

## Tesis de Posgrado

# Difracción de ondas electromagnéticas en medios anisótropos corrugados periódicamente

Inchaussandague, Marina Elizabeth

1996

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Físicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en [digital.bl.fcen.uba.ar](http://digital.bl.fcen.uba.ar). Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in [digital.bl.fcen.uba.ar](http://digital.bl.fcen.uba.ar). It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

**Cita tipo APA:**

Inchaussandague, Marina Elizabeth. (1996). Difracción de ondas electromagnéticas en medios anisótropos corrugados periódicamente. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.

[http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis\\_2877\\_Inchaussandague.pdf](http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2877_Inchaussandague.pdf)

**Cita tipo Chicago:**

Inchaussandague, Marina Elizabeth. "Difracción de ondas electromagnéticas en medios anisótropos corrugados periódicamente". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1996.

[http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis\\_2877\\_Inchaussandague.pdf](http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2877_Inchaussandague.pdf)

**EXACTAS** UBA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales



**UBA**

Universidad de Buenos Aires

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES  
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
Departamento de Física  
Grupo de Electromagnetismo Aplicado

DIFRACCIÓN DE ONDAS ELECTROMAGNÉTICAS EN MEDIOS  
ANISÓTROPAS CORRUGADOS PERIÓDICAMENTE

por Marina Elizabeth Inchaussandague

Tesis presentada para optar por el título de Doctora en Ciencias Físicas  
Director de tesis: Dr. Ricardo Ángel Depine

1996

h<sup>2</sup>

*A mis hijos, Matías y Lucía*

## Resumen

En esta tesis se desarrollan nuevos métodos teóricos rigurosos que permiten resolver el problema de la difracción de luz en una superficie corrugada periódicamente que separa un medio isótropo (dieléctrico, metal o conductor perfecto) de un medio anisótropo (cristal uniaxial o biaxial).

Los métodos desarrollados se basan en el empleo de transformaciones de coordenadas que convierten la superficie periódica en un plano, simplificando de este modo el manejo matemático de las condiciones de contorno en la interfase. Escribiendo las ecuaciones de Maxwell en el espacio transformado, el problema original se reduce a la resolución numérica de sistemas de ecuaciones diferenciales acopladas cuyas características varían de acuerdo con el tipo de transformación utilizada.

Se emplean dos tipos de transformaciones: contravariantes y covariantes. El método de transformaciones covariantes permite tratar superficies periódicas iluminadas por una onda plana que incide desde cualquiera de los medios y con vector de onda orientado arbitrariamente con respecto a los surcos de la red.

Se estudia la consistencia de los formalismos investigados mediante el análisis de casos límites como el de interfases planas y redes isótropas y se comparan los resultados con los obtenidos utilizando métodos aproximados que emplean en su formulación la hipótesis de Rayleigh.

Como ejemplos de aplicación de los métodos presentados en este trabajo, se analiza la conversión entre modos de polarización y la excitación resonante de plasmones superficiales.

## Indice

1	Introducción . . . . .	2
2	Presentación del problema . . . . .	8
2.1	Ecuaciones de Maxwell y condiciones de contorno . . . . .	9
2.2	Ecuaciones constitutivas . . . . .	10
2.2.1	Medio isótropo . . . . .	11
2.2.2	Medio anisótropo . . . . .	11
2.3	Campos incidentes . . . . .	17
2.3.1	Incidencia desde el medio isótropo . . . . .	17
2.3.2	Incidencia desde el medio anisótropo . . . . .	18
2.4	Campos difractados . . . . .	21
2.4.1	Medio isótropo . . . . .	24
2.4.2	Medio anisótropo . . . . .	26
2.5	Potencia reflejada y transmitida . . . . .	30
2.5.1	Interfase isótropo-cristal . . . . .	30
2.5.2	interfase cristal-metal . . . . .	34
3	Método de transformaciones conformes y no conformes . . . . .	36
3.1	Ecuaciones de propagación . . . . .	36
3.2	Condiciones de contorno . . . . .	37
3.3	Tratamiento para la zona isótropa usando el método de transformaciones conformes . . . . .	39
3.4	Tratamiento para la zona del cristal usando transformaciones no conformes . . . . .	41
3.5	Transformación de las condiciones de contorno . . . . .	43
3.6	Reducción a ecuaciones diferenciales ordinarias . . . . .	44
3.7	Empalme de soluciones en $Y = 0$ . . . . .	46
3.8	Empalme de soluciones en $Y = Y_0^+$ y en $Y = Y_0^-$ . . . . .	47
3.9	Resolución numérica . . . . .	48
3.10	Método de transformaciones conformes para una red uniaxial-conductor perfecto . . . . .	53
3.11	Ejemplos de aplicación . . . . .	58
3.11.1	Comparación con el método de Rayleigh . . . . .	59
3.11.2	Interfase vacío-cristal uniaxial . . . . .	61
3.11.3	Interfase dieléctrico-cristal uniaxial . . . . .	64
3.11.4	Interfase cristal uniaxial-metal . . . . .	67
3.11.5	Interfase cristal uniaxial-conductor perfecto . . . . .	74
4	Método de transformaciones covariantes . . . . .	81
4.1	Ecuaciones de propagación . . . . .	82
4.1.1	Medio isótropo . . . . .	82
4.1.2	Medio anisótropo . . . . .	84
4.2	Transformación de los campos incidentes y difractados . . . . .	87
4.2.1	Medio isótropo . . . . .	87
4.2.2	Medio anisótropo . . . . .	89

