# Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada



ESTUDIO NUMERICO DE LA INTERACCION DE LUZ CON SUPERFICIES Y GUIAS DE ONDA RUGOSAS BASADO EN LA HIPOTESIS DE RAYLEIGH

# TESIS MAESTRIA EN CIENCIAS

### **BLANCA ESTHELA RUIZ SANTOS**

Ensenada, Baja California, Mexico. Abril de 2001.



TESIS DEFENDIDA POR

**Blanca Esthela Ruiz Santos** 

Y APROBADA POR EL SIGUIENTE COMITÉ

Dr. Eugenio Rafael Méndez Méndez

Director del Comité

Dr. Anatolii Khomenko Filatova

Miembro del Comité

Dr. Gilberto López Mariscal

Miembro del Comité

Dr. Raúl Rangel Rojo

Miembro del Comité Dr. Pedro Negrete Regagnon Miembro' del Comité

Dr. Eugenió Méndez Méndez

Jefe del Departamento de Óptica

Dr. Luis Alberto Delgado Argote

Director de Estudios de Posgrado

4 de Abril del 2001

### CENTRO DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y DE EDUCACIÓN SUPERIOR DE ENSENADA



### DIVISIÓN DE FÍSICA APLICADA DEPARTAMENTO DE ÓPTICA

# ESTUDIO NUMÉRICO DE LA INTERACCIÓN DE LUZ CON SUPERFICIES Y GUÍAS DE ONDA RUGOSAS BASADO EN LA HIPÓTESIS DE RAYLEIGH

TESIS

que para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de Maestro en Ciencias presenta:

### **BLANCA ESTHELA RUIZ SANTOS**

Ensenada, Baja California, México. Abril de 2001.

**RESUMEN** de la Tesis de Blanca Esthela Ruiz Santos, presentada como requisito parcial para la obtención del grado de **MAESTRO EN CIENCIAS en ÓPTICA con especialidad en OPTICA FÍSICA**. Ensenada, Baja California, México. Marzo de 2001.

# ESTUDIO NUMÉRICO DE LA INTERACCIÓN DE LUZ CON SUPERFICIES Y GUÍAS DE ONDA RUGOSAS BASADO EN UN MÉTODO DE RAYLEIGH

Resumen aprobado por:

Dr. Eugenio Rafael Méndez Méndez Director de Tesis

Se presenta un estudio numérico del esparcimiento de luz por superficies y guías de onda rugosas. El estudio está basado en una simulación tipo Monte Carlo basada en un método de Rayleigh. De especial interés son algunos sistemas que se sabe producen efectos coherentes, tales como el retroesparcimiento reforzado, y que involucran la excitación de plasmones de superficie u ondas guiadas. Para el caso de superficies consideramos perfiles con estadísticas tanto gaussianas como no gaussianas. Se presentan resultados sobre la dependencia del pico de retroesparcimiento reforzado con los parámetros estadísticos de la superficie y se considera también el caso de superficies rugosas aleatorias que son periódicas en promedio. En los casos más estudiados de retrosesparcimiento reforzado debido al acoplamiento a polaritones de superficie, es suficiente considerar hasta eventos de esparcimiento doble. En nuestro estudio, consideramos también un caso en el que se presenta este fenómeno debido a efectos de esparcimiento triple.

Se considera también el caso de luz esparcida por películas metálicas y dieléctricas rugosas entre dos medios semiinfinitos. La distribución angular de la luz esparcida en reflexión y transmisión presenta características atribuibles a la interferencia de ondas que han sufrido esparcimiento múltiple. En los resultados se observan efectos de retroesparcimiento reforzado así como picos de transmisión antiespecular. Para sistemas que soportan más de un modo guiado, se encontraron picos satélite tanto en reflexión como en transmisión. Finalmente, se presenta un estudio de la eficiencia de acoplamiento de luz a guías de onda dieléctricas rugosas como función del ángulo de incidencia y de los parámetros de la rugosidad.

Palabras clave: Esparcimiento de luz, hipótesis de Rayleigh, retroesparcimiento reforzado, efectos coherentes, plasmones polaritones de superficie, guías de onda.

**ABSTRACT** of the thesis presented by **Blanca Esthela Ruiz Santos** in partial fulfillment of the requirements for the degree of **MASTER of SCIENCE** in **OPTICS.** Ensenada, Baja California, Mexico. April 2001.

## NUMERICAL STUDY OF THE INTERACTION OF LIGHT WITH RANDOMLY ROUGH SURFACES AND WAVE GUIDES BASED ON A RAYLEIGH'S

#### METHOD

Abstract aproved by:

Dr. Eugenio Rafael Méndez Méndez Thesis Advisor

We present a numerical study of light scattering by randomly rough surfaces and wave guides. This study is based on a Monte Carlo type simulation based on a Rayleigh's method.

Special attention is paid to systems that are known to produce coherent effects, such as enhanced backscattering, involving the excitation of plasmon polaritons or guided waves. For the case of randomly rough surfaces we consider profiles with both gaussian and nongaussian statistics. Results for the dependence of the width of the backscattering peak on the statistical parameters of the surfaces are presented, as well as a study of scattering by surfaces that are periodic on average. In most of the cases reported of enhanced backscattering caused by the coupling of waves to surface plasmons, it is sufficient to consider up to double scattering events. In our study , we consider a case in which this fenomenon is due to triple scattering events.

We also consider the scattering of light by thin metal and dielectric rough films. The reflected and transmitted scattering distributions present features that are attributable to interference and multiple scattering. The results show the presence of enhanced backscattering as well as enhanced antispecular effects. Satellite peaks in reflection and transmission are also found for systems that support more than one guided mode. Finally, we present a study of the efficiency of the coupling of light to the waveguide as a function of the angle of incidence and the roughness parameters.

Key words: Light scattering, Rayleigh's hypotesis, enhanced backscattering, coherent effects, surface plasmon polaritons, waveguides.

A mi padre, por su amor incondicional.

A mi abuela María, por mostrarme como vive una mujer valiente.

#### AGRADECIMIENTOS

A Oscar García, por devolverme la esperanza, por su increíble amor y por ayudarme a crecer.

A *Patricia Puente*, por ser mi compañera en esta aventura. *Amiga, usted siempre será ley*!. A *Fernando Treviño*, por siempre darme su ayuda en el momento que más lo necesito. *Gracias por todos los abrazos*.

A mi asesor: el Dr. *Eugenio Méndez*, por todo lo que me enseño, por su paciencia infinita y su gran apoyo.

A Demetrio Macías, por mostrarme una visión alternativa de las cosas y por ser mi "cuaderno de doble raya".

Al Dr. *Kevin O'Donnell*, por todo su entusiasmo y ayuda en la interpretación de resultados y por proporcionarme sus datos para la elaboración de esta tesis.

A los compañeros del grupo de esparcimiento y en especial a *Elena Chaikina*, *Tamara Leskova*, *Claudio Valencia*, *Víctor Ruiz*, *Demetrio Macías* y *Gina Navarrete* por su ayuda y comentarios sobre el tema así como los incontables momentos agradables y conversaciones que compartimos.

A los maestros del departamento de óptica por todo lo que me enseñaron.

A mis compañeros de generación por lo que aprendimos juntos y lo que aprendí de ellos. Por todo el apoyo durante el año de cursos.

A los miembros de mi comité de tesis por su ayuda y consejos: Dr. Raúl Rangel, Dr. Anatolii Khomenko, Dr. Gilberto López Mariscal, Dr. Pedro Negrete.

A mis tres hombres de las sonrisas *Juan Antonio Peralta, Javier Camacho* y *Pedro Antonio Leree*, por alegrar mis mañanas. A Juan Antonio Peralta, por tratarme como 'la más bella de sus hijas'.

A Javier Camacho, Mine y su familia, por su amistad y su hospitalidad.

A *Pedro Leree*, por su amistad, su paciencia y toda la ayuda técnica en la escritura de esta tesis. *Que haría sin ti Pedro??!!* 

A mis compañeras de departamento: *Mary* y *Silvia*, por hacer de nuestra casa un lugar al que me alegra volver cada noche, por su gran amistad y por tenerme paciencia cuando pierdo todas las cucharas.

A Olga Badillo y Marcia Padilla, por toda su ayuda en estos tres años.

A los miembros del 'Harén de María': *Carlos F., Alexandro R., Javo, Chucho* y por supuesto *María*, por el apoyo que nos dieron a todos los 'hermanitos chicos', por la cálida bienvenida a CICESE, por las risas compartidas y por hacer mi estancia en este centro mucho más grata.

Al CONACyT por la beca otorgada.

# ÍNDICE

I.	INTRODUCCIÓN	1
II.	TEORÍA	5
II.1.	Ecuación de onda y ecuación de Helmholtz	6
II.2.	Ondas planas y espectro angular	7
II.3.	Ondas electromagnéticas de superficie	9
II.4.	Ondas en guías de onda planas	12
II.5.	Derivación de las ecuaciones reducidas de Rayleigh	16
II.5.1.	El caso de dos medios	16
II.5.2.	El caso de tres medios	21
III.	IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA	29
III.1.	Generación de superficies rugosas aleatorias	30
III.1.1.	Propiedades estadísticas de la superficie	31
III.1.2.	Análisis espectral de la superficie	33
III.1.3.	Discretización de superficies	36
III.2.	Determinación del sistema de ecuaciones y de los campos esparcidos.	37
IV.	RESULTADOS Y DISCUSIÓN	42
IV.1.	Dos medios semiinfinitos	42
IV.1.1.	Ancho del pico de retroesparcimiento reforzado en función de los parámetros estadísticos de la superficie.	45
IV.1.2.	Superficies rugosas aleatorias periódicas en promedio	53

IV.1.3.	Superficies con espectro de potencia West-O'Donnell	56
IV.1.4.	Superficies con estadísticas no gaussianas	64
IV.2.	Esparcimiento por películas rugosas	66
IV.2.1.	El caso de una película dieléctrica depositada sobre un metal.	66
IV.2.2.	El caso de una película delgada de metal	69
IV.2.3.	El caso de una película rugosa dieléctrica delgada	75
V.	RESUMEN Y CONCLUSIONES	84
	APÉNDICE A	88
	APÉNDICE B	91
	BIBLIOGRAFÍA	97

### LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Comparación de resultados obtenidos con el método de la ecuación integral y el método de perturbaciones pequeñas. La gráfica muestra la parte incoherente del CDR para una superficie rugosa de plata con estadísticas gaussianas y función de correlación gaussiana con $\delta = 5$ nm y $a = 100$ nm. La polarización es $p$ y $\lambda = 457.9$ nm.	Página 2
	La línea contínua representa los resultados de la teoría perturbativa de Maradudin y Méndez (1993) y los círculos son los resultados obtenidos con el método de la ecuación integral.	
2	Regiones de validez de la representación del campo en términos del espectro angular.	8
3	Rejilla de difracción: se muestran los diferentes ordenes difractados.	11
4	Geometria de una guía de onda plana.	13
5	Geometria del problema para dos medios semiinfinitos.	16
6	Geometria del problema para una película entre dos medios semiinfinitos.	21
7	Espectro West-O'Donnell: los rectangulos de potencia se encuentras centrados en $k_{sp}$ .	35
8	Componente incoherente del CDR para una superficie de plata con estadísticas gaussianas y con función de correlación gaussiana iluminada en polarización $p \ a \ \theta_0 = 0^\circ$ . La línea roja representa los resultados obtenidos con la teoría perturbativa de Maradudin y Méndez [1993] y la línea azul aquellos obtenidos con el método	43

numérico. La longitud de onda es  $\lambda = 457.9$ nm y los parámetros de la superficie son  $\delta = 5$ nm, a = 100nm y  $\epsilon(\omega) = -7.5 + i0.24$ .

El número de realizaciones es Np = 10000.

9

10

Caminos de esparcimiento múltiple que producen retroesparcimiento reforzado.

44

Componente incoherente del CDR para una superficie de plata con estadísticas gaussianas y con función de correlación gaussiana, iluminada en polarización  $p \ a \ \theta_0 = 30^\circ$ . La línea roja representa los resultados obtenidos con la teoría perturbativa y la línea azul aquellos obtenidos con el método numérico. La longitud de onda es  $\lambda = 457.9$ nm y los parámetros de la superficie son  $\delta = 5$ nm, a = 100nm y  $\epsilon(\omega) = -7.5 + i0.24$ . El número de realizaciones es Np = 10000.

11 Como en la figura 10 pero para polarización *s* y solamente con el 45 método numérico.

12 Componente incoherente del CDR para superficies de plata 46 ( $\epsilon_{II}(\omega) = -7.5 + i0.24$ ) con estadísticas y espectro de potencia gaussianos a incidencia normal en polarización p. La longitud de correlación de todas las superficies es a = 100 nm y la desviación estandar de las alturas es  $\delta = 5$ , 10, 14.85 y 20 nm. La longitud de onda de la luz es  $\lambda = 457.9$  nm y  $N_p = 10000$ .

13 Dependencia del ancho de pico de retroesparcimiento a media altura 47 (FWHM) con la desviación estándar de alturas de las superficies.

14 Distancia media recorrida por un plasmón como función del 50 parámetro de la rugosidad superficial, estimada por medio de simulaciones numéricas.

15 Constante de decaimiento de los plasmones de superficie como 51 función de la varianza de alturas en la superficie.

Figura

16

17

Página

53

Componente incoherente del CDR para distintas longitudes de correlación La superficie tiene un espectro gaussiano y estadísticas también gaussianas con una desviación estandar de alturas  $\delta = 14.85$  nm. La longitud de onda del campo incidente es  $\lambda = 457.9$  nm. La constante dieléctrica del material es  $\epsilon_{II}(\omega) = -7.5 + i0.24$  y se estimaron los promedios de  $N_p = 10000$  realizaciones.

Componente incoherente del CDR para una superficie aleatoria con un espectro gaussiano a la que se le añade una componente periódica con h = 10 nm y b = 392.5 nm. Las estadísticas de la componente aleatoria son también gaussianas con una desviación estándar de alturas  $\delta = 5$  nm y longitud de correlación a = 320 nm. La polarización es p y la longitud de onda del campo incidente es  $\lambda = 457.9$  nm. La constante dieléctrica del material es  $\epsilon_{II}(\omega) =$ -7.5 + i0.24.

18 Igual que la figura 17 pero con  $\delta = 15$  nm.

- 19 Igual que la figura 18 pero con a = 125 nm.
- 20 Componente incoherente del CDR para una superficie rugosa de oro con  $\epsilon_{II}(\omega) = -9.0 + i1.29$ , cuyo perfil constituye un proceso estocástico gaussiano y con un espectro de potencia West-O'Donnell a incidencia normal. La longitud de onda del campo incidente es de  $\lambda = 612$  nm y la luz tiene polarización p. La desviación estándar de alturas es de  $\delta = 5$  nm y  $\theta_{max} = 13.5^{\circ}$ . Se muestran resultados obtenidos experimentalmente [West y O'Donnell, 1995], con un método perturbativo [Maradudin *et al*, 1995] y con la simulación numérica aqui descrita.
- 21

Igual que la figura 20. EL ángulo de incidencia es  $\theta_0 = 10^\circ$ .

58

22 Espectro West-O'Donnell centrado en  $2k_{sp}$ . Se ilustran también los 60 procesos físicos que se producen al iluminar la superficie a ángulos rasantes.

- 55
- 56

57

24

Componente incoherente del CDR para una superficie con un espectro de potencia West-O'Donnell centrado en  $2k_{sp}$ . La superficie tiene una constante dielectrica  $\epsilon_{II}(\omega) = -61.0 + i6.2$  para la longitud de onda usada,  $\lambda = 1152$  nm. Los números de onda mínimo y máximo del espectro son  $k_{\rm min} = 9.93 \times 10^{-3} \ {\rm nm^{-1}} \ {\rm y}$  $k_{\rm max} = 1.49 \times 10^{-2} \ {\rm nm^{-1}}$  respectivamente y la desviación estándar de las alturas es  $\delta = 11.1$  nm. El ángulo de incidencia es  $\theta_0 = 76^\circ$ . Se muestran resultados obtenidos con la simulación numérica, con la teoría perturbativa de 4to orden [Maradudin y Méndez, 1993] y con la teoría perturbativa de orden infinito [McGurn, Maradudin y Celli, 1985].

La parte incoherente del CDR promedio para una superficie con un espectro de potencia West-O'Donnell centrado en  $2k_{sp}$ . La superficie tiene una constante dielectrica  $\epsilon_{II}(\omega) = -61.0 + i6.2$  para la longitud de onda usada,  $\lambda = 1152$  nm. Los numeros de onda minimo y maximo del espectro son  $k_{\rm min} = 9.93 \times 10^{-3} \ {\rm nm^{-1}} \ {\rm y}$  $k_{\rm max} = 1.49 \times 10^{-2} \ {\rm nm^{-1}}$  respectivamente. Igual que la figura 23 pero con  $\theta_0 = 60^\circ$ .

- 25 Resultados de esparcimiento obtenidos con superficies gaussianas 64 y con superficies con estadísticas determinadas por la primera transformación propuesta en el capítulo III para el caso que corresponde a la figura 8. Línea negra: superficie con estadísticas gaussianas. Línea azul: superficie con estadísticas no gaussianas.
- 26 Como en la figura 25, pero con la segunda transformación propuesta 65 en el capítulo III.
- 27 Componente incoherente del CDR para el caso de polarización s, longitud de onda  $\lambda = 633$  nm e incidencia a un ángulo  $\theta_0 = 0^\circ$ . La constante dieléctrica de la película es  $\epsilon (\omega)_{II} = 2.6896 + i0.01$  y su rugosidad está caracterizada por un espectro de potencia gaussiano con parámetros  $\delta = 30$  nm y a = 100 nm. El espesor promedio de la pelicula es D = 500 nm y el número de realizaciones es  $N_p = 5000$ .
- 28

Caminos de esparcimiento múltiple que dan lugar a los picos satélite.

63

67

68

70

Igual que la figura 27 pero con un espectro de potencia West-O'Donnell.

30 Componente incoherente del CDR para una película delgada con una constante dieléctrica  $\epsilon_{II}(\omega) = -7.5 + i0.24$ . La superficie rugosa tiene un espectro de potencia gaussiano con una longitud de correlación a = 125 nm y una desviación estándar de alturas  $\delta = 5$ nm. La longitud de onda del campo incidente es  $\lambda = 457.9$  nm y su polarización es p. El ángulo de incidencia es  $\theta_0 = 5^\circ$  y el número de realizaciones es  $N_p = 5000$ .

- 31 Caminos de esparcimiento múltiple que producen picos de 71 reforzamiendo antiespecular.
- Componente incoherente del CDT para el mismo caso de la figura
   30.
- 33 Parte incoherente del CDR promedio para una superficie con los 73 parámetros de la figura 30, pero con un espectro de potencia West-O'Donnell con  $\theta_{\text{max}} = 15^{\circ}$ . El número de realizaciones es  $N_p = 5000$ .
- Componente coherente del CDT para el mismo caso de la figura 33. 73
- 35 Componente incoherente del CDR para una película iluminada con una longitud de onda  $\lambda = 394.7$  nm a incidencia normal en polarización p. Para esta longitud de onda, la constante dieléctrica del medio II es  $\epsilon_{II}(\omega) = -4.28 + i0.21$ . Los parámetros de la superficie son a = 100 nm y  $\delta = 15$  nm con un espectro de potencia gaussiano.

Página

77

Modos y números de onda para guías de diferentes espesores en polarización s y  $\lambda = 633$  nm.

37 Componente incoherente del CDR para una película rugosa con una constante dieléctrica  $\epsilon_{II}(\omega) = 2.25 + i0.0$  y un espesor promedio D = 100 nm iluminada a incidencia normal con polarización s. La rugosidad está caracterizada por un espectro de potencia West-O'Donnell centrado en  $k = 1.788 (\omega/c) \operatorname{con} \theta_{\max} = 10^{\circ} \mathrm{y} \ \delta = 30$ nm. La longitud de onda de la luz es  $\lambda = 633$  nm.

78

81

Componente incoherente del CDR promedio para una película rugosa con una constante dieléctrica  $\epsilon_{II}(\omega) = 2.25$  y un espesor D = 400 nm. La rugosidad está caracterizada por un espectro de potencia West-O'Donnell centrado en  $k = 1.95 (\omega/c) \operatorname{con} \theta_{\max} =$  $20^{\circ}$  y  $\delta = 30$  nm. La longitud de onda de la luz es  $\lambda = 633$  nm e incide normalmente con polarización s.

- 39 Ilustración de dos situaciones que, con argumentos de reciprocidad, 79 se pueden considerar equivalentes.
- 40 Componente incoherente del espectro del campo transmitido hacia 80 el interior de la guía. Las posiciones de los picos coinciden con los números de onda de los modos guiados.
- 41 Como en la figura 40 pero con D = 800 nm.
- 42 Eficiencia de acoplamiento para guías de onda rugosas con espectro 82 de potencia gaussiano con longitud de correlación a = 100 nm y desviación de alturas  $\delta = 5$  nm. El espesor de la película es D = 100  $\mu$ m.

38

Figura 43 Como en la figura 42 pero con  $\delta = 20$  nm.

Página 83

### **I.Introducción**

La interacción de ondas electromagnéticas con superficies rugosas ha sido objeto de una gran cantidad de estudios a través de los años [ver, por ejemplo, Ogilvy, 1991; Ishimaru,1978; Warnick y Chew, 2001; Maradudin y Méndez, 2001]. El tema tiene numerosas aplicaciones científicas y tecnológicas que van desde el sensado remoto [Donelan *et al*, 1987] hasta la microscopía de óptica de campo cercano [Greffet y Carminati, 1996], pasando por las propiedades generales de sistemas desordenados [Sánchez-Gil *et al*, 1999] y la intensificación de campos en interfases [Sánchez-Gil y García-Ramos, 1998], entre otras.

1

Todos los objetos físicos reales están limitados por superficies y prácticamente todas las superficies reales son ópticamente rugosas. Es decir, a escalas de la longitud de onda de la luz visible todas las superficies presentan irregularidades. La interacción de luz con superficies y películas rugosas puede ser muy compleja. Se puede, por ejemplo, excitar otro tipo de ondas como ondas guiadas o de superficie y, con cambios pequeños en algún parámetro, aumentar o reducir considerablemente la reflectividad o transmitividad de un medio, o cambiar drásticamente la distribución angular de la intensidad esparcida.

Los métodos analíticos para tratar el problema de esparcimiento de ondas electromagnéticas por superficies rugosas están basados en aproximaciones de algún tipo. Los métodos más usuales, que podríamos llamar métodos clásicos, son la teoría perturbativa [Rice,1951] y los métodos basados en la aproximación de Kirchhoff [Beckman y Spizzichino, 1963]. La teoría perturbativa está limitada en su aplicación a superficies con rugosidades superficiales cuyas variaciones de altura son muy inferiores a la longitud de onda y los métodos de Kirchhoff solamente pueden tratar superficies con pendientes suaves y detalle lateral superior a la longitud de onda.

Cuando la superficie dá lugar a efectos de esparcimiento múltiple, los métodos clásicos no pueden tratar adecuadamente el problema y no reproducen las observaciones experimentales. La interferencia que se da entre campos que han sido múltiplemente esparcidos da lugar a fenómenos importantes y a veces inesperados, como el retroesparcimiento reforzado [McGurn *et al*, 1985] y los picos satélite [Freilikher *et al*, 1997]. Para estudiar estos fenómenos, se ha tenido que recurrir a métodos perturbativos de alto orden [McGurn *et al*, 1985; Maradudin y Méndez, 1993; O'Donnell *et al*, 1998] o a métodos numéricos [Maradudin *et al*, 1990]. En cuanto a los métodos numéricos, las formulaciones más usuales están basadas en el teorema de extinción [Wolf, 1973] o, equivalentemente, con el teorema integral de Green. Se establecen un par de ecuaciones integrales acopladas cuya solución provée los valores del campo y su derivada normal en la superficie. Con estos valores, se puede calcular el valor del campo en cualquier punto del espacio. El método se conoce como el método de la ecuación integral o el método de momentos y puede considerarse un método de espacio coordenado – espacio coordenado [DeSanto *et al*, 1997].

Esta técnica ha resultado ser de utilidad para el caso de superficies muy rugosas y, aunque en principio es una técnica rigurosa, es conocido que en ciertas situaciones no da resultados satisfactorios. A saber, el llamado método de la ecuación integral produce resultados poco confiables cuando el contraste dieléctrico es pequeño, cuando los ángulos de incidencia o esparcimiento son rasantes (cercanos a  $\pm 90^{\circ}$ ) y cuando la muestra es poco rugosa y soporta plasmones de superficie o modos guiados.



