

Propiedades ópticas de películas delgadas semiconductoras en la presencia de efectos lineales en el vector de onda

F.J. Espinoza-Beltrán

*Centro de Investigación en Física, Universidad de Sonora,
Apartado postal A-088, 83190 Hermosillo, Sonora.*

P. Halevi

*Departamento de Física, Instituto de Ciencias,
Universidad Autónoma de Puebla,
Apartado postal J-48, 72570 Puebla, Puebla.*

(Recibido el 3 de mayo de 1989; aceptado el 6 de diciembre de 1989)

Resumen. Hemos estudiado las propiedades ópticas de CdS en la cercanía de la resonancia excitónica $B(n = 1)$. Este excitón se caracteriza por su fuerte dispersión espacial, la cual es consecuencia de un desdoblamiento de banda de energía que es lineal en el vector de onda. Para una frecuencia dada deben superponerse tres ondas planas parciales y dependiendo de la región de frecuencia, una, dos o tres ondas tendrán carácter propagatorio. Hemos calculado la reflectancia R , transmitancia T , y absortancia A para una película delgada con capas superficiales libres de excitones. Para este propósito empleamos un método de "impedancias de interface sucesivas" y dos diferentes condiciones adicionales en la frontera. Además de los espectros $R(\omega)$, $T(\omega)$, y $A(\omega)$ también hemos graficado la reflectancia como función del espesor de la película y los campos eléctricos de las tres ondas parciales en el interior de la película. Los diferentes picos y mínimos son interpretados tentativamente en términos de resonancias Fabry-Perot (ondas estacionarias) de los tres modos.

PACS: 78.65.Jd; 78.40.Ha; 73.60.Fw

1. Introducción

Los trabajos realizados por S.I. Pekar en 1957 [1] sobre dispersión espacial en sólidos predijeron por primera vez la presencia de ondas de luz adicionales. Los fenómenos de dispersión espacial, también llamados no-locales, aparecen cuando la constante dieléctrica del material es función del vector de onda del campo eléctrico dentro del material. Con el fin de predecir los efectos debidos a la dispersión espacial S.I. Pekar y J.J. Hopfield en 1958 [2] formularon el concepto de acoplamiento excitón-fotón, llamado comúnmente polaritón excitón. El excitón [3,4] es la excitación elemental o cuanto asociado a la polarización de una pareja electrón-hoyo, de manera semejante

como el fonón es la excitación elemental de las vibraciones de la red cristalina. Resultados experimentales independientes han coincidido en que la presencia de ondas adicionales es debida al movimiento de la masa excitónica efectiva, de manera que la energía cinética del excitón se agrega a su energía de formación.

La teoría de excitones fue formulada en los años treinta por Frenkel, Peierls y Wannier [3]. Esta teoría permitió formular los mecanismos por los cuales sólidos aislantes puros absorben luz visible o ultravioleta a una longitud de onda dada, y la forma en que disponen de dicha energía.

La presencia de modos de propagación adicionales conlleva al problema de las condiciones adicionales en la frontera (ABC) [1], es decir, condiciones que deben satisfacer las nuevas ondas en la frontera del medio no-local. Hasta la fecha, el ABC de Pekar es el que mejor se aproxima a los resultados experimentales.

En 1963 Hopfield y Thomas [5] introducen el modelo de capa "muerta" o capa superficial libre de excitones en la frontera del material no-local. Este modelo les condujo a resultados que, a muy buena aproximación, coinciden con resultados experimentales. Posteriormente el modelo de capa "muerta" ha sido usado satisfactoriamente en muchos tratamientos teóricos.

En 1959 Hopfield y Thomas [6], basándose en un trabajo anterior de D. Dutton (1958) [6], publicaron un artículo sobre el espectro de reflectancia del CdS a bajas temperaturas, donde identifican tres series excitónicas intrínsecas separadas, llamadas A , B y C . La serie A es la de frecuencia más baja, siendo fuertemente activada sólo para luz polarizada con el campo eléctrico perpendicular al eje del cristal ($\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$). Las series B y C se activaron para ambos modos de polarización de la luz ($\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$ y $\mathbf{E} \parallel \mathbf{c}$). La explicación a estos resultados la dieron en términos de excitones formados de un electrón de la banda de conducción y un hoyo de cada una de las tres bandas de valencia, las cuales son resultados de un rompimiento completo de la degeneración de las tres bandas p en el estado $\mathbf{q} = 0$, bajo la influencia del campo eléctrico del cristal y efectos de acoplamiento espín-órbita. Los estados cuánticos $n = 1$ de los excitones fueron detectados a 77°K , mientras que los $n = 2$, más débiles, sólo fueron apreciados a 4.2°K .

Posteriormente, en 1964, Mahan y Hopfield [7] reportaron mediciones de reflectividad del principal estado excitónico ($n = 1$) de la serie B en CdS. Observaron que sólo con el vector de onda y el campo eléctrico de la luz incidente, perpendiculares al eje del cristal ($\mathbf{q} \perp \mathbf{c}$ y $\mathbf{E} \perp \mathbf{c}$), aparece una estructura adicional de interés. La explicación de este fenómeno los llevó a desarrollar una teoría basada en términos de energía lineales en el vector de onda, de acuerdo con la simetría del cristal de CdS tipo Wurtzita. Según esta teoría, en cristales uniaxiales, como Wurtzita, la componente del campo eléctrico del cristal en dirección axial puede dar lugar a un acoplamiento espín-órbita, produciendo un desdoblamiento de la banda excitónica B en dos nuevas subbandas "+" y "-". El desdoblamiento excitónico acoplado a la luz da lugar a tres ramas polaritónicas transversales. Estas han sido detectadas por Koteles y Winterling [8,9,10]. Posteriormente P. Halevi y colaboradores [11], han calculado los espectros de reflectancia total atenuada (ATR) correspondientes al excitón B de CdS. Además del mínimo principal en la reflectancia se encontró un

mínimo adicional, al cual los autores interpretaron como un polaritón de superficie adicional proveniente exclusivamente de los efectos de dispersión espacial.

Las propiedades ópticas de los excitones de las series *A* y *C* (en CdS y otros semiconductores del grupo II-VI) han sido ampliamente estudiadas; véase por ejemplo el artículo de revisión reciente de P. Halevi [12]. En el caso de las series mencionadas los efectos de dispersión espacial provienen de un término en la energía del excitón que es cuadrático en el vector de onda. La serie *B* se distingue en un término adicional, lineal con este vector, como se menciona en el párrafo anterior. El propósito del presente trabajo es explorar los efectos del desdoblamiento lineal en el vector de onda sobre las propiedades ópticas de una película delgada. Por excelencia, tales efectos son mostrados por el excitón *B* de CdS. Utilizaremos los parámetros de este excitón, reportados en las referencias [8] y [9], para calcular la reflectancia, transmitancia y absortancia, incluyendo una capa muerta superficial. Nos limitamos al caso de incidencia normal, siendo el campo eléctrico de la onda perpendicular al eje cristalino *c*, el cual es paralelo a la superficie. Un estudio semejante para el excitón *A* ha sido realizado por Gaspar-Armenta y Halevi [13]. Los mismos autores [14] también investigaron la transmisión de pulsos de luz a través de películas semiconductoras no-locales.