4.3	Resolución numérica . . . . .	92
4.4	Ejemplos de aplicación . . . . .	99
4.4.1	Comparación con el método de Rayleigh . . . . .	99
4.4.2	Conversión de polarizaciones $s - p$ en redes uniaxiales profundas . . . . .	101
4.4.3	Excitación de plasmones superficiales en redes anisótropas . . . . .	103
5	Conclusiones . . . . .	113
A	Matrices de reflexión y transmisión . . . . .	116
B	Título y resumen en inglés . . . . .	123
C	Agradecimientos . . . . .	124

## 1. Introducción

Las estructuras periódicas cuentan con numerosas aplicaciones tradicionales en óptica, como por ejemplo, redes de difracción, filtros interferenciales o recubrimientos antireflectantes. Otras novedosas aplicaciones son objeto de investigación en la actualidad, principalmente debido a los recientes avances en las áreas de comunicaciones y computación óptica [1].

La periodicidad de la estructura puede tener origen en la modulación espacial del índice de refracción de un medio material (redes en volumen) o en el corrugado periódico de la superficie de separación entre dos medios (redes corrugadas).

Existen varios métodos teóricos para analizar la difracción de luz mediante redes, la mayoría de ellos dedicados a redes corrugadas. El primer método presentado para resolver el problema de la red fue desarrollado por Rayleigh a comienzos de siglo [2] y se basa en la llamada hipótesis de Rayleigh. Dado que el rango de validez de dicha hipótesis sólo se conoce en las redes entre vacío y un conductor perfecto [3], la aplicabilidad del método a otro tipo de estructuras es objeto de investigación en la actualidad.

El avance en el área computacional permitió el desarrollo de métodos teóricos *rigurosos* para estudiar el problema de las redes. En este punto es conveniente recordar que por método riguroso entendemos aquel que partiendo de las leyes elementales del electromagnetismo y utilizando teoremas matemáticos reduce el problema físico a un problema matemático cuya solución se obtiene, por lo general, empleando cálculos numéricos. Las aproximaciones se realizan sólo en la implementación numérica, nunca antes. Entre los métodos teóricos rigurosos que han sido implementados numéricamente y que han dado resultados precisos para un amplio rango de longitudes de onda pueden mencionarse los

integrales [3], los diferenciales [4, 5] y los modales [6]. La mayoría de ellos suponen que la red está formada por un material perfectamente conductor o por materiales permeables isótropos, como un dieléctrico o un metal con pérdidas óhmicas, cuyas propiedades electromagnéticas son las mismas en todas las direcciones. Sin embargo, existe otro tipo de materiales denominados anisótropos en los cuales las propiedades eléctricas, así como también otras características físicas, varían de acuerdo con la dirección.

Las interfases corrugadas periódicamente que involucran anisotropías propias de un medio material resultan interesantes, tanto desde el punto de vista teórico como por sus posibles aplicaciones en nuevos dispositivos ópticos. A diferencia de lo que sucede en las redes isótropas en montaje *clásico* (vector de onda incidente perpendicular a los surcos de la red), el problema de la difracción en estas estructuras no resulta separable en dos modos independientes de polarización (tratamiento escalar), sino que requiere un tratamiento electromagnético completamente vectorial. La dificultad es similar a la que se presenta en la resolución de las redes isótropas en montaje *cónico*, es decir, cuando el vector de onda incidente está orientado arbitrariamente con respecto a la dirección de los surcos.