Figura 1. Comparación de resultados obtenidos con el método de la ecuación integral y el método de perturbaciones pequeñas. La gráfica muestra la parte incoherente del CDR para una superficie rugosa de plata con estadísticas gaussianas y función de correlación gaussiana con  $\delta = 5$ nm y a = 100nm. La polarización es  $p \ge \lambda = 457.9$ nm. La línea contínua representa los resultados de la teoría perturbativa de Maradudin y

Méndez (1993) y los círculos son los resultados obtenidos con el método de la ecuación integral.

Para ejemplificar esta situación, se presenta en la figura 1 una comparación entre los resultados obtenidos con el método de la ecuación integral y el método de perturbaciones pequeñas. La gráfica muestra la parte incoherente del CDR (Coeficiente Diferencial de Reflexión) para una superficie de plata con estadísticas gaussianas y una función de correlación también gaussiana. La rugosidad está caracterizada por una desviación estandar de alturas  $\delta = 5$ nm y una longitud de correlación a = 100nm para el caso de polarización  $p \neq \lambda = 457.9$ nm. La constante dieléctrica de la plata para esta longitud de onda es  $\epsilon(\omega) = -7.5 + i0.24$  [McGurn *et al*, 1985]. La línea contínua representa los resultados de la teoría perturbativa de Maradudin y Méndez (1993) y los círculos representan los resultados obtenidos con el método integral. Podemos ver que los resultados que se obtienen con el método basado en el teorema integral de Green no tienen un comportamiento adecuado a ángulos rasantes de esparcimiento y que, a otros ángulos, tampoco coinciden plenamente con los cálculos basados en la teoría perturbativa en condiciones en las que se espera que ésta última produzca resultados confiables. Como veremos en el capítulo de resultados, el método de Rayleigh empleado en esta tesis produce resultados muy superiores.

El trabajo descrito en esta tesis consiste, principalmente, en el desarrollo e implementación de un método numérico para el estudio de superficies y guías de onda con pequeñas rugosidades superficiales. Esta técnica alternativa de solución produce resultados bien comportados para superficies y películas con rugosidades pequeñas.

La técnica propuesta se puede denominar de espectro-espectro [DeSanto *et al*, 1997] y está basada en la hipótesis de Rayleigh [Rayleigh, 1896]. Empleando esta hipótesis se derivan las llamadas ecuaciones reducidas de Rayleigh [Toigo *et al*, 1977], que constituyen un buen punto de partida para las teorías perturbativas. También han sido utilizadas para simulaciones tipo Monte Carlo, como las que se plantean en esta tesis [Michel, 1994; Madrazo y Maradudin, 1997]. Se espera que con resultados obtenidos mediante esta técnica se puedan abarcar áreas inaccesibles en el espacio de parámetros tanto a la teoría perturbativa como al método de la ecuación integral. También es de esperarse que los resultados sean

válidos para ángulos rasantes de incidencia y de esparcimiento.

A continuación describimos brevemente la organización de la tesis.

Las bases teóricas del método propuesto se describen en los capítulos II y III. Primero, en el capítulo II, se presentan los fundamentos necesarios para la derivación de las ecuaciones reducidas de Rayleigh en las dos geometrías consideradas. Se parte de una representación de los campos en términos de sus espectros angulares. Considerando las condiciones de frontera, se llega a un par de ecuaciones integrales acopladas que, después de ser manipuladas, se pueden reducir, obteniéndose finalmente una sola ecuación matricial cuya solución representa el campo esparcido en reflexión. Para el caso de películas consideramos también el campo trasmitido, el cual se puede expresar en términos del campo reflejado y se calcula fácilmente una vez que se conoce éste.

En el capítulo III se definen las características y propiedades de las superficies estudiadas. Se describen los espectros de potencia considerados así como la metodología usada para la generación numérica de las superficies. Se describen las aproximaciones numéricas adoptadas para la evaluación de ciertas funciones que aparecen en las ecuaciones reducidas de Rayleigh y el método de solución de éstas para obtener los campos esparcidos en reflexión y transmisión. También se presentan las pruebas utilizadas para estimar la validez de la solución. En el capítulo IV se presentan resultados representativos para las distintas geometrías y casos considerados, así como un análisis de éstos. Finalmente, en el capítulo V se presentan las conclusiones de este trabajo.

### II.Teoría

Al incidir un haz de luz sobre una superficie perfectamente plana, parte de la energía incidente se refleja hacia el medio de incidencia. Este fenómeno se conoce como reflexión especular. El ángulo de reflexión es igual al ángulo de incidencia. Si la superficie es ligeramente rugosa (variación de las alturas mucho menor que la longitud de onda de la luz incidente), una cierta cantidad de luz difusa acompaña a la componente especular. Esta componente difusa es reflejada o esparcida en muchas direcciones, rodeando a la componente especular en la distribución angular de la luz reflejada. El valor de la componente difusa, también llamada componente incoherente, se incrementa con la rugosidad y se puede llegar a circunstancias en las que la componente coherente prácticamente desaparece.

Para una superficie perfectamente plana, la fracción de energía que no se refleja es absorbida por el material, convirtiéndola en calor o en otra clase de energía. Sin embargo, para el caso de metales y cuando la rugosidad de la superficie es débil, no toda la luz que no se refleja es transmitida directamente al segundo medio, ya que una parte de ésta puede ser acoplada por medio de la rugosidad a ondas superficiales. Esta clase de ondas tienen un carácter no radiativo y usan la frontera entre los dos medios para propagarse. Una onda incidente (de volumen) puede ser convertida en una onda superficial por medio de la rugosidad. De igual manera, una onda superficial puede ser convertida en una onda de volumen al interactuar con la rugosidad de la superficie metálica. Este proceso de conversión de ondas de volumen a ondas superficiales y viceversa, juega un papel muy importante en el esparcimiento de luz por superficies con rugosidad débil.

Algo similar puede ocurrir cuando el material sobre el cual incide la luz tiene un espesor finito. Es decir, sobre una película rugosa. Parte de la energía puede acoplarse al sistema debido a la rugosidad y ser propagada en su interior como un modo guiado. Esta luz puede interactuar, a su vez, con la superficie rugosa y volver a ser radiada.

En este trabajo consideramos dos sistemas con los cuales estudiamos problemas de esparcimiento de luz. El primero de ellos está formado por la superficie de un material rugoso semiinfinito en contacto con el vacío. El segundo sistema consiste de una película delgada

5

depositada sobre un material semiinfinito, en donde la superficie que se encuentra en contacto con el vacío, es rugosa. En ambos casos, por simplicidad, suponemos que la rugosidad es unidimensional. Es decir, que las muestras presentan variaciones de altura en una dirección (x) y son constantes en otra (y) perpendicular a la primera. Se supone, además, que el plano de incidencia (x - z) es perpendicular a la dirección en la que la superficie es invariante.

Para estudiar estos problemas se establecen primero las condiciones de frontera entre los medios, que se suponen isotrópicos y homogéneos y que están descritos ópticamente por sus constantes dieléctricas. Utilizando la hipótesis de Rayleigh y estas condiciones de frontera, se obtiene una ecuación integral que involucra al campo incidente y el perfil utilizado. La solución numérica de esta ecuación nos proporciona el campo esparcido, con el cual, para el caso de una película delgada despositada sobre un material semiinfinito, calculamos también el campo transmitido a través de la muestra. En particular, se calculan los coeficientes diferenciales de reflexión y transmisión, que representan la fracción de la potencia incidente que es esparcida por unidad de ángulo.

#### II.1. Ecuación de onda y ecuación de Helmholtz

Tenemos que la ecuación de onda está dada por

$$\nabla^{2}\mathbf{U}\left(\mathbf{r};t\right) = \frac{n_{\mathcal{R}}^{2}}{c^{2}}\frac{\partial^{2}\mathbf{U}\left(\mathbf{r};t\right)}{\partial t^{2}},\tag{1}$$

donde c es la velocidad de la luz en el vacío,  $n_{\mathcal{R}}$  es el índice de refracción del medio  $\mathcal{R}$  y U (**r**; t) representa el vector de campo eléctrico E (**r**; t) o el de campo magnético H (**r**; t). Una solución para esta ecuación diferencial es una función que describe una perturbación óptica monocromática que representamos como

$$\mathbf{U}(\mathbf{r};t) = \mathbf{U}(\mathbf{r})\exp\left(-i\omega t\right). \tag{2}$$

Aquí,  $\mathbf{U}(\mathbf{r})$  representa la parte espacial de la perturbación. Substituyendo esta solución en la ecuación de onda, obtenemos

$$\nabla^{2}\mathbf{U}(\mathbf{r}) + n_{\mathcal{R}}^{2}\left(\frac{\omega}{c}\right)^{2}\mathbf{U}(\mathbf{r}) = 0, \qquad (3)$$

que es conocida como la ecuación de Helmholtz.

En los sistemas propuestos, para ondas en las dos polarizaciones elementales (s y p) el

campo es de la forma [Maradudin et al, 1990]

$$\mathbf{U}(\mathbf{r};t) = (0, U(\mathbf{r}), 0) \exp(-i\omega t), \qquad (4)$$

donde  $\mathbf{r} = (x, z)$  y  $U(\mathbf{r})$  representa la única componente (la componente y) del vector de campo eléctrico  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  en el caso de la polarización s y del campo magnético  $\mathbf{H}(\mathbf{r})$  en el caso de la polarización p. Esto ilustra el hecho de que sólo tenemos que ocuparnos de la componente y del campo magnético o del campo eléctrico y que, bajo estas circunstancias, el problema es de naturaleza escalar.

#### II.2. Ondas planas y espectro angular

Una solución elemental a la ecuación de Helmholtz está dada por una onda plana propagante, que puede ser escrita como

$$U(x, z|\omega) = U_0 \exp\left\{in_{\mathcal{R}}\frac{\omega}{c}(x\sin\theta_0 - z\cos\theta_0)\right\},\tag{5}$$

donde  $U_0$  es una constante con unidades apropiadas que representa la amplitud de la onda. La ecuación (5) representa una onda plana que viaja hacia abajo (z's negativas) y cuya dirección de propagación hace un ángulo  $\theta_0$  con el eje z. Definiendo  $k = n_R \frac{\omega}{c} \sin \theta_0$  y  $\alpha_I(k) = \left(\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \epsilon_R - k^2\right)^{1/2}$ , con  $n_R = \sqrt{\epsilon_R}$ , tenemos que la ecuación (5) puede también escribirse de la forma:

$$U(x, z|\omega) = U_0 \exp\left\{i(kx - \alpha_I(k)z)\right\}.$$
(6)

Esta expresión es más general que la ecuación (5), pues vale tanto para ondas propagantes  $(k < n_{\mathcal{R}}\omega/c)$  como para ondas evanescentes  $(k > n_{\mathcal{R}}\omega/c)$ . Es fácil verificar que esta expresión es una solución de la ecuación de Helmholtz.

Las ondas planas son muy importantes para nuestro estudio, pues es conocido que una manera de representar un campo óptico coherente en una región del espacio libre de fuentes está dada por el llamado espectro angular. Según esta representación, en una región libre de fuentes entre dos planos infinitos, cualquier campo se puede representar como una superposición (o integral) de ondas planas viajando en diferentes direcciones [Mandel y Wolf, 1995]. El campo es una combinación lineal de funciones que no cambia su forma al propagarse y se dice que cada término es un modo de la ecuación. Por lo tanto, el espectro angular es una expansión modal. Expresiones de este tipo serán utilizadas más adelante.

En el contexto de esparcimiento de luz por superficies y películas la representación de un campo como una superposición de ondas planas es válida únicamente en una región homogénea y sin fuentes comprendida entre dos planos, o en un semiespacio delimitado por un plano. Es decir que para una superficie rugosa la representación es válida por encima de un plano que esta definido por  $z > \zeta_{\max}(x)$  y por abajo de  $z < \zeta_{\min}(x)$ , como se muestra en la figura 2.



Figura 2. Regiones de validez de la representación del campo en términos del espectro angular.

La hipótesis de Rayleigh consiste, entonces, en suponer que esta representación es válida en la región definida como  $\zeta_{\min}(x) < z < \zeta_{\max}(x)$ . Esta hipótesis es necesaria en nuestro tratamiento en el momento de aplicar las condiciones de continuidad de las componentes tangenciales de los campos a través de la interfase. Es común encontrarla en la mayoria de los tratamientos de tipo perturbativo y ha sido objeto de muchas discusiones en la literatura [Petit y Cadilhac, 1966; Burrows, 1969; Millar, 1969; Millar, 1971; Hill y Celli, 1978]. Al parecer, hay un consenso de que esta suposición funciona bien cuando las rugosidades de la superficie son pequeñas (comparadas con la longitud de onda), pero no se han establecidos criterios de validez. En los experimentos numéricos realizados para esta tesis no hemos encontrado ningún caso en el cual la limitante del método propuesto sea la hipótesis de Rayleigh. Las limitaciones que hemos encontrados están más bien relacionadas con la precisión numérica utilizada en la implementación del método.

#### II.3. Ondas electromagnéticas de superficie

Las ondas electromagnéticas de superficie son ondas que se propagan a lo largo de la superficie de un material y cuyas amplitudes decaen exponencialmente al alejarse de la interfase. Este tipo de ondas electromagnéticas son llamadas plasmones o polaritones de superficie. Su existencia fue predicha a principio del siglo pasado por Sommerfeld [1909]. Un plasmón de superficie representa un modo natural de vibración de los electrones libres de un metal, que puede excitarse en el caso de la polarización p. Es de interés, para el desarrollo e interpretación del presente trabajo, determinar las condiciones bajo las cuales una onda incidente sobre la superficie plana de un material puede excitar una onda superficial.

Partimos de que las componentes y de los campos en los medios I y II pueden ser representadas por

$$U(x,z) = U_0 \exp\left[ikx - i\alpha_{\mathcal{R}}(k)z\right],$$

donde U(x, z) representa la componente y del vector de campo eléctrico  $\mathbf{E}(x, z)$  en el caso de la polarización s y del campo magnético  $\mathbf{H}(x, z)$  en el caso de la polarización p,  $U_0$  representa una constante con unidades apropiadas, k es el número de onda y  $\alpha_{\mathcal{R}}(k) = \left(\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \epsilon_{\mathcal{R}} - k^2\right)^{1/2}$ , donde  $\epsilon_{\mathcal{R}} = \epsilon_I$  ó  $\epsilon_{II}$ . Suponemos además que  $\epsilon_I = 1$ .

La continuidad de las componentes paralelas de  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$  a través de la interfase plana, implica que

$$U^{I}(x,z)\big|_{z=0} = U^{II}(x,z)\big|_{z=0} , \qquad (7)$$

У

$$\frac{1}{\epsilon_I} \frac{\partial}{\partial z} U^I(x,z) \big|_{z=0} = \frac{1}{\epsilon_{II}} \frac{\partial}{\partial n} U^{II}(x,z) \big|_{z=0} .$$
(8)

Se propone una posible solución con ondas planas en ambos medios

$$U^{I}(x,z) = U_{0I} \exp\left\{ikx + i\alpha_{I}(k)z\right\},\tag{9}$$

$$U^{II}(x,z) = U_{0II} \exp\{iqx - i\alpha_{II}(q)z\}.$$
(10)

Estas ondas viajan hacia la derecha. Para k,q > 0,  $U^{I}(x,z)$  viaja hacia arriba y  $U^{II}(x,z)$  viaja hacia abajo.

Dado que

$$\frac{\partial}{\partial z}U^{I}(x,z) = i\alpha_{I}(k)U^{I}(x,z),$$

у

$$\frac{\partial}{\partial z}U^{II}(x,z) = -i\alpha_{II}(q) U^{II}(x,z),$$

invocando (7) y (8) llegamos a que

$$\epsilon_{II}\alpha_{I}\left(k\right) + \epsilon_{I}\alpha_{II}\left(k\right) = 0 \tag{11}$$

es una condición para que (9) y (10) sean una solución posible del problema. Esto solo puede ocurrir cuando  $\epsilon_I$  y  $\epsilon_{II}$  tienen signos contrarios, por ejemplo en una interfase dieléctricometal. El problema general es complicado, pues  $\epsilon_I$  y  $\epsilon_{II}$  pueden ser complejos. En adelante consideraremos casos en los que  $\epsilon_I$  es real y positiva (dieléctrico) y  $\epsilon_{II}$  tiene una parte real que es negativa y es, en magnitud, mucho mayor que su parte imaginaria.

Sustituyendo  $\alpha_I(k)$  y  $\alpha_{II}(k)$  en la ecuación (11), y reacomodando, encontramos que el número de onda para que (9) y (10) sean solución está dado por

$$k_{sp} = \pm \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_I \epsilon_{II}}{\epsilon_I + \epsilon_{II}}},\tag{12}$$

que es el número de onda del plasmón superficial.

Esta expresión constituye la relación de dispersión de los plasmones superficiales que se propagan en una interfase plana dieléctrico-metal. La parte real de esta ecuación está asociada a la constante de propagación de la onda superficial, mientras que la parte imaginaria está asociada a la constante de atenuación de la onda debido a efectos de absorción en el metal. Vemos que, dado que  $\epsilon_I$  y  $\epsilon_{II}$  tienen signos contrarios (partes reales), se cumple que  $\mathbb{R} \{k_{sp}\} > n\omega/c$  (suponiendo  $|\epsilon_{II}| > 1$ . En un metal en contacto con un dieléctrico, para frecuencias menores que la frecuencia del plasma, estas condiciones se cumplen. Por lo tanto, es posible tener plasmones superficiales en la superficie del metal. El número de onda de un plasmón superficial es más grande que la componente del vector de propagación de una onda que se propaga a incidencia rasante. Debido a esto no es posible excitar plasmones de superficie sobre una superficie plana con una onda propagante.

Por otro lado, el espectro angular del campo esparcido por una superficie rugosa tiene componentes a muchos números de onda  $q(\omega)$  diferentes al correspondiente a la dirección especular. Para ilustrar esto, tomamos como ejemplo una rejilla periódica como la que se muestra esquemáticamente en la figura 3. El espectro angular de la onda difractada se puede representar de la forma

$$R_{p,s}\left(k|q\right) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} 2\pi\delta\left(q-q_m\right)A_{p,s}^m\tag{13}$$

donde los coeficientes  $A_{p,s}^m$  representan las amplitudes de reflexión, que dependen de las propiedades de la superficie y de la polarización; los subindices s y p se refieren al tipo de polarización. Suponiendo que el medio I es el vacio, tenemos que

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

donde  $k = (\omega/c) \sin\theta_0$  y L representa el período de la rejilla.



Figura 3. Rejilla de difracción: se muestran los diferentes ordenes difractados.

La expresión anterior representa la conocida ecuación de la rejilla de difracción, que se puede reescribir de la siguiente forma:

$$q_m = k + mk_T, \ m = ..., -2, -1, \ 0, \ 1, \ 2, ...,$$
 (14)

con  $k_T = 2\pi/L$ . Esta ecuación puede interpretarse como una ecuación de conservación de momento en una dirección paralela a la interfase promedio.

La cantidad  $\pm mk_T$  representa un cierto "momento" que puede ser suministrado por la rugosidad superficial para que  $q_m$ , el número de onda del haz difractado, iguale el número de onda del plasmón superficial. Es decir, que se puede cumplir que el número de propagación de onda incidente, más el del orden difractado, sea igual al número de onda del plasmón superficial. Bajo estas condiciones es posible excitar este tipo de ondas. Dado que en metales  $\epsilon(\omega)$  tiene una parte real negativa y de magnitud relativamente alta en comparación con la parte imaginaria,  $k_{sp}$  es sólo un poco mayor que ( $\omega/c$ ), por lo que la condición  $q_m = k_{sp}$  se cumple prácticamante cuando el orden difractado es rasante a la superficie del metal.

Conociendo el ángulo de incidencia  $\theta_0$  y la constante dieléctrica del material, se puede calcular, por medio de las ecuaciones (12) y (14), el período y el orden de la rejilla requeridos para excitar plasmones superficiales que se propaguen a la derecha o a la izquierda. Cabe señalar que la relación de dispersión de los plasmones superficiales en una superficie rugosa es distinta a la que se tiene para una superficie plana. Sin embargo, varios autores indican que si la rugosidad es pequeña, la diferencia será despreciable.

Los plasmones superficiales resultan atractivos e importantes en una gran variedad de situaciones debido a que cuando una onda incidente se logra acoplar a una onda superficial, una buena parte de la energía incidente puede ser "atrapada" por la onda superficial, provocando una intensificación del campo local en la vecindad de la interfase.

#### II.4. Ondas en guías de onda planas

Una señal luminosa puede transmitirse a través del espacio libre. Alternativamente, la señal puede transmitirse sin efectos de difracción y prácticamente sin pérdidas, utilizando guías de onda. El concepto básico del confinamiento óptico consiste en tener un medio con un índice de refracción dado sumergido dentro de otro con un índice de refracción menor. Este sistema funciona como una trampa, dentro de la cual la luz se encuentra confinada por medio del fenómeno de la reflexión interna total en las fronteras. A lo largo de este trabajo estudiaremos algunos problemas de esparcimiento que involucran guías de onda, por lo que es importante presentar una pequeña revisión del tema.

Una guía de onda plana consiste de una película de un material dieléctrico flanqueada por medios de índices de refracción menor. Un diagrama esquemático de la geometría se muestra en la figura 4.



Figura 4. Geometria de una guía de onda plana.

El medio superior tiene un índice de refracción  $n_I$ . La región central de la guía se supone con un indice de refracción  $n_{II}$  y ésta se encuentra depositada sobre un substrato con índice de refracción  $n_{III}$ . Para que se dé el guiado, debemos suponer que  $n_{II} > n_I$  y que  $n_{II} > n_{III}$ . En el caso  $n_I = n_{III}$  tenemos una guía de onda plana simétrica. De esta manera los modos que se propagan dentro de la guía pueden ser expresados como distribuciones de campo pares e impares, simplificando el problema. Esta configuración es interesante para nosotros por la similitud que tiene con la geometría de una fibra óptica de índice escalón y por su relación con un proyecto experimental de esparcimiento en fibras que se desarrolla en CICESE [Puente, 2001]. Aunque en el capítulo de resultados se considerará el caso de una película dieléctrica depositada sobre un metal o conductor perfecto, la motivación para presentar estos resultados está en el comparar con resultados conocidos. Por otro lado, no estamos al tanto de cálculos con el sistema aire-dieléctrico-aire por lo que se pondrá énfasis en este caso. A continuación planteamos una solución para el campo propagado dentro de una guía simétrica.

#### II.4.1. Modos de una guía de onda plana simétrica.

Podemos definir un modo de propagación como un campo que se propaga en el interior de una guía sin cambiar su forma. En general, para un sistema de espesor finito existe una cantidad finita de modos, que se pueden determinar del valor del ángulo crítico y la condición de autoconsistencia, que establece que una onda debe reproducirse en cada viaje redondo por las paredes de la guía.

Con referencia a la figura 4, tenemos que el ángulo  $\overline{\theta}$  debe ser mayor que el ángulo crítico complementario  $\overline{\theta_c}$ , que está dado por  $\overline{\theta_c} = \sin^{-1} (n_I/n_{II})$ .

En un viaje redondo la onda que ha sido reflejada dos veces en las interfases superior e inferior lleva un retraso de fase con respecto a la onda original de  $2\varphi_r$ . Este retraso es introducido por las reflexiones internas en las fronteras dieléctricas. Para tener la autoconsistencia se debe cumplir que el cambio de fase entre la onda original y la onda que ha completado un viaje redondo sea de cero o un múltiplo de  $2\pi$ ,

$$n_{II}\frac{\omega}{c}2D\sin\theta - 2\varphi_r = 2\pi n, \qquad n = 0, 1, 2, ...$$
 (15)

El cambio de fase  $\varphi_r$  depende del ángulo  $\theta$  y de la polarización de la onda incidente. Para polarización s, la fase  $\varphi_r$ , se puede determinar de la expresión

$$\tan\left(\frac{\varphi_r}{2}\right) = \left(\frac{\sin^2\theta_c}{\sin^2\theta} - 1\right)^{1/2}.$$
(16)

De las ecuaciónes (15) y (16), obtenemos

$$\tan\left(\pi\frac{n_{II}D}{\lambda}\sin\theta - n\frac{\pi}{2}\right) = \left(\frac{\sin^2\overline{\theta_c}}{\sin^2\theta} - 1\right)^{1/2},\tag{17}$$

que representa la condición de autoconsistencia para los modos en polarización s.