En la Sec. 2 resumimos las propiedades esenciales de un polaritón-excitón en la presencia de términos lineales en el vector de onda. En la Sec. 3 presentamos el cálculo de la reflectancia y transmitancia de una película delgada semiconductor con las propiedades mencionadas. Nuestros resultados numéricos son reportados en la Sec. 4, en la cual se examinan las propiedades de una película delgada de CdS en la vecindad del excitón *B*. En particular, presentamos gráficas de barridos de frecuencia (espectros) y de espesor de la película. Además, se exhibe el perfil del campo eléctrico en la película, lo cual ayuda en la interpretación de las resonancias tipo Fabry-Perot en la película. La Sec. 5 se dedica a las conclusiones.

2. Tres modos de propagación

La geometría considerada en este trabajo es la siguiente. El eje cristalino uniaxial *c* es paralelo a la superficie de la película. La luz incide en la dirección perpendicular a la superficie, con el campo eléctrico perpendicular a *c*. Según Mahan y Hopfield [7], las energías de los excitones desdoblados está dada por

$$h\omega_{\pm}(\mathbf{q}) = h\omega_T(0) + \frac{\hbar^2}{2m}q^2 \pm \phi q, \quad (1)$$

donde ω_T es la frecuencia resonante del excitón en el límite de longitud de onda infinita, *m* es la masa excitónica transversal (respecto al eje cristalino), y ϕ es un parámetro proporcional al campo cristalino que causa el desdoblamiento. Los tres términos en el lado derecho de la Ec. (1) tienen los significados, respectivamente, de energía potencial (para $q = 0$), energía cinética y energía potencial de interacción entre el excitón y el campo cristalino. Los dos signos algebraicos corresponden al

efecto de desdoblamiento del excitón B . Es conveniente hablar de un excitón “+” y un excitón “-”; estos dos poseen iguales fuerzas osciladoras $2\pi\beta$.

Nuestra función dieléctrica está dada por

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \frac{2\pi\beta\omega_T^2}{\omega_+^2(q) - \omega^2 - i\nu\omega} + \frac{2\pi\beta\omega_T^2}{\omega_-^2(q) - \omega^2 - i\nu\omega}. \quad (2)$$

Aquí, ν es una frecuencia fenomenológica disipativa y ϵ_0 es la constante dieléctrica de altas frecuencias. Los tres términos corresponden a las contribuciones del fondo dieléctrico del excitón “+” y del excitón “-”. Puede verse que esta expresión se reduce a la ecuación correspondiente a la función dieléctrica para el excitón A cuando se anula el parámetro ϕ .

En la Ec. (1) los últimos dos sumandos del miembro derecho son cantidades pequeñas comparadas con el primero, de manera que una buena aproximación para $\omega_{\pm}^2(q)$ es la siguiente

$$\omega_{\pm}^2(q) = \omega_T^2(0) + Dq^2 \pm \Phi q, \quad (3)$$

donde

$$D = \frac{h\omega_T^2}{m}, \quad \Phi = \frac{2\omega_T\phi}{h}. \quad (4)$$

Sustituyendo la Ec. (3) en la Ec. (2), se tienen que

$$\epsilon(\omega, q) = \epsilon_0 - \frac{\omega_P^2(\Omega^2 - Dq^2)}{\Omega^4 - (2D\Omega^2 + \Phi^2)q^2 + D^2q^4}, \quad (5)$$

donde

$$\Omega^2 = \omega^2 - \omega_T^2 + i\nu\omega \quad \text{y} \quad \omega_P^2 = 4\pi\beta\omega_T^2. \quad (6)$$

Teniendo incidencia normal, sólo podrán excitarse modos de vibración transversales en el semiconductor. Dichos modos satisfacen la relación de dispersión

$$\epsilon(\omega, q) = \frac{q^2}{q_0^2}, \quad q_0 = \frac{\omega}{c}. \quad (7)$$

Sustituyendo la Ec. (5) en la Ec. (7) se obtiene la ecuación cúbica en q^2

$$D^2q^6 - (2D\Omega^2 + \epsilon_0D^2q_0^2 + \Phi^2)q^4 + (\Omega^4 - \omega_P^2Dq_0^2 + 2\epsilon_0D\Omega^2q_0^2 + \epsilon_0\Phi^2q_0^2)q^2 + (\omega_P^2 - \epsilon_0\Omega^2)\Omega^2q_0^2 = 0. \quad (8)$$

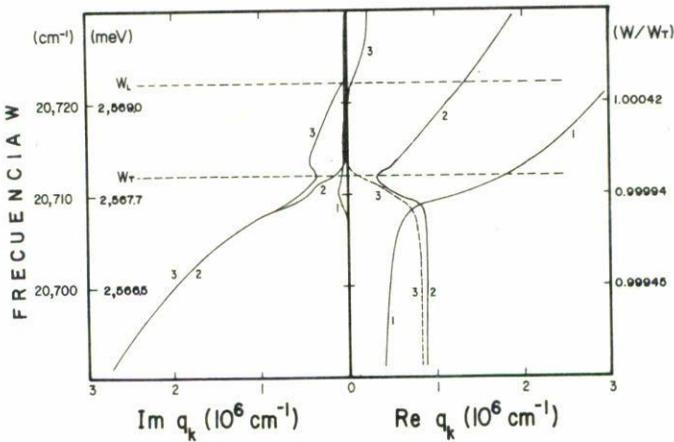


FIGURA 1. Relación de dispersión para las tres ondas de volumen parciales de CdS-Excitón $B(n = 1)$. La frecuencia ω es real, mientras el vector de la onda q_k ($k = 1, 2, 3$) es complejo. En el lado derecho de la figura $Re q_k$ describe las propiedades de dispersión, en el lado izquierdo $Im q_k$ corresponde a las propiedades de atenuación. Se nota una división natural en tres regiones de frecuencia: debajo de la frecuencia transversa ω_T , entre ω_T y la frecuencia longitudinal ω_L , y encima de ω_L . En estas regiones existen, respectivamente, una, dos, y tres ondas parciales propagatorias.

Para propagación en una dirección dada ($Re q > 0$), esta ecuación da como resultado tres ramas polaritónicas transversales, con vectores de onda q_k ($k = 1, 2, 3$), en el medio no local. Los tres vectores son, en general, funciones complejas que deben tener parte imaginaria positiva. Esto asegura que todas las componentes del campo electromagnético decaen a cero para grandes distancias a partir de la superficie. La Fig. 1 muestra las relaciones para $\omega(Re q_k)$ y $\omega(Im q_k)$, usando los parámetros dados en las Refs. [8] y [9].

Para el modo $k = 1$ se cumple la desigualdad $Re q_1 \gg Im q_1$ para todas las frecuencias. Por lo tanto, el modo parcial $k = 1$ es una onda que se propaga con poca atenuación. Notamos que la dispersión $\omega(Re q_1)$ se asemeja mucho a la de la "onda no-local" del polaritón A de CdS. El modo $k = 2$ es propagatorio solamente encima de la frecuencia ω_T , y el modo $k = 3$ es propagatorio para $\omega > \omega_L$, siendo ω_L la frecuencia longitudinal definida por $\omega_L^2 = \omega_T^2 + \omega_p^2/\epsilon_0$ (aunque para incidencia normal no se tienen ondas longitudinales, las cuales son observadas para incidencia oblicua con polarización p para frecuencias $\omega > \omega_L$). En la región de los "rayos residuos" ($\omega_T < \omega < \omega_L$) el modo $k = 3$ demuestra una atenuación exponencial a partir de la superficie, así que el comportamiento se asemeja al "efecto piel" en metales. Este mismo modo ($k = 3$) exhibe un comportamiento extraño debajo de ω_T , siendo $Re q_3 < 0$. Esta situación corresponde a una fuente (para la onda 3) en el infinito. Debido al hecho de que tal fuente no existe en nuestro problema, parece más conveniente interpretar a las ondas 2 y 3 debajo de ω_T como un conjunto. Una mirada a la Fig. 1 sugiere que estas ondas parciales están de hecho fuertemente