La mayor parte de la investigación previa a esta tesis realizada en redes anisótropas, se limita a considerar *interfases planas* con una modulación espacial del índice de refracción [7, 8, 9], pudiéndose mencionar como excepciones un trabajo dedicado a redes isótropas con revestimientos cristalinos [10] y los artículos citados en [11, 12] donde se aplica el método integral al caso de redes anisótropas corrugadas para una orientación muy particular del eje óptico del cristal. Dada la imposibilidad de tratar escalarmente el problema de las redes corrugadas anisótropas, en los primeros formalismos desarrollados para redes corrugadas uniaxiales se ha elegido simplificar el problema utilizando la hipótesis de Rayleigh [13, 14, 15, 16]. El uso de esta aproximación introduce una limitación en cuanto a la altura de los corrugados, ya que por analogía con el caso isótropo, se espera que sea



válida cuando la profundidad de los surcos de la red es pequeña frente al período de la misma.

El objetivo de este trabajo es desarrollar formalismos teóricos rigurosos que permitan calcular los campos electromagnéticos difractados en una superficie anisótropa corrugada periódicamente. Como se ha mencionado anteriormente, existen distintos métodos teóricos utilizados en la resolución de las redes isotropas que podrían, en principio, ser generalizados al caso de las redes anisotropas. De estos formalismos, se ha elegido en este trabajo investigar aquellos basados en la utilización de transformaciones de coordenadas que convierten la interfase periódica en un plano, simplificando de este modo el tratamiento matemático de las condiciones de contorno en la superficie de separación entre ambos medios.

La organización de esta tesis es la siguiente: en primer término (capítulo 2), se presenta el problema a resolver y se detallan las generalidades de los medios anisotropos [17], que permitirán encontrar los campos en las regiones fuera de los surcos. También se escriben los campos incidentes considerando incidencias desde el medio isotropo o desde el cristal (sección 2.3). Haciendo uso de la pseudoperiodicidad de los campos difractados en la red anisótropa se muestra que las ecuaciones de propagación que se obtienen a partir de las ecuaciones de Maxwell se resuelven analíticamente en las regiones fuera de los surcos. De este modo se demuestra que en estas zonas los campos se expresan como desarrollos en ondas planas salientes conocidos como desarrollos de Rayleigh (sección 2.4). A partir de estos desarrollos se obtienen las expresiones de las potencias reflejadas y transmitidas y las eficiencias de los órdenes difractados (sección 2.5). En este punto es conveniente remarcar que todos los métodos que podrían ser aplicados a la resolución de este problema hacen uso de los desarrollos de Rayleigh para expresar los campos en la zona fuera de los surcos de la red, ya que dichos desarrollos surgen de la resolución analítica de las ecuaciones de propagación en esta zona. La diferencia entre ellos radica en la forma de tratar el problema en la región entre los surcos de la red, donde no son válidos los

desarrollos de Rayleigh.

Como hemos mencionado anteriormente, los formalismos que se investigan en este trabajo se basan en el uso de transformaciones de coordenadas que convierten la superficie periódica que separa los medios en un plano. Existen distintos tipos de transformaciones de coordenadas que pueden utilizarse para resolver este problema. Uno de ellos es el de las transformaciones conformes y no conformes. Este tipo de transformaciones ha sido utilizado con éxito en la resolución de las redes isótropas en montaje clásico (tratamiento escalar) [18, 19, 20, 21, 22] y cónico (tratamiento vectorial) [23] y puede aplicarse, en principio, a redes con surcos de cualquier forma y profundidad.

En el capítulo 3 se emplean las transformaciones conformes y no conformes para desarrollar el primero de los formalismos teóricos rigurosos que se investigan en esta tesis. Dicho formalismo se aplica a la resolución del problema de una red entre un cristal uniaxial con orientación arbitraria de su eje óptico y un medio isótropo (dieléctrico, metal o conductor perfecto). La red es iluminada desde el cristal o desde el medio isótropo por una onda plana cuyo vector de onda es perpendicular a los surcos de la red (montaje clásico) [24, 25, 26, 27]. Dado que las componentes transversales de los campos se expresan en términos de las componentes paralelas a los surcos de la red, el problema queda resuelto si estas últimas se conocen. A partir de las ecuaciones de Maxwell se obtienen las ecuaciones de propagación que satisfacen estas componentes en la zona del medio isótropo y en la zona del cristal (sección 3.1) y las condiciones de contorno que deben cumplir en la superficie de separación entre los medios (sección 3.2). Las ecuaciones diferenciales y las condiciones de contorno que se obtienen mezclan las componentes antes mencionadas, motivo por el cual el problema no es separable en dos modos independientes de polarización, contrariamente a lo que sucede en el caso de una red formada por un material isótropo en montaje clásico. Transformando la zona isótropa mediante una transformación conforme (sección 3.3) y la zona uniaxial mediante una no conforme