Las soluciones de esta ecuación nos dan los ángulos  $\theta_n$  de rebote de las dos ondas planas que forman el modo. Estas soluciones se pueden obtener graficando ambos lados de (17) y encontrando los puntos de intersección entre la gráfica del lado derecho de la ecuación, que es función del sin  $\theta$  y las gráficas del lado izquierdo de la ecuación, que forman una familia de curvas. En el caso de la polarización p el cambio de fase  $\varphi_r$  está dado por

$$\tan\left(\frac{\varphi_r}{2}\right) = \frac{1}{\cos^2\overline{\theta_c}} \left(\frac{\sin^2\theta_c}{\sin^2\theta} - 1\right)^{1/2} \tag{18}$$

por lo que de (15) y (18) se tiene que la condición de autoconsistencia esta representada por

$$\tan\left(\pi\frac{n_{II}D}{\lambda}\sin\theta - n\frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{\cos^2\overline{\theta_c}} \left(\frac{\sin^2\theta_c}{\sin^2\theta} - 1\right)^{1/2}.$$
(19)

De la ecuación (19) se pueden obtener los ángulos correspondientes a los modos TM usando el método gráfico.

Para convertir estas expresiones a la notación y cantidades empleadas en el problema de esparcimiento es conveniente identificar las componentes x y z del vector de propagación de la onda. Tenemos que, en términos de los ángulos  $\theta$  y  $\overline{\theta}$ , la constante de propagación de la onda dentro de la guía está dada por

$$k_g = n_{II} \frac{\omega}{c} \sin \overline{\theta} = n_{II} \frac{\omega}{c} \cos \theta.$$
<sup>(20)</sup>

Similarmente, tenemos que

$$\alpha_{II}(k_g) = \sqrt{\epsilon_{II} \frac{\omega^2}{c^2} - k_g^2} = n_{II} \frac{\omega}{c} \sin \theta.$$
<sup>(21)</sup>

Vemos que, cuando  $\overline{\theta} = \overline{\theta_c}$ ,  $n_{II} \sin \overline{\theta_c} = n_I$ . Para ángulos  $\overline{\theta}$  mayores que el ángulo crítico las ondas son guiadas y  $k_g > \frac{\omega}{c}$ , mientras que para ángulos  $\overline{\theta} < \overline{\theta_c}$ , las ondas no son guiadas.

Tenemos entonces una solución parecida a la de los polaritones de superficie. Para acoplar una onda propagante a una guía es necesario emplear algún mecanismo para alcanzar una constante de propagación superior a  $\omega/c$ . Como en aquel caso, esto se puede lograr mediante la rugosidad superficial.

La cantidad de soluciones para el campo, o modos que pueden propagarse dentro de una guía, es finita y depende de las dimensiones de ésta, de los índices de refracción y de la longitud de onda. La solución gráfica propuesta a las ecuaciones de autoconsistencia nos dá las constantes de propagación para una guía dada y una longitud de onda dada. Es importante el poder calcular el número de modos que soporta una determinada guía, que está dado por

$$M \doteq \frac{n_{II} \sin \theta_c}{\lambda/2D},\tag{22}$$

tanto para la polarización s como para la polarización p, donde el operador  $\doteq$  indica que el número calculado con el lado derecho de la ecuación (22) se incrementa al entero más cercano.

#### II.5. Derivación de las ecuaciones reducidas de Rayleigh

En esta sección se presenta la derivación de las ecuaciones reducidas de Rayleigh en las dos geometrías propuestas.

#### II.5.1. El caso de dos medios

Consideremos una superficie unidimensional cuyo perfil esta descrito por la expresión  $z = \zeta(x)$ . Se supone que las regiones semi infinitas *I* y *II* están llenas con un material isotrópico y homogéneo, caracterizado por sus constantes dielectricas  $\epsilon_I(\omega)$  y  $\epsilon_{II}(\omega)$ . El medio de incidencia es la región *I* (ver figura 5).



Figura 5. Geometria del problema para dos medios semiinfinitos.

El eje z es perpendicular al plano medio de la superficie, la cual es invariante a lo largo del eje y. También se supone que el plano de incidencia es el plano x - z. Es bien conocido que bajo estas condiciones, los estados puros de polarización s (vector de campo eléctrico perpendicular al plano de incidencia) y p (vector de campo eléctrico en el plano de incidencia) retienen su polarización y, por lo tanto, el problema electromágnetico se reduce a un problema de naturaleza escalar.

Partimos de que las componentes s y p del campo incidente pueden ser representadas por

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

donde  $U_0$  representa la amplitud del campo incidente,  $k = n_I (\omega/c) \sin \theta_0$  y  $\alpha_I (k) = n_I (\omega/c) \cos \theta_0$  son las componentes x y z del vector de onda incidente.

Las componentes y de los campos reflejado y transmitido se pueden escribir en términos de su espectro angular como

$$U_R(x,z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) \exp[iqx + i\alpha_I(q)z], \quad z \ge \zeta_{\max}(x), \tag{23}$$

у

$$U_T(x,z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} T(q|k) \exp[iqx - i\alpha_{II}(q)z], \quad z \le \zeta_{\min}(x), \tag{24}$$

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 a 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 correspondientes a las regiones I o II.

El campo total en la región I está entonces dado por la suma de los campos incidente y esparcido,

$$U^{I}(x,z) = U_{inc}(x,z) + U_{R}(x,z),$$
(25)

mientras que en la región II tenemos solo el campo transmitido

$$U^{II}(x,z) = U_T(x,z).$$
 (26)

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

$$U^{I}(x,\zeta(x)) = U^{II}(x,\zeta(x)),$$
(27)

18

у

$$\frac{1}{\nu_I} \frac{\partial}{\partial n} U^I(x,z) \Big|_{z=\zeta(x)} = \frac{1}{\nu_{II}} \frac{\partial}{\partial n} U^{II}(x,z) \Big|_{z=\zeta(x)} , \qquad (28)$$

donde

у

$$\frac{\partial}{\partial n} = \frac{1}{\left(1 + \left(\zeta'(x)\right)^2\right)^{1/2}} \left(-\zeta(x)\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z}\right)$$
(29)

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

Usando la expansión en ondas planas (23) y (24), las ecuaciónes de continuidad (27) y (28), e invocando la hipótesis de Rayleigh, se pueden establecer las siguientes ecuaciones acopladas

$$U_{0} \exp\{ikx - i\alpha_{I}(k)\zeta(x)\} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) \exp\{iqx + i\alpha_{I}(q)\zeta(x)\}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} T(q|k) \exp\{iqx - i\alpha_{II}(q)\zeta(x)\}$$
(30)

$$\frac{-1}{\nu_{I}} [\zeta'(x)k + \alpha_{I}(k)] U_{0} \exp\{ikx - i\alpha_{I}(k)\zeta(x)\} + \\
+ \frac{1}{\nu_{I}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} [-\zeta'(x)q + \alpha_{I}(q)] R(q|k) \exp\{iqx + i\alpha_{I}(q)\zeta(x)\} \\
= \frac{-1}{\nu_{II}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} [\zeta'(x)q + \alpha_{II}(q)] T(q|k)\} \exp\{iqx - i\alpha_{II}(q)\zeta(x)\}.$$
(31)

Estas ecuaciones pueden ser combinadas de tal manera que se obtiene una sola ecuación integral para R(q|k) o para T(q|k). Para esto, multiplicamos la primer ecuación por

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

y la segunda por

$$-\nu_{II}\exp\{-ipx-i\alpha_{II}(p)\zeta(x)\}$$
Integrando con respecto a x, sumando ambas ecuaciones y reacomodando, llegamos a que

$$-U_0 I_0(k|p) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) I_R(q|p) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} T(q|k) I_T(q|p),$$
(32)

donde (ver Apéndice I)

$$I_T(q|p) = 0, (33)$$

$$I_R(q|p) = \left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right)\left(pq + \alpha_{II}(p)\alpha_I(q)\right) - \sigma}{\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)}\right] I\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)|p-q\right), \quad (34)$$

$$I_0(k|p) = \left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right)\left(\alpha_{II}(p)\alpha_I(k) - kp\right) + \sigma}{\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)\right)}\right] I\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)|p-k\right), \quad (35)$$

con

$$I(\gamma|Q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-iQx} e^{-i\gamma\zeta(x)},$$
(36)

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

Para el caso de polarización p podemos finalmente escribir

$$-U_{0}\left(kp - \alpha_{II}(p)\alpha_{I}(k)\right) \left[\frac{I\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)|p - k\right)}{\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)}\right]$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \left(pq + \alpha_{II}(p)\alpha_{I}(q)\right) \left[\frac{I\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p - q\right)}{\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)}\right] R(q|k), \quad (37)$$

mientras que para la polarización s tenemosque

$$-U_0 \left[ \frac{I\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)|p-k\right)}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)} \right] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \left[ \frac{I\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)|p-q\right)}{\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)} \right] R(q|k).$$
(38)

Estas ecuaciones se conocen como las ecuaciones reducidas de Rayleigh.

En este punto, suponemos que la superficie es periódica. La sección de interés, de longitud L, se repite periódicamente de tal manera que  $\zeta(x + jL) = \zeta(x)$ . Entonces,

$$I(\gamma|Q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-iQx} e^{-i\gamma\zeta(x)}$$
  
= 
$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-inQL} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-iQx} e^{-i\gamma\zeta(x)}.$$
 (39)

Usando la relación

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-iQnL} = \frac{2\pi}{L} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \delta\left(Q - \frac{2\pi j}{L}\right),\tag{40}$$

y definiendo

$$\hat{I}(\gamma|Q) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-iQx} e^{-i\gamma\zeta(x)},$$
(41)

podemos escribir

у

$$I(\gamma|Q) = \hat{I}(\gamma|Q)2\pi \sum_{j=-\infty}^{\infty} \delta\left(Q - \frac{2\pi j}{L}\right).$$
(42)

Por otro lado definimos

$$p_n = k + 2\pi n/L,\tag{43}$$

$$q_m = k + 2\pi m/L \tag{44}$$

$$R(q|k) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} 2\pi \delta(q-q_m) R_m.$$
(45)

Tenemos también que k y  $q_m$  están relacionados con los ángulos de incidencia y esparcimiento, de manera que  $k = n_I (\omega/c) \sin \theta_0$  y  $q_m = n_I (\omega/c) \sin \theta_m$ .

La expresión (45) ilustra el hecho de que el campo esparcido consiste de los órdenes de difracción de la superficie periódica. Al aumentar el periodo L, los órdenes están más cercanos y la distribución angular se acerca al continuo.

Encontramos entonces que para polarización s la ecuación reducida de Rayleigh se puede escribir de la forma

$$U_0 \frac{\hat{I}(\alpha_{II}(p_n) + \alpha_I(k)|p_n - k)}{\alpha_{II}(p_n) + \alpha_I(k)} = -\sum_{m = -\infty}^{\infty} \frac{\hat{I}(\alpha_{II}(p_n) - \alpha_I(q_m)|p_n - q_m)}{\alpha_{II}(p_n) - \alpha_I(q_m)} R_m.$$
(46)

mientras que, para polarización p, tenemos

$$U_{0}(kp_{n} - \alpha_{II}(p_{n})\alpha_{I}(k)) \left[ \frac{\hat{I}(\alpha_{II}(p_{n}) + \alpha_{I}(k)|p_{n} - k)}{\alpha_{II}(p_{n}) + \alpha_{I}(k)} \right]$$
  
=  $-\sum_{m=-\infty}^{\infty} (p_{n}q_{m} + \alpha_{II}(p_{n})\alpha_{I}(q_{m})) \left[ \frac{\hat{I}(\alpha_{II}(p_{n}) - \alpha_{I}(q_{m})|p_{n} - q_{m})}{\alpha_{II}(p_{n}) - \alpha_{I}(q_{m})} \right] R_{m}.$  (47)

#### II.5.2. El caso de tres medios

\_

En este sistema tenemos una película delgada depositada sobre un material semiinfinito plano (ver figura 6). Una cara de la película es rugosa y se encuentra en contacto con el vacío.

Se supone que las regiones semiinfinitas  $I \ y \ III$ , al igual que la región II de la película, están llenas con un medio isotrópico y homogéneo, caracterizado por sus constantes dieléctricas dependientes de la frecuencia  $\epsilon_I(\omega)$ ,  $\epsilon_{II}(\omega)$  y  $\epsilon_{III}(\omega)$ . La región I se encuentra definida por la condición  $z > \zeta(x)$ . La película delgada está comprendida en la región  $0 < z < \zeta(x)$  y, por último, la región III está definida por la condición z < 0. El medio de incidencia es la región I.



Figura 6. Geometria del problema para una película entre dos medios semiinfinitos.

En la figura 6 se observa que el plano z = D es el plano promedio de la superficie, y que el plano x - z forma el plano de incidencia. Nuestro sistema de coordenadas consiste, entonces, del sistema de referencia ortogonal (x, y, z). El perfil de la superficie está dado por  $z = \zeta(x)$  y es invariante en y. En este caso se consideran también estados puros de polarización s y p por lo que, nuevamente, el problema electromágnetico se reduce a un problema de naturaleza escalar.

En ambos casos representamos el campo incidente como

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

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

Para  $z > D + \zeta_{\max}(x)$ , el campo está dado por la suma del campo incidente y el

reflejado

$$U(x,z) = \exp[ikx - i\alpha_I(k)(z-D)] + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) \exp[iqx + i\alpha_I(q)(z-D)], \quad (48)$$

mientras que para  $0 < z < D + \zeta_{\min}(x)$  el campo se puede expresar de la forma

$$U(x,z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \exp(iqx) \{T_1(q|k) \exp[i\alpha_{II}(q)(z-D)] + T_2(q|k) \exp[-i\alpha_{II}(q)(z-D)]\},$$
(49)

y para z < 0,tenemos que

$$U(x,z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \exp\left(iqx\right) T_3(q|k) \exp\left[-i\alpha_{III}(q)z\right].$$
(50)

En estas expresiones  $\alpha_{\mathcal{R}}(q) = (\varepsilon_{\mathcal{R}}(\omega)\frac{\omega^2}{c^2} - q^2)^{1/2}$ , donde  $\mathcal{R}$  indica cantidades que corresponente a las regiones *I*, *II*, o *III*. Las condiciones de frontera en z = 0 son:

$$T_1(q|k) \exp[-i\alpha_{II}(q)D] + T_2(q|k) \exp[i\alpha_{II}(q)D] = T_3(q|k),$$
(51)

$$\frac{\alpha_{II}(q)}{\nu_{II}}T_{1}(q|k)\exp[-i\alpha_{II}(q)D] - \frac{\alpha_{II}(q)}{\nu_{II}}T_{2}(q|k)\exp[i\alpha_{II}(q)D]$$

$$= -\frac{\alpha_{III}(q)}{\nu_{III}}T_{3}(q|k).$$
(52)

donde  $\nu_{\mathcal{R}} = 1$  para la polarización s y  $\nu_{\mathcal{R}} = \varepsilon_{\mathcal{R}}(\omega)$  para la polarización p. Por lo tanto, tenemosque

$$T_1(q|k) = T_2(q|k)\tau_{12}(q), \tag{53}$$

con

$$\tau_{12} = \frac{\alpha_{II}(q)\nu_{III} - \alpha_{III}(q)\nu_{II}}{\alpha_{II}(q)\nu_{III} + \alpha_{III}(q)\nu_{II}} \exp[2i\alpha_{II}(q)D].$$
(54)

Por otro lado, las condiciones de frontera en  $z = \zeta(x) + D$  son:

$$\exp\{ikx - i\alpha_I(k)\zeta(x)\} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) \exp\{iqx + i\alpha_I(q)\zeta(x)\}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} T_1(q|k) \exp\{iqx + i\alpha_{II}(q)\zeta(x)\}$$
$$+ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} T_2(q|k) \exp\{iqx - i\alpha_{II}(q)\zeta(x)\}$$
(55)

$$\frac{-1}{\nu_{I}} (\alpha_{I}(k) + k\zeta'(x)) \exp\{ikx - i\alpha_{I}(k)\zeta(x)\} + \frac{1}{\nu_{I}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} (\alpha_{I}(q) - q\zeta'(x)) \times R(q|k) \exp\{iqx + i\alpha_{I}(q)\zeta(x)\} \\
= \frac{1}{\nu_{II}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} (\alpha_{II}(q) - q\zeta'(x)) T_{1}(q|k) \exp\{iqx + i\alpha_{II}(q)\zeta(x)\} - \frac{1}{\nu_{II}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} (\alpha_{II}(q) + q\zeta'(x)) T_{2}(q|k) \exp\{iqx - i\alpha_{II}(q)\zeta(x)\} \tag{56}$$

Multiplicando la primera ecuación por

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

la segunda por

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

integrando con respecto a x y sumando las dos ecuaciones encontramos que

$$I_{0+}(k|p) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) I_{R+}(q|p) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} T_1(q|k) I_{T1+}(q|p) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} T_2(q|k) I_{T2+}(q|p),$$
(57)

donde se puede mostrar que (ver Apéndice II)

$$I_{0+}(k|p) = \left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right)\left(\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(k) - kp\right) + \sigma}{\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)}\right] I\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)|p-k\right), \quad (58)$$

$$I_{R+}(q|p) = -\left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right)\left(\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(q) + qp\right) - \sigma}{\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)}\right]I\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p-q\right), \quad (59)$$

$$I_{T1+}(q|p) = 2\pi\delta(p-q)2\alpha_{II}(p),$$
(60)

$$I_{T2+}(k|p) = 0, (61)$$

con  $I(\gamma|Q)$  dada por la ecuación (36),  $\sigma = 0$  en polarización p y  $\sigma = (\omega/c)^2 (\varepsilon_{II}(\omega) - \varepsilon_I(\omega))$ en polarización s. Entonces, podemos escribir la ecuación (57) como

$$\left[\frac{\left(1-\frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right)\left(\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(k)-kp\right)+\sigma}{\alpha_{II}(p)+\alpha_{I}(k)}\right]I\left(\alpha_{II}(p)+\alpha_{I}(k)|p-k\right)=2\alpha_{II}(p)T_{1}(p|k)+$$

$$+\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) \left[ \frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right) \left(\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(q) + qp\right) - \sigma}{\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)} \right] I\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p-q\right).$$
(62)

De la misma manera, podemos derivar una segunda ecuación. Para esto, multiplicamos la ecuación (55) por

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

y la ecuación (56) por

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

Integramos con respecto a x y restamos ambas ecuaciones, encontrando que

$$I_{0-}(k|p) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) I_{R-}(q|p) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} T_1(q|k) I_{T1-}(q|p) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} T_2(q|k) I_{T2-}(q|p), \quad (63)$$

donde se puede mostrar que (ver Apéndice II):

-

$$I_{0-}(k|p) = -\left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right)(\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(k) + kp) - \sigma}{(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(k))}\right]I(-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)|p-k).$$
(64)

$$I_{R-}(q|p) = \left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right)\left(\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(q) - pq\right) + \sigma}{\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(q)}\right]I\left(-\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p-q\right), \quad (65)$$

$$I_{T1-}(q|p) = 0, (66)$$

$$I_{T2-}(q|p) = 2\pi\delta(p-q)2\alpha_{II}(p).$$
(67)

Empleando estas expresiones en la ecuación (63), multiplicándola por  $\tau_{12}$  y usando la ecuación (53) obtenemos que

$$\tau_{12}(p) \left[ \frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right) \left(\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(k) + kp\right) - \sigma}{\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(k)\right)} \right] I\left(-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)|p-k\right)$$

$$= -2\alpha_{II}(p)T_{1}(p|k) + \tau_{12}(p) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi}R(q|k) \times \left[ \frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right) \left(\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(q) - pq\right) + \sigma}{\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(q)} \right] I\left(-\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p-q\right).$$
(68)

Sumando esta ecuación a la ecuación (62) obtenemos finalmente que para el caso de

polarización p, la ecuación resultante se puede escribir de la forma

$$-\left[\frac{kp - \alpha_{II}(p)\alpha_{I}(k)}{\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)}\right] I\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)|p-k\right) - \tau_{12}(p) \left[\frac{kp + \alpha_{II}(p)\alpha_{I}(k)}{-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)}\right] I\left(-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)|p-k\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \left\{ \left[\frac{pq + \alpha_{II}(p)\alpha_{I}(q)}{\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)}\right] I\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p-q\right) + \tau_{12}(p) \left[\frac{pq - \alpha_{II}(p)\alpha_{I}(q)}{-\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)}\right] I\left(-\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p-q\right) \right\} R(q|k).$$
(69)

mientras que para la polarización s, tenemos que

$$-\left[\frac{I\left(\alpha_{II}(p)+\alpha_{I}(k)|p-k\right)}{\alpha_{II}(p)+\alpha_{I}(k)}\right]-\tau_{12}(p)\left[\frac{I\left(-\alpha_{II}(p)+\alpha_{I}(k)|p-k\right)}{-\alpha_{II}(p)+\alpha_{I}(k)}\right]=$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \left\{ \left[ \frac{I\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p - q\right)}{\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)} \right] + \tau_{12}(p) \left[ \frac{I\left(-\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p - q\right)}{-\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)} \right] \right\} R(q|k).$$

$$(70)$$

Estas constituyen las ecuaciones reducidas de Rayleigh para el caso de la geometría mostrada en la figura 6.

La solución de estas ecuaciones nos dá el campo reflejado al medio de incidencia. Con esta información podemos encontrar fácilmente los campos en las regiones II y III. Analizamos primero el caso del campo transmitido  $T_3$ .

De la ecuación (68) tenemos que

$$2\alpha_{II}(p)T_{1}(p|k) = -\tau_{12}(p) \left[ \frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right) \left(\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(k) + kp\right) - \sigma}{\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(k)\right)} \right] \times I\left(-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)|p-k\right) + \tau_{12}(p) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) \times \left[ \frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right) \left(\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(q) - pq\right) + \sigma}{\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(q)} \right] I\left(-\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p-q\right),$$
(71)

mientras que de las ecuaciones (55) y (53) tenemos

$$T_1(q|k) = \exp[i\alpha_{II}(q)D] \left[\frac{\tau_{12}(q)}{\tau_{12}(q) + \exp[2i\alpha_{II}(q)D]}\right] T_3(q|k).$$
(72)

Usando estos resultados obtenemos

$$T_{3}(p|k) = -\left[\frac{\nu_{III} \exp[i\alpha_{II}(p)D]}{\alpha_{II}(p)\nu_{III} + \alpha_{III}(p)\nu_{II}}\right] \times \left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right)\left(\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(k) + kp\right) - \sigma}{\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(k)\right)}\right] I\left(-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)|p-k\right) + \left[\frac{\nu_{III} \exp[i\alpha_{II}(p)D]}{\alpha_{II}(p)\nu_{III} + \alpha_{III}(p)\nu_{II}}\right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) \times \left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right)\left(\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(q) - pq\right) + \sigma}{\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(q)}\right] I\left(-\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p-q\right).$$
(73)

26

Por lo tanto, para polarización p, encontramos que

$$T_{3}(p|k) = -\left[\frac{\varepsilon_{III}(\varepsilon_{II} - \varepsilon_{I}) \exp[i\alpha_{II}(p)D]}{\varepsilon_{I}(\alpha_{II}(p)\varepsilon_{III} + \alpha_{III}(p)\varepsilon_{II})}\right] \times \left\{ \left(kp + \alpha_{II}(p)\alpha_{I}(k)\right) \left[\frac{I\left(-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)|p - k\right)}{-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)}\right] + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) \left(pq - \alpha_{II}(p)\alpha_{I}(q)\right) \left[\frac{I\left(-\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p - q\right)}{-\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)}\right] \right\},$$
(74)

mientras que para polarización s

$$T_{3}(p|k) = -\left[\frac{(\omega/c)^{2}(\varepsilon_{II} - \varepsilon_{I})\exp[i\alpha_{II}(p)D]}{\alpha_{II}(p) + \alpha_{III}(p)}\right] \left[\frac{I\left(-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)|p-k\right)}{-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)}\right] + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} R(q|k) \left[\frac{I\left(-\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p-q\right)}{-\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)}\right].$$
(75)

Una vez calculado R(q|k), podemos calcular el campo transmitido a la región III mediante estas expresiones.

Similarmente, una vez que se ha determinado  $T_3(p|k)$ ,  $T_1(p|k)$  se puede calcular con la ecuación (72) y  $T_2(p|k)$  con la ecuación (53).