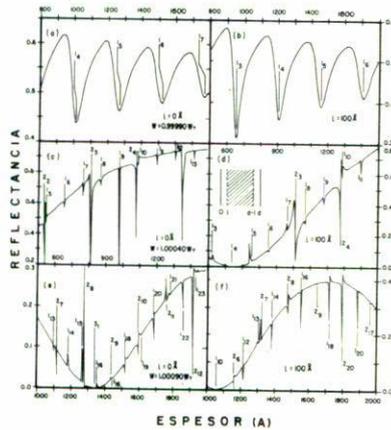


FIGURA 2. Reflectancia en función del espesor d de una película de CdS en la región espectral del excitón B . En (a) y (b) se consideran las regiones debajo de ω_T ; en (c) y (d) la región entre ω_T y ω_L ; y en (e) y (f) la región encima de ω_L . Además, en (a), (c) y (e) se ignoró la existencia de capas libres de excitones; mientras tanto, tales capas han sido incluidas en (b), (d) y (f); ver inserto. La definición de los números k_n junto a las resonancias tiene el significado de que n medias longitudes de onda (o sea $\pi/\text{Re } q_k$) de la onda parcial k caben nominalmente en el espesor $d - 2l$ de la parte central (bulk) de la película. Tal asignación se hizo tentativamente mediante la relación de Fabry-Perot, Ec. (29). Para facilitar la interpretación de las resonancias se utilizó la condición adicional a la frontera de que las derivadas normales de la polarización excitónica en las interfaces internas del medio no-local se anulan [16], y que además la frecuencia de amortiguamiento ν es pequeña.

correlacionadas. Al mismo tiempo, el hecho de que $\text{Im } q_{2,3}$ es bastante más grande que $|\text{Re } q_{2,3}|$ implica que debajo de ω_T los modos $k = 2$ y 3 no son propagatorios.

Podemos anticipar interferencia de ondas y las resonancias Fabry-Perot correspondientes solamente si $\text{Re } q_k \gg \text{Im } q_k$. Entonces, lo dicho en el párrafo anterior implica que esperamos resonancias de este tipo provenientes de un solo modo parcial ($k = 1$) en la región $\omega < \omega_T$, de dos modos ($k = 1$ y 2) para $\omega_T < \omega < \omega_L$, y de los tres modos para $\omega > \omega_L$.

3. Reflectancia y transmitancia

Escogemos el eje y paralelo al eje cristallino c ($\hat{y} \parallel c$) y el eje z perpendicular a la película delgada (véase la Fig. 2). La película tiene espesor d , siendo las posiciones de las dos caras $z = 0$ y $z = d$. Además, incluimos capas libres de excitones, de espesor l , en ambas superficies. En estas regiones ($0 \leq z \leq l$, $d - l \leq z \leq d$) la constante dieléctrica es ϵ_0 . Por otro lado, en el interior ("bulk", $l < z < d - l$) la

función dieléctrica es no-local, dada por la Ec. (5). La luz incide en la dirección $+z$ sobre la superficie $z = 0$. Por lo tanto, el campo eléctrico es paralelo al eje \hat{x} , o sea, perpendicular a \mathbf{c} . El campo magnético de la onda es paralelo a \hat{y} .

En el caso de un medio semiinfinito ($z \geq 0$) no-local, el campo eléctrico es una superposición de las tres ondas parciales $k = 1, 2, 3$ con $\text{Im} q_k > 0$. En la región "bulk" de nuestra película tenemos para cada onda parcial "incidente" una onda correspondiente "reflejada". Entonces se requiere una superposición de seis ondas parciales con vectores de onda $\pm q_1, \pm q_2, \pm q_3$, soluciones de la Ec. (8) de sexto grado. Designaremos a las amplitudes de estas ondas $E_k^{(+,-)}$. Siendo las capas muertas medios locales, los vectores de onda posibles son $\pm q_l = \pm q_0 \sqrt{\epsilon_0}$. Las amplitudes en la "primera" ("segunda") capa muerta son $E_{l1}^{(+,-)}$ ($E_{l2}^{(+,-)}$). El vector de onda de la onda incidente (reflejada) en el vacío es q_0 ($-q_0$) y su amplitud es E_I (E_R). En el otro lado de la película tenemos una sola onda transmitida con vectores de onda q_0 y amplitud E_T . Los campos eléctricos para cada región se expresan de la siguiente manera

$$E(z) = E_I e^{iq_0 z} + E_R e^{-q_0 z}, \quad z \leq 0 \quad (9)$$

$$E(z) = E_{l1}^{(+)} e^{iq_1 z} + E_{l1}^{(-)} e^{-iq_1 z}, \quad 0 \leq z \leq l \quad (10)$$

$$E(z) = \sum_{k=1}^3 \left(E_k^{(+)} e^{iq_k z} + E_k^{(-)} e^{-q_k z} \right), \quad l \leq z \leq d-l \quad (11)$$

$$E(z) = E_{l2}^{(+)} e^{iq_2 z} + E_{l2}^{(-)} e^{-q_2 z}, \quad d-l \leq z \leq d \quad (12)$$

$$E(z) = E_T e^{iq_0 z}, \quad z \geq d \quad (13)$$

Los campos magnéticos pueden calcularse a partir de los campos eléctricos (9–13) usando la ley de Faraday para ondas armónicas

$$B = -\frac{i}{q_0} \frac{\partial E}{\partial z}. \quad (14)$$

En ninguna de las tres regiones hay densidades volumétricas de carga o corriente. Con esto se tiene que los campos eléctricos y magnéticos totales (todos paralelos a las interfaces) son continuos

$$E_x(z^-) = E_x(z^+) \quad \text{y} \quad B_y(z^-) = B_y(z^+), \quad (15)$$

donde z^- y z^+ representan la posición del lado izquierdo (derecho) de cualquier interface. Estas condiciones a la frontera, llamadas condiciones de Maxwell, dan lugar a ocho ecuaciones. Sin embargo, éstas no son suficientes para obtener un sistema completo, ya que se tienen doce campos normalizados E_I desconocidos. Esto aparece porque en el medio no-local se tienen tres ondas moviéndose a la

derecha y tres a la izquierda, además de las cuatro ondas en las capas muertas y las ondas reflejada y transmitida.

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

$$\mathcal{P}(z) = \mathbf{P}(z) - \frac{\epsilon_0 - 1}{4\pi} \mathbf{E}(z), \tag{16}$$

o sea, la polarización total menos la polarización de fondo dieléctrico. Podemos reescribir esta ecuación en términos de las susceptibilidades de los excitones “+” y “-”

$$\mathcal{P}(z) = \mathcal{P}_+(z) + \mathcal{P}_-(z), \tag{17}$$

donde

$$\mathcal{P}_\pm(z) = \sum_{k=1}^3 \chi_\pm(q_k) \left(E_k^{(+)} e^{iq_k z} + E_k^{(-)} e^{-iq_k z} \right), \tag{18}$$

con

$$\chi_\pm(q_k) = \frac{\omega_P^2}{8\pi} \frac{1}{\omega_\pm^2(q_k) - \omega^2 - i\nu\omega}. \tag{19}$$

χ_+ y χ_- son las susceptibilidades correspondientes al segundo y tercer término de la función dieléctrica (2).

