillas del reloj), el orden $m = 1$ se mueve en sentido de las manecillas del reloj. Similarmente, el orden $m = -1$ se mueve en el mismo sentido, por lo que para ángulos mayores a 1.5° , todas las longitudes de onda son propagantes (ver figura 3.22), mientras que a ángulos de incidencia menores a 1.5° , las longitudes de onda cercanas a 700 nm son evanescentes. Por otro lado, el orden $m = -2$ es evanescente en todas sus longitudes de onda para ángulos de incidencia menores a 1.6° , y después de este ángulo empieza a surgir de la superficie, como se ilustra en la figura 3.25.

Ya que los órdenes $m = 1$ y $m = -2$ pueden ser evanescentes, ambos pueden excitar PPS en la rejilla y es por esto que en la figura 3.22 aparecen dos anomalías para un mismo θ_0 .

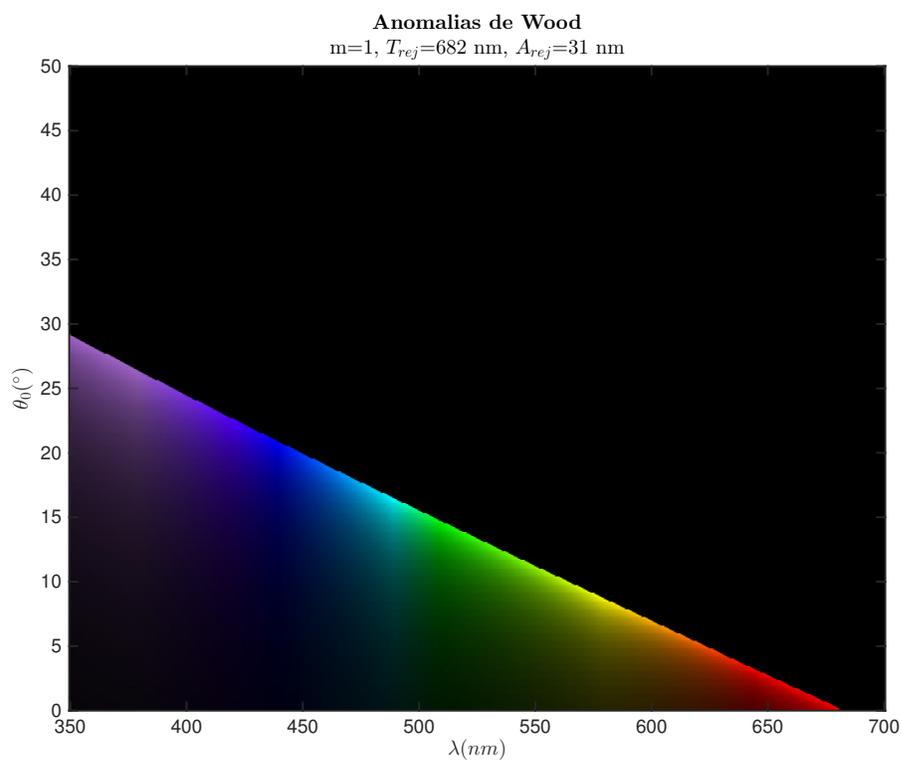


Figura 3.23: Mismos parámetros que la figura 3.22 pero para el orden $m = 1$.

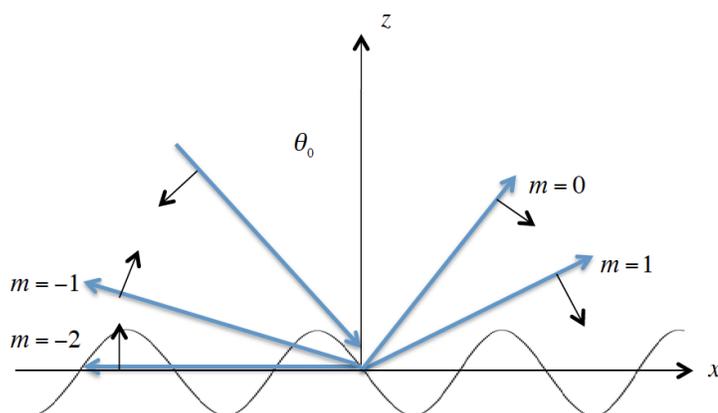


Figura 3.24: Sentido del movimiento de los órdenes de difracción al aumentar el ángulo de incidencia. Las flechas negras indican el sentido del movimiento al incrementar θ_0 . Los órdenes $m = 1, -1, -2$ se mueven en sentido de las manecillas de reloj cuando el ángulo de incidencia crece.

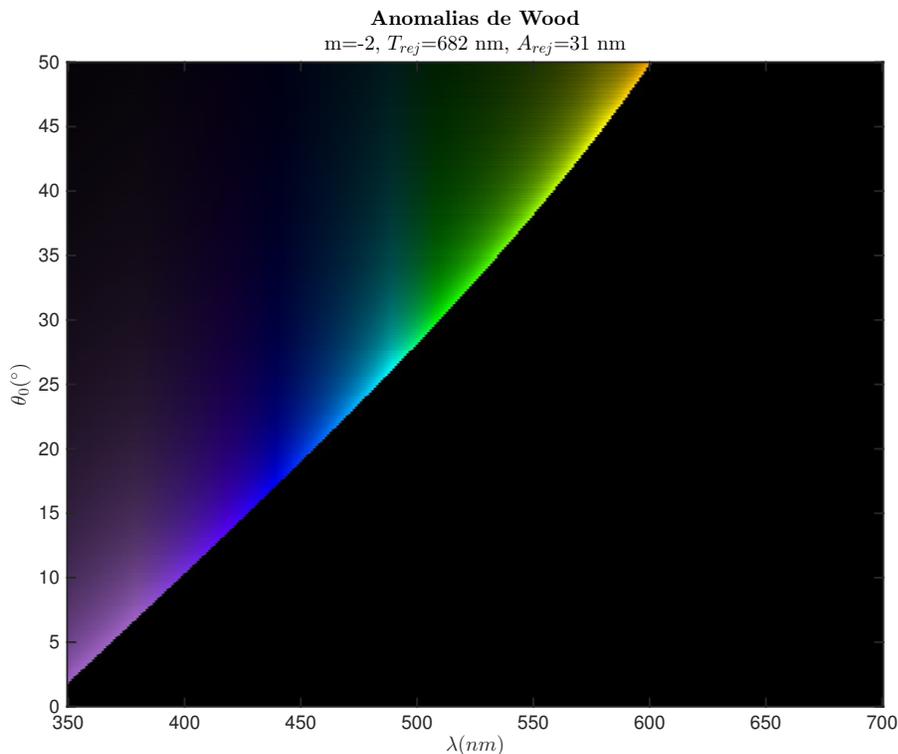


Figura 3.25: Mismos parámetros que la figura 3.22 pero para el orden $m = -2$.

Además de los órdenes $m = 1$, $m = -1$ y $m = -2$, existe también una componente especular cuyo ángulo de esparcimiento es el mismo que θ_0 pero medido en sentido contrario (orden $m = 0$). Aunque al iluminar la rejilla con luz blanca los colores no se separan angularmente como en los otros órdenes, al descomponer la luz reflejada en el orden cero se observarían espectros como los mostrados en la figura 3.26. Se ve que las anomalías de Wood también están presentes en este orden. Sin embargo, a diferencia del orden $m = 1$, sólo se observa una anomalía para cada ángulo de incidencia. Para poder explicar este fenómeno, en la sección 3.4.3 se analiza con detalle la reflectancia de cada uno de los órdenes.

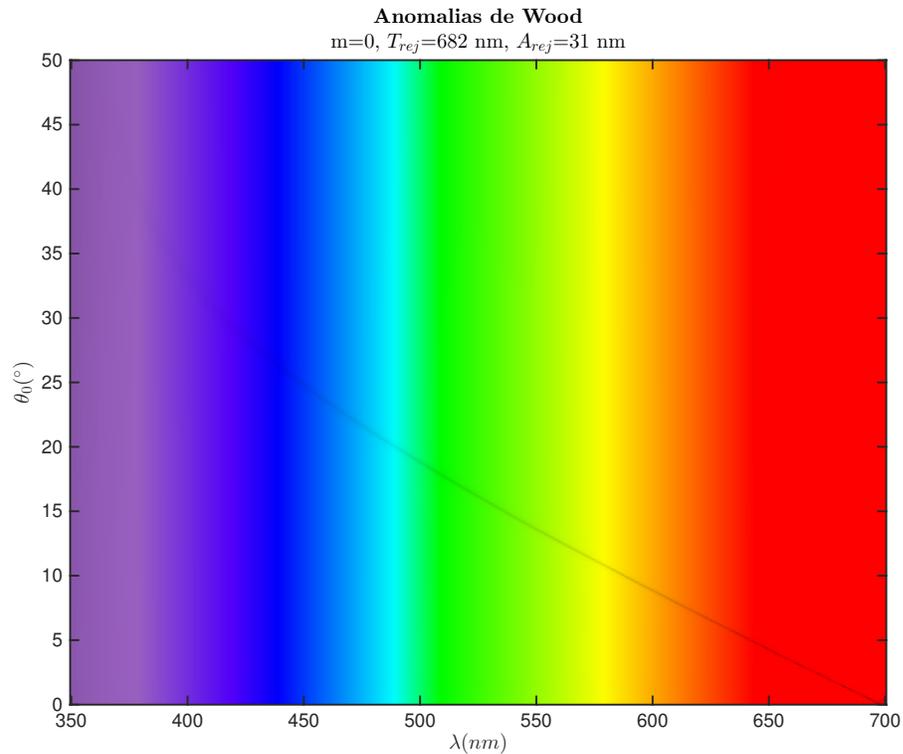


Figura 3.26: Mismos parámetros que la figura 3.22 pero para el orden $m = 0$. La luz blanca en la dirección especular se descompone en las longitudes de onda que la constituyen.