(sección 3.4), se obtienen las ecuaciones de propagación y las condiciones de contorno en el espacio transformado (sección 3.5), con lo cual el problema se reduce a la resolución de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas de segundo orden y con coeficientes *variables* en el cual las incógnitas son las componentes del campo eléctrico y del magnético a lo largo de los surcos de la red (sección 3.6). Los detalles de la implementación numérica del método se presentan en la sección 3.9. Como ejemplificación del formalismo desarrollado, se presentan los resultados obtenidos para el caso de una interfase cristal-dieléctrico iluminada desde el medio isótropo y cristal-metal iluminada desde el medio uniaxial, en ambos casos para redes cicloidales. También se muestran los resultados obtenidos al aplicar el método de transformaciones conformes para resolver el problema de una red de perfil triangular entre un cristal uniaxial y un conductor perfecto (sección 3.11).

El método de transformaciones conformes y no conformes requiere encontrar cuál es la transformación conforme que convierte cada perfil en un plano. Por otra parte, el hecho de que la transformación no conforme se obtenga a partir de la transformación conforme es muy conveniente pero, desafortunadamente, implica una limitación en la aplicabilidad del método ya que en algunos casos la transformación no conforme que se obtiene no resulta inversible. Con el objeto de superar estas limitaciones, se emplea en el capítulo 4 otro tipo de transformación no conforme de coordenadas denominado transformación covariante que también ha dado muy buenos resultados para resolver el caso de las redes isótropas [28, 29]. La novedad de esta transformación es que convierten los versores cartesianos en una terna no ortogonal de versores en el espacio transformado y, a diferencia de las transformaciones conformes y no conformes, conducen a la resolución de un sistema de ecuaciones diferenciales con coeficientes *constantes*. En este trabajo se aplica esta transformación al caso general de una red anisótropa (uniaxial o biaxial) en montaje cónico e iluminada desde el cristal o desde el medio isótropo [30, 31]. En primer término, se escriben las ecuaciones de Maxwell en forma

covariante en un sistema de coordenadas no ortogonal adecuado a la geometría de la red (sección 4.1), obteniéndose un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden con coeficientes constantes. En la sección 4.2 se derivan las expresiones del campo incidente y de los campos difractados en el espacio transformado. Los detalles de la implementación numérica ilustrando la resolución del sistema de ecuaciones diferenciales obtenido, se presenta en la sección 4.3. Finalmente, en la sección 4.4 se ejemplifica el formalismo desarrollado para estudiar la conversión de polarizaciones  $s - p$  en redes uniaxiales profundas y la excitación de plasmones superficiales en redes entre un medio anisótropo y un metal.

En esta tesis se desarrollan formalismos diferenciales rigurosos que permiten encontrar los campos difractados en interfases con corrugado periódico que involucran medios anisótropos. La confiabilidad de los formalismos investigados se verifica analizando la conservación de la energía, controlando los resultados en situaciones límites y comparando con los métodos basados en la hipótesis de Rayleigh en el caso de redes poco profundas. Como ejemplos de aplicación de los métodos presentados, se estudia la conversión entre modos de polarización y la excitación de plasmones superficiales en redes uniaxiales y biaxiales de profundidad arbitraria. Finalmente, se presentan conclusiones y se sugieren líneas de trabajo que permitirán estudiar fenómenos novedosos y de interés práctico que pueden esperarse en este tipo de estructuras.

## 2. Presentación del problema

En un sistema de coordenadas cartesianas  $(x, y, z)$ , consideramos una superficie con simetría de traslación en la dirección  $z$  y periódica en  $x$ , cuyo perfil está definido por la función  $y = a(x)$  (período  $d$ ). Dicha superficie separa un medio anisótropo (zona  $y < a(x)$ ) de un medio isótropo (zona  $y > a(x)$ ). El medio anisótropo puede ser un cristal uniaxial o biaxial y el isótropo un dieléctrico, un metal real o un conductor perfecto (ver figura 2.1).