Mahan y Hopfield [7] usaron una generalización del *ABC* de Pekar: supusieron que cada una de las polarizaciones excitónicas parciales $\mathcal{P}_+(z)$ y $\mathcal{P}_-(z)$ se anulan en la interface bulk/capa muerta, o sea $\mathcal{P}_\pm(z) = 0$. Este *ABC* dió buenos resultados en la comparación del espectro de reflectancia calculado y observado del excitón *B* de CdS [7]. Esta condición, aplicada a nuestra película delgada, se puede escribir en la forma

$$\mathcal{P}_\pm(l) = \sum_{k=1}^3 \chi_\pm(q_k) \left(E_k^{(+)} e^{iq_k l} + E_k^{(-)} e^{-q_k l} \right) = 0, \tag{20a}$$

$$\mathcal{P}_\pm(d-l) = \sum_{k=1}^3 \chi_\pm(q_k) \left(E_k^{(+)} e^{iq_k(d-l)} + E_k^{(-)} e^{-iq_k(d-l)} \right) = 0, \tag{21a}$$

Con estas cuatro ecuaciones completamos las doce necesarias para calcular los campos E_R , $E_{11}^{(+,-)}$, $E_{1,2,3}^{(+,-)}$, $E_{12}^{(+,-)}$ y E_T (normalizados a E_I) de las Ecs. (9-13).

A pesar del hecho de que el *ABC* de Pekar está ganando una creciente aceptación [12], la interpretación de las resonancias de interferencia en nuestros espectros se facilita usando un *ABC* diferente, que es una generalización del *ABC* sugerido por Fuchs y Kliever y por Ting *et al.* [16]. Como veremos más adelante, el uso de este *ABC* da lugar a efectos no-locales pequeños en general. Una excepción importante ocurre cuando una onda parcial no-local exhibe una resonancia, pero resulta que en este caso se satisface la condición de Fabry-Perot, Ec. (28), con alta precisión. El *ABC* mencionado supone que la derivada normal de $\mathcal{P}(z)$ se anula en la interfase interna bulk/capa muerta. En nuestro caso, las Ecs. (20a) y (21a) se reemplazan por las siguientes

$$\frac{\partial \mathcal{P}_{\pm}(l^+)}{\partial z} = i \sum_{k=1}^3 q_k \chi_{\pm}(q_k) \left(E_k^{(+)} e^{iq_k l} - E_k^{(-)} e^{-iq_k l} \right) = 0, \tag{20b}$$

$$\frac{\partial \mathcal{P}_{\pm}(d-l^-)}{\partial z} = i \sum_{k=1}^3 q_k \chi_{\pm}(q_k) \left(E_k^{(+)} e^{iq_k(d-l)} - E_k^{(-)} e^{-iq_k(d-l)} \right) = 0. \tag{21b}$$

El cálculo de las reflectancia y transmitancia se hará siguiendo un método de escalafón de impedancias de superficie. Este método consiste en expresar la reflectancia en términos de la impedancia de la primera interface. Esta a su vez se calcula como función de la impedancia de la segunda interface en $z = l$. El método continúa hasta llegar a la superficie en $z = d$, en la cual la impedancia de superficie es igual a la de vacío.

Podemos definir una impedancia de superficie para cualquiera de las interfaces de nuestro sistema planar. Designando con $z = z_0$ a alguna de estas interfaces, la impedancia de superficie correspondiente para incidencia normal se define como

$$Z(z_0) = \frac{E(z_0)}{B(z_0)}. \tag{22}$$

Aquí $E(z_0)$ y $B(z_0)$ son los campos electromagnéticos justo a la izquierda (z_0^-) o a la derecha (z_0^+) de la interface z_0 . Debido a la continuidad de $E(z_0)$ y $B(z_0)$ tenemos que

$$Z(z_0^-) = Z(z_0^+), \quad z_0 = 0, l, d-l, d. \tag{23}$$

Utilizando las expresiones para los campos de las Ecs. (9-14) obtenemos que

$$Z(0^-) = \frac{1 + E_R/E_I}{1 - E_R/E_I}, \tag{24a}$$

$$Z(0^+) = \frac{q_0 \frac{1 + E_{l1}^{(-)}/E_{l1}^{(+)}}{1 - E_{l1}^{(-)}/E_{l1}^{(+)}}}{q_l} \quad (24b)$$

$$Z(l^-) = \frac{q_0 \frac{1 + E_{l1}^{(-)}/E_{l1}^{(+)}}{1 - E_{l1}^{(-)}/E_{l1}^{(+)}} e^{-2iq_l l}}{q_l} \quad (25a)$$

$$Z(l^+) = \frac{q_0 \sum_{k=1}^3 \left(E_k^{(+)} e^{iq_k l} + E_k^{(-)} e^{-iq_k l} \right)}{\sum_{k=1}^3 q_k \left(E_k^{(+)} e^{iq_k l} - E_k^{(-)} e^{-iq_k l} \right)} \quad (25b)$$

$$Z(d-l^-) = \frac{q_0 \sum_{k=1}^3 \left(E_k^{(+)} e^{iq_k(d-l)} + E_k^{(-)} e^{-iq_k(d-l)} \right)}{\sum_{k=1}^3 q_k \left(E_k^{(+)} e^{iq_k(d-l)} - E_k^{(-)} e^{-iq_k(d-l)} \right)} \quad (26a)$$

$$Z(d-l^+) = \frac{q_0 \frac{1 + E_{l2}^{(-)}/E_{l2}^{(+)}}{1 - E_{l2}^{(-)}/E_{l2}^{(+)}} e^{-2iq_l(d-l)}}{q_l} \quad (26b)$$

$$Z(d^-) = \frac{q_0 \frac{1 + E_{l2}^{(-)}/E_{l2}^{(+)}}{1 - E_{l2}^{(-)}/E_{l2}^{(+)}} e^{-2iq_l d}}{q_l} \quad (27a)$$

$$Z(d^+) = 1. \quad (27b)$$

La última ecuación se explica por el hecho de que en el vacío (y en unidades gaussianas) $\mathbf{E} = \mathbf{B}$.

La reflectancia se determina mediante las Ecs. (23-27) y los *ABC*'s, Ecs. (20) y (21), de la siguiente manera. Igualando los lados derechos de las Ecs. (27b) y (27a), se calcula el cociente $E_{l2}^{(-)}/E_{l2}^{(+)}$, y este a su vez, determina $Z(d-l^+)$, es decir, $Z(d-l^-)$. Entonces, utilizando la Ec. (26a) y los cuatro *ABC*'s de las Ecs. (20-21), podemos calcular cinco de los seis campos parciales $E_k^{(+,-)}$ normalizando al sexto, por ejemplo $E_1^{(-)}/E_1^{(+)}$, $E_2^{(+)} / E_1^{(+)}$, $E_2^{(-)}/E_1^{(+)}$, $E_3^{(+)} / E_1^{(+)}$, $E_3^{(-)}/E_1^{(+)}$. El lado derecho de la Ec. (25b) es expresable en términos de estos mismos cinco cocientes, así que $Z(l^+)$ y $Z(l^-)$ quedan determinados. De la Ec. (25a) calculamos $E_{l1}^{(-)}/E_{l1}^{(+)}$, y este cociente, a su vez, lleva a $Z(0^+)$ o $Z(0^-)$ a través de la Ec. (24b). Entonces E_R/E_I se calcula de la Ec. (24a). La reflectancia es $R = |E_R/E_I|^2$.