Como se derivó en la sección 2.7.2, a partir de la ecuación (2.58) es posible calcular el ángulo de incidencia para el cual se excita un PPS dado el orden de difracción m que lo excita. En este caso, se tomó el orden $m = 1$ y se realizó un barrido sobre todas las longitudes de onda de 350 nm a 700 nm . La curva teórica resultante se muestra en línea continua en la figura 3.27. Además, en línea discontinua se ilustra el ángulo de incidencia calculado para la excitación de PPS por el orden $m = -2$. Se observa que ambas curvas coinciden con las bandas oscuras que denotan la aparición de las anomalías de Wood. Esto muestra que las ecuaciones reducidas de Rayleigh son adecuadas para simular fielmente el problema de la excitación de PPS por una rugosidad superficial.

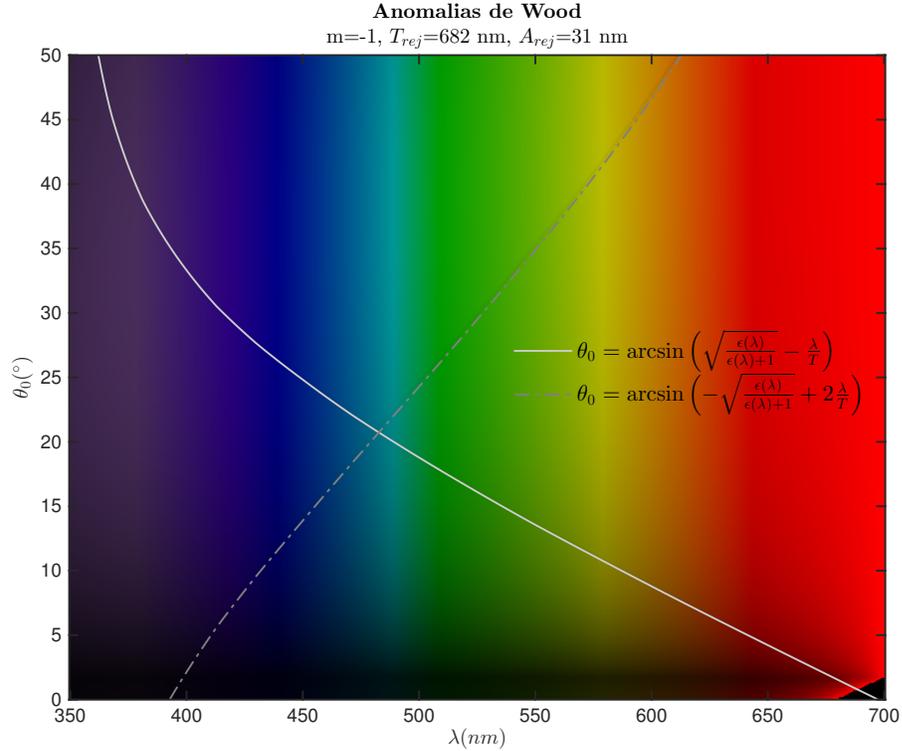


Figura 3.27: Mismo espectro de difracción mostrado en la figura 3.22. Las curvas representan el ángulo de incidencia en función de la longitud de onda en donde aparecen las anomalías de Wood según la ecuación 2.58.

3.4.2 Optimización del Acoplamiento a PPS

Para calcular la amplitud de la rejilla que permite optimizar la eficiencia de excitación de los PPS, y así poder observar anomalías de Wood más marcadas, se calculó la reflectancia total para diferentes amplitudes de la rejilla, manteniendo siempre un período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$. Entre más pequeña es la reflectancia, mayor es la eficiencia de excitación del PPS. Al variar la longitud de onda es necesario determinar en cada caso el ángulo de incidencia que permite excitar PPS, lo cual se hizo utilizando la ecuación (2.58) y suponiendo que el orden $m = 1$ era el que excitaba los PPS. Es decir, que el cálculo de la reflectancia se realizó para los valores θ_0 y λ de la

curva en línea continua de la figura 3.27. La amplitud de la rejilla, A_{rej} , se varió de 10 nm a 210 nm en pasos de 13° . Los resultados se ilustran en la figura 3.28. En a) se muestra la reflectancia para las amplitudes $A_{rej} = 10, 23, 36$ y $50 nm$. Para los cuatro casos, la reflectancia es muy grande para longitudes de onda cortas y disminuye conforme aumenta λ . Para $A_{rej} = 10 nm$ la reflectancia es alta, por lo que la eficiencia de excitación de los PPS es muy baja. Por el contrario, para $A_{rej} = 50 nm$ la reflectancia es la menor de las cuatro amplitudes en todo el rango de longitudes de onda, lo que sugiere que entre mayor sea la profundidad, mejor será la excitación de PPS.

En el inciso b) de la misma figura se muestran los resultados para $A_{rej} = 63, 76, 90$ y $103 nm$. Similarmente, la rejilla con la amplitud más grande tiene una reflectancia menor en casi todas las longitudes de onda, a excepción de longitudes mayores a $660 nm$, donde la reflectancia crece y es mayor que para las otras tres amplitudes. En el inciso c) se ilustran las reflectancias para $A_{rej} = 116, 130, 143$ y $156 nm$. Se puede observar que para un rango de longitudes de onda que va de $350 nm$ hasta $570 nm$, la reflectancia es la más pequeña para $A_{rej} = 156 nm$, y la más grande para $A_{rej} = 116$. Después de este intervalo, la reflectancia es la más grande para $A_{rej} = 156 nm$ y la más pequeña para $A_{rej} = 116 nm$. Por último, en d) se encuentran las reflectancias para $A_{rej} = 170, 183, 196$ y $210 nm$. Para estas amplitudes, sucede un fenómeno similar al del inciso c), pues para λ entre $350 nm$ y $480 nm$, la rejilla más profunda ($A_{rej} = 210 nm$) tiene una reflectancia menor y la menos profunda ($A_{rej} = 170 nm$), tiene una reflectancia mayor en el mismo intervalo; después de $\lambda = 480 nm$ los papeles se invierten.

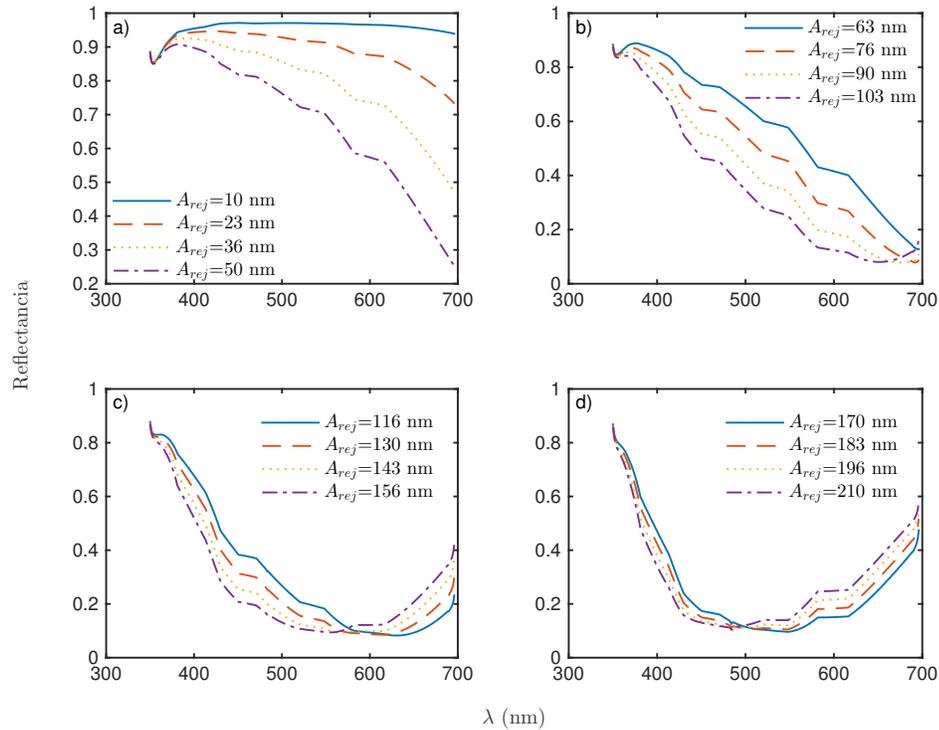


Figura 3.28: Reflectancia de una onda plana con longitud de onda λ incidiendo a un ángulo θ_0 , dado por la ecuación (2.58) (con $m = 1$), sobre una rejilla de difracción de período $T_{rej} = 682$ nm y amplitud A_{rej} .