#### II.5.3. Eficiencia y coeficientes diferenciales de esparcimiento.

Una medida de la energía del campo esparcido en un orden dado es la eficiencia de esparcimiento en reflexión, que está dada por la expresión

$$\varepsilon_m = \frac{\alpha_I(q_m)}{\alpha_I(k_0)} |R_m|^2.$$
(76)

Similarmente, para el campo transmitido se tiene que

$$\tau_m = \frac{\alpha_{III}(q_m)}{\alpha_I(k_0)} |T_m|^2.$$
(77)

En general, consideramos que el medio I es vacío. En los casos en que calculamos la luz transmitida al medio III, también consideramos que es el vacío. Por cuestiones de conservación de energía es evidente que se debe cumplir que

$$\sum_{m} \tau_m + \sum_{m} \varepsilon_m \le 1,$$
(78)

donde las sumas son sobre todos los canales abiertos (no evanescentes).

27

El coeficiente diferencial se define como la fracción del flujo total incidente que es esparcido en un intervalo angular  $\partial \theta_m$ , en los alrededores del angulo  $\theta_m$  y está dado por

$$\frac{\partial R}{\partial \theta_m} = \frac{L\cos\theta_m}{\lambda} \varepsilon_m = \frac{L}{\lambda} \frac{\cos^2\theta_m}{\cos\theta_0} |R_m|^2, \tag{79}$$

para el caso de reflexión, y

$$\frac{\partial T}{\partial \theta_m} = \frac{L\cos\theta_m}{\lambda} \tau_m = \frac{L}{\lambda} \frac{\cos^2\theta_m}{\cos\theta_0} |T_m|^2 \tag{80}$$

para el caso de transmisión.

# **III.Implementación numérica**

Como ya hemos mencionado, en esta tesis se consideraron dos tipos de sistemas de esparcimiento. El primero consiste de la interfaz rugosa entre dos medios semiinfinitos. El otro sistema consiste de una película delgada rugosa entre dos medios semiinfinitos. El método de solución es similar para los dos casos y nuestro interés está centrado en la distribución angular del campo esparcido (en reflexión, y en reflexión y transmisión para el segundo sistema) por superficies con propiedades estadísticas bien definidas. La intensidad esparcida promedio fue estimada por medio de simulaciones tipo Monte Carlo para varias superficies. Para esto, consideramos superficies con estadísticas tanto gaussianas como no gaussianas.

El problema de esparcimiento se plantea matemáticamente en términos de la ecuación matricial que resulta de las ecuaciones reducidas de Rayleigh, cuya solución determina la amplitud del campo esparcido. Para el caso de una película entre dos medios semiinfinitos es posible obtener, además del campo esparcido en reflexión, una solución para el campo transmitido hacia el tercer medio.

Para realizar la simulación es necesario, en primer lugar, la generación de un perfil que representa la superficie rugosa sobre la cual se hará incidir una onda electromagnética plana. Como veremos más adelante, una vez que se tiene una superficie y se define el campo incidente, se puede evaluar tanto la matriz como el término independiente. Ambos involucran integrales oscilantes que dependen del perfil y que se deben evaluar numéricamente. Esta es una de las partes más demandantes del problema. En nuestro cálculo utilizamos una aproximación basada en una expansión en serie de Taylor que nos permite reducir drásticamente el tiempo máquina utilizado. Las pruebas realizadas indican que los resultados obtenidos con una evaluación numérica directa de estas integrales son prácticamente iguales a los obtenidos utilizando la aproximación, pero la evaluación directa toma mucho más tiempo.

Para resolver el sistema de ecuaciones que determinan el campo esparcido que se tiene para una realización de la superficie, utilizamos la llamada descomposición LU [Press,

Teukolsky, Vetterling y Flannery 1992], que está implementada como una subrutina de las librerías Lapack para Fortran. Con esto se determina el campo reflejado. Una vez hecho esto, el campo transmitido se calcula por una multiplicación matricial simple. Para cada superficie se calcula la eficiencia de esparcimiento para todos los órdenes, con lo que podemos calcular un parámetro de conservación de energía que sirve como un indicador de la validez de la solución.

Al promediar la intensidad esparcida, podemos ver el resultado obtenido como la suma de dos componentes; la coherente y la incoherente. La componente coherente se define como el módulo cuadrado de la amplitud compleja promedio. Para el tipo de superficies utilizadas ésta es más fuerte, representando el campo reflejado especularmente. El campo esparcido de manera difusa está representado por la componente incoherente que se calcula como la intensidad total menos la intensidad coherente. Para el campo transmitido se tiene un comportamiento similar.

Los promedios se estiman de un número grande de realizaciones, con lo que se obtiene la parte incoherente del Coeficiente Diferencial de Reflexión (CDR) y, en su caso, del Coeficiente Diferencial de Transmisión (CDT). En los resultados que presentamos, los promedios se estimaron sobre un mínimo de 4000 realizaciones de la superficie, con lo cual se espera que estemos cerca del promedio que se calcularía sobre todo el ensamble.

## III.1. Generación de superficies rugosas aleatorias.

Aunque consideramos dos casos distintos dentro de esta tesis, en ambos la generación numérica de la superficie rugosa se realiza con la misma técnica. En el caso de una película delgada rugosa entre dos medios semiinfinitos, tenemos que solo la capa superior es rugosa y que la película se encuentra depositada sobre un material perfectamente plano. Las estadísticas y espectros de potencia utilizados en la generación de las superficies fueron elegidos por ser estos los más interesantes desde el punto de vista de la búsqueda de efectos coherentes, tales como el de retroesparcimiento reforzado.

#### III.1.1. Propiedades estadísticas de la superficie

En la mayoría de los trabajos teóricos de esparcimiento de luz por superficies rugosas aleatorias se supone que el perfil superficial constituye un proceso aleatorio gaussiano estacionario. Este tipo de proceso está completamente definido por el promedio m y la función de correlación W(x) (Goodman, 1985, p.82). Denotando el proceso por la función  $\zeta(x)$ , éste quedaría especificado por:

$$m = \left\langle \zeta \left( x \right) \right\rangle,\tag{81}$$

$$\delta^2 = \left\langle \left(\zeta \left(x\right) - m\right)^2 \right\rangle,\tag{82}$$

$$W(x) = \left\langle \zeta(x')\,\zeta(x+x')\right\rangle,\tag{83}$$

donde  $\delta$  representa la desviación estándar y los paréntesis angulados denotan promedio de ensamble. Para el caso m = 0 se tiene que  $W(x) = \delta^2 C(x)$ , donde C(x) representa la función de correlación normalizada, que en varios de los casos tratados aquí es de forma gaussiana

$$C(x) = exp\{-x^2/a^2\},$$
 (84)

donde a se conoce como la longitud de correlación.

También es de nuestro interés estudiar algunos casos de superficies no gaussianas. En particular consideramos dos clases de superficies no gaussianas, ambas obtenidas a través de transformaciones no lineales de superficies gaussianas.

La primera transformación considerada está dada por

$$\zeta\left(x\right) = \zeta_1^2\left(x\right),\tag{85}$$

donde  $\zeta_1(x)$  es una realización de un proceso aleatorio gaussiano con una función de correlación gaussiana. La desviación estandar de las alturas del proceso  $\zeta_1(x)$  es  $\delta_1$  y su longitud de correlación  $a_1$ . Se puede demostrar que la función de densidad de probabilidad del proceso aleatorio  $\zeta(x)$  está dada por

$$P\zeta(s) = \frac{1}{\sqrt{\pi s\delta}} \exp\left(-s/\delta\right),\tag{86}$$

que se conoce como la distribución  $\chi_1^2$ . El promedio de  $\zeta(x)$  es

$$\left\langle \zeta\left(x\right)\right\rangle = \delta_{1}^{2} \tag{87}$$

y la varianza

$$\delta^{2} = \left\langle \zeta^{2}\left(x\right)\right\rangle - \left\langle \zeta\left(x\right)\right\rangle^{2} = 2\delta_{1}^{4}.$$
(88)

También estamos interesados en la correlación

$$\left\langle \zeta\left(x\right)\zeta\left(x'\right)\right\rangle = \left\langle \zeta_{1}^{2}\left(x\right)\zeta_{1}^{2}\left(x'\right)\right\rangle,\tag{89}$$

Pero dado que el promedio del proceso no es cero, es más conveniente considerar la autocovarianza normalizada, que se define de la forma

$$\mathcal{C}(x-x') = \frac{\langle \zeta(x) \zeta(x') \rangle - \langle \zeta(x) \rangle \langle \zeta(x') \rangle}{\langle \zeta^2(x) \rangle - \langle \zeta(x) \rangle^2}.$$
(90)

Para la transformación (87), se encuentra que

$$\mathcal{C}\left(x-x'\right)=C^{2}\left(x-x'\right),$$

donde C(x) es la función de correlación de  $\zeta_1(x)$  que es de la forma dada por la ecuación esta dada por la ecuación (84). Entonces tenemos que

$$\mathcal{C}(x-x') = \exp\left\{-\frac{2(x-x')^2}{a_1^2}\right\} = \exp\left\{-\frac{(x-x')^2}{a^2}\right\},$$
(91)

lo que nos lleva a que la función de autocovariancia es gaussiana con una longitud de correlación

$$a = \frac{a_1}{\sqrt{2}}.$$
(92)

Dado que la función de probabilidad de las alturas para este tipo de superficies es positiva en todos sus puntos, no tenemos simetría alrededor del eje z = 0. Es de nuestro interés el trabajar con una función de probabilidades no gaussiana con simetría par por lo que consideramos una segunda tranformación que se describe a continuación.

Definimos dos funciones  $\zeta_1(x)$  y  $\zeta_2(x)$  que representan dos procesos aleatorios gaussianos con desviacion estándar de alturas  $\delta_1$  y  $\delta_2$ , respectivamente. Se tiene que

$$\delta_1 = \delta_2. \tag{93}$$

La transformación está dada por

$$\zeta(x) = \zeta_1^2(x) - \zeta_2^2(x).$$
(94)

El promedio, en este caso, es  $\langle \zeta (x) \rangle = 0$  y la variancia

$$\delta = 2\delta_1^2. \tag{95}$$

La función de correlación de las funciones  $\zeta_1(x)$  y  $\zeta_2(x)$  es gaussiana y sus longitudes

de correlación son  $a_1$  y  $a_2$ . Tomando en cuenta que las dos funciones tienen las mismas estadísticas y espectros de potencia notamos que

$$a_1 = a_2 \tag{96}$$

por lo que la función  $\zeta(x)$  resultante tiene también una función de correlación gaussiana con una longitud de correlación

$$a = \frac{a_1}{\sqrt{2}}.$$
(97)

Estas relaciones serán usadas posteriormente para definir las propiedades estadísticas de las superficies no gaussianas estudiadas.

#### III.1.2. Análisis espectral de la superficie

Para llevar a cabo las simulaciones se consideraron dos tipos distintos de espectro de potencia de las superficies. Estos son el gaussiano y el West-O'Donnell. Se eligieron estos espectros por ser los más interesantes desde los puntos de vista histórico y de búsqueda de efectos de retroesparcimiento reforzado. Antes de proceder a definir estos espectros, presentamos una breve introducción sobre el análisis espectral de procesos aleatorios.

Supongamos una función conocida  $\zeta(x)$  que representa el perfil de la superficie. Podemos diferenciar dos distintas clases de funciones. Por un lado, si  $\zeta(x)$  cumple con la condición

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\zeta(x)| \, dx < \infty,\tag{98}$$

decimos que la función  $\zeta(x)$  tiene transformada de Fourier. Por otro lado, puede ocurrir que  $\zeta(x)$  no cumpla con la condición (98), pero satisface

$$\lim_{L \to \infty} \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \zeta^2(x) < \infty,$$
(99)

en cuyo caso decimos que  $\zeta(x)$  tiene potencia promedio finita. En la práctica, es importante el poder especificar ya sea la distribución de energía (cuando se satisface la ecuación (98)) o la potencia promedio (cuando se satisface la ecuación (99)) del proceso aleatorio. Dichas descripciones son llamadas, respectivamente, la densidad espectral de energía (espectro de energía) y la densidad espectral de potencia (espectro de potencia) de la función  $\zeta(x)$ . Es común que para procesos aleatorios estacionarios (98) no se cumpla, por lo que es más usual emplear la densidad espectral de potencia.

Sea

$$\widehat{\zeta}_{L}(k) = \int_{-L/2}^{L/2} \zeta(x) \exp(ikx) \, dx, \tag{100}$$

la transformada de Fourier truncada de  $\zeta(x)$ . Definimos entonces el espectro de potencias G(k) como

$$G(k) = \lim_{L \to \infty} \frac{\left\langle \left| \widehat{\zeta}_L(k) \right|^2 \right\rangle}{L}.$$
(101)

Dado que  $\zeta(x)$  es real, de esta definición se sigue que G(k) es una función par de k. Es decir, que el espectro de potencia es simétrico. Debido a esto algunos autores solamente consideran las frecuencias positivas.

Hemos mencionado que los procesos gaussianos están completamente determinados por m y W(x). Para cerrar el ciclo, invocamos el teorema de Wiener-Khinchin, que establece que la función de correlación W(x) y el espectro de potencia G(k) constituyen un par de Fourier (Goodman, 1985, p.73),

$$G(k) = \int_{-\infty}^{\infty} W(x) e^{ikx} dx,$$
(102)

$$W(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(k) e^{-ikx} dq.$$
(103)

Consecuentemente, una superficie aleatoria gaussiana puede especificarse completamente por su promedio y su densidad espectral de potencia G(k).

La primera predicción analítica de retroesparcimiento reforzado fué hecha para una superficie gaussiana con espectro gaussiano [McGurn, Maradudin y Celli, 1985]. Cabe resaltar que a pesar de que la predicción data de 1985, el efecto aún no ha sido observado con este tipo de superficies. Incluso, los cálculos realizados con el método integral dejan lugar a dudas pues el efecto es apenas apreciable.

Para el caso de superficies con función de correlación gaussiana, se tiene que

$$W(x) = \delta^2 \exp\left(\frac{-x^2}{a^2}\right),\tag{104}$$

donde *a* es la longitud de correlación y nos dá una medida de la escala lateral de las irregularidades en la superficie. Por otro lado, el espectro también es gaussiano (teorema de Wiener-Khinchin) y está dado por

$$G\left(k\right) = \sqrt{\pi a} \exp\left(-4a^2k^2\right). \tag{105}$$

El efecto de retroesparcimiento reforzado debido a la excitación de plasmones de superficie se ha podido observar experimentalmente solamente con superficies que propician los mecanismos físicos que dan origen al efecto [West y O'Donnell, 1995]. Estas superficies tienen un espectro de potencia que se conoce ahora como West-O'Donnell. La forma de este espectro se ilustra en la figura 7.



Figura 7. Espectro West-O'Donnell: los rectangulos de potencia se encuentras centrados en  $k_{sp}$ .

Como vimos en el capítulo anterior, para acoplar una onda propagante a un plasmón de superficie, se debe cumplir la condición

$$\pm k_{sp} = k_{inc} + k_s \tag{106}$$

donde  $k_{sp}$  y  $k_{inc}$  son los números de onda del polaritón y de la onda incidente, mientras que  $k_s$  es una contribución suministrada por la superficie.

Si la superficie tiene una frecuencia tal que este momento adicional, sumado al número de onda del haz incidente es igual al número de onda del plasmón de superficie, entonces se pueden excitar plasmones de superficie. De aquí que para cada longitud de onda, y para un ángulo de incidencia determinado, existen una o más frecuencias espaciales de la superficie que permiten el acoplamiento a plasmones de superficie. Para incidencia normal, esto se cumple cuando  $|k_s| = |k_{sp}|$ . A otros ángulos de incidencia, para excitar polaritones, tanto a la derecha como a la izquierda, se necesitan dos números de onda (frecuencias espaciales) de la superficie, dados por

$$\left|k_{s}^{(1)}\right| = \left|k_{sp} - k_{inc}\right| \tag{107}$$

У

$$\left|k_{s}^{(2)}\right| = \left|k_{sp} + k_{inc}\right|. \tag{108}$$

El espectro de potencia West-O'Donnell esta diseñado justamente para propiciar estas excitaciones, es por esto que consiste de un rectángulo de frecuencias centradas en  $k_{sp}$ , tal como se muestra en la figura 7. El ancho del rectángulo determina el intervalo de ángulos de incidencia para los que esto ocurre.

Para el caso de guías de onda, se pueden diseñar superficies de manera análoga.

#### III.1.3. Discretización de superficies

El primer problema que aparece en el tratamiento numérico del problema de esparcimiento estriba en el hecho de que el perfil, que es una función contínua, se tiene que describir en la simulación de manera discreta. Podemos visualizar la superficie discretizada como una función contínua multiplicada por una función peine,

$$\operatorname{comb}(\Delta x) = \sum_{n = -\infty}^{\infty} \delta\left(\frac{x}{\Delta x} - n\right).$$
(109)

De esta manera se obtiene el perfil muestreado con intervalos  $\Delta x$ . Esto hace que la transfomada de Fourier del perfil muestreado sea periódica, por lo que se tienen que satisfacer ciertos requerimientos para evitar el traslape de las densidades espectrales de potencia.

Para generar las superficies se utilizó el método espectral propuesto por Maradudin et al (1989). Se requiere, en principio, construir un vector de la variable independiente x, con N puntos separados por una distancia  $\Delta x$ , la cual varía dependiendo del experimento. Este conjunto de puntos está dado por  $\{x_j = j\Delta x\}$  con j = -N/2, ... - 2, -1, 0, ..., N/2 - 1, de manera que la longitud total de la superficie simulada está dada por  $L = N\Delta x$ .

El perfil de la superficie se puede generar a través de la transformada de Fourier discreta

[Maradudin et al, 1989]

$$\zeta(x_j) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l=-N/2}^{N/2-1} \frac{1}{\sqrt{2}} \left( M_l + iN_l \right) \sqrt{G\left(|k_l|\right)} \exp\left(ik_l x_j\right), \tag{110}$$

donde  $G(k_l)$  es el espectro de potencia característico de la superficie y  $k_l$  es el número de onda, definido como  $k_l = l\Delta k$ , con  $\Delta k = \frac{2\pi}{L}$  y l un entero entre -N/2 y N/2 - 1. Notamos que cada componente espectral está multiplicada por el factor

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(M_l+iN_l\right),$$

donde  $M_l$  y  $N_l$  son variables aleatorias gaussianas independientes, con promedio cero, desviación estándar uno y con las propiedades

$$M_l = +M_{-l},$$
$$N_l = -N_{-l},$$

de manera que el factor que multiplica al espectro de potencia constituye un arreglo hermitiano. Se sigue que la transformada de Fourier de este producto es un arreglo real, como lo debe ser la superficie. Se puede mostrar, entonces, que existe una correlación entre los puntos de la superficie, que denotamos por  $W(x_j)$ , y que resulta ser precisamente la transformada de Fourier del espectro  $G(k_l)$  utilizado.

## III.2. Determinación del sistema de ecuaciones y de los campos esparcidos.

La ecuación (46) nos da las ecuaciones reducidas de Rayleigh para el caso de una interfase periódica entre dos medios semiinfinitos y polarización s. Es posible visualizar esta ecuación de la forma

$$[U_n] = [M_{mn}] [R_m], \qquad (111)$$

que representa un sistema de ecuaciones lineales que podemos resolver por métodos convencionales. En este caso hemos elegido la descomposición LU, la cual es una representación de una matriz como el producto de dos matrices triangulares, una superior y otra inferior. La ventaja de esta representación es que la solución al sistema de ecuaciones es trivial y puede ser llevada a cabo por medio de sustitución hacia adelante.

El vector  $U_n$  es un término que depende del campo incidente y del perfil superficial. La matriz  $M_{mn}$  también depende del campo incidente y del perfil. El vector  $R_m$  representa el espectro angular del campo esparcido en reflexión, también llamado la amplitud de esparcimiento. Las ecuaciones que se obtienen, tanto para los dos casos de polarización como para la película delgada entre dos medios semiinfinitos, son del mismo tipo. Para este último sistema tenemos, también, que el campo transmitido al medio III está expresado por la ecuación (75) para la polarización *s* y por (74) para la polarización *p*. En ambos casos es de la forma

$$[T_l] = [N_l] + [B_{ml}] [R_m]$$
(112)

por lo que su evaluación es sencilla una vez que se tiene  $R_m$ .

Una vez que el sistema ha sido resuelto, la eficiencia total de esparcimiento es calculada para cada realización como una medida de la validez de la solución.

La generación de la matriz  $M_{mn}$ , del vector  $U_n$  y, en el segundo caso, del vector  $N_l$ y la matriz  $B_{ml}$  es una tarea que se repite para cada una de las realizaciones del ensamble. Los índices n, m y l son enteros que van de -M a M, y 2M + 1 es el número máximo de componentes espectrales que se toman para calcular el campo esparcido.

De (43) y (44) vemos que existe una separación de  $2\pi/L$  entre las componentes paralelas a la superficie promedio del vector de onda asociado al campo esparcido. Estos números de onda van de  $-2\pi M/L$  hasta  $2\pi M/L$  para el caso de incidencia normal y se recorren para cualquier otro ángulo de incidencia, pues este último determina el valor de k. El valor de M se define de manera que se abarquen valores superiores a  $\omega/c$  a ambos lados del espectro. La zona que está un poco por arriba de  $|\omega/c|$  es en la que se pueden excitar plasmones polaritones de superficie, lo cual puede generar, a través de procesos de esparcimiento múltiple, el pico de retroesparcimiento reforzado. En general hemos trabajado con valores de M que corresponden a p's y q's de  $|2\omega/c|$  o más.

Para cada elemento de los vectores  $U_n$  y  $N_l$  y las matrices  $M_{mn}$  y  $B_{ml}$  en las ecuaciones (111) y (112) es necesario evaluar la función  $I(\gamma|Q)$ . Esto se puede lograr evaluando númericamente la integral por medio de aproximaciones trapezoidales a lo largo de la superficie. Sin embargo, se trata de un cálculo pesado para la computadora, considerando que el número de componentes espectrales usados en la solución de un problema es grande, además de la cantidad de realizaciones sobre las cuales es necesario promediar para obtener

resultados en un experimento numérico. Una forma alternativa de evaluar esta función se presenta a continuación.

Primero, expresamos la ecuación (36) de la siguiente manera

$$I(\gamma|Q) = F\left\{\exp\left(-i\gamma\zeta\left(x\right)\right)\right\},\tag{113}$$

donde F {} representa el operador transformada de Fourier truncado a una longitud L. Utilizamos ahora la expansión

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

De esta manera tenemos que

$$I(\gamma|Q) = F_L\{1\} + F_L\{-i\gamma\zeta(x)\} + F_L\left\{-\frac{\gamma^2\zeta(x)^2}{2!}\right\} + F_L\left\{\frac{i\gamma^3\zeta^3(x)}{3!}\right\} + \dots$$

Como  $\gamma$  no depende de la variable de integración la podemos sacar fuera del operador de transformada de Fourier, con lo que la ecuación (113) queda de la forma

$$I(\gamma|Q) = F_L\{1\} - i\gamma F_L\{\zeta(x)\} + \frac{i^2\gamma^2}{2!}F_L\{\zeta(x)^2\} - \frac{i^3\gamma^3}{3!}F_L\{\zeta^3(x)\} + \dots$$

En consecuencia, si calculamos las transformadas de Fourier truncada ( a través de la FFT) del perfil y sus potencias, sólo es necesario evaluar un polinomio para calcular cada uno de los elementos de  $M_{mn}$ ,  $B_{ml}$ ,  $N_l$  y  $U_n$ .