La transmitancia, $T = |E_T/E_I|^2$, se calcula mediante una generalización del método descrito en la Ref. [13]. Finalmente, la absorbancia es $A = 1 - R - T$. Los detalles de los cálculos de R y de T aparecen en la Ref. [15]. Utilizando métodos semejantes, hemos calculado también el perfil $E(z)$ del campo eléctrico en la película.

| | |
|---|--------------------------|
| $\gamma = \nu/\omega_T$ | 2.921×10^{-5} |
| $\omega_P/\omega_T = (4\pi\beta)^{1/2}$ | 0.0838 |
| ω_T | 2567.9 meV |
| D/c^2 | 4.18876×10^{-6} |
| ϵ_0 | 7.2 |
| $\Psi = c\Phi/D\hbar$ | 13.55 |

TABLA I. Parámetros para CdS, excitón $B(n=1)$ [8,9].

4. Resultados numéricos

Hemos puesto a prueba nuestros cálculos y programa de computadora con los casos límite: $\phi \rightarrow 0$ y $d \rightarrow \infty$. Para un valor muy pequeño del parámetro de acoplamiento ϕ , el excitón B debe tener propiedades ópticas prácticamente idénticas a las del excitón A . De hecho, para tales valores de ϕ hemos logrado reproducir varias gráficas de R , T y A de la Ref. [13]. Para d muy grande ($10 \mu\text{m}$), en la región $\omega_T < \omega < \omega_L$, nuestro cálculo de $R(\omega)$ reproduce con muy buena precisión un espectro de Mahan y Hopfield [7]. Para $\omega < 0.9999 \omega_T$ una dificultad computacional causa divergencias no físicas para películas gruesas. Por otro lado, encima de ω_L se obtienen resonancias Fabry-Perot que pueden esperarse en esta región para una película de cualquier espesor finito.

En todos los cálculos numéricos hemos utilizado los parámetros de las Refs. [8] y [9], resumidos en la Tabla I, correspondientes al excitón B de CdS (estos parámetros son aproximadamente iguales a los usados por Mahan y Hopfield [7]).

Las propiedades de nuestra película semiconductora dependen fuertemente de la región espectral. Según la Fig. 1, se presenta una división natural a tres regiones: $\omega < \omega_T$, $\omega_T < \omega < \omega_L$ y $\omega > \omega_L$. No obstante, el amortiguamiento no-local, así como el fenomenológico (local), impiden un delineamiento bien definido y el comportamiento en las cercanías inmediatas de ω_T y ω_L es muy complejo. Nos hemos fijado en tres frecuencias, una en cada una de las regiones mencionadas: $\omega = 0.9999 \omega_T$, $\omega = 1.0004 \omega_T$ y $\omega = 1.0009 \omega_T$. Primero consideramos la reflectancia R en función del espesor d de la película (barrido de espesor) y posteriormente a los perfiles $E_k^{(+,-)}$ de los campos eléctricos en la película. Estos estudios facilitan la interpretación de los espectros $R(\omega)$, $T(\omega)$ y $A(\omega)$.

Barrido de espesor

En la Fig. 2 presentamos la reflectancia R en función del espesor de la película d , ignorando la capa muerta ($l=0$) en las partes (a), (c) y (e), y tomándola en cuenta en (b), (d) y (f). Aquí usamos la generalización de ABC de Fuchs y Kliever o de

Ting *et al.* [16], o sea, las Ecs. (20b) y (21b). Es conocido [12] que las amplitudes de las ondas adicionales (“no-locales”) son pequeñas en comparación con la “onda local” en el caso de este *ABC*, lo que ayudará en la interpretación de las resonancias.

La Fig. 1 muestra que debajo de ω_T existe solamente una onda propagatoria caracterizada por $\text{Re } q_1(\omega)$, siendo los modos parciales $k = 2, 3$ fuertemente atenuados. Por lo tanto, no es sorprendente que en la Fig. 2(a), para $\omega = 0.9999 \omega_T$, aparezca una sola serie de resonancias. Para $l = 0$ interpretamos esta serie en términos de resonancias tipo Fabry-Perot: en el caso local $R(d)$ es una función periódica con periodo igual a una media longitud de onda en la película y con mínimos en las posiciones $d = (\lambda/2)n$. En la presencia de absorción pequeña esta condición puede expresarse en la forma

$$(\text{Re } q_k)d \cong \pi n_k, \quad n_k = 1, 2, 3. \tag{28}$$

Las posiciones nominales de los mínimos, o sea los dados por la última ecuación, están marcados en la Fig. 2(a) mediante la designación 1_n (“ n medias longitudes de onda del modo parcial $k = 1$ ”) con una línea vertical adjunta. El hecho de que los mínimos correspondientes aparecen a la derecha de las posiciones nominales se explica con los fuertes efectos no-locales que existen en las cercanías de ω_T . No obstante, las distancias Δd entre dos mínimos consecutivos satisfacen muy bien la ecuación $(\text{Re } q_k)\Delta d = \pi$.

El efecto de las capas muertas puede entenderse cualitativamente mediante el siguiente argumento. Para $\omega = .9999 \omega_T$ la constante dieléctrica correspondiente al modo parcial $k = 1$ es muy alta, $\epsilon_1 = (\text{Re } q_1/q_0)^2 \cong 94$. Ahora, en las capas muertas (con $\epsilon_0 = 7.2$), tenemos que $q_1l/\pi \cong 0.1$. Entonces la penetración de la onda a las capas muertas es muy pequeña y las oscilaciones están prácticamente limitadas a la parte no-local de la película. La conclusión es que, con buena aproximación, podemos reemplazar la Ec. (28) por

$$(\text{Re } q_k)(d - 2l) \cong \pi n_k. \tag{29}$$

Las líneas verticales en la Fig. 2(b) indican las posiciones predichas por esta fórmula. El acuerdo con las posiciones de los mínimos es excelente, a pesar de la cercanía a la frecuencia ω_T . Llamamos también la atención a que la amplitud de las oscilaciones en las Figs. 2(a) y 2(b) se va amortiguando con el espesor debido a absorción de naturaleza tanto local como no-local.

En la región de frecuencia $\omega_T < \omega < \omega_L$ no hay ondas locales propagándose en la película. Las ondas no-locales $k = 1$ y 2 son propagatorias presentando resonancias aproximadamente en las posiciones predichas por la Ec. (28). Esto se muestra en la Fig. 2(c), para $\omega = 1.0004 \omega_T$, mediante las líneas verticales, donde estamos denotando por 1_n (2_n) las resonancias de orden n debidas al modo $k = \hat{1}$ ($= 2$). Estas interpretaciones de las resonancias, así como en otras figuras más adelante, son tentativas. Notamos que en la cercanía de las resonancias los efectos no-locales juegan un papel muy importante aún en el caso de *ABC* de Fuchs y Kliever y Ting *et al.* La envolvente de las resonancias (estructura gruesa) describe el comportamiento

local de la película ($D = 0$ y $\phi = 0$). Este está dominado por el efecto de piel, de manera tal que muy poca luz penetra a una profundidad superior a $2/\text{Im} q_3$. La presencia de capas muertas, Fig. 2(d), causa un desplazamiento de todas las resonancias en $2l$ hacia espesores más grandes, según muestra la Ec. (29). Además, notamos que la estructura gruesa correspondiente a la onda local $k = 3$ muestra un mínimo con reflectancia $\cong 0$, o pesar de que la región central es un medio opaco. Esto no es sorprendente, ya que es conocido en la óptica que ciertas combinaciones hechas a la medida de capas delgadas de diferentes espesores e índices de refracción pueden ocasionar este comportamiento.