Entonces, no se puede establecer una amplitud óptima de la rejilla de período $T_{rej} = 682$ nm para la cual la excitación de PPS sea la mejor en todo el intervalo de longitudes de onda estudiado. Sólo se puede concluir que para ciertos rangos de λ , la eficiencia de excitación de PPS es mejor para ciertas amplitudes de la rejilla.

Para saber cómo se ven las anomalías de Wood para otra profundidad de la rejilla, se realizaron simulaciones con la amplitud $A_{rej} = 156$ nm, pues la reflectancia calculada es la menor para un rango amplio de longitudes de onda. En la figura 3.29 se muestra la eficiencia del orden $m = -1$ para una rejilla con esta amplitud. Las anomalías se ven más oscuras que cuando se utilizó una rejilla con una amplitud

$A_{rej} = 31 \text{ nm}$. Como se puede ver en las figuras 3.30 y 3.31, las posiciones de los órdenes no cambian, de manera que es el orden $m = 1$ el que excita los PPS que provocan la aparición de las anomalías de Wood que se desplazan hacia la izquierda conforme el ángulo de incidencia crece. Igualmente, el orden $m = -2$ es el que excita PPS causantes de la aparición de las anomalías que se desplazan hacia la derecha conforme θ aumenta.

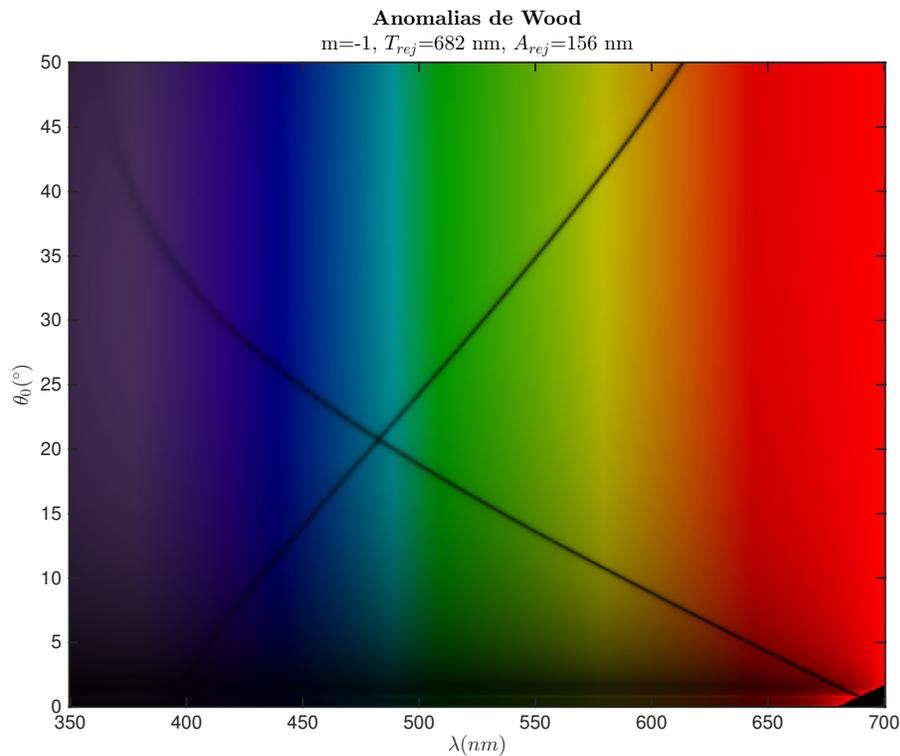


Figura 3.29: Eficiencia del orden $m = -1$ del espectro de difracción de una onda plana con longitud de onda λ incidiendo a un ángulo θ_0 sobre una rejilla senoidal de período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$ y altura $A_{rej} = 156 \text{ nm}$.

Las longitudes de onda evanescentes que cumplen con la condición de acoplamiento son las que excitan los PPS. Como se puede ver en la figura 3.30, para el orden $m = 1$, la longitud para la cual un orden se vuelve evanescente para un ángulo de incidencia dado, es cercana a la curva de acoplamiento para longitudes de onda largas, pero

éstas se despegan al acercarse al ultravioleta, donde está la frecuencia de plasma de la plata. Un fenómeno similar ocurre para el orden $m = -2$, como se muestra en la figura 3.31. Entre más grande es la longitud de onda, la diferencia entre la posición en la que el orden se vuelve evanescente y la curva de acoplamiento a PPS disminuye.

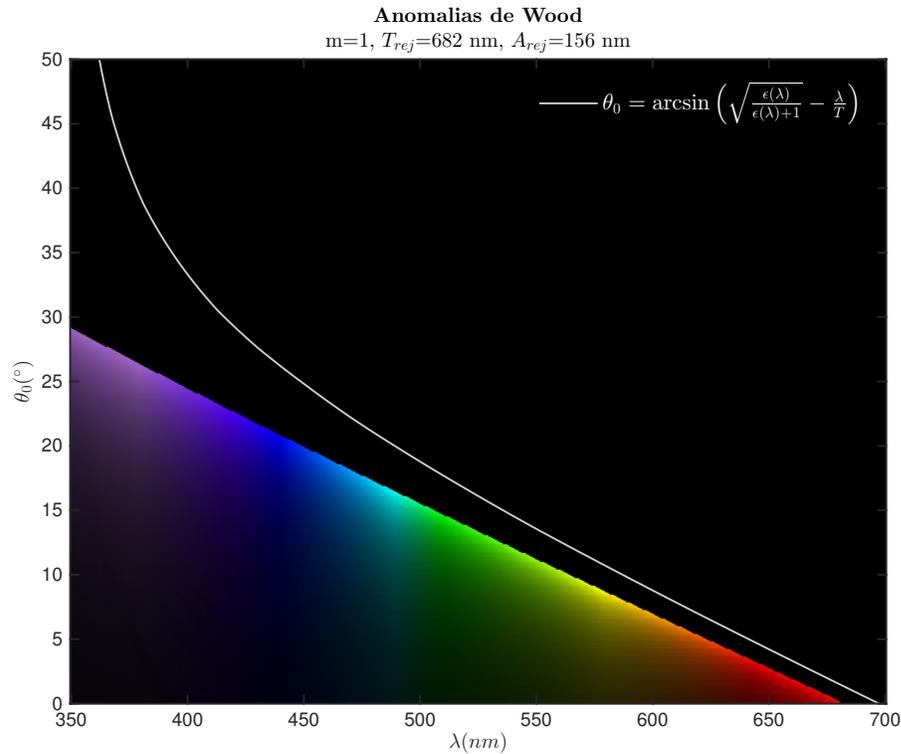


Figura 3.30: Mismos parámetros que la figura 3.29 pero para el orden $m = 1$.

En orden $m = -2$ también se pueden ver las anomalías de Wood causadas por la excitación de PPS por el orden $m = 1$. Esto se analiza por medio de la reflectancia de cada uno de los órdenes en la sección 3.4.3.

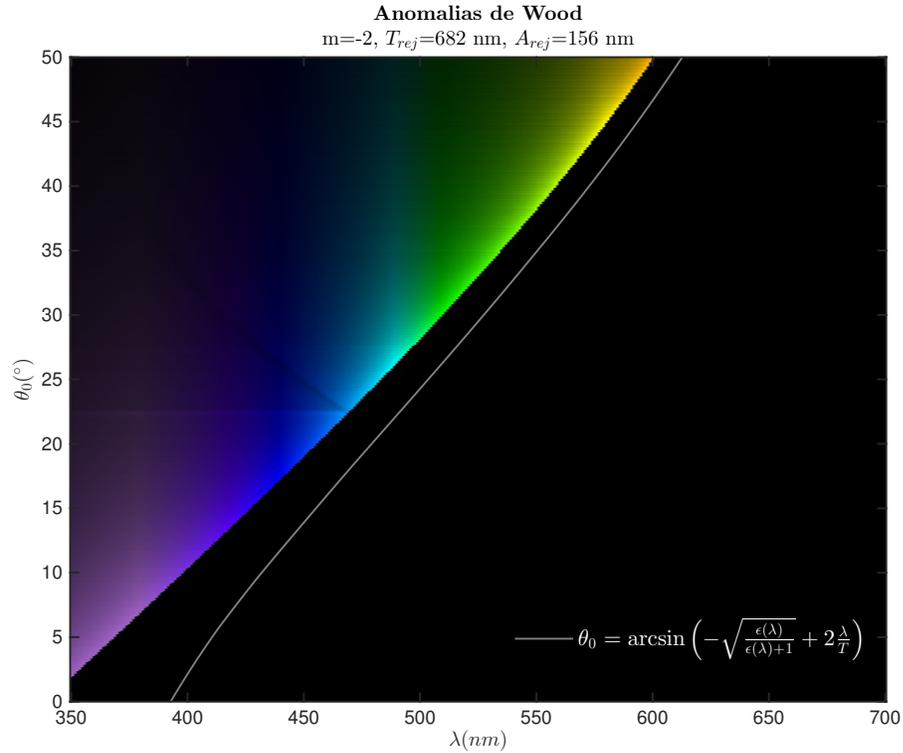


Figura 3.31: Mismos parámetros que la figura 3.29 pero para el orden $m = -2$.