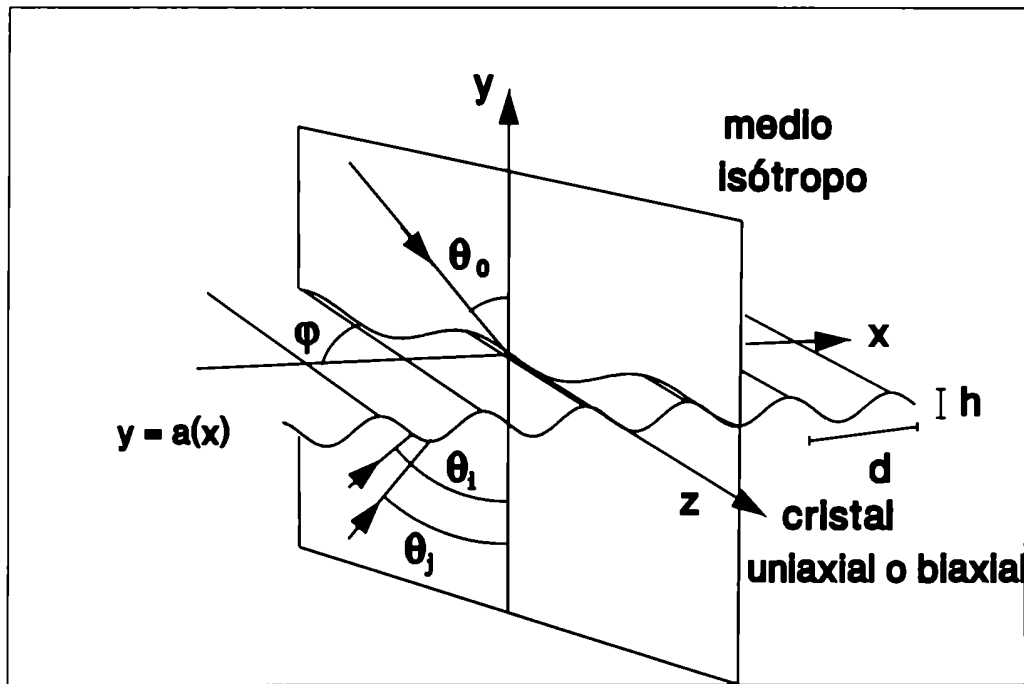


Figura 2.1: Vista de la red mostrando las posibles incidencias consideradas en este problema. Los subíndices  $i$  y  $j$  denotan la polarización de la onda incidente desde el cristal (ordinaria o extraordinaria si es uniaxial o del tipo 1 ó 2 si es biaxial)

Para resolver el problema de la difracción de una onda electromagnética en este tipo de interfase,

partimos de las ecuaciones de Maxwell y de las condiciones de contorno que debe cumplir el campo electromagnético en la superficie de separación entre ambos medios.

## 2.1. Ecuaciones de Maxwell y condiciones de contorno

El campo electromagnético se describe clásicamente en términos de dos campos vectoriales: el campo eléctrico  $\vec{E}$  y el vector inducción magnética  $\vec{B}$ . Para incluir las propiedades del medio donde éstos actúan, se introducen además los vectores  $\vec{D}$  y  $\vec{H}$ , llamados desplazamiento eléctrico y campo magnético, respectivamente.

Los campos  $\vec{E}$ ,  $\vec{H}$ ,  $\vec{D}$  y  $\vec{B}$  satisfacen las ecuaciones de Maxwell que, en ausencia de fuentes libres, se escriben como (en el sistema de unidades gaussiano):

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}(\vec{r}, t)}{\partial t}, \quad (2.1)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}(\vec{r}, t)}{\partial t}, \quad (2.2)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = 0, \quad (2.3)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0, \quad (2.4)$$

donde  $\vec{r} = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z}$  y  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío.

Para determinar los campos, deben considerarse además las relaciones que describen los efectos que produce el campo electromagnético en el medio material en cuestión. Estas relaciones se conocen como ecuaciones constitutivas y para un medio lineal son las siguientes:

$$\vec{D} = \vec{\epsilon} \cdot \vec{E}, \quad (2.5)$$

$$\vec{B} = \vec{\mu} \cdot \vec{H}, \quad (2.6)$$

donde  $\vec{\epsilon}$  y  $\vec{\mu}$  son los tensores llamados dieléctrico o permitividad y permeabilidad, respectivamente. Ellos dependen de la estructura molecular y cristalina del material, así como también de la densidad

y de la temperatura. En un medio isótropo, estos tensores son diagonales y sus elementos son iguales entre sí, por lo cual cada uno de ellos se reduce a un escalar. Contrariamente, el carácter tensorial se conserva en los materiales anisótropos. En este caso los tensores pueden ser llevados a una forma diagonal, pudiéndose obtener los tres elementos diagonales correspondientes a los autovalores distintos (cristal biaxial) o dos elementos diagonales iguales (cristal uniaxial).