Para frecuencias $\omega > \omega_L$ se tienen tres ondas propagatorias, donde sólo el modo 3 representa una onda local. Nuevamente el comportamiento grueso de $R(d)$ es determinado por esta onda, apareciendo las resonancias de los modos 1 y 2, más débiles, superpuestas. Esto es mostrado en la Fig. 2(e) para $\omega = 1.0009 \omega_T$. Puede observarse que la Ec. (29) predice correctamente las posiciones de las resonancias, aunque algunas de éstas se presentan como máximos de reflectancia. El mínimo grueso es debido a la primera resonancia del modo 3. Las resonancias son señaladas en la gráfica por medio de líneas verticales denotadas por k_n . La introducción de las capas muertas, Fig. 2(f), causa un corrimiento de las resonancias no locales en 200 \AA a la derecha, de la misma manera como observamos en las Figs. 2(b) y (d) en comparación con las Figs. 2(a) y (c). Por otro lado, la estructura gruesa se recorre aproximadamente 300 \AA hacia la izquierda. Este comportamiento se explica por el hecho que la resonancia ancha en aproximadamente 1050 \AA no está dominada por la "onda local" $k = 3$ en la parte central de la película, sino que influyen fuertemente las capas muertas. Esto podemos apreciarlo en el hecho de que la constante dieléctrica efectiva para el modo 3 es $\epsilon_3 = (\text{Re} q_3/q_0)^2 = 3.24$ para la frecuencia considerada. Como este valor es menor que $\epsilon_0 (= 7.2)$ el "espesor efectivo" de la capa muerta es mayor que $2l$ (una media longitud de la onda en las capas muertas es $\lambda_1/2 = 882 \text{ \AA}$).

Usando ahora la generalización del *ABC* de Pekar [1], Ecs. (20a) y (21a), se consideran los mismos casos que en la Fig. 2. Se grafica $R(d)$, Fig. 3, con $l = 0$ en las partes (a), (c) y (e), y con capas muertas ($l = 100 \text{ \AA}$) en (b), (d) y (f). Los efectos no-locales debidos al *ABC* de Pekar son muy fuertes, por lo que la interpretación de las gráficas de reflectancia se complica.

La Fig. 3(a), correspondiente a la frecuencia $\omega = 0.9999 \omega_T$, presenta un comportamiento análogo al de la Fig. 2(a). Los mínimos asociados con la onda $k = 1$ demuestran ahora desplazamientos fuertes hacia la izquierda. Esto tentativamente se explica a partir de que la amplitud de la onda 2 es apreciable en la cercanía de las superficies de la película, como veremos más adelante en la Fig. 5(a). Sin embargo, la separación periódica entre los mínimos coincide con media longitud de onda de la onda 1, $\lambda_1/2$. Un aspecto notorio es el hecho de que los mínimos de reflectancia son ahora menos pronunciados, poniéndose de manifiesto la presencia de un amortiguamiento no-local, además del fenomenológico. El efecto de las capas muertas, Fig. 3(b), consta de un desplazamiento uniforme en las posiciones de los mínimos, respecto a la Fig. 3(a) en 200 \AA , manteniéndose la periodicidad.

En $\omega = 1.0004 \omega_T$, se tiene dos ondas armónicas ($k = 1$ y 2), cuyas resonancias se observan en la Fig. 3(c). La identificación de las resonancias mediante la Ec. (28)

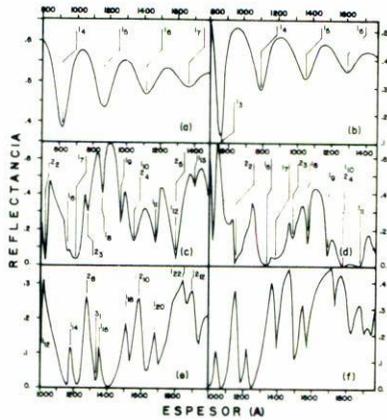


FIGURA 3. Lo mismo que en la Fig. 2 pero utilizando la condición adicional a la frontera de que la polarización excitónica se anula en las interfaces del medio no-local (*ABC* de Pekar). Se utilizaron los parámetros citados en la Tabla I. Debido a los fuertes efectos no-locales se nota, frecuentemente, una discrepancia fuerte entre posiciones nominales y actuales de las resonancias. Las asignaciones k_n son tentativas.

resulta difícil y, por lo tanto, los números k_n en la figura deben ser considerados tentativos (la validez de esta ecuación no se ha probado para un medio no-local). El estudio de los perfiles de los campos eléctricos dentro de la película [Figs. 5(c) y (d)] demuestran que la amplitud de la onda 3 es muy grande; por lo tanto, esta onda parcial podría causar desplazamientos en las posiciones de las resonancias de las ondas 1 y 2. También existe el problema de ocultamiento de una resonancia por otra cercana o dobles resonancias. La Fig. 3(d) presenta la reflectancia considerando capas muertas. Las diferencias con 3(c) son algo más que desplazamientos, ya que hay un cambio en la forma general de la gráfica. Sin embargo, algunos mínimos prominentes de la Fig. 3(c) resultan ser desplazados hacia espesores mayores en aproximadamente 200 Å; únicamente éstos son marcados en la Fig. 3(d).

Para $\omega = 1.0009 \omega_T$, Fig. 3(e), intervienen los tres modos $k = 1, 2, 3$ que son propagatorios encima de ω_T . Las resonancias debidas a los modos 1 y 2 coinciden aproximadamente con las predicciones de la Ec. (28), pero se manifiestan ahora en forma de máximos y son más prominentes para órdenes pares. La onda 3 contribuye con una sola resonancia, 3_1 , que aparece como un mínimo en la posición nominal. Es interesante notar la semejanza entre los dos grupos de máximos ($1_{14}, 2_8, 1_{16}$) y ($1_{18}, 2_{10}, 1_{20}$). La introducción de la capa muerta, Fig. 3(f), provoca también un desplazamiento general de las resonancias respecto a 3(e), manteniéndose como máximos y en las mismas posiciones relativas. El efecto de las capas muertas complica la

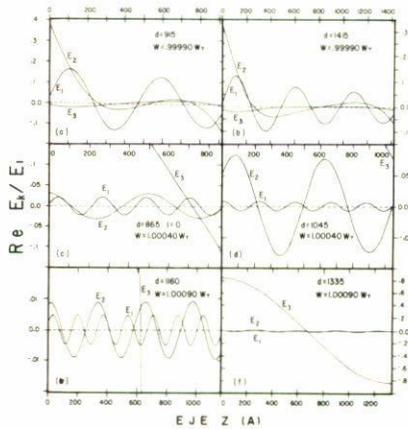


FIGURA 4. Perfiles de los campos eléctricos parciales en la película $E_k(z) = \text{Re}[E_k^{(+)}e^{iq_k z} + E_k^{(-)}e^{-iq_k z}]/E_I$ en función de z . Presentamos el comportamiento en las tres regiones: $\omega < \omega_T$, (a) y (b); $\omega_T < \omega < \omega_L$, (c) y (d); y $\omega > \omega_L$, (e) y (f). Los parámetros se tomaron de la Tabla I con la excepción de γ , ya que se supuso muy pequeña. Además, se trabajó con el ABC de Fuchs y Kliewer [16], y se ignoraron las capas muertas. Los espesores de la película d escogidos en (a), (b), (c), (d), (e) y (f) corresponden a las siguientes resonancias en la Fig. 2: 1₄ y 1₅ en (a), 2₃ y 1₉ en (c), 1₁₄ y 3₁ en (e). Contando el número n de “medias ondas” de la onda resonante parcial k que caben en el espesor d , observamos que en todos los casos (a)–(f) este número sí corresponde a la asignación k_n en la Fig. 2.

identificación de las resonancias, sin embargo, la comparación con la Fig. 3(e) es de gran ayuda, así como también el trazo de los perfiles de campo eléctrico.