En la figura 3.32 se muestra la simulación del orden $m = 0$, separando todas las longitudes de onda que lo conforman. Igual que para la rejilla con profundidad $A_{rej} = 31 \text{ nm}$, se presentan las anomalías de Wood causadas por la excitación de PPS por el orden $m = 1$. Para un ángulo θ_0 , se observa que en algunas longitudes de onda más pequeñas de donde se presenta la anomalía, la intensidad es mayor. Esto es debido a que el orden $m = 1$ se vuelve evanescente en estas longitudes de onda, por lo que la luz se redistribuye entre los órdenes propagantes.

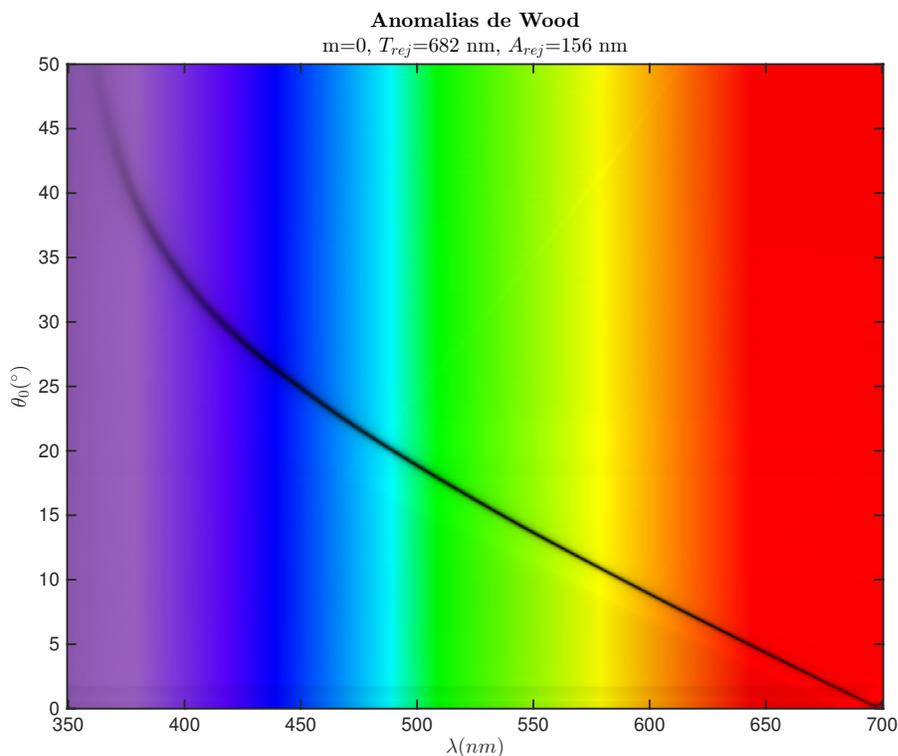


Figura 3.32: Mismos parámetros que la figura 3.29 pero para el orden $m = 0$.

Para ambas profundidades de la rejilla, la anomalía provocada por el orden $m = -2$ no está presente en el orden $m = 0$. Sin embargo, como se puede apreciar en la figura 3.32, en la región del verde y amarillo se produce un aumento en la intensidad en la zona en la que se podría esperar la anomalía. Esto sugiere que el PPS excitado por el orden $m = -2$ se está desacoplando, convirtiéndose en ondas de volumen que hacen una aportación adicional a la intensidad del orden $m = 0$. Un análisis de este fenómeno se hace en la sección 3.4.3.

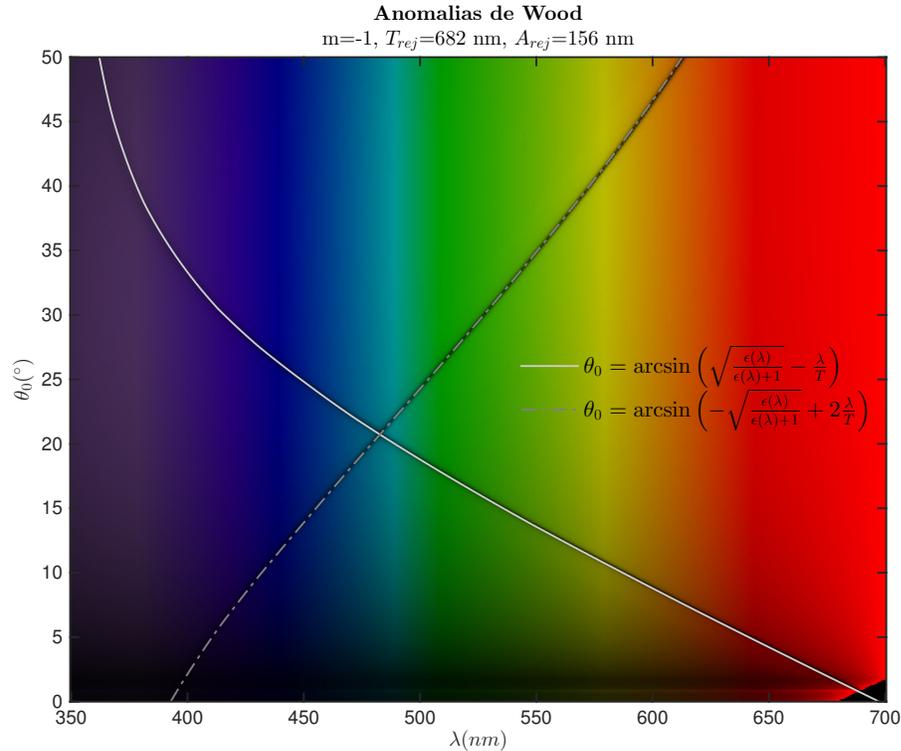


Figura 3.33: Mismos parámetros que la figura 3.29 pero para el orden $m = -1$ y con las curvas teóricas del ángulo de incidencia.

En la figura 3.33 se presenta la simulación del orden $m = -1$ junto con las curvas teóricas del ángulo de incidencia en función de la longitud de onda; ambas curvas siguen las anomalías fielmente, como sucede para la rejilla de $A_{rej} = 31 \text{ nm}$.

3.4.3 Reflectancia de los Órdenes de Difracción para las Anomalías de Wood

En esta sección se estudian los órdenes que excitan los PPS que provocan las anomalías de Wood mostradas en la sección 3.4.1 y 3.4.2 a partir de cálculos de la reflectancia de cada uno de ellos. En la figura 3.34 se ilustran los órdenes $m = 0, 1, -1, -2$

para un ángulo de incidencia $\theta_0 = 10^\circ$ para las rejillas con amplitud a) 31 *nm* y b) 156 *nm*. En ambos casos, se observan dos mínimos de reflectancia en el orden $m = -1$, en $\lambda = 433$ *nm* y $\lambda = 587$ *nm*. Estos mínimos corresponden a las dos anomalías de Wood de las figuras 3.27 y 3.33 que aparecen en $\theta_0 = 10^\circ$. El orden $m = -2$ excita el PPS en $\lambda = 433$ y el orden $m = 1$ el correspondiente a $\lambda = 587$ *nm*, pues éstos se vuelven evanescentes un poco antes de que aparezcan los mínimos, como se muestra en la gráfica de reflectancia. Además, para la rejilla con $A_{rej} = 156$ *nm*, en el orden $m = 0$ se observa un máximo que empieza en $\lambda = 564$ *nm*. Este máximo se observa también en el mismo ángulo y longitud de onda en la figura 3.32, donde antes de que aparezca la anomalía se presenta un máximo de intensidad. Este fenómeno sucede porque el orden $m = -2$ se vuelve evanescente a $\lambda = 564$ *nm*, por lo que la luz se redistribuye en los órdenes propagantes causando en este caso un máximo en el orden $m = 0$, que también se presenta en el orden $m = -1$, como se muestra en la gráfica de reflectancia. Al aumentar la longitud de onda, se excita el PPS en $\lambda = 587$ y la reflectancia disminuye en el orden $m = 0$ y $m = -1$ (para $A_{rej} = 156$ *nm*) a los valores 0.11 y 0.011, respectivamente.