Si se tiene una superficie  $S$  que divide el espacio en dos regiones (región 1 y región 2), los campos deben satisfacer las siguientes condiciones de contorno en la interfase  $S$ :

$$\hat{n} \times (\vec{E}_2 - \vec{E}_1) \Big|_S = 0, \quad (2.7)$$

$$\hat{n} \times (\vec{H}_2 - \vec{H}_1) \Big|_S = 0, \quad (2.8)$$

$$\hat{n} \cdot (\vec{B}_2 - \vec{B}_1) \Big|_S = 0, \quad (2.9)$$

$$\hat{n} \cdot (\vec{D}_2 - \vec{D}_1) \Big|_S = 0, \quad (2.10)$$

donde  $\hat{n}$  es el versor normal a la superficie  $S$  y  $\vec{E}_1, \vec{H}_1, \vec{D}_1$  y  $\vec{B}_1$  ( $\vec{E}_2, \vec{H}_2, \vec{D}_2$  y  $\vec{B}_2$ ) son los campos en la región 1 (2), respectivamente. Debe recordarse que las ecuaciones 2.8 y 2.10 no son válidas si alguno de los medios es un conductor perfecto.

Resolviendo entonces las ecuaciones de Maxwell 2.1, 2.2, 2.3 y 2.4 en las regiones 1 y 2, con las condiciones de contorno 2.7, 2.8, 2.9 y 2.10 (o 2.7 y 2.9 para un conductor perfecto), se obtienen el campo eléctrico y el magnético en todo punto del espacio. En este trabajo, denotaremos con el subíndice 1 (2) a los campos en el medio isótropo (anisótropo), respectivamente.

## 2.2. Ecuaciones constitutivas

Como hemos visto en la sección anterior, para obtener los campos electromagnéticos deben considerarse las ecuaciones constitutivas que expresan la respuesta del medio frente a la presencia de un

campo aplicado. A continuación, escribiremos las ecuaciones constitutivas que caracterizan a los medios materiales isótropos y anisótropos.

### 2.2.1. Medio isótropo

Utilizando las expresiones 2.5 y 2.6 se obtienen las ecuaciones constitutivas que caracterizan a un medio isótropo:

$$\vec{D}_1 = \epsilon_i \vec{E}_1 , \quad (2.11)$$

$$\vec{B}_1 = \mu_i \vec{H}_1 , \quad (2.12)$$

donde  $\epsilon_i$  y  $\mu_i$  son constantes denominadas permitividad y permeabilidad, respectivamente. Estas ecuaciones expresan que la respuesta del medio es isótropa en el espacio, es decir, que no depende de la dirección considerada.

### 2.2.2. Medio anisótropo

En un medio eléctricamente anisótropo la permitividad se expresa en forma tensorial (ec. 2.5) y las ecuaciones constitutivas se escriben como:

$$\vec{D}_2 = \vec{\epsilon} \cdot \vec{E}_2 , \quad (2.13)$$

$$\vec{B}_2 = \mu \vec{H}_2 , \quad (2.14)$$

donde  $\vec{\epsilon}$  es el tensor dieléctrico y  $\mu$  es la permeabilidad del cristal. Suponemos que el medio anisótropo no tiene pérdidas, por lo tanto, el tensor dieléctrico es real, simétrico y definido positivo. Como consecuencia, todos los autovalores de  $\vec{\epsilon}$  deben ser positivos y distintos de cero [32].

El tensor dieléctrico tiene asociados tres autovalores:  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$  y  $\epsilon_3$ . Debido a la simetría de  $\vec{\epsilon}$ , los autovectores asociados a autovalores diferentes son ortogonales entre sí. Llamamos  $\hat{u}_1$ ,  $\hat{u}_2$  y  $\hat{u}_3$  a los autovectores asociados a los autovalores  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$  y  $\epsilon_3$ , respectivamente. Por convención y sin pérdida



de generalidad, elegimos:  $\epsilon_1 < \epsilon_2 < \epsilon_3$  y  $\hat{u}_1 \times \hat{u}_2 = \hat{u}_3$ . Por lo tanto, utilizando notación diádica, la expresión del tensor dieléctrico en la base de autovectores es:

$$\bar{\epsilon} = \epsilon_1 \hat{u}_1 \hat{u}_1 + \epsilon_2 \hat{u}_2 \hat{u}_2 + \epsilon_3 \hat{u}_3 \hat{u}_3 . \quad (2.15)$$

En la ecuación anterior,  $\hat{u}_l \hat{u}_l$  ( $l=1,2$  o  $3$ ) denota el producto diádico del vector  $\hat{u}_l$  consigo mismo. Este producto diádico se define como [17]:

$$\hat{u}_l \hat{u}_l \longleftrightarrow u_{li} u_{lj} , \quad (2.16)$$

y sus nueve componentes están representadas por la matriz

$$\hat{u}_l \hat{u}_l = [u_{li} u_{lj}] = \begin{bmatrix} u_{lx} u_{lx} & u_{lx} u_{ly} & u_{lx} u_{lz} \\ u_{ly} u_{lx} & u_{ly} u_{ly} & u_{ly} u_{lz} \\ u_{lz} u_{lx} & u_{lz} u_{ly} & u_{lz} u_{lz} \end{bmatrix} , \quad (2.17)$$

donde  $u_{lx}$ ,  $u_{ly}$  y  $u_{lz}$  son las componentes cartesianas del versor  $\hat{u}_l$  (con  $l=1, 2$  o  $3$ ).