Perfil de campo eléctrico

Con el fin de ayudarnos con el análisis de las gráficas de reflectancia se obtienen los perfiles de los campos eléctricos dentro de la película. Esto es, se grafican

$$\text{Re } E_k(z) = \text{Re}(E_k^{(+)}e^{iq_k z} + E_k^{(-)}e^{-iq_k z}).$$

Enseguida se analizan las Figs. 4 y 5, las cuales contienen los perfiles de los campos eléctricos correspondientes a dos mínimos de cada una de las partes (a), (c) y (e) de las Figs. 2 y 3, respectivamente.

Los perfiles hechos para mínimos de reflectancia donde los ABC empleados son los de las Ecs. (20b) y (21b) aparecen en la Fig. 4. Cada una de las partes (a) y (b) corresponde a un mínimo de la Fig. 2(a). En estos casos la resonancia es debida al modo $k = 1$ (1₄ y 1₅). Observando el perfil E_1 , la onda resonante, se ve que

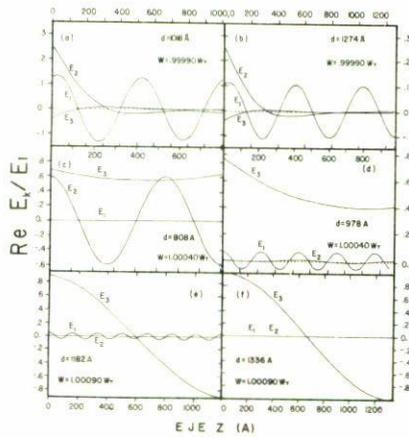


FIGURA 5. Igual que en la Fig. 4 pero con valor realista de γ y el ABC de Pekar. Los espesores seleccionados en las Figs. (a), (b), (c), (d), (e) y (f) corresponden a las siguientes resonancias en la Fig. 3: 1_4 y 1_6 en (a), 1_8 y 2_4 en (c), 1_{14} y 3_1 en (e). Debido a los fuertes efectos de dispersión espacial el número de "medias longitudes de onda" no corresponde a la asignación k_n en la Fig. 3 con una precisión tan buena como en el caso del ABC de Fuchs-Kliewer.

hay aproximadamente un número entero n de medias longitudes de onda, $\lambda_1/2$, en el espesor de la película. Los perfiles E_2 y E_3 son ondas amortiguadas que no provocan resonancias. Las partes (c) y (d) corresponden a mínimos de la Fig. 2(c). En este caso aparecen dos ondas armónicas, E_1 y E_2 , y una amortiguada E_3 . Para dibujar la Fig. 4(c) y (d) escogimos el espesor correspondiente a las resonancias 2_3 y 1_9 , respectivamente, en la Fig. 2(c). Como se puede esperar, en la Fig. 4(c) caben aproximadamente tres medias longitudes de onda del campo E_2 en el espesor de la película; de manera semejante en la Fig. 4(d), notamos que caben nueve medias longitudes de onda de la onda 1 en el espesor. En los dos casos las amplitudes de las ondas no resonantes son muy pequeñas. Asimismo, se identifican las resonancias 1_{14} y 3_1 en los perfiles de campo de las partes (e) y (f) de la Fig. 4, representando dos mínimos de la Fig. 2(e). En estas dos figuras se tienen tres ondas armónicas, como lo predice la relación de dispersión de la Fig. 1 para frecuencias $\omega > \omega_L$. Un detalle notorio de estas figuras es que en todos los casos de la Fig. 4 el perfil del campo de la onda resonante tiene un valor muy pequeño de su derivada dE_k/dz en las fronteras del medio no-local.

La Fig. 5 presenta en sus seis partes perfiles de campo eléctrico correspondientes a mínimos de reflectancia de las Figs. 3(a), 3(c) y 3(e). En todos estos se utiliza el ABC de Pekar, no obstante sin capas muertas. Siguiendo el procedimiento empleado en el caso de la Fig. 4, se encuentra que las partes (a) y (b) de la Fig. (5) corresponden a las resonancias 1_4 y 1_6 de la Fig. 3(a); las partes (c) y (d) se identifican

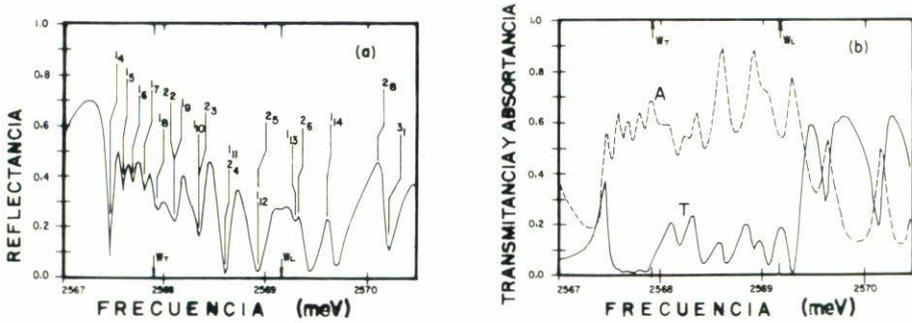


FIGURA 6. Espectros de (a) reflectancia y (b) transmitancia y absorbancia para el excitón *B* de CdS con los parámetros de la Tabla I, capas muertas de espesor $l = 100 \text{ \AA}$, espesor total $d = 1500 \text{ \AA}$ y el *ABC* de Pekar. La asignación k_n de las resonancias es tentativa y corresponde a la relación de Fabry-Perot, Ec. (29). En la región $\omega < \omega_T$ solamente aparecen resonancias de la onda parcial $k = 1$; en la región $\omega_T < \omega < \omega_L$ los modos $k = 1$ y 2 son resonantes; para $\omega > \omega_L$ la descripción de los espectros requiere que se postulen tres modos parciales $k = 1, 2$ y 3 .

como las resonancias 1_8 y 2_4 de la Fig. 3(c). De manera semejante las partes (e) y (f) describen las resonancias 1_{14} y 3_1 de la Fig. 3(e). La derivada total del campo resonante era pequeña en las superficies, ahora son los valores mismos de estos campos los que son relativamente pequeños en las fronteras [una excepción a esto se presenta en la Fig. 5(f)]. Este comportamiento es causado por el *ABC* de Pekar que impone el desvanecimiento de la polarización excitónica en las superficies. Como es conocido, este *ABC* intensifica el comportamiento no-local y por lo tanto no podemos anticipar que las condiciones clásicas de Fabry-Perot, Ec. (28), se cumplan con precisión. De hecho, examinando la Fig. 5, es claro que el número de medias longitudes de onda de la onda “resonante” que caben en el espesor de la película se desvía apreciablemente de un número entero. En parte, eso podría ser causado también por la rápida variación del campo E_3 en las Figs. 5(c), (d) y (e).

Barrido de frecuencia

Usando el *ABC* de Pekar [1], se realiza un barrido de frecuencia para obtener la reflectancia $R(\omega)$, la transmitancia $T(\omega)$ y la absorbancia $A(\omega)$, Fig. 6, donde se considera una película delgada con $d = 1500 \text{ \AA}$ y $l = 100 \text{ \AA}$. Los parámetros empleados son los de la Tabla I. En el análisis de la reflectancia se identifican los mínimos debidos a las resonancias de los modos $k = 1, 2$ y 3 . La Ec. (29) en conjunto

con la Fig. 1, permite predecir, para el caso local, la frecuencia a la cual aparece un mínimo de reflectancia debido a una resonancia. La asignación de las resonancias k_n es tentativa, buscándose la mejor coincidencia entre mínimos de R y posiciones nominales.