Por otro lado, numéricamente, el factorial en el denominador de los términos de la serie puede llegar a ser un problema cuando tomamos órdenes grandes. Como una solución a este problema, la serie fue evaluada recursivamente. Para esto definimos

$$a_0 = F_L\left\{1\right\},\tag{114}$$

$$a_1 = i\gamma F_L\left\{\zeta(x)\right\},\tag{115}$$

$$a_2 = \frac{i^2 \gamma^2}{2!} F_L \left\{ \zeta^2(x) \right\}, \tag{116}$$

$$a_n = \frac{i^n \gamma^n}{n!} F_L \left\{ \zeta^n(x) \right\} = \frac{i \gamma a_{n-1}}{n F_L \left\{ \zeta^{n-1}(x) \right\}} F_L \left\{ \zeta^n(x) \right\}.$$
(117)

40

Con estas expresiones podemos calcular cada término a partir del anterior y reducir de esta forma el error numérico que se tiene al calcular el cociente entre dos numéros grandes. En caso de que  $F_L \{\zeta^{n-1}(x)\}$  sea igual a cero, se evalua el término  $a_n$  de manera directa. Tenemos entonces que (36) está dada por

$$I(\gamma|Q) = a_0 + a_1 + \dots + a_n.$$
(118)

Como ya hemos mencionado, la solución del sistema de ecuaciones fue obtenida por medio de una descomposición LU. Los programas utilizados en esta simulación para la solución del sistema de ecuaciones forman parte de las subrutinas comprendidas en la libreria Lapack para Fortran. Para esto, se escribe la matriz  $M_{mn}$  como el producto de dos matrices,

$$L \cdot U = M_{mn}$$

donde L es una matriz triangular inferior y U es triangular superior. El sistema lineal de ecuaciones

$$M \cdot x = b,$$

se escribe entonces de la forma

$$L \cdot (U \cdot x) = b$$

Definiendo  $y = U \cdot x$ , resolvemos primero el sistema

$$L \cdot y = b$$

y después el sistema

$$U \cdot x = y$$

La ventaja de resolver un sistema lineal de esta manera es que para un sistema triangular la solución es trivial y se encuentra por sustitución hacia adelante [Press, Teukolsky, Vetterling y Flannery 1992].

La eficiencia de esparcimiento es calculada para cada una de las realizaciones tanto en reflexión como en transmisión. El vector solución,  $R_m$ , representa la amplitud de las ondas planas que conforman el campo esparcido en reflexión. Tenemos que, para una realización, la eficiencia de esparcimiento del campo reflejado está dada por (76). De la misma manera, para la transmisión tenemos que la eficiencia de esparcimiento esta dada por (77) por lo que se debe cumplir la condición (78), donde la sumatoria está hecha sobre todos los canales

abiertos; es decir, para las  $q_m < |\omega/c|$ . La suma de las eficiencias nos sirve como un indicador de la validez de la solución.

Los resultados obtenidos numéricamente fueron comparados con predicciones teóricas en intervalos de parámetros de superficie en que las dos teorías son válidas y bien comportadas.

El coeficiente diferencial de reflección está dado por la ecuación (79). De aquí tenemos que la componente incoherente está dada por

$$\left\langle \frac{\partial R}{\partial \theta_m} \right\rangle_{Incoh} = \frac{L}{\lambda} \frac{\cos^2 \theta_m}{\cos \theta_0} \left[ \left\langle |R_m|^2 \right\rangle - |\langle R_m \rangle|^2 \right], \tag{119}$$

mientras que,

$$\left\langle \frac{\partial R}{\partial \theta_m} \right\rangle_{Coh} = \frac{L}{\lambda} \frac{\cos^2 \theta_m}{\cos \theta_0} \left| \langle R_m \rangle \right|^2$$

representa la componente coherente o especular. La separación de las componentes coherente e incoherente del resultado es posible una vez que se ha promediado sobre un gran número de realizaciones.

Los promedios estimados para  $\langle |R_m|^2 \rangle$  y  $|\langle R_m \rangle|^2$  son almacenados en archivos independientes después de cada realización, utilizando todas las anteriores. Estos archivos son procesados una vez que se han llevado a cabo todas las realizaciones del experimento numérico para estimar la componente incoherente.

De la misma manera, para la transmisión, tenemos que de la ecuación (80), la componente incoherente está dada por

$$\left\langle \frac{\partial T}{\partial \theta_m} \right\rangle_{Incoh} = \frac{L}{\lambda} \frac{\cos^2 \theta_m}{\cos \theta_0} \left[ \left\langle |T_l|^2 \right\rangle - |\langle T_l \rangle|^2 \right], \tag{120}$$

mientras que

$$\left\langle \frac{\partial T}{\partial \theta_m} \right\rangle_{Coh} = \frac{L}{\lambda} \frac{\cos^2 \theta_m}{\cos \theta_0} \left| \langle T_l \rangle \right|^2 \tag{121}$$

representa la componente coherente transmitida.

El ángulo de esparcimiento  $\theta_m$  para cada componente de los vectores resultantes esta dado por la ecuación (44), de donde

$$\theta_m = \sin^{-1} \left( \frac{q_m c}{\omega} \right) \tag{122a}$$

para  $-1 < q_m c / \omega < 1$ .

# **IV.Resultados y discusión**

Utilizando el método descrito es posible analizar una gran cantidad de casos de esparcimiento por superficies y películas unidimensionales. En este capítulo se presentan algunos de ellos, a manera de demostración de las capacidades del método.

En primer término, se presentan resultados representativos para dos medios semiinfinitos, tomando en cuenta materiales como plata, oro y vidrio, con distintas estadísticas y espectros de potencia. También se presentan gráficas del comportamiendo del campo esparcido para superficies con una componente periódica. En la segunda parte de este capítulo se analiza el esparcimiento provocado por películas rugosas depositadas sobre un sustrato plano para varias combinaciones de materiales y parámetros superficiales. Se hacen comparaciones con resultados obtenidos con teorías perturbativas y con algunos resultados experimentales que han sido publicados. Por último se analiza un caso práctico de acoplamiento de luz a una guía de onda de vidrio por medio de su rugosidad superficial. Se

### IV.1. Dos medios semiinfinitos

Como ejemplo que ilustra la precisión de los resultados que se obtienen con el método numérico basado en las hipótesis de Rayleigh, en la figura 8 se muestra el CDR obtenido para la superficie propuesta en la introducción de esta tesis.

Como se observa en la figura, los resultados obtenidos por medio de la simulación numérica basada en las ecuaciones reducidas de Rayleigh (línea azul) se ajustan muy bién a los predichos (línea roja) por la teoría perturbativa [A.A. Maradudin y E. R. Méndez, 1993]. Ambas curvas predicen el pico de retroesparcimiento reforzado que, dado que se tiene incidencia normal, aparece a 0°. Este pico, como ya se explicó, es resultado de la interferencia constructiva entre ondas múltiplemente esparcidas que involucran la excitación de ondas de superficie o plasmones.



Figura 8. Componente incoherente del CDR para una superficie de plata con estadísticas gaussianas y con función de correlación gaussiana iluminada en polarización p a  $\theta_0 = 0^\circ$ . La línea roja representa los resultados obtenidos con la teoría perturbativa de Maradudin y Méndez [1993] y la línea azul aquellos obtenidos con el método numérico. La longitud de onda es  $\lambda = 457.9$ nm y los parámetros de la superficie son  $\delta = 5$ nm, a = 100nm y  $\epsilon(\omega) = -7.5 + i0.24$ . El número de realizaciones es Np = 100000.

Al incidir una onda plana sobre la superficie rugosa puede acoplarse a un plasmón de superficie que se propague ya sea en la dirección positiva de las x's o en la dirección negativa, de tal manera que puede darse la situación que se ilustra en la figura 9.



Figura 9. Caminos de esparcimiento múltiple que producen retroesparcimiento reforzado.

La diferencia de camino óptico entre las ondas esparcidas que siguen los caminos rojo y azul es cero en la dirección de retroesparcimiento. En este caso, la interferencia constructiva es posible produciéndose así el pico de retroesparcimiento reforzado. En otras direcciones el estado de interferencia es aleatorio, por lo que al promediar se pierden estos efectos. También es claro que, a diferencia del método basado en el teorema integral de Green (ver figura 1), los cálculos se comportan bien a ángulos rasantes de esparcimiento. En este caso el pico de retroesparcimiento se encuentra centrado en el mismo ángulo que la componente especular pero no debe confundirse con esta última. En el caso considerado, la componente coherente del campo es una función  $\delta$  centrada en  $\theta_s = 0^\circ$ , mientras que el pico de retroesparcimiento es un pico con un cierto ancho  $\Delta \theta$  finito.

Para una visualización más clara del efecto de retroesparcimiento, en la figura 10 se presentan resultados para esta misma superficie, pero ahora iluminada a un ángulo de incidencia  $\theta_0 = 30^\circ$ . Se observa un pico bien definido en la dirección de retroesparcimiento, es decir a  $\theta_s = -30^\circ$ .



Figura 10. Componente incoherente del CDR para una superficie de plata con estadísticas gaussianas y con función de correlación gaussiana, iluminada en polarización p a  $\theta_0 = 30^\circ$ . La línea roja representa los resultados obtenidos con la teoría perturbativa y la línea azul aquellos obtenidos con el método numérico. La longitud de onda es  $\lambda = 457.9$ nm y los parámetros de la superficie son  $\delta = 5$ nm, a = 100nm y  $\epsilon (\omega) = -7.5 + i0.24$ . El número de realizaciones es Np = 10000.

Nuevamente, la línea azul representa los resultados obtenidos por medio de la simulación numérica, mientras que la línea roja corresponde a los resultados encontrados

con la teoría perturbativa.

La teoría electromagnética predice que la excitación de plasmones es posible únicamente para polarización p. Para mostrar la importancia que tiene la excitación de plasmones de superficie sobre el pico de retroesparcimiento, en la figura 11 se muestran resultados para el mismo caso mostrado en la figura 10, pero con polarización s. Como es de esperarse, la distribución de intensidades no muestra ninguna seña particular en la dirección de retroesparcimiento y la distribución angular es distinta de la observada para polarización p; en general, está más cargada hacia la dirección especular y contiene menos energía.



Figura 11. Como en la figura 10 pero para polarización s y solamente con el método numérico.

En las siguientes subsecciones se estudian los efectos que las distintas propiedades de la superficie tienen sobre la distribución angular del campo esparcido.

# IV.1.1. Ancho del pico de retroesparcimiento reforzado en función de los parámetros estadísticos de la superficie.

Uno de los fenómenos más interesantes en el estudio del esparcimiento de luz por superficies poco rugosas es el retroesparcimiento reforzado. Como ya mencionamos, este efecto se debe a la excitación de plasmones de superficie y la interferencia constructiva que puede darse entre la luz radiada cuando estos interactúan con la rugosidad superficial. El pico de retroesparcimiento se encuentra centrado, en todos los casos, en un ángulo  $\theta_s$  de esparcimiento igual al negativo del ángulo  $\theta_0$  de incidencia. Para rugosidades pequeñas el pico tiene una forma que es aproximadamente lorentziana y su ancho angular es variable. Este ancho depende de los parámetros estadísticos de la superficie y su constante dieléctrica. Es de interés el analizar la dependencia del ancho del pico con la desviación estándar de las alturas y con la longitud de correlación para el caso de superficies con un espectro de potencia gaussiano.



Figura 12. Componente incoherente del CDR para superficies de plata ( $\epsilon_{II}$  ( $\omega$ ) = -7.5 + *i*0.24) con estadísticas y espectro de potencia gaussianos a incidencia normal en polarización *p*. La longitud de correlación de todas las superficies es *a* = 100 nm y la desviación estandar de las alturas es  $\delta$  = 5, 10, 14.85 y 20 nm. La longitud de onda de la luz es  $\lambda$  = 457.9 nm y  $N_p$  = 10000.

En la figura 12 se muestran resultados obtenidos para superficies cuyos perfiles constituyen procesos estocásticos gaussianos, con espectros de potencia gaussianos y una longitud de correlación a = 100nm. Las desviaciones estándar de alturas van desde  $\delta = 5$  nm hasta  $\delta = 20$  nm. El material presenta una constante dieléctrica  $\epsilon_{II}(\omega) = -7.5 + i1.24$  para esta longitud de onda ( $\lambda = 457.9$  nm). El ángulo de incidencia es  $\theta_0 = 0^\circ$  y la polarización

46

es p.

En la figura se ve que el ancho y la forma del pico cambian al aumentar la rugosidad. Empleando teorías perturbativas, es posible encontrar expresiones para el ancho de estos picos como función de la desviación estándar de las alturas. Sin embargo, debido a las limitaciones de la teoría perturbativa, estos cálculos solamente pueden tratar con rugosidades muy pequeñas. Con el método numérico aquí descrito es posible estudiar casos con rugosidades más importantes. Los anchos de picos fueron estimados a su altura media (FWHM), sin tomar en cuenta la altura de la curva de fondo.

En la figura 13 se presenta una comparación de resultados obtenidos por medio de teorías perturbativas de alto orden [McGurn, Maradudin y Celli, 1985; O'Donnell, 2001] con los obtenidos por medio del método numérico.





La línea roja representa los resultados obtenidos por medio de la solución numérica de las ecuaciones reducidas de Rayleigh, mientras que las otras son distintas aproximaciones

obtenidas con el método perturbativo de 4to, 6to y 8vo orden [O'Donnell, 2001] y con la teoría perturbativa de orden infinito de McGurn, Maradudin y Celli [1985]. La teoría perturbativa es poco confiable para predecir los anchos de los picos de retroesparcimiento en superficies con rugosidades mayores de 6nm. De la teoría perturbativa vemos que la predicción del ancho del pico se vuelve oscilatoria con el orden y su valor depende fuertemente de donde se trunque la serie. En este caso, con el método de las ecuaciones reducidas de Rayleigh, hemos logrado tener resultados confiables hasta, aproximadamente,  $\delta = 20$  nm. Claramente, el ancho del pico de retroesparcimiento aumenta cuando se incrementa la rugosidad de la superficie.

Por otro lado, del mecanismo físico responsable del pico de retroesparcimiento, es de esperarse una relación entre su ancho angular y la distancia promedio que un plasmón puede viajar en la superficie. Esta está dada por

$$\Delta \theta = \frac{\lambda}{l_{tot}},\tag{123}$$

donde  $l_{tot}$  es el camino libre medio para los polaritones y  $\Delta \theta$  es el ancho total a altura media del pico de retroesparcimiento (FWHM).

El camino libre medio  $l_{tot}$  para los polaritones es la distancia promedio entre eventos de esparcimiento y depende tanto de las pérdidas debidas a la rugosidad (fugas de luz) como de las pérdidas óhmicas (absorción en el metal). Las pérdidas óhmicas están relacionadas con la resistencia eléctrica del material y de ésta depende la distancia  $l\epsilon$  que un plasmón polaritón puede viajar en una superficie perfectamente plana antes de atenuarse por completo. Para las superficies que consideramos en este trabajo esta distancia es mucho mayor que  $l_{sp}$ , que es la distancia que el plasmón viaja en promedio antes de ser convertido de nuevo en una onda radiativa debido a su interacción con la rugosidad superficial. La longitud  $l_{tot}$  es el inverso de la constante de decaimiento total, que está dado por

$$\Delta_{tot} = \Delta \epsilon + \Delta_{sp}. \tag{124}$$

Es decir que

$$\frac{1}{l_{tot}} = \frac{1}{l\epsilon} + \frac{1}{l_{sp}},\tag{125}$$

por lo que la ecuación (123) se puede escribir de la forma

$$\Delta \theta = \frac{\lambda \left( l\epsilon + l_{sp} \right)}{l\epsilon l_{sp}}.$$
(126)

En trabajos anteriores basados en métodos perturbativos [McGurn, Maradudin y Celli, 1985; McGurn 1989] se ha encontrado que el decaimiento que un plasmón sufre debido a las pérdidas óhmicas (ocasionadas por la parte imaginaria de la constante dieléctrica) es

$$\Delta \epsilon = \frac{\operatorname{Im}\left\{\epsilon_{II}\left(\omega\right)\right\} \varkappa_{sp}}{2\operatorname{Re}\left\{\epsilon_{II}\left(\omega\right)\right\} \left[\operatorname{Re}\left\{\epsilon_{II}\left(\omega\right)\right\} + 1\right]},\tag{127}$$

mientras que el decaimiento debido a pérdidas por fugas de luz en la superficie está dado por

$$\Delta_{sp} \simeq 2\pi^{1/2} a \delta^2 C_1^2 \left[ \frac{\operatorname{Re}\left\{ \epsilon_{II}\left(\omega\right) \right\} - 1}{\operatorname{Re}\left\{ \epsilon_{II}\left(\omega\right) \right\}} \right]^2 \varkappa_{sp}^4 \exp\left( -a^2 \varkappa_{sp}^2 \right), \tag{128}$$

donde  $\varkappa_{sp}$  es el número de onda de un plasmón, dado por

$$\varkappa_{sp} = \frac{\omega}{c} \left[ \frac{\operatorname{Re}\left\{ \epsilon_{II}\left(\omega\right) \right\}}{\operatorname{Re}\left\{ \epsilon_{II}\left(\omega\right) \right\} + 1} \right]^{1/2}$$
(129)

у

$$C_{1} = \frac{\operatorname{Re}\left\{\epsilon_{II}\left(\omega\right)\right\}\sqrt{-\operatorname{Re}\left\{\epsilon_{II}\left(\omega\right)\right\}}}{1-\operatorname{Re}\left\{\epsilon_{II}\left(\omega\right)\right\}^{2}}.$$
(130)

La ecuación (128) fue derivada con una teoría perturbativa por lo que se espera que solamente sea confiable para rugosidades pequeñas. Es de interés estudiar el comportamiento del decaimiento debido a la rugosidad ( $\Delta_{sp}$ ) como función de  $\delta$ , entrando incluso a regiones en las que las condiciones para la aplicación de la teoría perturbativa son dudosas.

Empleando la ecuación (126) es posible expresar  $l_{sp}$  de la forma

$$l_{sp} = \frac{\lambda l\epsilon}{\Delta \theta l\epsilon - \lambda}.$$
(131)

Similarmente tenemos que

$$\Delta_{sp} = \frac{\Delta\theta l\epsilon - \lambda}{\lambda l\epsilon}.$$
(132)

Podemos ahora estimar estas cantidades con los resulados numéricos. Consecuentemente, en la figura 14 se muestra una gráfica de la distancia  $l_{sp}$  como función de la rugosidad de la superficie.



Figura 14. Distancia media recorrida por un plasmón como función del parámetro de la rugosidad superficial, estimada por medio de simulaciones numéricas.

Vemos que la distancia  $l_{sp}$  disminuye rápidamente conforme la rugosidad se incrementa. Esto era de esperarse, ya que para rugosidades mayores la probabilidad de que la onda interactúe con las irregularidades de la superficie y se convierta en una onda radiativa aumenta.

La ecuación (128) predice que el decaimiento debido a las rugosidades es proporcional al cuadrado de la desviación estándar de alturas de la superficie. Es razonable suponer que, al menos en la parte inicial, la gráfica de  $\Delta_{sp}$  contra  $\delta^2$  sea lineal. Los resultados numéricos obtenidos para  $\Delta_{sp}$  se muestran en la figura 15. Inspeccionando la figura, vemos que los primeros puntos efectivamente parecen caer sobre una línea. Sin embargo, es claro que al aumentar la rugosidad se pierde la linealidad. Por otro lado, la pendiente de la recta que podemos ajustar a la parte inicial de la curva no coincide con lo que predice la ecuación (128).



Figura 15. Constante de decaimiento de los plasmones de superficie como función de la varianza de alturas en la superficie.

Volviendo a la figura 13, vemos que al aumentar la rugosidad de la superficie se incrementa la intensidad incoherente esparcida. Para explicar esto, notemos que en teoría perturbativa, el campo esparcido se expresa como una expansión en potencias del perfil de la superficie. La parte incoherente del CDR es también una serie que tiene la forma [Maradudin

y Méndez, 2000]  

$$\left\langle \frac{\partial R}{\partial \theta_s} \right\rangle_{incoh} = \frac{1}{L_1} \frac{\omega}{2\pi c} \frac{\cos^2 \theta_s}{\cos \theta_0} \left\{ \left\langle \left| R^{(1)} \left( q | k \right) \right|^2 \right\rangle \right. \\
\left. + \frac{1}{4} \left[ \left\langle \left| R^{(2)} \left( q | k \right) \right|^2 \right\rangle - \left| \left\langle R^{(1)} \left( q | k \right) \right\rangle \right|^2 \right] \right. \\
\left. + \frac{1}{3} \operatorname{Re} \left\{ R^{(3)} \left( q | k \right) R^{(3)*} \left( q | k \right) \right\} + O\left( \zeta^6 \right) \right\} \\
= \rho^{(1-1)} \delta^2 + \rho^{(2-2)} \delta^4 + \rho^{(3-1)} \delta^4 + O\left( \zeta^6 \right).$$
(133)

donde  $\rho^{(n-m)}$  son coeficientes que tienen que ver con las contribuciones de n y m eventos de esparcimiento. El primer término de la serie es entonces proporcional a  $\delta^2$  y está relacionado con esparcimiento sencillo. Es un término proporcional a la densidad espectral de potencia. Los siguientes dos términos son proporcionales a  $\delta^4$ . El término con  $\rho^{(2-2)}$  toma en cuenta

procesos de esparcimiento doble y su interferencia en el campo lejano. Este término es el responsable del pico de retroesparcimiento.

Es claro que si  $\delta$  se duplica, esto representa un factor de 4 para el primer término, de 16 para los segundos y así sucesivamente. El efecto de duplicar  $\delta$  dependerá entonces del peso que cada uno de los términos tenga. Es interesante entonces calcular la energía total esparcida para una superficie y compararla con otra cuya desviación estándar de alturas sea un múltiplo de la desviación estándar de alturas de la primera. En caso de que el primer término fuera el único relevante para el resultado final, esperaríamos que la energía total esparcida se cuadruplicara para superficies con un factor de 2 en sus desviaciones estándar de alturas.

De acuerdo con los resultados mostrados en la figura 13 la razón de la intensidad esparcida por la superficie con  $\delta = 10$  nm y la superficie con  $\delta = 5$  nm es de 6.41. Por otro lado, para las superficies de  $\delta = 20$  nm y  $\delta = 10$  nm la razón es de 6.91. Esto indica que los términos de orden alto (igual o mayores que dos) tienen una contribución importante en el resultado y, por lo tanto, que los efectos de esparcimiento múltiple no son despreciables en la determinación de la forma de la curva.

También es interesante notar el cambio en la forma del pico de retroesparcimiento. Para rugosidades pequeñas, tiene una forma lorentziana. Vemos, sin embargo, que al aumentar la rugosidad este pico va tomando una forma más triangular.

Por otro lado, la longitud de correlación de la superficie afecta también la distribución angular de la intensidad esparcida. En la figura 16 se muestra la comparación de los resultados obtenidos para una superficie de plata ( $\epsilon_{II}(\omega) = -7.5 + i0.24$ ) con una desviación estándar de alturas de 14.85 nm para incidencia normal y  $\lambda = 457.9$  nm. Las gráficas corresponden a los resultados obtenidos para distintas longitudes de correlación. Vemos que, la intensidad del campo esparcido aumenta ligeramente al disminuir la longitud de correlación.



Figura 16. Componente incoherente del CDR para distintas longitudes de correlación La superficie tiene un espectro gaussiano y estadísticas también gaussianas con una desviación estandar de alturas  $\delta = 14.85$  nm. La longitud de onda del campo incidente es  $\lambda = 457.9$  nm. La constante dieléctrica del material es  $\epsilon_{II}(\omega) = -7.5 + i0.24$  y se estimaron los promedios de  $N_p = 10000$  realizaciones.

Sin embargo, los cambios son, por mucho, menos importantes que los que se producen al variar la desviación estándar de las alturas. También en este caso la forma del pico de retroesparcimiento cambia. Es lorentziana para longitudes de correlación grandes y toma una forma cónica o triangular conforme a disminuye.

#### IV.1.2. Superficies rugosas aleatorias periódicas en promedio

En esta sección se presentan resultados para el esparcimiento por superficies metálicas rugosas aleatorias que son periódicas en promedio [Michel, Knotts y O'Donnell, 1995]. este tipo de superficies se pueden usar para modelar rejillas de difracción imperfectas. Es conocido que las rejillas con una pequeña rugosidad pueden dar origen a bandas difusas [Beckman y Spizzichino, 1963; McGurn *et al*, 1985] y a las llamadas anomalias de Wood. Estos efectos son debidos a la excitación de plasmones de superficie, pero no necesariamente a efectos de esparcimiento múltiple.

Para la generación de este tipo de superficies se siguió el procedimiento ya descrito para obtener, primero, una superficie con espectro gaussiano. A la función que describe el perfil resultante se le sumó una función senoidal con una amplitud h y un periodo b.

La figura 17 muestra los resultados obtenidos para una superficie de plata con una constante dieléctrica  $\epsilon_{II}(\omega) = -7.5 + i0.24$ , desviación estándar de alturas  $\delta = 5$  nm y una longitud de correlación a = 320 nm. El ángulo de incidencia es  $\theta_0 = 30^\circ$ . La componente periódica tiene una amplitud h = 10 nm y un periodo b = 392.5 nm. La longitud de onda es  $\lambda = 457.9$  nm en polarización p. El número de realizaciones es  $N_p = 5000$ .