Supongamos que una onda plana monocromática de frecuencia  $\omega_0$  y caracterizada por un vector de onda  $\vec{k}$  se propaga en un medio anisótropo infinito. La ecuación de dispersión en el cristal resulta [17]:

$$|k_0^2 \mu \bar{\epsilon} + (\vec{k} \times \vec{I})^2| = 0 , \quad (2.18)$$

donde  $\vec{I}$  es la matriz identidad y  $k_0 = \omega_0/c$ . En la ecuación anterior, el producto  $\vec{k} \times \vec{I}$  está dado por la matriz:

$$\vec{k} \times \vec{I} = \begin{bmatrix} 0 & -k_z & k_y \\ k_z & 0 & k_x \\ -k_y & k_x & 0 \end{bmatrix} , \quad (2.19)$$

donde  $k_x$ ,  $k_y$  y  $k_z$  son las componentes cartesianas del vector  $\vec{k}$ . La forma más usual de escribir la ecuación 2.18 es:

$$(\vec{k} \cdot \bar{\epsilon} \cdot \vec{k}) \vec{k}^2 + k_0^2 \mu \vec{k} \cdot \vec{C} \cdot \vec{k} + k_0^4 \mu^2 |\bar{\epsilon}| = 0 , \quad (2.20)$$

donde

$$\tilde{C} = \text{adj } \tilde{\epsilon} - \text{tr}(\text{adj } \tilde{\epsilon}) \tilde{I} , \quad (2.21)$$

y  $\text{adj}$  y  $\text{tr}$  denotan la adjunta y la traza de una matriz, respectivamente. En particular, supongamos que en el cristal se propaga una onda cuya dirección de propagación se conoce. Escribimos entonces  $\vec{k} = |\vec{k}|\hat{k}$ . Reemplazando en la ecuación 2.20, resulta:

$$(\hat{k} \cdot \tilde{\epsilon} \cdot \hat{k}) (\hat{k} \cdot \hat{k}) |\vec{k}|^4 + k_0^2 \mu \hat{k} \cdot \tilde{C} \cdot \hat{k} |\vec{k}|^2 + k_0^4 \mu^2 |\tilde{\epsilon}| = 0 . \quad (2.22)$$

La ecuación 2.22 es bicuadrática, es decir que  $k = |\vec{k}| > 0$  puede tomar dos valores para cada versor  $\hat{k}$ . Definiendo el índice de refracción como  $n = |\vec{k}|/k_0$ , de la ecuación 2.22 se desprende que para cada dirección de  $\hat{k}$  hay dos índices de refracción cuyos valores están dados por:

$$n^2 = \frac{k^2}{k_0^2} = \frac{-\mu \hat{k} \cdot \tilde{C} \cdot \hat{k} \pm \sqrt{\Sigma}}{2(\hat{k} \cdot \tilde{\epsilon} \cdot \hat{k})(\hat{k} \cdot \hat{k})} \quad (2.23)$$

donde

$$\Sigma = \mu^2 (\hat{k} \cdot \tilde{C} \cdot \hat{k})^2 - 4(\hat{k} \cdot \tilde{\epsilon} \cdot \hat{k}) |\tilde{\epsilon}| \mu^2 (\hat{k} \cdot \hat{k}) . \quad (2.24)$$

Notemos que no sólo hay dos índices diferentes para una misma dirección, sino que estos varían al variar  $\hat{k}$ . Puede demostrarse que es posible encontrar una dirección de propagación tal que las dos soluciones coincidan ( $\Sigma = 0$ ). Estas direcciones se llaman **ejes ópticos** del cristal. En términos de los autovalores y autovectores del tensor  $\tilde{\epsilon}$ , las expresiones de los ejes ópticos son:

$$\hat{c}_1 = \sqrt{\frac{\epsilon_3 (\epsilon_2 - \epsilon_1)}{\epsilon_2 (\epsilon_3 - \epsilon_1)}} \hat{u}_1 + \sqrt{\frac{\epsilon_1 (\epsilon_3 - \epsilon_2)}{\epsilon_2 (\epsilon_3 - \epsilon_1)}} \hat{u}_3 , \quad (2.25)$$

$$\hat{c}_2 = -\sqrt{\frac{\epsilon_3 (\epsilon_2 - \epsilon_1)}{\epsilon_2 (\epsilon_3 - \epsilon_1)}} \hat{u}_1 + \sqrt{\frac{\epsilon_1 (\epsilon_3 - \epsilon_2)}{\epsilon_2 (\epsilon_3 - \epsilon_1)}} \hat{u}_3 . \quad (2.26)$$