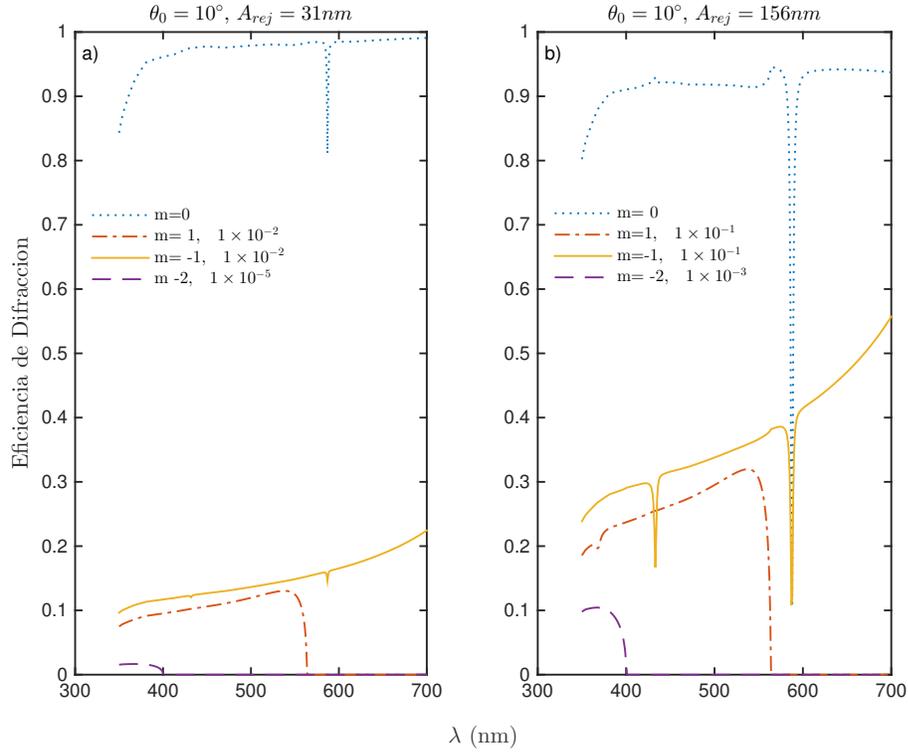


Figura 3.34: Eficiencia de difracción de los órdenes $m = 0, 1, -1, -2$ en función de la longitud de onda para una rejilla con período $T_{rej} = 682$ nm y amplitudes a) $A_{rej} = 31$ nm y b) $A_{rej} = 156$ nm. El ángulo de incidencia es $\theta_0 = 10^\circ$.

Al aumentar el ángulo de incidencia hasta $\theta_0 = 20.74^\circ$, se puede observar en la figura 3.35 que sólo aparece un mínimo de reflectancia en los órdenes $m = 0$ y $m = -1$, para ambas amplitudes de la rejilla. En la misma figura, se muestra que los órdenes $m = 1$ y $m = -2$ se vuelven evanescentes unas longitudes de onda antes de que se presente el mínimo. Por lo tanto, a $\theta_0 = 20.74^\circ$ los PPS excitados por el orden $m = 1$ y $m = -2$ se cruzan, a una longitud de onda de $\lambda = 484$ nm. Este punto equivale a la intersección de las dos curvas teóricas mostradas en las figuras 3.27 y 3.33. Aquí, el mínimo de reflectancia en el orden $m = -1$ para la rejilla con $A_{rej} = 156$ nm disminuye hasta 0.006. Esta intersección es interesante porque se puede eliminar casi por completo esta longitud de onda en los órdenes $m = 0$ y

$$m = -1.$$

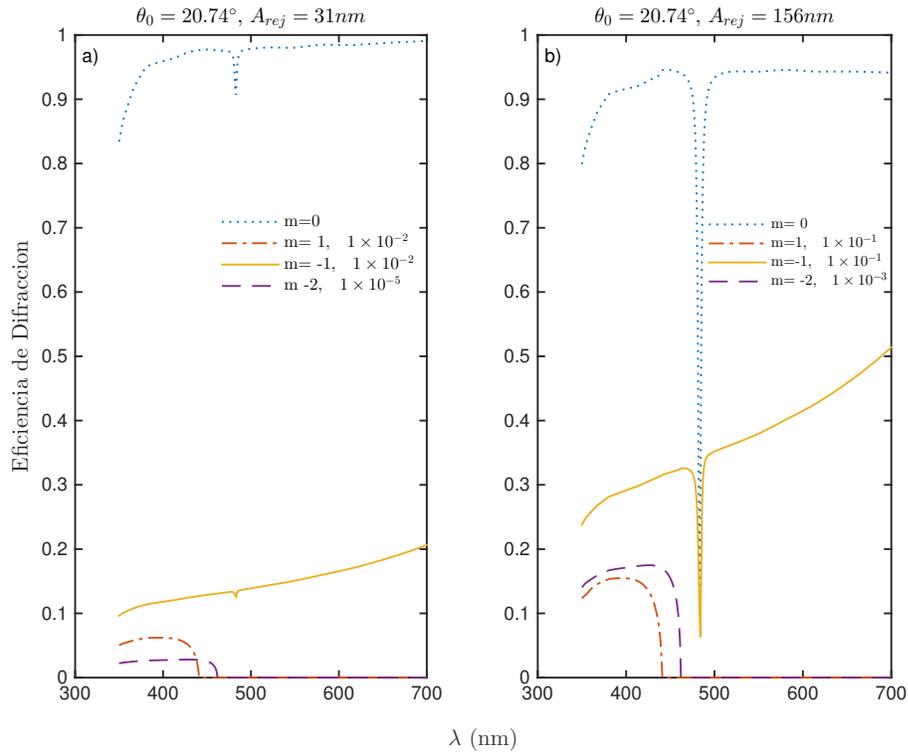


Figura 3.35: Mismos parámetros que la figura 3.34 pero con $\theta_0 = 20.74^\circ$.

En la figura 3.36 se ilustra la eficiencia de difracción de los mismos órdenes pero para un ángulo de incidencia de $\theta_0 = 25^\circ$. Para ambas amplitudes de la rejilla, se observan dos mínimos de reflectancia, uno en $\lambda = 449 \text{ nm}$ y el otro en $\lambda = 505 \text{ nm}$. Ya que el ángulo de incidencia aumentó, el orden $m = 1$ se vuelve evanescente para longitudes de onda más cortas, mientras que el orden $m = -2$ se vuelve propagante para longitudes de onda más largas. Esto significa que conforme θ_0 aumenta, los órdenes se mueven en contra de las manecillas del reloj. Por lo tanto, el mínimo en $\lambda = 449 \text{ nm}$ es provocado por la excitación de PPS por el orden $m = 1$ y el otro mínimo es causado por el orden $m = -2$.

Para el orden $m = -2$ ($A_{rej} = 156 \text{ nm}$) se presenta también un mínimo en $\lambda = 449 \text{ nm}$, lo cual significa que el PPS excitado por el orden $m = 1$ también está afectando la reflectancia de este orden, presentándose como una anomalía de Wood que se puede observar en la figura 3.31. Además, para la misma amplitud, se presenta un máximo de reflectancia en el orden $m = 0$ en $\lambda = 505 \text{ nm}$. Esto se debe a que el PPS excitado por el orden $m = -2$ está siendo desacoplado y se convierte en ondas de volumen. Nótese que la posición de este máximo coincide con uno de los mínimos de reflectancia en el orden $m = -1$. En la figura 3.32 se puede observar que en la posición donde debería estar la anomalía de Wood, aparece este máximo de intensidad.

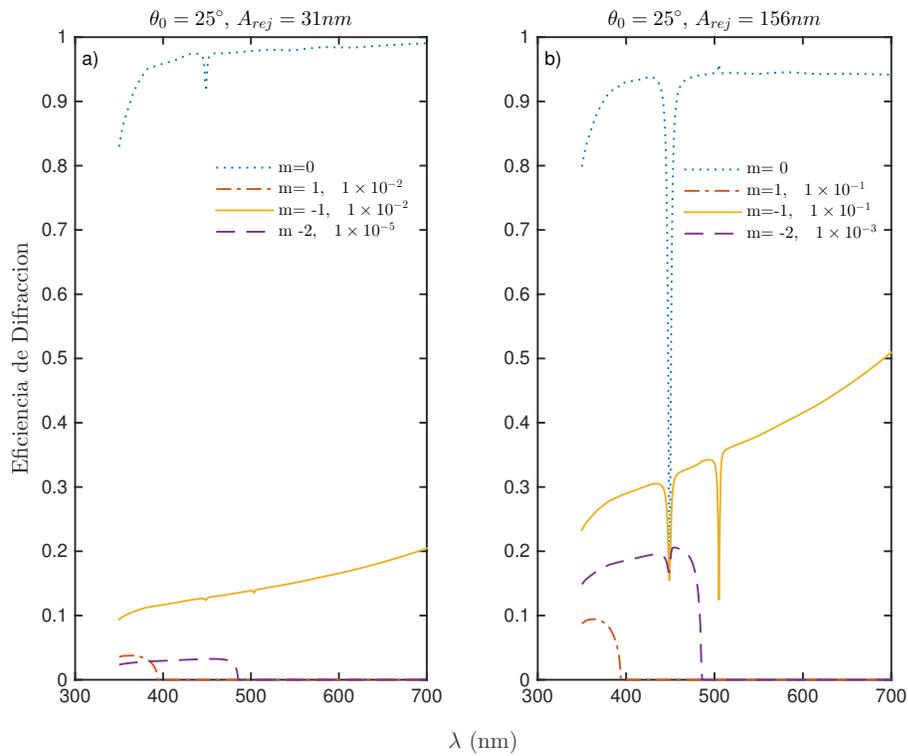


Figura 3.36: Mismos parámetros que la figura 3.34 pero con $\theta_0 = 25^\circ$.