Para frecuencias $\omega < \omega_T$ se esperan resonancias debidas al modo 1. Las posiciones de los mínimos comparadas con las predichas por la Ec. (29) se encuentran desplazadas en forma no uniforme, como puede verse en la Fig. 6(a). Estos desplazamientos son ocasionados por los fuertes efectos no-locales del ABC , por la influencia de la capa muerta y por la cercanía a ω_T . En la segunda región ($\omega_T < \omega < \omega_L$), donde se tienen dos modos resonantes ($k = 1$ y 2), los mínimos son debidos a dobles resonancias producidas por ambos modos. Al igual que en la región anterior, se aprecian diferencias entre los mínimos y las posiciones nominales. Como consecuencia de las dobles resonancias hay una mayor energía transferida a la película, por lo que los mínimos de reflectancia son más pronunciados. En la región $\omega > \omega_L$ aparece un comportamiento semejante, ya que continúan presentándose dobles resonancias. Las resonancias más evidentes son las debidas al modo 2, las cuales se encuentran desplazadas respecto a la posición nominal. El modo 1 contribuye a las resonancias para las órdenes cuyas posiciones nominales quedan cercanas a las posiciones de las resonancias del modo 2. El modo 3 genera una resonancia para el orden 1 junto con el modo 2 (resonancias 3_1 y 2_8). En los espectros de absorptancia A y transmitancia T se tiene comportamiento complementario con la reflectancia R , cumpliéndose la relación $R + T + A = 1$. Los mínimos de R para $\omega < \omega_T$ coinciden con máximos de A , siendo T aproximadamente constante y pequeña. La excepción se presenta para $\omega = .99984 \omega_T$, donde hay un mínimo marcado de R y un máximo de T . Para frecuencias $\omega_T < \omega < \omega_L$, la transmitancia aumenta alcanzando valores máximos de aproximadamente 0.2. En esta región se tienen identificadas cinco dobles resonancias, observándose una coincidencia aproximada entre mínimos de R y máximos de A y T . Para $\omega > \omega_L$, T aumenta apreciablemente, mientras que A se reduce. A mínimos de T corresponden máximos de A , mientras que los mínimos de R se encuentran cercanos a máximos de T .

5. Conclusiones

En este trabajo hemos estudiado propiedades ópticas de un semiconductor con propiedades anómalas en el sentido de que cierta banda de energía exhibe un desdoblamiento lineal en el vector de onda. Como consecuencia, el comportamiento es fuertemente no-local, dando como resultado la propagación simultánea de tres polaritones excitones producidos por luz monocromática. Hemos realizado un análisis detallado de espectros de las reflectancia, transmitancia y absorptancia correspondientes al excitón B del CdS , considerado como prototipo del comportamiento no-local mencionado. El análisis de los aspectos prominentes en las curvas de reflectancia se realizó mediante la condición clásica de Fabry-Perot, o sea, a base de resonancias geométricas de ondas estacionarias en la película. La asignación correspondiente de picos y/o mínimos ha tenido solo éxito limitado, precisamente porque la condición

de Fabry-Perot no es aplicable a un medio material con dispersión espacial, en el cual se propagan simultáneamente varias ondas parciales (nuestro uso del *ABC* de Pekar aumenta efectivamente la importancia de estos efectos). Además, la situación se complica por la existencia de capas libres de excitones en las dos superficies de la película. No obstante, la interpretación de los espectros claramente demuestra la necesidad de postular tres ondas propagatorias para frecuencias superiores a la frecuencia longitudinal ω_L , y a dos ondas en la región entre ω_T y ω_L . En el caso del excitón *A* del mismo CdS, en estas regiones se propagan dos ondas y una onda, respectivamente. Nuestras conclusiones son apoyadas mediante un estudio de los perfiles de las tres ondas parciales en la película.

Agradecimientos

FJEB quiere agradecer a J.A. Gaspar-Armenta por su valiosa ayuda en el inicio de este trabajo.

Referencias

1. S.I. Pekar, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **33** (1958) 1022; **34** (1958) 1176 [*Sov. Phys.- JETP* **6** (1958) 785; **7** (1958) 813].
2. J.J. Hopfield, *Phys. Rev.* **112** (1958) 1555.
3. R.S. Knox, Theory of Excitons, *Solid State Phys. Supplem.* **5** Academic Press (1963).
4. V.M. Agranovich y V.L. Ginzburg, *Crystal Optics with Spatial Dispersion and Excitons*, 2da. Ed. Wiley, New York (1983).
5. J.J. Hopfield y D.G. Thomas, *Phys. Rev.* **132** (1963) 563.
6. J.J. Hopfield y D.G. Thomas, *Phys. Rev.* **116** (1959) 573; D. Duton, *Phys. Rev.* **112** (1958) 785.
7. G.D. Mahan y J.J. Hopfield, *Phys. Rev.* **135** (1964) A428.
8. E.S. Koteles y G. Winterling, *J. Lumin* **18/19** (1979) 267.
9. E.S. Koteles y G. Winterling, *Phys. Rev. Lett.* **44** (1980) 948.
10. E.S. Koteles, en *Excitons*, Ed. E.I. Rashba y M.D. Sturge. North-Holland, Amsterdam (1982), p. 83.
11. P. Halevi, O.B.M. Hardouin Duparc, A.A. Maradudin, R.F. Wallis, *Phys. Rev.* **B32** (1985) 6986; **36** (1987) 2783.
12. P. Halevi, en *Excitons in Confined Systems*, Ed. F. del Sole, A. de Andrea, y A. Lapicciarella. Springer Proc. Phys. **25** (1988) 2.
13. J.A. Gaspar y P. Halevi, *Rev. Mex. Fis.* **33** (1988) 599.
14. J.A. Gaspar y P. Halevi, *Optics Commun.* **64** (1987) 217.
15. Fco. J. Espinoza-Beltrán, Reporte Técnico, CIF88-4 CIFUS, Universidad de Sonora.
16. R. Fuchs y K.L. Kliewer, *Phys. Rev.* **B3** (1971) 2270; K.L. Kliewer y R. Fuchs, *Phys. Rev.* **172** (1968) 607; C.S. Ting, M.J. Frankel y J.L. Birman, *Solid State Commun.* **17** (1975) 1285.
17. G.H. Coccoletzi y W.L. Mochan, *Phys. Rev.* **B39** (1989) 8403.

Abstract. We have studied the optical properties of CdS in the neighborhood of the $B(n = 1)$ excitonic resonance. This exciton is characterized by an extremely strong spatial dispersion which is a consequence of an energy-band splitting that is linear in the wavevector. For a given frequency, three partial plane waves must be superposed and, depending on the frequency region, one, two or three waves have propagatory character. We have calculated the reflectivity R , transmittivity T , and absorptivity A of a thin film with allowance for exciton-free surface layers. For this purpose we employ a method of "successive interface impedances" and two different Additional Boundary Conditions. In addition to $R(\omega)$, $T(\omega)$, and $A(\omega)$ spectra, we have also plotted the reflectivity as a function of film thickness and profiles of the electric fields of the three partial waves inside the film. The various peaks and minima are interpreted tentatively in terms of Fabry Perot (standing wave) resonances of the three modes.