Figura 17. Componente incoherente del CDR para una superficie aleatoria con un espectro gaussiano a la que se le añade una componente periódica con h = 10 nm y b = 392.5 nm. Las estadísticas de la componente aleatoria son también gaussianas con una desviación estándar de alturas  $\delta = 5$  nm y longitud de correlación a = 320 nm. La polarización es p y la longitud de onda del campo incidente es  $\lambda = 457.9$  nm. La constante dieléctrica del material es  $\epsilon_{II}(\omega) = -7.5 + i0.24$ .

Lo más notable en esta figura es la aparición de dos picos, a los ángulos de esparcimiento  $\theta_s = -4.33^\circ$  y  $\theta_s = 4.33^\circ$ . Estos picos son un reflejo de la excitación de plasmones en la superficie y su ubicación está relacionada con el número de onda del plasmón, la longitud de onda y el periodo de la componente periódica. La posición de
los picos es independiente del ángulo de incidencia. No se observa ninguna característica especial en la dirección de retroesparcimiento.

En la figura 18 se muestran resultados para este mismo caso pero con una desviación estándar en las alturas de la superficie  $\delta = 15$  nm y  $N_p = 4000$ . Debido a que no ha habido cambios en la longitud de onda y el periodo de la componente periódica, los dos picos siguen apareciendo en la misma posición, aunque su magnitud ha variado. En este caso se puede apreciar un pequeño pico en la dirección de retroesparcimiento.



Figura 18. Igual que la figura 17 pero con  $\delta = 15$  nm.

En la figura 19 se muestra la parte incoherente del CDR para una superficie de plata con una constante dieléctrica  $\epsilon_{II}(\omega) = -7.5 + i0.24$ , desviación estándar de alturas  $\delta = 15$ nm y una longitud de correlación a = 125 nm. La componente periódica tiene una amplitud h = 10 nm y un periodo b = 392.5 nm. El ángulo de incidencia es  $\theta_0 = 30^\circ$ , la longitud de onda es  $\lambda = 457.9$  nm y la luz tiene polarización p. Al reducir la longitud de correlación se vuelve más notable el pico de retroesparcimiento, además de que la forma de la curva de esparcimiento cambia drásticamente. Sin embargo, las bandas difusas siguen apareciendo en las mismas posiciones.



Figura 19. Igual que la figura 18 pero con a = 125 nm.

#### IV.1.3. Superificies con espectro de potencia West-O'Donnell

Aunque el efecto de retroesparcimiento reforzado debido a la excitación de plasmones de superficies fue predicho en 1985 [McGurn, Maradudin y Celli, 1985] para superficies con espectro de potencia gaussiano, a la fecha el efecto solamente ha sido observado experimentalmente con superficies con un espectro de potencia diseñado para propiciar los mecanismos físicos involucrados. El espectro se conoce ahora como el espectro West-O'Donnell [West y O'Donnell, 1995] y fue introducido en esta tesis en el capítulo III.

La figura 20 muestra los resultados experimentales de West y O'Donnell para el esparcimiento angular de una superficie de oro con estadísticas gaussianas y un espectro de potencia tipo West-O'Donnell con  $\theta_{\text{max}} = 13.85^{\circ}$ , iluminada a incidencia normal. La longitud de onda de la luz utilizada es  $\lambda = 612$  nm, la desviación estandar de alturas es  $\delta = 5$  nm y la constante dieléctrica del oro para esta longitud de onda es  $\epsilon_{II}(\omega) = -9.0 + i1.29$ .



Figura 20. Componente incoherente del CDR para una superficie rugosa de oro con  $\epsilon_{II}(\omega) = -9.0 + i1.29$ , cuyo perfil constituye un proceso estocástico gaussiano y con un espectro de potencia West-O'Donnell a incidencia normal. La longitud de onda del campo incidente es de  $\lambda = 612$  nm y la luz tiene polarización p. La desviación estándar de alturas es de  $\delta = 5$  nm y  $\theta_{max} = 13.5^{\circ}$ . Se muestran resultados obtenidos experimentalmente [West y O'Donnell, 1995], con un método perturbativo [Maradudin *et al*, 1995] y con la simulación numérica aqui descrita.

Se muestran también en la figura los resultados de la teoría perturbativa de Maradudin y Méndez [1995] (ver también Maradudin, McGurn y Méndez, 1995) y los del método de simulación numérica aquí explorado. El número de realizaciones utilizado para estimar el promedio es  $N_p = 5000$ .

En la teoría perturbativa (ecuación (133)) el primer término es proporcional al espectro de potencia centrado en  $k = (\omega/c) \sin \theta_0$ . A incidencia normal, los dos rectángulos del espectro West-O'Donnell estarían centrados en un número de onda que corresponde aproximadamente a  $\theta_s = 90^\circ$  ( $k_{sp}$  es muy cercano a  $\omega/c$ ). El primer término, que representa esparcimiento sencillo, da origen a los detalles que se observan a ángulos mayores a los 55°. Lo que se observa es la mitad de cada uno de los rectángulos, modulado por factores angulares. El cuadro central es debido a esparcimiento múltiple. Su posición es independiente del ángulo de incidencia y depende solamente de  $k_{sp}$  y del espectro de potencia. Los números de onda presentes en la superficie permiten a los polaritones regresar a la zona radiativa en la región  $|\theta_s| < 13.5^{\circ}$ .

En la figura 21 se muestran resultados para la misma superficie pero con un ángulo de incidencia  $\theta_0 = 10^\circ$ . Vemos que el rectángulo central, debido a esparcimiento doble, no cambia de posición, mientras que los detalles debidos a esparcimiento sencillo se han recorrido en la dirección especular.



Figura 21. Igual que la figura 20. EL ángulo de incidencia es  $\theta_0 = 10^{\circ}$ .

Debido a su diseño, las superficies con este espectro de potencia excitan plasmones que se propagan hacia ambos lados de la superficie para todos los ángulos de incidencia  $\theta_0$ comprendidos en el intervalo  $-\theta_{max} \le \theta_0 \le \theta_{max}$ , donde

$$k_{\min} = k_{sp} - \frac{\omega}{c} \sin \theta_{\max} \tag{134}$$

у

$$k_{\max} = k_{sp} + \frac{\omega}{c} \sin \theta_{\max}.$$
(135)

Estas expresiones nos dan la relación entre el ángulo  $\theta_{\max}$  y los números de onda limitantes de los cuadrados centrados en  $k_{sp}$ . Los plasmones acoplados tienen números de onda  $k_{sp}$  y

 $-k_{sp}$  que se pueden alcanzar de la siguiente manera

$$+k_{sp} = \frac{\omega}{c}\sin\theta_0 + k_1 \tag{136}$$

У

$$-k_{sp} = \frac{\omega}{c}\sin\theta_0 - k_2,\tag{137}$$

donde  $k_1$  y  $k_2$  son dos números de onda contenidos en el espectro de potencias de la superficie. Una vez excitados los plasmones, estos pueden decaer en ondas de volumen por procesos de esparcimiento. Para el ángulo de esparcimiento  $\theta_s$ , esto puede ocurrir si se cumple con las condiciones

$$\frac{\omega}{c}\sin\theta_s = +k_{sp} - k_3 \tag{138}$$

у

$$\frac{\omega}{c}\sin\theta_s = -k_{sp} + k_4,\tag{139}$$

donde  $k_3$  y  $k_4$  son números de onda comprendidos en el espectro de potencia. Por lo tanto, si el espectro de potencia es diferente de cero solo para k entre  $k_{\min}$  y  $k_{\max}$  (y para -k entre - $k_{\min}$  y - $k_{\max}$ ), se excitarán plasmones para ángulos de incidencia  $-\theta_{\max} \le \theta_0 \le \theta_{\max}$  y los plasmones excitados solo serán acoplados a ondas de volumen correspondientes a ángulos de esparcimiento comprendidos en el intervalo  $-\theta_{\max} \le \theta_s \le \theta_{\max}$ .

En la dirección de retroesparcimiento  $\theta_s = -\theta_0$ , se requiere que  $k_1 = k_4$  y  $k_2 = k_3$ . En este caso, las ecuaciones (136), (137), (138) y (139) describen un par de procesos de esparcimiento que al interferir dan lugar al retroesparcimiento reforzado (ver figura 9). Empleando argumentos de reciprocidad se puede mostrar que en la dirección de retroesparcimiento las ondas que siguen estos dos caminos tienen la misma amplitud y fase. Por lo tanto, interfieren constructivamente; consecuentemente, la intensidad de esparcimiento en la dirección de retroesparcimiento es dos veces más grande que la intensidad esparcida en las direcciones vecinas inmediatas. Esto se debe a que, para direcciones distintas de  $\theta_s = -\theta_0$ , las ondas tienen una diferencia de fase aleatoria y distinta de cero, por lo que las ondas esparcidas se vuelven incoherentes y los efectos de interferencia se borran.



Figura 22. Espectro West-O'Donnell centrado en  $2k_{sp}$ . Se ilustran también los procesos físicos que se producen al iluminar la superficie a ángulos rasantes.

Hasta ahora se han considerado únicamente efectos producidos por el acoplamiento y desacoplamiento de plasmones a la superficie. Es decir, solamente dos eventos de esparcimiento son necesarios para producir este efecto y no hay necesidad de considerar procesos de esparcimiento tipo polaritón-polaritón. Es decir, procesos de esparcimiento de orden más alto. Sin embargo, se ha encontrado otro tipo de mecanismo físico que da lugar al efecto de retroesparcimiento reforzado [O'Donnell, West y Méndez, 1998]. En este caso, es necesario considerar la interacción polaritón-polaritón. Como en los casos anteriores, es

necesario acoplar de alguna manera parte de la radiación incidente a plasmones de superficie. La diferencia estriba en que, mientras que en los cados anteriores se acoplan plasmones en ambas direcciones, en el segundo solamente se excita al plasmon en una dirección. Es a través de la interacción del plasmón con la rugosidad que se genera el plasmón que viaja en la dirección contraria. Este efecto se genera de manera natural debido al espectro de potencia de la superficie propuesta a continuación. Se trata de un espectro tipo West-O'Donnell, pero ahora el rectángulo se encuentra centrado en un número de onda que corresponde a dos veces el número de onda del plasmon. El primer diagrama de la figura 22 muestra este espectro y su relación con la región radiativa. Con este tipo de espectros es relevante considerar efectos de esparcimiento sencillo, doble y triple. En un primer lugar se tiene esparcimiento sencillo que, como ya se dijo, tiene la forma del espectro de potencia y se encuentra centrado en  $k = \omega/c \sin \theta_0$ . En el caso aquí considerado el ángulo de incidencia  $\theta_0$  es muy grande  $(> 60^{\circ})$  por lo que la curva correspondiente a este tipo de esparcimiento está representada por el espectro corrido considerablemente hacia la derecha, lo que permite tener parte de uno de los rectángulos en la zona radiativa y excitar un plasmón hacia la izquierda. El otro rectángulo queda en la zona no radiativa. La situación se muestra en el segundo diagrama de la figura 22.

Los plasmones excitados hacia la izquiera interactúan con la rugosidad, ocurriendo un segundo proceso de esparcimiento. Los números de onda resultantes están dadas por

$$q = -k_{sp} + k_s \tag{140}$$

Tomando en cuenta que los números de onda de la superficie,  $k_s$ , se encuentran alrededor de  $2k_{sp}$ , vemos que esto produce un segundo rectángulo de esparcimiento en la parte alta de la región positiva de  $\theta_s$ , excitándose ahora un plasmón que viaja hacia la derecha. La situación se ilustra en el tercer diagrama de la figura 22.

A través de un tercer evento de esparcimiento, la onda de superficie  $+k_{sp}$  excitada puede dar lugar a esparcimiento difuso a ángulos rasantes negativos, como se muestra en el cuarto diagrama de la figura 22.

En la figura 23 y 24 se muestran las distribuciones angulares obtenidas con una superficie con el espectro descrito. La figura 23 corresponde a  $\theta_0 = 76^\circ$  y la figura 24 a  $\theta_0 =$ 

60°. Se trata de una superficie de plata con una constante dielectrica  $\epsilon_{II}(\omega) = -61.0 + i6.2$ , iluminada con luz de longitud de onda  $\lambda = 1152$  nm. Los números de onda mínimo y máximo del espectro son  $k_{\min} = 9.93 \times 10^{-3}$  nm<sup>-1</sup> y  $k_{\max} = 1.49 \times 10^{-2}$  nm<sup>-1</sup>, respectivamente. El número de realizaciones es  $N_p = 6000$ .



Figura 23. Componente incoherente del CDR para una superficie con un espectro de potencia West-O'Donnell centrado en  $2k_{sp}$ . La superficie tiene una constante dielectrica  $\epsilon_{II}(\omega) = -61.0 + i6.2$  para la longitud de onda usada,  $\lambda = 1152$  nm. Los números de onda mínimo y máximo del espectro son  $k_{min} = 9.93 \times 10^{-3}$  nm<sup>-1</sup> y  $k_{max} = 1.49 \times 10^{-2}$  nm<sup>-1</sup> respectivamente y la desviación estándar de las alturas es  $\delta = 11.1$  nm. El ángulo de incidencia es  $\theta_0 = 76^\circ$ . Se muestran resultados obtenidos con la simulación numérica, con la teoría perturbativa de 4to orden [Maradudin y Méndez, 1993] y con la teoría perturbativa de orden infinito [McGurn, Maradudin y Celli, 1985].

En la figura 23 se muestran varias curvas teóricas para la parte incoherente del CDR cuando se utiliza un ángulo de incidencia  $\theta_0 = 76^\circ$ . Los resultados obtenidos con teoría perturbativa a cuarto orden no presentan el pico de retroesparcimiento reforzado ni la distribución adicional que aparece con los otros métodos entre  $-50^\circ$  y  $-60^\circ$ . El pico de retroesparcimiento si aparece en los obtenidos con la teoría de McGurn, Maradudin y Celli [1985] que incluye términos de alto orden. Las dos curvas tienen una intensidad menor a la resultante con los cálculos numéricos. El pico de retroesparcimiento es apenas perceptible en esta última.

Usando esta misma superficie pero con un ángulo de incidencia  $\theta_0 = 60^\circ$  se obtuvieron los resultados que se muestran en la figura 24.



Figura 24. Igual que la figura 23 pero con  $\theta_0 = 60^\circ$ .

En esta figura es más claro el hecho de que para el cuarto orden, la teoría perturbativa no muestra el fenómeno de retroesparcimiento reforzado. De hecho, ni siquiera muestra la disribución que se observa con las otras teorías alrededor de la dirección de retroesparcimiento. Siendo un efecto debido a esparcimiento triple, esta distribución aparece en el 6to orden de la teoría perturbativa [O'Donnell, West y Méndez, 1998]. Nuevamente la intensidad es mayor con los cálculos basados en la hipótesis de Rayleigh. Sin embargo, en este caso, el pico de retroesparcimiento se aprecia claramente en los resultados.

Este caso presenta problemas serios para su estudio por otros métodos. Por un lado, la teoría perturbativa de 6to orden es complicada y su evaluación involucra integrales bidimensionales que no son de fácil manejo numérico [O'Donnell, West y Méndez, 1998]. Por otro lado, la teoría perturbativa de McGurn, Maradudin y Celli, aunque reproduce cualitativamente los resultados, no es confiable en términos cuantitativos. El método integral tiene serios problemas debido a que se trata de un caso con un ángulo de incidencia grande y se excitan plasmones de superficie. Se trata pues, de un caso en el que el método explorado en esta tesis resulta muy ventajoso, dando resultados confiables.

#### IV.1.4. Superficies con estadísticas no gaussianas

En la mayoría de los resultados publicados de esparcimiento de luz por superficies rugosas aleatorias se supone que el perfil superficial es un proceso aleatorio gaussiano. Desde el punto de vista teórico, esto simplifica el problema. En consecuencia, el tipo de problemas que hemos venido tratando en esta tesis solamente se han estudiando con superficies gaussianas. Es interesante saber en que medida afectan a la distribución de luz esparcida las estadísticas de las superficies.



Figura 25. Resultados de esparcimiento obtenidos con superficies gaussianas y con superficies con estadísticas determinadas por la primera transformación propuesta en el capítulo III para el caso que corresponde a la figura 8. Línea negra: superficie con estadísticas gaussianas. Línea azul: superficie con estadísticas no gaussianas.

Estudiamos primero el caso de superficies no gaussianas con estadísticas determinadas por la primera transformación propuesta en el capítulo III de esta tesis. La superficie tiene, entonces estadísticas  $\chi_1^2$ . La correspondencia entre las desviaciones estándar de alturas y las longitudes de correlación de la superficie gaussiana que genera la superficie no gaussiana (transformada) y esta última está dada por las ecuaciones (88) y (92), respectivamente, de manera que se pueden generar realizaciones de este tipo con superficies no gaussianas con los parámetros  $\delta$  y *a* deseados. En la figura 25 mostramos la comparación de los resultados presentados en la figura 8 con los resultados obtenidos con superficies con estadísticas no gaussianas empleando los mismo parámetros *a* y  $\delta$ . La línea negra representa los resultados para superficies con estadísticas gaussianas y la línea azul para las no gaussianas. Observamos que las distribuciones ángulares y las magnitudes de la intensidad esparcida son similares. Podemos ver que la curva correspondiente a la superficie no gaussiana está un poco por abajo de la gaussiana, pero que no hay diferencias notables en lo que toca al pico de retroesparcimiento. Posiblemente las diferencias se deban, en buena medida a que la densidad de alturas de la superficie es asimétrica.



Figura 26. Como en la figura 25, pero con la segunda transformación propuesta en el capítulo III.

Para la segunda transformación propuesta la densidad de probabilidad de alturas es simétrica. La correspondencia entre los parámetros esta dada por las ecuaciones (93) y (97).

En la figura 26 mostramos la comparación de los resultados obtenidos para el mismo caso de la figura 8 y su equivalente en estadísticas no gaussianas.

En este caso el ajuste de las dos curvas es mucho mejor que el de la figura 25. De nuevo, la línea negra representa los resultados de la figura 8 mientras que la línea azul representa los resultados obtenidos con superficies no gaussianas.

Como conclusión, podemos decir que, al menos con las clases de superficies no gaussianas estudiadas, no se observan efectos importantes en relación al retroesparciminto reforzado y que, en este límite de rugosidad pequeña, las correcciones a las curvas de esparcimiento son pequeñas.

### IV.2. Esparcimiento por películas rugosas

El sistema formado por una superficie metálica o dieléctrica ya sea rodeada de aire o depositada sobre un sustrato, que puede ser un metal, un conductor perfecto o un dieléctrico, es capaz de soportar modos guiados u ondas de superficie. Cuando una onda electromagnética incide sobre este tipo de sistema, la distribución angular del campo esparcido en reflexión y transmisión puede mostrar detalles a ángulos especiales de esparcimiento. Además del pico de retroesparcimiento en transmisión, se pueden presentar efectos coherentes en la dirección antiespecular y, tanto en transmisión como en reflexión, los llamados picos satélite. En esta sección estudiamos problemas de esparcimiento para distintas combinaciones de materiales en este tipo de sistemas. Inicialmente se presentan comparaciones con resultados obtenidos con otros métodos, como un medio para validar el método propuesto en esta tesis. Posteriormente el estudio se centra en el caso de una guía de onda dieléctrica con rugosidad, ya que no estamos al tanto de reportes en la literatura para este caso.

#### IV.2.1. El caso de una película dieléctrica depositada sobre un metal.

El esparcimiento de luz por una película dieléctrica rugosa sobre un sustrato conductor perfecto plano ha sido considerado por varios autores [Freilikher *et al*, 1997; Sánchez-Gil *et al*, 1996; Madrazo y Maradudin, 1996]. La motivación para estudiar este sistema

proviene del hecho de que se pueden presentar efectos coherentes, no solo en la dirección de retroesparcimiento, sino en otras direcciones, dando origen a los picos satélite. En esta sección consideramos un sistema similar pero en lugar de considerar un sustrato conductor perfecto, consideramos uno metálico. Estudiamos solamente el esparcimiento por reflexión ya que la onda transmitida penetra muy poco en el medio *III*, que es un metal.



Figura 27. Componente incoherente del CDR para el caso de polarización s, longitud de onda  $\lambda = 633$  nm e incidencia a un ángulo  $\theta_0 = 0^\circ$ . La constante dieléctrica de la película es  $\epsilon (\omega)_{II} = 2.6896 + i0.01$  y su rugosidad está caracterizada por un espectro de potencia gaussiano con parámetros  $\delta = 30$  nm y a = 100 nm. El espesor promedio de la película es D = 500 nm y el número de realizaciones es  $N_p = 5000$ .

En la figura 27 se muestran resultados para un sistema compuesto de una película dielétrica rugosa con un espesor promedio D = 500 nm, caracterizada por una constante dieléctrica  $\epsilon_{II}(\omega) = 2.6896 + i0.01$ , depositada sobre un sustrato con una constante dieléctrica  $\epsilon_{III}(\omega) = -700 + i0.24$ . Se escogió una constante dieléctrica muy alta para poder comparar con los resulados de Freilikher *et al* [1997], que consideran el esparcimiento por una película dieléctrica depositada sobre un conductor perfecto. El espectro de potencia de la superficie rugosa es gaussiano con una longitud de correlación a = 100nm y una desviación estándar de alturas  $\delta = 30$ nm. La longitud de onda es  $\lambda = 633$ nm y consideramos

el caso de polarización s e incidencia normal. La película se escoge de modo tal que, en ausencia de rugosidad, es capaz de soportar dos modos guiados, con números de onda  $k_1(\omega) = 1.5466 (\omega/c)$  y  $k_2(\omega) = 1.2423 (\omega/c)$ . El pico de retroesparcimiento es claramente visible al ángulo  $\theta_s = 0^\circ$ .Los picos satélite tienen su origen en procesos de esparcimiento múltiple que se ilustran en la figura 28. La figura muestra dos posibilidades de acoplamiento de la onda incidente. En el primer caso la onda se acopla a un modo guiado que se propaga hacia el lado positivo de las x's con un número de onda  $k_1$  y el segundo, a un modo que se propaga hacia el lado negativo de las x's con un número de onda  $k_2$ . Al interactuar estos modos con la superficie, pueden ser convertidos de nuevo en ondas propagantes hacia el medio I. La interferencia constructiva de estas dos ondas da como resultado la aparición de picos satélite. Debido a que  $k_1 \neq k_2$  la condición de interferencia contructiva no ocurre en la dirección de retroesparcimiento.



Figura 28. Caminos de esparcimiento múltiple que dan lugar a los picos satélite.

Los picos deberían aparecer en ángulos de esparcimiento determinados por la expresión

$$\sin\theta_s = \sin\theta_0 \pm \frac{\omega}{c} \left( k_n \left( \omega \right) - k_m \left( \omega \right) \right) \qquad n \neq m \tag{141}$$

donde  $k_n(\omega)$  y  $k_m(\omega)$  son los números de onda de los dos modos. En el caso presentado en la figura 27 podrían esperarse a  $\theta_s = \pm 17.47^\circ$ . Estas direcciones se denotan por medio de líneas verticales punteadas. Vemos que en  $\theta_s = \pm 17.47^\circ$  la curva de esparcimiento presenta un pequeño abultamiento. Sin embargo, se trata de un detalle que está demasiado cerca del nivel de ruido estadístico como para resultar una demostración convincente de este efecto. Aún así, estos picos están mejor definidos que en los resultados que se presentan en el artículo de Freilikher *et al* (1997) y podrían resultar más claros aumentando el número de realizaciones

e incrementando el número de puntos de muestreo en la gráfica.

Para hacer más notoria la presencia de estos efectos consideramos el mismo sistema pero con un espectro de rugosidad tipo West-O'Donnell con  $k_{\min} = 0.82 \frac{\omega}{c}$  y  $k_{\max} = 1.97 \frac{\omega}{c}$ . Los resultados se muestran en la figura 29. Vemos que la forma de la curva de esparcimiento cambia considerablemente. Lo más importante a resaltar de esta curva es que los picos satélite se observan ahora claramente a  $\theta_s = \pm 17.47^{\circ}$ .

Estos resultados se pueden comparar directamente con los resultados publicados por Madrazo y Maradudin [1997], en particular, con la figura 9 de su artículo. La distribución de intensidad es similar pero los picos satélites son más claros en nuestros resultados. Esto se debe posiblemente a que en este trabajo consideramos una superficie periódica y, por lo tanto, infinita, mientras que Madrazo y Maradudin consideraron una superficie finita.



Figura 29. Igual que la figura 27 pero con un espectro de potencia West-O'Donnell.