Por último, en la figura 3.37 se muestran las eficiencias cuando se incide con

un ángulo $\theta_0 = 30^\circ$. En este caso, el orden $m = 1$ es totalmente evanescente, sin embargo, se sigue presentando la excitación de PPS pues ésta se presenta un poco después de que el orden se vuelve evanescente. Para la rejilla con $A_{rej} = 31 \text{ nm}$, los mínimos en el orden $m = -1$ son poco visibles. Por el contrario, para la rejilla con $A_{rej} = 156 \text{ nm}$ los mínimos son fácilmente distinguibles. En este último caso, se presenta en $\lambda = 416 \text{ nm}$ un mínimo de eficiencia en los órdenes $m = 0, -1, -2$, correspondiente a la excitación de PPS por el orden $m = 1$. Además, la excitación de PPS por el orden $m = -2$ se presenta como un mínimo de eficiencia en el orden $m = -1$ en $\lambda = 529 \text{ nm}$; en esta misma posición, se presenta el máximo del orden $m = 0$, por lo que el PPS se sigue desacoplando al incrementar el ángulo de incidencia.

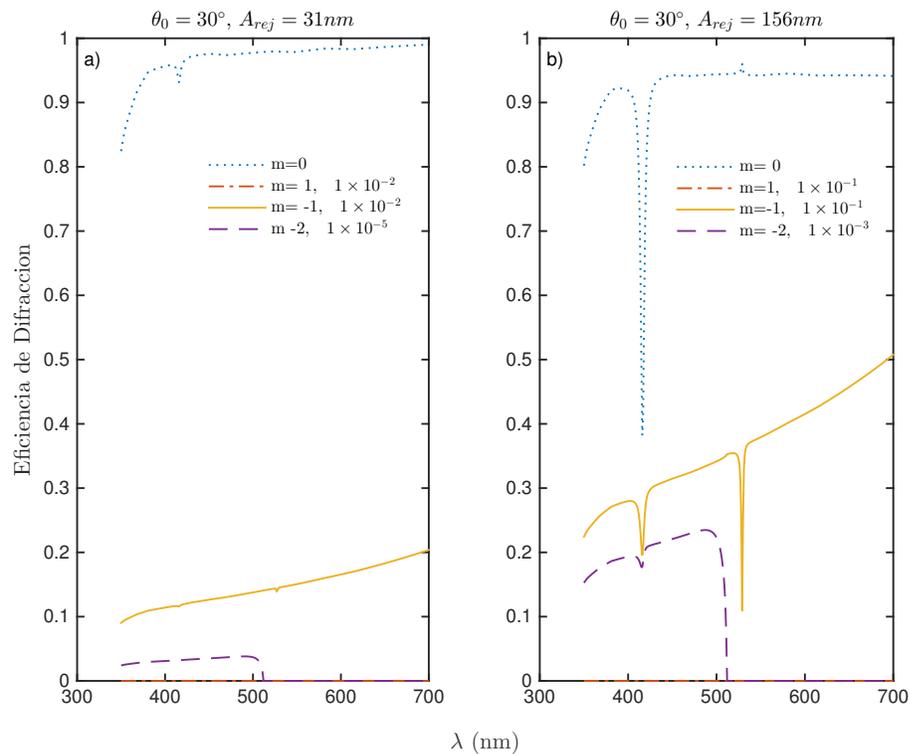


Figura 3.37: Mismos parámetros que la figura 3.34 pero con $\theta_0 = 30^\circ$.

Capítulo 4

Conclusiones

En este capítulo se presenta un resumen del trabajo realizado, así como las conclusiones más importantes de esta tesis.

Los resultados numéricos presentados en esta tesis están basados en la solución numérica de las ecuaciones reducidas de Rayleigh, que son una herramienta matemática utilizada para el cálculo del esparcimiento de luz por superficies rugosas. Son apropiadas para el estudio de problemas de esparcimiento por superficies que soportan plasmones polaritones de superficie. En este caso, se considera que la superficie es periódica y por lo tanto infinitamente larga, y que la iluminación viene dada por una onda plana.

Las ecuaciones reducidas de Rayleigh se basan principalmente en la técnica del espectro angular y en la hipótesis de Rayleigh. El espectro angular es un método que se emplea para propagar un campo en una región del espacio libre de fuentes limitada por dos planos paralelos. La hipótesis de Rayleigh consiste en suponer que esta representación también es válida en la zona de corrugación de la superficie. En

el caso de rejillas de difracción, se supone entonces que la representación en términos del espectro angular es válido también por debajo del punto máximo de la rejilla. Esta hipótesis es muy importante, pues es la que permite evaluar de manera sencilla las condiciones de frontera, que resulta en un sistema matricial. De esta manera, una solución a las ecuaciones reducidas de Rayleigh se obtiene al resolver el sistema matricial numéricamente y su solución puede ser utilizada para calcular el campo esparcido reflejado en campo lejano y cercano.

En lo que respecta al trabajo presentado, primeramente se estudió la excitación de PPS por rejillas de difracción de diferentes períodos y alturas analizando la reflectancia resultante al iluminarlas con ondas planas con polarización p y s . Para una de estas rejillas, se fijó la longitud de onda de la luz incidente y se varió el ángulo de incidencia, mientras que para el resto de las rejillas se fijó el ángulo de incidencia y se cambió la longitud de onda. Los mínimos de reflectancia permitieron encontrar las condiciones de incidencia necesarias para la excitación de PPS, pues la luz incidente que no se refleja es en su mayoría acoplada a PPS y termina siendo absorbida en el metal.

A partir de los resultados se puede concluir que la excitación de PPS es posible únicamente al utilizar luz con polarización p , pues según los cálculos presentados al emplear polarización s no se presentan cambios abruptos en la reflectancia. Sin embargo, se mostró que a partir del cálculo de la reflectancia no siempre se pueden conocer todas las excitaciones de PPS, especialmente cuando éstos son excitados por órdenes de difracción grandes. Por esta razón es importante analizar cuidadosamente los órdenes de difracción que son evanescentes y así poder encontrar si existen otras excitaciones. Por otro lado, la profundidad de la rejilla no juega un papel importante en la determinación de la longitud de onda a la cual los PPS son excitados.

El campo cercano, calculado a partir del campo magnético, posibilita la observación del campo generado por los PPS cerca de la superficie. Según los resultados obtenidos al utilizar rejillas de difracción y pozos gaussianos, el campo es más intenso dentro de los surcos y decae al alejarse de éstos en la dirección z . Esto es de esperarse, pues la naturaleza de los PPS los limita a existir en la interfaz dieléctrico-metal.

Para estudiar el esparcimiento de PPS por defectos superficiales, se considera el esparcimiento de rejillas de difracción a las que se añade el defecto. La rejilla se ilumina de manera que se exciten PPS. De esta forma, la intensidad esparcida contiene varias contribuciones que, bajo ciertas condiciones se pueden separar; a saber, el esparcimiento del haz incidente por la rejilla, el esparcimiento del haz incidente por el defecto y el esparcimiento del PPS por el defecto. Se encontró que la profundidad y ancho del pozo juegan un papel importante en la distribución angular del esparcimiento del PPS por el pozo. Entre más pequeño el ancho del pozo, el esparcimiento se presenta en el CDR en un rango angular relativamente amplio, a diferencia de cuando se utilizan pozos con ancho y profundidad más grande, que resulta en una distribución angular del esparcimiento más pequeña. Si se elige adecuadamente el período de la rejilla, el ángulo de incidencia y la longitud de onda, es posible separar la aportación del esparcimiento del PPS por el pozo, y la aportación al CDR del esparcimiento de la luz incidente por el pozo. Asimismo, la separación puede ser aún más significativa si se utiliza una rejilla de difracción con período menor a la longitud de onda a la cual se excita el PPS, y si se utiliza un ángulo de incidencia tal que la componente especular aparezca del lado contrario a la contribución del esparcimiento del PPS por el pozo. No se han reportado trabajos experimentales en los cuales se utilice esta técnica, por lo que los cálculos teóricos presentados en esta tesis podrían ayudar a determinar las características óptimas de

la superficie para poder observar el esparcimiento de PPS por defectos.

Las anomalías de Wood se presentan en el campo lejano como un mínimo de intensidad a cierta longitud de onda. Este mínimo es causado por la excitación de PPS sobre la rejilla utilizada. Al incidir luz blanca sobre la superficie, ésta se descompone en sus longitudes de onda constituyentes en cada orden de difracción. Es en estos órdenes en donde las anomalías pueden ser observadas, revelando las condiciones en las que se excitan los PPS. Para la rejilla de difracción con período $T_{rej} = 682 \text{ nm}$, además de la componente especular, el orden de difracción $m = -1$ es propagante para todos los ángulos de incidencia utilizados en la mayoría sus longitudes de onda. Por otro lado, el orden $m = 1$ es propagante en la mayoría de las longitudes de onda cuando el ángulo de incidencia es pequeño, pero se vuelve evanescente en más longitudes de onda al incrementar el ángulo de incidencia. Por el contrario, el orden $m = -2$ es completamente evanescente a ángulos pequeños y se vuelve propagante en longitudes de onda cada vez más grandes al aumentar el ángulo de incidencia. En el orden $m = -1$, las anomalías de Wood son fácilmente distinguibles, mientras que los otros dos órdenes ($m = 1$ y $m = -2$) son los que, dependiendo del ángulo de incidencia, excitan los PPS. Debido a esta excitación, el mapa de intensidad del orden $m = -1$ presenta dos ramas oscuras que se intersectan en un punto. Esta intersección es de interés, pues a esta longitud de onda y ángulo de incidencia la luz desaparece casi por completo. Para esta rejilla, se encontró solo una intersección de las anomalías. Para rejillas con períodos más grandes que la longitud de onda, aparecen más órdenes propagantes, por lo que se puede presentar más de una intersección de las anomalías de Wood. Por otro lado, en el orden $m = 0$ se pueden observar las anomalías de Wood, pero en este caso la luz de diferente longitud de onda no se separa angularmente. En este orden también se

puede observar el desacoplamiento de la luz acoplada a PPS por otro orden, lo que pone en evidencia que para visualizar los procesos físicos que ocurren en esta interacción es mejor analizar las eficiencias de difracción de los diferentes órdenes que la reflectancia total.

A pesar de que los primeros resultados de Wood tienen más de 100 años de haber sido publicados, no existe un estudio moderno de las anomalías. Los resultados numéricos presentados en esta tesis podrían servir como una guía y para comparar con resultados experimentales que surjan en el futuro. Además, se demuestra el alcance que tienen las ecuaciones reducidas de Rayleigh en la solución de problemas de esta naturaleza.

Referencias

- Aizpurua, J. y Hillenbrand, R. (2012). Localized surface plasmons: basics and applications in field-enhanced spectroscopy. En *Plasmonics*, páginas 151–176. Springer.
- Barnes, W. L., Dereux, A., y Ebbesen, T. W. (2003). Surface plasmon subwavelength optics. *Nature*, **424**(6950): 824.
- Bohm, D. y Pines, D. (1951). A collective description of electron interactions. i. magnetic interactions. *Physical Review*, **82**(5): 625.
- Burrows, M. (1969). Equivalence of the rayleigh solution and the extended-boundary-condition solution for scattering problems. *Electronics Letters*, **5**(12): 277–278.
- De La Cruz, S., Méndez, E. R., Macías, D., Salas-Montiel, R., y Adam, P.-M. (2012). Compact surface structures for the efficient excitation of surface plasmon-polaritons. *Physica status solidi (b)*, **249**(6): 1178–1187.
- Fano, U. (1941). The theory of anomalous diffraction gratings and of quasi-stationary waves on metallic surfaces (Sommerfeld's waves). *JOSA*, **31**(3): 213–222.
- Kretschmann, E. y Raether, H. (1968). Radiative decay of non radiative surface plasmons excited by light. *Zeitschrift für Naturforschung A*, **23**(12): 2135–2136.

- Loewen, E. G. y Popov, E. (1997). *Diffraction gratings and applications*. CRC Press.
- Maier, S. A. (2007). *Plasmonics: fundamentals and applications*. Springer Science & Business Media.
- Mandel, L. y Wolf, E. (1995). *Optical coherence and quantum optics*. Cambridge university press.
- Maradudin, A. y Méndez, E. (1993). Enhanced backscattering of light from weakly rough, random metal surfaces. *Applied optics*, **32**(19): 3335–3343.
- Maradudin, A., Michel, T., McGurn, A., y Méndez, E. (1990). Enhanced backscattering of light from a random grating. *Annals of Physics*, **203**(2): 255–307.
- Maystre, D. (2012). Theory of wood's anomalies. En *Plasmonics*, páginas 39–83. Springer.
- Maystre, D. y Petit, R. (1971). Sur la diffraction d'une onde plane par un réseau infiniment conducteur. *Optics Communications*, **4**(1): 97–101.
- Millar, R. (1969). On the rayleigh assumption in scattering by a periodic surface. En *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, Vol. 65, páginas 773–791. Cambridge University Press.
- Millar, R. (1973). The rayleigh hypothesis and a related least-squares solution to scattering problems for periodic surfaces and other scatterers. *Radio Science*, **8**(8-9): 785–796.
- Otto, A. (1968). Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection. *Zeitschrift für Physik*, **216**(4): 398–410.
- Palmer, C. H. (1952). Parallel diffraction grating anomalies. *JOSA*, **42**(4): 269–276.

- Pines, D. y Bohm, D. (1952). A collective description of electron interactions: II. collective vs individual particle aspects of the interactions. *Physical Review*, **85**(2): 338.
- Pitarke, J., Silkin, V., Chulkov, E., y Echenique, P. (2006). Theory of surface plasmons and surface-plasmon polaritons. *Reports on progress in physics*, **70**(1): 1.
- Powell, C. y Swan, J. (1959). Origin of the characteristic electron energy losses in aluminum. *Physical Review*, **115**(4): 869.
- Rayleigh, L. (1907a). III. Note on the remarkable case of diffraction spectra described by Prof. Wood. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, **14**(79): 60–65.
- Rayleigh, L. (1907b). On the dynamical theory of gratings. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, **79**(532): 399–416.
- Ritchie, R. (1957). Plasma losses by fast electrons in thin films. *Physical Review*, **106**(5): 874.
- Ruíz, B. (2012). *Estudio numérico de la interacción de luz con superficies y guías de ondas rugosas basado en la hipótesis de Rayleigh*. Tesis de maestría, CICESE.
- Strong, J. (1936). Effect of evaporated films on energy distribution in grating spectra. *Physical Review*, **49**(4): 291.
- Toigo, F., Marvin, A., Celli, V., y Hill, N. (1977). Optical properties of rough surfaces: general theory and the small roughness limit. *Physical Review B*, **15**(12): 5618.

Wood, R. W. (1902). XLII. on a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, **4**(21): 396–402.

Wood, R. W. (1935). Anomalous diffraction gratings. *Physical Review*, **48**(12): 928.

Zayats, A. V., Smolyaninov, I. I., y Maradudin, A. A. (2005). Nano-optics of surface plasmon polaritons. *Physics reports*, **408**(3): 131–314.

Apéndice A

Solución Integral I_T

Se considera la integral

$$I_T(q|p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx [\zeta'(x) (q + p) + \alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p)] \times \\ \times \exp \left\{ -i(q - p)x + i (\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)) \zeta(x) \right\}, \quad (\text{A.1})$$

que se puede escribir como

$$I_T(q|p) = (q + p) \int_{-\infty}^{\infty} dx \zeta'(x) \exp \left\{ i (\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)) \zeta(x) \right\} \exp \left\{ -i(q - p)x \right\} + \\ + [\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p)] \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left\{ -i(q - p)x + i (\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)) \zeta(x) \right\}. \quad (\text{A.2})$$

Ahora se utiliza

$$\zeta'(x) \exp \left\{ i (\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)) \zeta(x) \right\} = \frac{1}{i (\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))} \times \\ \times \frac{d}{dx} \exp \left\{ i (\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)) \zeta(x) \right\}, \quad (\text{A.3})$$

para escribir

$$\begin{aligned}
I_T(q|p) &= \frac{q+p}{i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))} \int_{-\infty}^{\infty} d \left(\exp \left\{ i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)) \times \zeta(x) \right\} \right) \times \\
&\times \exp \left\{ -i(q-p)x \right\} + [\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p)] \times \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left\{ -i(q-p)x + i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)) \zeta(x) \right\}. \quad (\text{A.4})
\end{aligned}$$

Integrando por partes se obtiene

$$\begin{aligned}
I_T(q|p) &= \frac{q+p}{i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))} \exp \left\{ -i(q-p)x + i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)) \zeta(x) \right\} \Big|_{-\infty}^{\infty} + \\
&+ \frac{q+p}{i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))} \int_{-\infty}^{\infty} dx i(q-p) \times \\
&\times \exp \left\{ -i(q-p)x + i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)) \zeta(x) \right\} + \\
&+ [\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p)] \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left\{ -i(q-p)x + i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)) \zeta(x) \right\}. \quad (\text{A.5})
\end{aligned}$$

El primer término desaparece y ya que

$$\begin{aligned}
\alpha_{II}^2(q) - \alpha_{II}^2(p) &= \varepsilon_{II}(\omega) \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 - q^2 - \varepsilon_{II}(\omega) \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 + p^2 \\
&= -(q^2 - p^2), \quad (\text{A.6})
\end{aligned}$$

la función $I_T(q|p)$ es igual a cero,

$$I_T(q|p) = 0. \quad (\text{A.7})$$

Se considera también la integral

$$\begin{aligned}
I_R(q|p) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\zeta'(x) \left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} q \right) - \alpha_{II}(p) - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(q) \right] \times \\
&\quad \times \exp \left\{ i(q-p)x - i(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)) \zeta(x) \right\} \\
&= \left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} q \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \zeta'(x) \exp \left\{ -i(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)) \zeta(x) \right\} \times \\
&\quad \times \exp \left\{ i(q-p)x \right\} - \left[\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(q) \right] \times \\
&\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left\{ i(q-p)x - i(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)) \zeta(x) \right\}. \tag{A.8}
\end{aligned}$$