#### IV.2.2. El caso de una película delgada de metal.

En contraste con la película dieléctrica depositada sobre un metal estudiada en la

69

sección anterior, la cual puede soportar un número arbitrario de modos guiados tanto en polarización s como en polarización p, una película delgada de metal puede soportar solo dos ondas de superficie (plasmones polaritones), independientemente de su grosor. Esto es en polarización p, pues en polarización s no se excitan plasmones. El caso ha sido estudiado por McGurn y Maradudin [1989] buscando un reforzamiento en la dirección antiespecular y, varios años más tarde, buscando picos satélite [Sánchez Gil *et al*, 1995]. A continuación presentamos cálculos que corresponden a algunos casos considerados por otros autores.



Figura 30. Componente incoherente del CDR para una película delgada con una constante dieléctrica  $\epsilon_{II}(\omega) = -7.5 + i0.24$ . La superficie rugosa tiene un espectro de potencia gaussiano con una longitud de correlación a = 125 nm y una desviación estándar de alturas  $\delta = 5$  nm. La longitud de onda del campo incidente es  $\lambda = 457.9$  nm y su polarización es p. El ángulo de incidencia es  $\theta_0 = 5^\circ$  y el número de realizaciones es  $N_p = 5000$ .

En la figura 30 se muestran resultados de esparcimiento en reflexión para una película delgada de plata, caracterizada por una constante dieléctrica  $\epsilon_{II}(\omega) = -7.5 + i0.24$ . La superficie rugosa tiene un espectro de potencia gaussiano con una longitud de correlación a = 125 nm y una desviación estándar de alturas  $\delta = 5$ nm. La longitud de onda del campo incidente es  $\lambda = 457.9$  nm y su polarización es p. El ángulo de incidencia es  $\theta_0 = 5^\circ$ . Este caso fué estudiado por McGurn y Maradudin [1989] empleando teoría perturbativa.

70

En la figura 30 se observa claramente el pico de retroesparcimiento a un ángulo  $\theta_s = -5^\circ$ . De acuerdo a los resultados obtenidos con la teoría perturbativa los picos satélites deben estar localizados en  $\theta_m = -14.7^\circ$  y  $\theta_m = 4.5^\circ$ , aunque en este caso son muy pequeños. En consecuencia, estos picos no son visibles en los resultados obtenidos por medio de la simulación que aquí presentamos. La explicación mas plausible que tenemos es que el nivel del ruido estadístico no es lo suficientemente pequeño como para permitir visualizar este efecto.



Figura 31. Caminos de esparcimiento múltiple que producen picos de reforzamiendo antiespecular.

Por otro lado, debido a que en este caso el espesor de la película no es lo suficientemente grande como para absorber toda la luz que viaja a través de ella, es posible tener transmisión hacia el tercer medio. Un efecto coherente interesante en este tipo de sistemas es la aparición de un pico antiespecular en la luz esparcida en transmisión. Los fenómenos físicos que dan lugar a este efecto se ilustran en la figura 31. La luz acoplada a un plasmón puede despues ser transmitida hacia el medio *III* donde puede hacer interferencia constructiva con luz que fue acoplada a plasmones que viajan en dirección contraria para despues ser transmitida al medio *III* también.



Figura 32. Componente incoherente del CDT para el mismo caso de la figura 30.

En la figura 32 se muestran los resultados del campo esparcido en transmisión para el mismo sistema y parámetros de los resultados de la figura 30. Vemos una curva muy parecida a la que se obtiene en reflexión, pero con otro nivel de intensidad. Se aprecia claramente un pico en la dirección antiespecular. Nuevamente los picos satélite no son visibles en nuestros resultados. Sin embargo, en ambos casos tenemos un buen acuerdo con la teoría perturbativa, tanto en la magnitud de la intensidad esparcida como en el tamaño del pico de retroesparcimiento.

Es posible favorecer el tipo de procesos que dan origen al pico de retroesparcimiento y a los picos satélites empleando parámetros similares pero reemplazando el espectro de potencia gaussiano por un espectro de potencia West-O'Donnell. Esto debe hacer más notables los picos satélite del campo esparcido. En la figura 33 se muestran los resultados obtenidos para el campo esparcido en reflexión. El espectro de potencia esta diseñado para excitar plasmones en ambas direcciones para un ángulo máximo  $\theta_{max} = 15^{\circ}$ . En esta figura se observan claramente tanto el pico de retroesparcimiento como los dos picos satélite que predice la teoría, demostrando que es posible observar estos efectos con el sistema estudiado.



Figura 33. Parte incoherente del CDR promedio para una superficie con los parámetros de la figura 30, pero con un espectro de potencia West-O'Donnell con  $\theta_{max} = 15^{\circ}$ . El número de realizaciones es  $N_p = 5000$ .



Figura 34. Componente coherente del CDT para el mismo caso de la figura 33.

La figura 34 muestra los resultados para el campo esparcido en tranmisión. En esta

figura, además de un muy claro pico en la dirección antiespecular, se observan los dos picos satétile predichos por la teoría perturbativa.

Sobre los resultados que involucran a las películas metálicas podemos comentar que la razón de la magnitud de la intensidad total esparcida en reflexión a aquella que se obtiene en transmisión es aproximadamente igual con ambos espectros.

Otro ejemplo con el cual podemos comparar con resultados publicados para este tipo de sistemas se muestra en la figura 35. El sistema es una película de plata con un espesor D = 48 nm. Una de las caras de esta película es rugosa. La película es iluminada con luz *p*-polarizada de una longitud de onda  $\lambda = 394.7$  nm que incide normalmente sobre la cara rugosa. Para esta longitud de onda, la constante dieléctrica de la plata es  $\epsilon_{II}(\omega) = -4.28 + i0.21$  y parámetros estadísticos de la superficie rugosa son a = 100 nm y  $\delta = 15$  nm con un espectro de potencia gaussiano.



Figura 35. Componente incoherente del CDR para una película iluminada con una longitud de onda  $\lambda = 394.7$  nm a incidencia normal en polarización p. Para esta longitud de onda, la constante dieléctrica del medio II es  $\epsilon_{II}(\omega) = -4.28 + i0.21$ . Los parámetros de la superficie son a = 100 nm y  $\delta = 15$  nm con un espectro de potencia gaussiano.

Este caso fue estudiado por Sánchez Gil et al [1995] empleando el método de la

ecuación integral. Encontramos algunas discrepancias en cuando a la magnitud de la intensidad esparcida, pues la reportada en el artículo es inferior, aunque la forma general de la curva es similar. Pensamos que estas discrepancias cuantitativas se deben a los problemas ya conocidos del método integral para tratar con situaciones en las que se excitan de manera importante plasmones de superficie. Para el caso en cuestión, el método de Rayleigh empleado aquí debe ser más confiable.

Por otro lado, ni en nuestro caso, ni en los cálculos reportados por Sánchez Gil *et al* [1995] es claro que existan indicios de picos satélite en las direcciónes esperadas.

#### IV.2.3. El caso de una película rugosa dieléctrica delgada

A pesar de la gran cantidad de trabajos publicados sobre películas delgadas y guías de onda dieléctricas, hasta donde sabemos, no se han reportado estudios como los que presentamos a continuación para este tipo de sistemas. Estudiamos, en particular, la posibilidad de observar efectos coherentes en las direcciones de retroesparcimiento y antiespecular. Asimismo, diseñamos una superficie para estudiar la aparición de picos satélite. Por otro lado se presentan cálculos sobre la eficiencia de acoplamiento de ondas propagantes a modos guiados debido a la rugosidad de la superficie.

Es sabido que una película delgada dieléctrica es capaz de soportar modos guiados. Para el caso de superficies perfectamente planas, este problema fue discutido en el capítulo II. Para obtener los números de onda de los modos TM (o p) soportados por una guía de onda es necesario encontrar gráficamente los cruces de la ecuación (19), mientras que los modos TE (o s) se encuentran a partir de la ecuación (17). Para estudiar la posible presencia de efectos coherentes en estas películas es interesante diseñar dos sistemas distintos, que sean capaces de soportar uno y dos modos respectivamente. La longitud de onda que se utilizará en ambos casos es  $\lambda = 633$  nm. La contante dieléctrica del medio II para esta longitud de onda se toma como  $\epsilon_{II}(\omega) = 2.25$ .

En la figura 36 se muestra una gráfica de los cruces que se tienen para diferentes espesores de la guía, los cuales fueron calculados con la ayuda de la ecuación (19).



Figura 36. Modos y números de onda para guías de diferentes espesores en polarización s y  $\lambda = 633$  nm.

El primer sistema a diseñar debe ser capaz de soportar solo un modo guiado, por lo cual escogimos un espesor promedio D = 100 nm. De la gráfica vemos que el número de onda de este modo es  $k = 1.788 (\omega/c)$ . Para excitar este modo por medio de la rugosidad utilizaremos un espectro West-O'Donnell centrado en este número de onda con  $\theta_{\text{max}} = 10^{\circ}$ . La desviación estándar de la altura de las rugosidades de la superficie fue escogida como  $\delta = 30$  nm. En la figura 37 se muestra la parte incoherente del CDR obtenido con este sistema para el caso de polarización s, en donde el promedio se estimó sobre un número de realizaciones  $N_p = 10000$ .

Se observa que el pico de retroesparcimiento tiene una altura de aproximadamente el doble del fondo, lo cual coincide con el máximo teórico posible. No hay picos satélite en la curva de la intensidad esparcida, ya que solamente hay un modo guiado en la película. Esto muestra que es posible observar el fenómeno de retroesparcimiento reforzado con este tipo de sistemas.

76



Figura 37. Componente incoherente del CDR para una película rugosa con una constante dieléctrica  $\epsilon_{II}(\omega) = 2.25 + i0.0$  y un espesor promedio D = 100 nm iluminada a incidencia normal con polarización s. La rugosidad está caracterizada por un espectro de potencia West-O'Donnell centrado en  $k = 1.788 (\omega/c)$  con  $\theta_{\text{max}} = 10^{\circ}$  y  $\delta = 30$  nm. La longitud de onda de la luz es  $\lambda = 633$  nm.

Consideramos ahora el diseño de un segundo sistema. De acuerdo con la gráfica de la figura 36, para abarcar dos modos es necesario escoger un espesor mayor para la película. En nuestro caso, escogimos D = 400 nm. De la gráfica observamos que los números de onda de los modos son  $k_1 = 1.75 (\omega/c)$  y  $k_2 = 2.21 (\omega/c)$ . Usamos entonces un espectro de potencia West-O'Donnell centrado en el número de onda intermedio  $k = 1.98 (\omega/c)$  con  $\theta_{\text{max}} = 20^{\circ}$ , lo cual nos permite abarcar los números de onda de los dos modos a ángulos pequeños de incidencia. La desviación estándar de las alturas de la rugosidad es  $\delta = 30$  nm. La figura 38 muestra los resultados obtenidos con el segundo sistema, para el caso de polarización s, promediados sobre un total de  $N_p = 2000$  realizaciones. Los picos satélites se encuentran en ángulos  $\theta_m = \pm 16.9^{\circ}$ . Por otro lado, es claro que es posible escoger un espesor tal para la película que permita tener prácticamente cualquier cantidad de modos guiados. De esta manera, apareceran más picos satélite, pero con menor contraste.



Figura 38. Componente incoherente del CDR promedio para una película rugosa con una constante dieléctrica  $\epsilon_{II}(\omega) = 2.25$  y un espesor D = 400 nm. La rugosidad está caracterizada por un espectro de potencia West-O'Donnell centrado en  $k = 1.95 (\omega/c) \operatorname{con} \theta_{\max} = 20^{\circ}$  y  $\delta = 30$  nm. La longitud de onda de la luz es  $\lambda = 633$  nm e incide normalmente con polarización s.

De los resultados anteriores, así como de consideraciones más elementales, es claro que es posible acoplar luz a los modos guiados de una película por medio de la rugosidad de la superficie.

En trabajos recientes se ha estudiado experimentalmente la fuga de luz de una guía de onda rugosa [Puente, 2000]. Como muestra, se usó el núcleo de una fibra óptica multimodo con indice de refracción tipo escalón atacado químicamente. La fibra fue alimentada con luz láser, excitando muchos modos dentro de ella. La luz que se propaga en esos modos interactúa con la parte rugosidad y es esparcida tanto hacia el exterior de la fibra como hacia otros modos guiados. En este trabajo se presentaron resultados para la distribución angular de la intensidad esparcida, encontrándose que la fuga de luz no es uniforme a lo largo de la fibra y que las curvas de esparcimiento no son simétricas; su forma depende de los parámetros de rugosidad. Empleando argumentos de reciprocidad, es plausible suponer que si se ilumina la guía de onda desde una dirección que coincida con la posición del máximo de la curva

de esparcimiento, será posible acoplar luz a la guía de manera relativamente eficiente. La situación se ilustra en la figura 39.



Figura 39. Ilustración de dos situaciones que, con argumentos de reciprocidad, se pueden considerar equivalentes.

Con el fin de dar una base teórica al trabajo mencionado, con las diferencias del caso, proponemos un experimento numérico en el cual se hace incidir luz sobre una guía a distintos ángulos  $\theta_0$ , calculando la potencia relativa de la luz acoplada a la guía para cada uno de ellos. No nos es posible reproducir las condiciones exactas del experimento realizado por Puente [2000]. En primer lugar, las superficies experimentales eran bidimensionales y sus estadísticas no pudieron ser determinadas cuantitativamente. Por otro lado, las alturas de las rugosidades de la fibra usada en el experimento son muy superiores a los límites del método aquí estudiado. Más aún, la guía de onda experimental tiene geometría cilíndrica, mientras que la aquí propuesta es una guía de onda plana. Aún así, esperamos encontrar ciertas similitudes entre la forma de la curva de luz acoplada a la guía y los resultados presentados en el trabajo de Puente.

La cantidad de modos que puede soportar una película para una longitud de onda dada depende de su constante dieléctrica y su espesor.

Una evidencia del acoplamiento de luz a los modos de la guía puede verse en la solución del campo transmitido hacia el interior de la guía, cuyo espectro angular,  $T_1(k|q)$ , está dado por la ecuación (72). El espectro  $T_1(k|q)$  presenta picos bien definidos centrados en el número de onda del modo. Como ejemplo, en la figura 40 se muestra la componente incoherente del espectro angular del campo transmitido  $T_1(k|q)$  para el sistema usado en la figura 38 en el caso de incidencia normal y polarización s. Como es de esperarse, la posición de estos picos no cambia con el ángulo de incidencia de la luz y sólo cambia su magnitud.



Figura 40. Componente incoherente del espectro del campo transmitido hacia el interior de la guía. Las posiciones de los picos coinciden con los números de onda de los modos guiados.

Al incrementar el espesor de la película aparecen más modos guiados que se encuentran más juntos. En la figura 41 se muestra la parte incoherente de  $T_1(k|q)$  para el sistema propuesto en la figura 40 pero con un espesor D = 800 nm. Para este caso, se tienen 3 modos guiados con números de onda  $k_1 = 1.75 (\omega/c)$ ,  $k_2 = 2.08 (\omega/c)$  y  $k_3 = 2.3 (\omega/c)$ . Las posiciones de los picos que se observan en la figura 41 coinciden con estos números de onda.



Figura 41. Como en la figura 40 pero con D = 800 nm.

Siguiendo con esta tendencia, podemos esperar que, para una película suficientemente gruesa, los modos guiados en el interior aparezcan prácticamente como un continuo.

Definimos entonces la eficiencia de acoplamiento por la expresión

$$\alpha_c = \sum |T_{1m}|^2 \tag{142}$$

donde la suma es sobre los órdenes que corresponden a los números de onda superiores a  $|\omega/c|$ . Nos es posible entonces obtener la eficiencia de acoplamiento de la luz que viaja hacia la derecha (dirección positiva de las x's) tomando en cuenta unicamente los números de onda positivos superiores a  $\omega/c$ .

En la figura 42 se muestra la eficiencia de acoplamiento de ondas que viajan hacia la derecha en función del ángulo de incidencia para una guía de onda rugosa cuya superficie está caracterizada por un espectro de potencia gaussiano con longitud de correlación a = 100 nm y una desviación estándar de las alturas  $\delta = 5$  nm. El material de la película está caracterizado por su constante dieléctrica  $\epsilon_{II}(\omega) = 2.25 + i0.001$  y su espesor es  $D = 100 \ \mu$ m. El número de realizaciones para cada ángulo de incidencia es  $N_p = 100$ . La curva es algo ruidosa

debido al bajo número de realizaciones utilizadas. Aún así, el esfuerzo computacional para este cálculo es considerable. Notamos que el acoplamiento a modos que viajan hacia la derecha es poco eficiente para ángulos negativos. Sin embargo, desde el momento en que el vector de propagación incidente tiene una componente en la dirección de las x's positivas, la eficiencia de acoplamiento aumenta. La eficiencia alcanza un máximo alrededor de los 70°, para luego decaer.





Al aumentar la desviación estándar de la rugosidad, la cantidad de luz acoplada es mucho mayor pero no encontramos cambios significativos en la forma de la curva de acoplamiento. En la figura 43 se muestran los resultados para los mismos parámetros de la figura 42 pero con una desviación estandar  $\delta = 20$  nm.



Figura 43. Como en la figura 42 pero con  $\delta = 20$  nm.

## **V. Resumen y conclusiones**

En este capítulo se presenta un resumen y las principales conclusiones del trabajo realizado.

En esta tesis se ha presentado el desarrollo e implementación de una herramienta para estudiar el esparcimiento de luz por superficies y películas rugosas unidimensionales. Se trata de un método numérico basado en la hipótesis de Rayleigh que, por medio de simulaciones tipo Monte Carlo, es capaz de calcular la luz esparcida por superficies y películas con rugosidades pequeñas para diferentes estadísticas y espectros de potencia y bajo diferentes condiciones de iluminación.

Se derivaron las ecuaciones reducidas de Rayleigh para dos clases de sistemas. El primero compuesto por dos medios semiinfinitos con una interfase rugosa y el segundo compuesto por una película rugosa depositada sobre un material semiinfinito plano. La rugosidad de la superficie se encuentra en contacto con el primer medio. Hasta donde sabemos, las ecuaciones reducidas de Rayleigh para el segundo sistema no habían sido reportadas hasta la fecha para el caso general, en el que se puede tener cualquier combinación de materiales.

Como un método para comprobar la validez de los resultados obtenidos, éstos fueron comparados con resultados obtenidos con teorías perturbativas en regiones donde éstas deben ser bien comportadas. También se hicieron comparaciones con resultados experimentales y con simulaciones basadas en el método integral y con métodos tipo Rayleigh reportados por otros autores.

De estos estudios concluimos que esta técnica constituye una herramienta confiable para el tratamiento del esparcimiento de luz por superficies con rugosidades pequeñas y que es adecuado para abordar casos cuyas condiciones están fuera de los límites de otros métodos.

La teoría perturbativa produce buenos resultados para superficies con rugosidades muy pequeñas, pero se vuelve inestable rápidamente al aumentar la rugosidad de la superficie. Con el método propuesto en esta tesis, podemos analizar esparcimiento por superficies con rugosidades que rebasan considerablemente los límites de la teoría perturbativa. En el caso del método integral se tiene que sus resultados no son bien comportados para sistemas en los cuales el contraste dieléctrico es pequeño, para ángulos rasantes de incidencia o esparcimiento y cuando la muestra es poco rugosa y soporta plasmones de superficie o modos guiados. Son precisamente este tipo de casos los que se estudian en esta tesis. El tiempo de máquina utilizado por el método propuesto es significativamente menor que el necesario para la obtención de resultados similares con el método integral.

En un primer estudio, se analizó la dependencia del pico de retroesparcimiento reforzado con los parámetros de la superficie para dos medios semiinfinitos. El ancho del pico de retroesparcimiento aumenta al incrementar la rugosidad de la superficie y cambia su forma de lorentziana a aproximadamente triangular. Se presentan comparaciones de los resultados obtenidos con los reportados hasta ahora con teoría perturbativa. Por otro lado, el ancho del pico de retroesparcimiento disminuye al aumentar la longitud de correlación.

El ancho del pico de retroesparcimiento es inversamente proporcional al camino libre medio de los plasmones polaritones de superficie. Se presenta una estimación de esta longitud como función de la rugosidad de la superficie. El decaimiento de plasmones debido a la rugosidad superficial es proporcional al cuadrado de la rugosidad para rugosidades pequeñas pero aumenta más rapidamente conforme la rugosidad crece. No encontramos buen acuerdo con la pendiente propuesta en trabajos anteriores para la curva de decaimiento [McGurn, 1989]. Analizando la potencia esparcida de manera difusa en función de la rugosidad, concluimos que la aportación de términos superiores al cuarto orden son siginificativos en este tipo de superficies con polarización p.

Se presentaron también resultados para superficies con una componente periódica. Este tipo de superficies se ha usado en el pasado para comprender el comportamiento de rejillas de difracción, que en la práctica siempre tienen una pequeña rugosidad. Los resultados muestran que el método propueso reproduce las bandas difusas reportadas en experimentos.

Para superficies con espectro de potencia West-O'Donnell, comparamos resultados obtenidos con resultados experimentales y con resultados basados en teorías perturbativas. Se encuentra un acuerdo razonable entre las curvas.

85

Estudiamos también el caso de una superficie con espectro de potencia West-O'Donnell centrado en  $2k_{sp}$ . Este es un caso que ha sido estudiado experimentalmente. Nuestros cálculos reproducen cualitativamente los resultados obtenidos con teoría perturbativa de sexto orden y experimentalmente. Encontramos algunas discrepancias en cuanto a la potencia total contenida en las curvas. La escala vertical de las curvas es muy sensible al valor de la constante dieléctrica del material, lo que hace dificil la comparación directa con la curva experimental. Por otro lado, la teoría de sexto orden tampoco es confiable en este sentido, pues no es claro que efecto tendrán las correciones de más alto orden. Sin embargo, podemos conluir que el método aquí propuesto no tiene problemas para estudiar superficies en las que se dan este tipo de procesos físicos, que involucran acoplamientos polaritón-polaritón.

Para el caso del sistema de una película rugosa dieléctrica depositada sobre un metal plano semiinfinito encontramos que las curvas de esparcimiento pueden contener un pico de retroesparcimeinto reforzado acompañado de un par (en el caso estudiado) de picos satélite. Estos picos son mucho más visibles al cambiar el espectro de potencia gaussiano por uno West-O'Donnell. Los resultados concuerdan con resultados basados en teoría perturbativa publicados por otros autores.

Para películas metálicas autosoportadas se obtuvieron datos tanto de esparcimiento en reflexión como en transmisión. En nuestros cálculos no son visibles los picos satélite para el espectro gaussiano pero aparecen claramente al cambiar a un espectro West-O'Donnell. Aquí también encontramos buen acuerdo con otros resultados.

Finalmente, se diseñaron dos sistemas compuestos por una película dieléctrica en vacío. El primero es capaz de soportar un solo modo guiado mientras que el segundo puede soportar dos modos guiados. En ambos casos el espectro de potencia usado es de tipo West-O'Donnell. Las curvas presentan claramente el pico de retroesparcimiento reforzado con una magnitud del doble del fondo. Como era de esperarse, los picos satélite solo aparecen en el segundo caso.

Con este tipo de sistemas, se estudió un caso específico de acoplamiento de luz a guías de onda por medio de la rugosidad. En particular, se hicieron estimaciones de la energía acoplada a la guía como función del ángulo de incidencia. Encontramos que la distribución

angular de la luz esparcida por guías de onda reportada en trabajos experimentales recientes coincide cualitativamente con la curva de eficiencia de acoplamiento de luz obtenidas en este trabajo.

# APÉNDICE A

Consideremos la integral  $c^{\infty}$ 

$$I_{T}(q|p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[ \zeta'(x) \left( q + p \right) + \alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p) \right] \exp \left\{ -i(q - p)x + i \left( \alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p) \right) \zeta(x) \right\}$$
  
Usando

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

podemos escribir

$$I_{T}(q|p) = \frac{q+p}{i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))} \int_{-\infty}^{\infty} d(\exp\{i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))\zeta(x)\}) \exp\{-i(q-p)x\} + [\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p)] \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\{-i(q-p)x + i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))\zeta(x)\}.$$

Integrando por partes obtenemos que

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

$$\alpha_{II}^2(q) - \alpha_{II}^2(p) = -(q^2 - p^2),$$

encontramos que

$$I_T(q|p) = 0. (A1)$$

Considerando ahora la integral

$$I_{R}(q|p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[ \zeta'(x) \left( p + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}} q \right) - \alpha_{II}(p) - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}} \alpha_{I}(q) \right] \times \exp \left\{ i(q-p)x - i \left( \alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q) \right) \zeta(x) \right\}$$

y usando,

$$\zeta'(x) \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)\zeta(x)\right\} = \frac{1}{-i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)}\frac{d}{dx} \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)\zeta(x)\right\},$$
escribimos.

cridimos,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \zeta'(x) \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)\zeta(x)\right\} \exp\left\{i(q-p)x\right\}$$
$$= \frac{-1}{i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)} \int_{-\infty}^{\infty} d\left(\exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)\zeta(x)\right\}\right) \exp\left\{i(q-p)x\right\}.$$

Integrando por partes y sustituyendo obtenemos

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

donde hemos definido

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

Por otro lado, el factor

$$\frac{\left[\left(p+\frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}q\right)\frac{-(p-q)}{(\alpha_{II}(p)-\alpha_{I}(q))}-\left[\alpha_{II}(p)+\frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\alpha_{I}(q)\right]\right]}{\left(1-\frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right)(pq+\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(q))-\sigma}{\alpha_{II}(p)-\alpha_{I}(q)}.$$

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

Sustituyendo, obtenemos

\_\_\_\_

$$I_R(q|p) = \frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right)\left(pq + \alpha_{II}(p)\alpha_I(q)\right) - \sigma}{\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)} I\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)|p-q\right), \quad (A2)$$

Considerando ahora la integral

$$I_{0}(k|p) = -\int_{-\infty}^{\infty} dx \left[ \zeta'(x) \left( p + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}} k \right) - \alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}} \alpha_{I}(k) \right] \exp \left\{ -i \left( \alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k) \right) \zeta(x) \right\} \times \exp \left\{ i (k-p) x \right\}$$

y usando,

$$\zeta'(x) \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)\right)\zeta(x)\right\} = \frac{-1}{i\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)\right)}\frac{d}{dx} \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)\right)\zeta(x)\right\}$$
Tenemos

Tenemos,

=

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \zeta'(x) \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)\right)\zeta(x)\right\} \exp\left\{i(k-p)x\right\}$$
$$\frac{-1}{i\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)\right)} \int_{-\infty}^{\infty} d\left(\exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)\right)\zeta(x)\right\}\right) \exp\left\{i(k-p)x\right\}$$

Integrando por partes tenemos

$$I_0(k|p) = \left[ \left( p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} k \right) \frac{p - k}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)} - \left[ -\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(k) \right] \right] I\left( \alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)|p - k \right).$$
  
Por otro lado el factor

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

Entonces,

$$I_0(k|p) = \left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right)\left(\alpha_{II}(p)\alpha_I(k) - kp\right) + \sigma}{\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)\right)}\right] I\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)|p-k\right).$$
(A3)

Las expresiones (A1), (A2) y (A3) coinciden con las expresiones (33), (34) y (35) respectivamente.
## **APÉNDICE B**

Consideremos la integral

 $-I_{T2+}(q|p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[ \zeta'(x) \left( q + p \right) + \alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p) \right] \exp \left\{ i(q - p)x - i \left( \alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p) \right) \zeta(x) \right\}.$ Ahora usamos

$$\zeta'(x) \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)\right)\zeta(x)\right\} = \frac{1}{-i\left(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)\right)} \frac{d}{dx} \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)\right)\zeta(x)\right\},$$
para escribir

$$-I_{T2+}(q|p) = \frac{q+p}{-i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))} \int_{-\infty}^{\infty} d(\exp\{-i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))\zeta(x)\}) \exp\{i(q-p)x\} + [\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p)] \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\{i(q-p)x - i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))\zeta(x)\}.$$

Integrando por partes, podemos escribir

$$-I_{T2+}(q|p) = \left[\frac{(q^2 - p^2) + (\alpha_{II}^2(q) - \alpha_{II}^2(p))}{(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))}\right] \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left\{i(q - p)x - i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))\zeta(x)\right\}$$
  
Dado que

$$\alpha_{II}^2(q) - \alpha_{II}^2(p) = -(q^2 - p^2)$$

la función  $I_{T2+}(q|p)$  es identica a cero,

$$I_{T2+}(q|p) = 0. (B1)$$

Ahora, consideremos la integral

 $-I_{T1+}(k|p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[ \zeta'(x)(p+q) - \alpha_{II}(p) - \alpha_{II}(q) \right] \exp\{-i(p-q)x - i(\alpha_{II}(p) - \alpha_{II}(q))\zeta(x)\}$ Usamos

$$egin{aligned} \zeta'(x) \exp\left\{-i\left(-lpha_{II}(q)+lpha_{II}(p)
ight)\zeta(x)
ight\} &=& rac{1}{-i\left(-lpha_{II}(q)+lpha_{II}(p)
ight)}rac{d}{dx} imes \ & \exp\left\{-i\left(-lpha_{II}(q)+lpha_{II}(p)
ight)\zeta(x)
ight\}, \end{aligned}$$

para escribir

$$-I_{T1+}(q|p) = \frac{q+p}{-i(-\alpha_{II}(q)+\alpha_{II}(p))} \int_{-\infty}^{\infty} d(\exp\{-i(-\alpha_{II}(q)+\alpha_{II}(p))\zeta(x)\}) \exp\{i(q-p)x\} - [-\alpha_{II}(q)-\alpha_{II}(p)]\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\{i(q-p)x-i(-\alpha_{II}(q)+\alpha_{II}(p))\zeta(x)\}.$$

Integrando por partes, obtenemos

$$-I_{T1+}(q|p) = \frac{q+p}{-i(-\alpha_{II}(q)+\alpha_{II}(p))} \exp\{i(q-p)x - i(-\alpha_{II}(q)+\alpha_{II}(p))\zeta(x)\}|_{-\infty}^{\infty} + \frac{q+p}{(-\alpha_{II}(q)+\alpha_{II}(p))} \int_{-\infty}^{\infty} dx(q-p) \exp\{i(q-p)x - i(-\alpha_{II}(q)+\alpha_{II}(p))\zeta(x)\} + \frac{q+p}{(-\alpha_{II}(q)+\alpha_{II}(p))} + \frac{q+p}{(-\alpha_{I$$

$$+ \left[-\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p)\right] \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left\{i(q-p)x - i\left(-\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)\right)\zeta(x)\right\}$$

El primer término contiene

$$\frac{i(q+p)}{(\alpha_{II}(p)-\alpha_{II}(q))} \exp\left\{i(q-p)x\right\}\Big|_{-\infty}^{\infty} = -2\pi\delta(p-q)2\alpha_{II}(p)$$

Entonces escribimos

$$-I_{T1+}(q|p) = -2\pi\delta(p-q)2\alpha_{II}(p) + \left[\frac{(q^2-p^2) + (\alpha_{II}^2(q) - \alpha_{II}^2(p))}{(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))}\right] \int_{-\infty}^{\infty} dx \times \exp\left\{i(q-p)x - i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))\zeta(x)\right\}.$$

Dado que

$$\alpha_{II}^2(q) - \alpha_{II}^2(p) = -(q^2 - p^2),$$

el segundo término es identico a cero. Entonces

$$I_{T1+}(q|p) = 2\pi\delta(p-q)2\alpha_{II}(p).$$
 (B2)

Considerando ahora la integral

$$-I_{R+}(q|p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[ \zeta'(x) \left( p + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}} q \right) - \alpha_{II}(p) - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}} \alpha_{I}(q) \right] \times \exp\left\{ i(q-p)x - i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)\zeta(x) \right\} \\ = \left( p + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}} q \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \zeta'(x) \exp\left\{ -i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)\zeta(x) \right\} \exp\left\{ i(q-p)x \right\} - \left[ \alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}} \alpha_{I}(q) \right] \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left\{ i(q-p)x - i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)\zeta(x) \right\} \right]$$

y usando,

$$\zeta'(x) \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)\zeta(x)\right\} = \frac{1}{-i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)}\frac{d}{dx} \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)\zeta(x)\right\},$$
escribimos.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \zeta'(x) \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)\zeta(x)\right\} \exp\left\{i(q-p)x\right\}$$

$$= \frac{-1}{i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)} \int_{-\infty}^{\infty} d\left(\exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)\zeta(x)\right\}\right) \exp\left\{i(q-p)x\right\}.$$
rando por partes, obtenemos

Integrando por partes, obtenemos

$$\frac{-1}{i(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q))} \exp\left\{-i(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q))\zeta(x)\right\} \exp\left\{i(q - p)x\right\}|_{-\infty}^{\infty} + \frac{1}{i(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q))} \int_{-\infty}^{\infty} dx i(q - p) \exp\left\{i(q - p)x\right\} \exp\left\{-i(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q))\zeta(x)\right\}$$

$$= \frac{-(p-q)}{(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q))} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\{i(q-p)x\} \exp\{-i(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q))\zeta(x)\}$$
  
Sustituyendo, obtenemos

 $-I_{R+}(q|p) = \left[ \left( p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} q \right) \frac{-(p-q)}{(\alpha_{II}(p) - \alpha_I(q))} - \left[ \alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(q) \right] \right] I \left( \alpha_{II}(p) - \alpha_I(q)|p-q \right),$ donde hemos definido

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

Encontramos ahora que el factor

$$\frac{\left[\left(p+\frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}q\right)\frac{-(p-q)}{(\alpha_{II}(p)-\alpha_{I}(q))}-\left[\alpha_{II}(p)+\frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\alpha_{I}(q)\right]\right]}{\left(1-\frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right)(pq+\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(q))-\sigma}{\alpha_{II}(p)-\alpha_{I}(q)}.$$

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

Sustituyendo, obtenemos

$$I_{R+}(q|p) = -\left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right)\left(pq + \alpha_{II}(p)\alpha_{I}(q)\right) - \sigma}{\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)}\right]I\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p-q\right), \quad (B3)$$

Consideremos ahora la integral

$$I_{0+}(k|p) = -\int_{-\infty}^{\infty} dx \left[ \zeta'(x) \left( p + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}} k \right) - \alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}} \alpha_{I}(k) \right] \times \exp \left\{ i(k-p)x - i \left( \alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k) \right) \zeta(x) \right\}$$

Usando,

 $\zeta'(x) \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)\right)\zeta(x)\right\} = \frac{-1}{i\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)\right)}\frac{d}{dx} \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)\right)\zeta(x)\right\}$ Tenemos

Tenemos,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \zeta'(x) \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)\right)\zeta(x)\right\} \exp\left\{i(k-p)x\right\}$$
$$= \frac{-1}{i\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)\right)} \int_{-\infty}^{\infty} d\left(\exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)\right)\zeta(x)\right\}\right) \exp\left\{i(k-p)x\right\}.$$

Integrando por partes y reacomodando

 $I_{0+}(k|p) = \left[ \left( p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} k \right) \frac{p-k}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)} - \left[ -\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(k) \right] \right] I\left( \alpha_{II}(p) + \alpha_I(k) | p-k \right).$ Por otro lado, el factor $\left( p + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} k \right) \frac{p-k}{\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)} - \left[ -\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_I} \alpha_I(k) \right]$ 

$$\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right)\left(\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(k) - kp\right) + \sigma}{\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)}$$

Entonces,

$$I_{0+}(k|p) = \left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_I}\right)\left(\alpha_{II}(p)\alpha_I(k) - kp\right) + \sigma}{\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)\right)}\right] I\left(\alpha_{II}(p) + \alpha_I(k)|p-k\right).$$
(B4)

Ahora, comparando las expresiones :

 $I_{T2-}(q|p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[ \zeta'(x)(p+q) + \alpha_{II}(p) + \alpha_{II}(q) \right] \exp\{-i(p-q)x - i(-\alpha_{II}(p) + \alpha_{II}(q))\zeta(x)\}$  $I_{T2+}(q|p) = -\int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\zeta'(x)(p+q) - \alpha_{II}(p) + \alpha_{II}(q)\right] \exp\{-i(p-q)x - i(\alpha_{II}(p) + \alpha_{II}(q))\zeta(x)\}$ podemos ver que podemos ir de una a la otra cambiando el signo de toda la expresión y cambiando el signo de  $\alpha_{II}(p)$  en donde aparezca. Entonces,

$$I_{T2-}(q|p) = \frac{q+p}{-i(\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p))} \exp \{i(q-p)x - i(\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p))\zeta(x)\}|_{-\infty}^{\infty} + \frac{q+p}{(\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p))} \int_{-\infty}^{\infty} dx(q-p) \exp \{i(q-p)x - i(\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p))\zeta(x)\} + [\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)] \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \{i(q-p)x - i(\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p))\zeta(x)\}.$$

El primer término contiene

$$\frac{-i(q+p)}{(\alpha_{II}(p)-\alpha_{II}(q))} \exp\left\{i(q-p)x\right\}\Big|_{-\infty}^{\infty} = 2\pi\delta(p-q)2\alpha_{II}(p)$$

Entonces escribimos

$$I_{T2-}(q|p) = 2\pi\delta(p-q)2\alpha_{II}(p) + \left[\frac{(q^2-p^2) + (\alpha_{II}^2(q) - \alpha_{II}^2(p))}{(\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p))}\right] \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\{i(q-p)x - i(\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p))\zeta(x)\}.$$

Jado qu

$$\alpha_{II}^2(q) - \alpha_{II}^2(p) = -(q^2 - p^2),$$

el segundo término es identico a cero. Entonces,

$$I_{T2-}(q|p) = 2\pi\delta(p-q)2\alpha_{II}(p).$$
 (B5)

Similarmente

$$I_{T1-}(q|p) = \frac{q+p}{i(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))} \exp \{i(q-p)x - i(-\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p))\zeta(x)\}|_{-\infty}^{\infty} - \frac{q+p}{(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))} \int_{-\infty}^{\infty} dx(q-p) \exp \{i(q-p)x - i(-\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p))\zeta(x)\} + \frac{1}{2} \exp \{i(q-p)x - i(-\alpha_{II}(q))\zeta(x)\} + \frac{1}{2} \exp \{i(q-p)x$$

94

$$+ \left[-\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p)\right] \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left\{i(q-p)x - i\left(-\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p)\right)\zeta(x)\right\}$$

El primer término desaparece. Entonces escribimos

$$I_{T1-}(q|p) = -\left[\frac{(q^2 - p^2) + (\alpha_{II}^2(q) - \alpha_{II}^2(p))}{(\alpha_{II}(q) + \alpha_{II}(p))}\right] \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left\{i(q - p)x - i(\alpha_{II}(q) - \alpha_{II}(p))\zeta(x)\right\}.$$
  
Dado que

 $\alpha_{II}^2(q) - \alpha_{II}^2(p) = -(q^2 - p^2),$ 

Entonces,

$$I_{T1-}(q|p) = 0. (B6)$$

Consideramos ahora la integral

$$-I_{R+}(q|p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[ \zeta'(x) \left( p + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}} q \right) - \alpha_{II}(p) - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}} \alpha_{I}(q) \right] \times \exp \left\{ i(q-p)x - i \left( \alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q) \right) \zeta(x) \right\}$$

Usando,

 $\zeta'(x) \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)\zeta(x)\right\} = \frac{1}{-i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)}\frac{d}{dx} \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)\zeta(x)\right\},$ 

escribimos,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \zeta'(x) \exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)\zeta(x)\right\} \exp\left\{i(q-p)x\right\}$$
$$\frac{-1}{i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)} \int_{-\infty}^{\infty} d\left(\exp\left\{-i\left(\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)\right)\zeta(x)\right\}\right) \exp\left\{i(q-p)x\right\}.$$

Integrando por partes y sustituyendo, obtenemos  $I_{R-}(q|p) = \left[ \left( p + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}q \right) \frac{(p-q)}{(\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(q))} - \left[ -\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\alpha_{I}(q) \right] \right] I \left( -\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p-q \right),$ Vemos que el factor

$$\frac{\left[\left(p+\frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}q\right)\frac{(p-q)}{(\alpha_{II}(p)+\alpha_{I}(q))}-\left[-\alpha_{II}(p)+\frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\alpha_{I}(q)\right]\right]}{\left(1-\frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right)(\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(q)-pq)+\sigma}{\alpha_{II}(p)+\alpha_{I}(q)}.$$

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

Sustituyendo, obtenemos

$$I_{R-}(q|p) = \left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right)\left(\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(q) - pq\right) + \sigma}{\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(q)}\right]I\left(-\alpha_{II}(p) - \alpha_{I}(q)|p-q\right), \quad (B7)$$

Considere ahora la contribución  $I_{0-}(k|p)$ . Tenemos

$$-I_{0-}(k|p) = \left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}k\right) \frac{p-k}{-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left\{i(k-p)x\right\} \times \exp\left\{-i\left(-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)\right)\zeta(x)\right\} - \left[\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\alpha_{I}(k)\right] \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left\{-i\left(-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)\right)\zeta(x)\right\} \exp\left\{i(k-p)x\right\} = \left[\left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}k\right) \frac{p-k}{-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)} - \left[\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\alpha_{I}(k)\right]\right] I\left(-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)|p-k\right)$$
  
El factor

$$\frac{\left(p + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}k\right)\frac{p - k}{-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)} - \left[\alpha_{II}(p) + \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\alpha_{I}(k)\right]}{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right)\left(-\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(k) - kp\right) + \sigma} - \alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)}$$

Entonces

=

$$I_{0-}(k|p) = -\left[\frac{\left(1 - \frac{\nu_{II}}{\nu_{I}}\right)\left(-\alpha_{II}(p)\alpha_{I}(k) - kp\right) + \sigma}{\left(-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)\right)}\right]I\left(-\alpha_{II}(p) + \alpha_{I}(k)|p-k\right).$$
(B8)

Las expresiones (B1)-(B8) coinciden con las expresiones (BB1), (BB2), (BB3), (BB4), (BB5), (BB6), (BB7) y (BB8) respectivamente.

## **BIBLIOGRAFÍA**

Arsenieva A.D., Maradudin A. A., Lu J.Q. y McGurn A. R., 1993, "Scattering of light from random surfaces that are periodic on average", Optics Letters, Vol. 18, No. 19, pp. 1588-1590.

Beckman P. y Spizzichino A., 1963, "The Scattering of Electromagnetic Waves from Rough Surfaces", (Oxford:Pergamon).

Cherin A. H., 1985, "An Introduction to optical fibers", 2da edición, McGraw Hill, Cap 4.

DeSanto J., Erdmann G., Hereman W. y Misra M., 1997, "Theoretical and Computational Aspects of Scattering from Rough Surfaces: One-dimensional Perfectly Reflecting Surfaces", Reporte Técnico MCS-97-09, Department of Mathematics and Computer Sciences, Colorado School of Mines, Golden, Colorado, Estados Unidos.

Donelan M. A. y W.J. Pierson Jr., 1987, "Radar Scattering and equilibrium ranges in windgenerated waves with application to scatterometry", J. Geophys. Res. Vol. 92: pp. 4971-5029.

Freilikher V., Kanzieper E., y Maradudin A. A., 1997, "Coherent scattering enhancement in systems bounded by rough surfaces", Physics Reports Vol. 288, pp. 127-204.

Goodman J., 1968, "Introduction to Fourier Optics", McGraw Hill, San Francisco, p. 13.

Goodman J., 1985, "Statistical Optics", Wiley-Interscience, NY.

Greffet J. J. y Carminati F., 1996, "*Theory of imaging in near-field microscopy*" en "*Near Field Microscopy*", NATO book series, Kluwer, Dordrecht.

Ishimaru A., 1978, "Wave Propagation and Scattering in Random Media", vols 1 y 2, Academic, NY.

Hill N. R. y Celli V., 1978, "Limits of convergence of the Rayleigh method for a surface scattering", Physical Review B, Vol. 17, No. 6, pp:2478-2491.

Madrazo A. y Maradudin A. A., 1997, "Numerical solutions of the reduced Rayleigh equation for the scattering of electromagnetic waves from rough dielectric films on perfectly conducting substrates", Opt. Commun. Vol. 134, pp. 251-263.

Mandel L. y Wolf E., 1995, "Optical Coherence and Quantum Optics", University of Cambridge Press, pp. 109-125.

Maradudin A. A., Michel T., McGurn A. R. y Méndez E. R., 1990, "Enhanced backscattering of light from a random grating", Annals of Physics 203, pp. 255-307.

Maradudin A. A. y Méndez E. R., 1993, "Enhanced backscattering of light from weakly rough random metal surfaces", Appl. Opt. 32, pp. 3335-3343.

Maradudin A. A., McGurn A. R. y Méndez E. R., 1995, "Surface plasmon polariton mechanism for enhanced backscattering of light from one-dimensional randomly rough metal surfaces", J. Opt. Soc. Am. A, Vol. 12, pp. 2500-2506.

Maradudin A. A. y Méndez E. R., 2001, "Scattering by Surfaces and Phase Screens" en "*Scattering*", editado por Roy Pike y Pierre Sabatier, Academic Press, en prensa.

McGurn A. R., 1990, "Enhanced retroreflectance effects in the reflection of light from ramdomly rough surfaces", Surface Science Reports 10, pp. 357-410.

McGurn A. R.y Maradudin A. A., 1989, "An analogue of enhanced backscattering in the transmission of light through a thin film with a randomly rough surface", Optics Communications, Vol 72, No. 5, pp. 279-285.

McGurn A. R., Maradudin A. A., y Celli V., 1985, "Localization effects in the scattering of light from a randomly rough grating", Physical Review B, Vol 31, No. 8, pp. 4866-4871.

Michel T., 1994, "Resonant light scattering from weakly rough random surfaces and imperfect gratings", J. Opt. Soc. Am. A /Vol.11/No. 6, pp. 1874-1885.

Michel T., Knotts M. y O'Donnell K., 1995, "Scattering by plasmon polaritons on a rough surface with a periodic component", J. Opt. Soc. Am. A /Vol.12/No. 3, pp. 548-559.

Millar R. F., 1969, "On the Rayleigh assumption in scattering by a periodic surface", Proc. Camb. Soc., 65, pp:773-791.

Millar R. F., 1971, "On the Rayleigh assumption in scattering by a periodic surface. II", Proc. Camb. Soc., 69, pp:217-225.

O'Donnell K., West C. A.y Méndez E. R., 1998, "Backscattering enhancement from polariton-polariton coupling on a rough metal surface", Physical Review B 57, pp. 13209-13219.

Ogilvy J. A., 1991, "Theory of Wave Scattering from Random Rough Surfaces", (Bristol: Hilger).

Petit R. y Cadilhac M., 1966, "Sur la diffraction d'une onde plane par un réseau infinitement conducteur", C.R. Acad. Sci., Ser. B. vol. 262, pp. 468-471.

Press W., Teulosky S., Vetterling W. y Flannery B., 1992, "*Numerical Recipes in Fortran* 77", University of Cambridge Press.

Puente P., 2000, "Esparcimiento múltiple de luz en guías de onda con superficie aleatoria", tesis de maestría, División de Física Aplicada, Departamento de Optica, CICESE.

Rayleigh, Lord, 1896, "The Theory of Sound", Vol. II Second Edition (London, Macmillan), pp. 89, 297-311.

Rice S. O., 1951, "Reflection of electromagnetic waves from slightly rough surfaces", Commun.\ Pure Appl.\ Math.\, pp. 351-378.

Saleh E. A. y Teich M.C., 1991, "Fundamentals of Photonics", 1ra edición, John Wiley & Sons, cap 7.

Sánchez-Gil J.A., Freilikher V., Yurkevich I., Maradudin A. A., 1998, "Coexistence of Ballistic Transport, Diffusion, and Localization in Surface Disordered Waveguides", Physical Review Letters, vol 80, No. 5, pp. 948-951.

Sánchez-Gil J.A. y García-Ramos F., 1998, "Calculations of the direct electromagnetic enhancement in surface enhanced Raman scattering on random self-affine fractal metal surfaces", J. Chem. Phys. 108 (1), pp. 317-325.

Toigo F., Marvin A., Celli V. y Hill N.R., 1977, "Optical properties of rough surfaces: General theory and the small roughness limit", Physical Review B 15, pp. 5618-5626.

Warnick y Chew, "Numerical simulation methods for rough surface scattering", Waves in Random Media vol. 11 (2001) R1-R30

West C. y O'Donnell K., 1995, "Observations of backscattering enhancement from polariton on a rough metal surface", Optical Society of America A, Vol. 12, No. 2, pp. 390-397.

Wolf E., 1973, "A generalized extinction theorem and its role in scattering theory, en Coherence and Quantum Optics", New York. Plenum, Mandel L., Wolf E. eds. 1973. P. 339 357.