Usando

$$\begin{aligned}
&\zeta'(x) \exp \left\{ -i(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)) \zeta(x) \right\} = \\
&\frac{1}{-i(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q))} \frac{d}{dx} \exp \left\{ -i(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)) \zeta(x) \right\}, \tag{A.9}
\end{aligned}$$

se puede escribir,

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} dx \zeta'(x) \exp \left\{ -i(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)) \zeta(x) \right\} \exp \left\{ i(q-p)x \right\} \\
&= \frac{-1}{i(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q))} \int_{-\infty}^{\infty} d \left(\exp \left\{ -i(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)) \zeta(x) \right\} \right) \times \\
&\quad \times \exp \left\{ i(q-p)x \right\}. \tag{A.10}
\end{aligned}$$

Integrando por partes y sustituyendo se obtiene

$$\begin{aligned}
I_R(q|p) &= \left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} q \right) \frac{-(p-q)}{(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q))} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \{ i(q-p)x \} \times \\
&\quad \times \exp \left\{ -i(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)) \zeta(x) \right\} - \left[\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(q) \right] \times \\
&\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left\{ -i(p-q)x - i(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)) \zeta(x) \right\} \\
&= \left[\left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} q \right) \frac{-(p-q)}{(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q))} - \left[\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(q) \right] \right] \times \\
&\quad \times I(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q) | p - q), \tag{A.11}
\end{aligned}$$

donde se ha definido

$$I(\gamma|Q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-iQx} e^{-i\gamma\zeta(x)}. \tag{A.12}$$

Se observa que el factor

$$\begin{aligned}
&\left[\left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} q \right) \frac{-(p-q)}{(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q))} - \left[\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(q) \right] \right] \\
&= - \frac{p^2 - pq \left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \right) - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} q^2}{\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)} - \left[\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(q) \right] \\
&= \frac{-p^2 + pq \left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \right) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} q^2}{\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)} - \\
&\quad - \frac{\left(\alpha_{II}^2(p) - \alpha_{II}(p) \alpha_I(q) \left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \right) - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I^2(q) \right)}{\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)} \tag{A.13}
\end{aligned}$$

Ahora,

$$\begin{aligned}
& \alpha_{II}^2(p) - \alpha_{II}(p)\alpha_I(q) \left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right) - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\alpha_I^2(q) \\
= & \varepsilon_{II}(\omega) \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - p^2 - \alpha_{II}(p)\alpha_I(q) \left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right) - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\varepsilon_I(\omega) \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 + \frac{\nu_{II}}{\nu_I}q^2 \\
= & \left[\varepsilon_{II}(\omega) - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\varepsilon_I(\omega)\right] \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - p^2 + \frac{\nu_{II}}{\nu_I}q^2 - \alpha_{II}(p)\alpha_I(q) \left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right) \\
= & \sigma - p^2 + \frac{\nu_{II}}{\nu_I}q^2 - \alpha_{II}(p)\alpha_I(q) \left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right), \tag{A.14}
\end{aligned}$$

donde

$$\sigma = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \left[\varepsilon_{II}(\omega) - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\varepsilon_I(\omega)\right]. \tag{A.15}$$

Entonces,

$$\begin{aligned}
& \left[\left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I}q\right) \frac{-(p-q)}{(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q))} - \left[\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\alpha_I(q)\right] \right] \\
= & \frac{-p^2 + pq \left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I}q^2 - \left(\sigma - p^2 + \frac{\nu_{II}}{\nu_I}q^2 - \alpha_{II}(p)\alpha_I(q) \left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right)\right)}{\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)} \\
= & \frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right) (pq + \alpha_{II}(p)\alpha_I(q)) - \sigma}{\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)}. \tag{A.16}
\end{aligned}$$

Donde $\sigma = 0$ para polarización p , y $\sigma = (\omega/c)^2(\varepsilon_{II}(\omega) - \varepsilon_I(\omega))$ para polarización s .

Sustituyendo se obtiene

$$I_R(q|p) = \frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right) (pq + \alpha_{II}(p)\alpha_I(q)) - \sigma}{\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)} I(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)|p - q). \tag{A.17}$$

Se considera ahora la integral

$$\begin{aligned}
I_0(k|p) &= - \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\zeta'(x) \left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} k \right) - \alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(k) \right] \times \\
&\quad \times \exp \left\{ -i (\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)) \zeta(x) \right\} \exp \{ i(k-p)x \} \\
&= - \left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} k \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \zeta'(x) \exp \left\{ -i (\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)) \zeta(x) \right\} \times \\
&\quad \times \exp \{ i(k-p)x \} - \left[-\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(k) \right] \times \\
&\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left\{ -i (\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)) \zeta(x) \right\} \exp \{ i(k-p)x \}. \quad (\text{A.18})
\end{aligned}$$

Usando

$$\begin{aligned}
\zeta'(x) \exp \left\{ -i (\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)) \zeta(x) \right\} &= \frac{-1}{i (\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k))} \times \\
&\quad \times \frac{d}{dx} \exp \left\{ -i (\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)) \zeta(x) \right\}, \quad (\text{A.19})
\end{aligned}$$

se tiene

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} dx \zeta'(x) \exp \left\{ -i (\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)) \zeta(x) \right\} \exp \{ i(k-p)x \} \\
&= \frac{-1}{i (\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k))} \int_{-\infty}^{\infty} d \left(\exp \left\{ -i (\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)) \zeta(x) \right\} \right) \times \\
&\quad \times \exp \{ i(k-p)x \}, \quad (\text{A.20})
\end{aligned}$$

y al integrar por partes se obtiene

$$\begin{aligned}
& \frac{-1}{i(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k))} \exp \left\{ -i(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)) \zeta(x) \right\} \exp \{i(k-p)x\} \Big|_{-\infty}^{\infty} + \\
& \quad + \frac{1}{i(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k))} \int_{-\infty}^{\infty} dx i(k-p) \exp \{i(k-p)x\} \times \\
& \quad \quad \times \exp \left\{ -i(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)) \zeta(x) \right\} \\
& = \frac{-(p-k)}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \{i(k-p)x\} \exp \left\{ -i(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)) \zeta(x) \right\}. \quad (\text{A.21})
\end{aligned}$$

Entonces,

$$\begin{aligned}
I_0(k|p) & = \left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} k \right) \frac{p-k}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \{i(k-p)x\} \times \\
& \quad \times \exp \left\{ -i(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)) \zeta(x) \right\} - \left[-\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(k) \right] \times \\
& \quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left\{ -i(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)) \zeta(x) \right\} \exp \{i(k-p)x\} \\
& = \left[\left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} k \right) \frac{p-k}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)} - \left[-\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(k) \right] \right] \times \\
& \quad \times I(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)|p-k). \quad (\text{A.22})
\end{aligned}$$

Se considera el factor

$$\begin{aligned}
& \left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} k \right) \frac{p - k}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)} - \left[-\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(k) \right] \\
= & \frac{\alpha_{II}^2(p) + \alpha_{II}(p)\alpha_I(k) \left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \right) - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I^2(k) + \left(p^2 - kp \left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \right) - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} k^2 \right)}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)} \\
= & \frac{\varepsilon_{II}(\omega) \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 - p^2 + \alpha_{II}(p)\alpha_I(k) \left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \right) - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \varepsilon_I(\omega) \left(\frac{\omega}{c} \right)^2}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)} + \\
& + \frac{\frac{\nu_{II}}{\nu_I} k^2 + \left(p^2 - kp \left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \right) - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} k^2 \right)}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)} \\
= & \frac{-p^2 + \alpha_{II}(p)\alpha_I(k) \left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \right) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} k^2 + \left(p^2 - kp \left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \right) - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} k^2 \right) + \sigma}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)} \\
= & \frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \right) (\alpha_{II}(p)\alpha_I(k) - kp) + \sigma}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)}. \tag{A.23}
\end{aligned}$$

Resultando entonces,

$$I_0(k|p) = \left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \right) (\alpha_{II}(p)\alpha_I(k) - kp) + \sigma}{(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k))} \right] I(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)|p - k). \tag{A.24}$$

Las expresiones (A.7), (A.17) y (A.24) representan los resultados principales de este apéndice y son las que se usan en la sección 2.7.4 para la deducción de las ecuaciones reducidas de Rayleigh.

Apéndice B

Demostración Identidad

$$\left[2\pi\delta(q - q_m)\right]^2$$

Usando el hecho de que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin qL/2}{qL/2} dq = \frac{2\pi}{L}. \quad (\text{B.1})$$

Se define

$$\begin{aligned} 2\pi\delta(q - q_m) &= \lim_{L \rightarrow \infty} L \frac{\sin(L(q - q_m)/2)}{L(q - q_m)/2} \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L/2}^{L/2} \exp\{i(q - q_m)x\} dx. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Entonces,

$$\left[2\pi\delta(q - q_m)\right]^2 = \lim_{L \rightarrow \infty} \int \int \exp\{i(q - q_m)(x - x')\} dx dx'. \quad (\text{B.3})$$

Definiendo $\Delta x = x - x'$ resulta

$$\begin{aligned} \lim_{L \rightarrow \infty} \exp\{i(q - q_m)\Delta x\} d\Delta x dx' &= L \lim_{L \rightarrow \infty} \int \exp\{i(q - q_m)\Delta x\} d\Delta x \\ &= 2\pi\delta(q - q_m). \end{aligned} \tag{B.4}$$

Entonces se demuestra que

$$[2\pi\delta(q - q_m)]^2 = L2\pi\delta(q - q_m). \tag{B.5}$$