Estas expresiones carecen de sentido si  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$  (medio isótropo), pero siguen valiendo si dos de los autovalores de  $\tilde{\epsilon}$  son iguales entre sí (medio uniaxial). Si esto sucede, se verifica que  $\hat{c}_1 = \hat{c}_2 = \hat{c}_0$ , es

decir que existe sólo un eje óptico cuya dirección coincide con la del autovector asociado al autovalor no repetido de  $\tilde{\epsilon}$ .

Si  $\epsilon_1 < \epsilon_2 < \epsilon_3$ , resulta  $\hat{c}_1 \neq \hat{c}_2$  y se dice que el medio es biaxial. En este caso, los ejes ópticos están contenidos en el plano formado por los autovectores correspondientes a los autovalores menor y mayor de  $\tilde{\epsilon}$ .

Partiendo de la ecuación 2.22, hemos visto que, dado  $\hat{k}$ , hay dos valores de  $k = |\vec{k}|$  posibles. Es decir que puede haber dos ondas monocromáticas cuyos frentes de onda son perpendiculares a  $\hat{k}$ , propagándose con velocidades de fase diferentes. Analizaremos ahora cuál es la polarización de los campos asociados a cada una de ellas dado un cierto valor de  $\hat{k}$ . Para ello debemos distinguir los siguientes casos [32]:

- I. Si  $|k_0^2 \mu \tilde{\epsilon} - \vec{k}^2 \tilde{I}| \neq 0$

En este caso, la polarización del campo eléctrico está dada por:

$$\vec{e} = \text{adj}(k_0^2 \mu \tilde{\epsilon} - \vec{k}^2 \tilde{I}) \cdot \vec{k}, \quad (2.27)$$

y la del campo magnético por:

$$\vec{h} = \frac{1}{k_0 \mu} \vec{k} \times \vec{e}. \quad (2.28)$$

- II. Si  $|k_0^2 \mu \tilde{\epsilon} - \vec{k}^2 \tilde{I}| = 0$

Si este determinante es 0, se verifica que  $\vec{k}^2$  es alguno de los autovalores de la matriz  $k_0^2 \mu \tilde{\epsilon}$ . Es decir que:

$$\frac{\vec{k}^2}{k_0^2 \mu} = \epsilon_1, \quad \epsilon_2 \quad \text{o} \quad \epsilon_3. \quad (2.29)$$

Como en nuestro problema conocemos  $\vec{k}$ , entonces podemos detectar cuál de los tres autovalores es el que corresponde considerar en la ecuación anterior. A ese autovalor lo llamaremos  $\epsilon_j$ .

Consideramos dos posibles situaciones:

II.1 Si  $\epsilon_j$  es un autovalor no repetido.

Nuevamente, debemos distinguir dos casos:

II.1.1 Si  $k_0^4 \mu_2^2 |\vec{\epsilon}| - (\vec{k} \cdot \vec{\epsilon} \cdot \vec{k}) \vec{k}^2 \neq 0$ .

En este caso se tiene que:

$$\vec{e} = k_0 \mu \hat{u}_j , \quad (2.30)$$

$$\vec{h} = \vec{k} \times \hat{u}_j . \quad (2.31)$$

II.1.2 Si  $k_0^4 \mu_2^2 |\vec{\epsilon}| - (\vec{k} \cdot \vec{\epsilon} \cdot \vec{k}) \vec{k}^2 = 0$ .

Esta condición es justamente el caso en el que los dos índices de refracción coinciden ( $\vec{k}$  es paralelo a alguno de los ejes ópticos) y la polarización de los campos será arbitraria.

II.2 Si  $\epsilon_j$  es un autovalor repetido.

La polarización del campo eléctrico está dada por:

$$\vec{e} = \vec{k} \times \hat{u}_k , \quad (2.32)$$

y la del campo magnético por:

$$\vec{h} = \frac{1}{k_0 \mu} \vec{k} \times \vec{e} . \quad (2.33)$$

Vamos a referirnos ahora al caso de los cristales uniaxiales, que son aquellos para los cuales el tensor dieléctrico tiene dos autovalores iguales. Para este tipo de cristales, dicho tensor se escribe como:

$$\vec{\epsilon} = \epsilon_{\perp} \vec{I} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) \hat{c}_0 \hat{c}_0 , \quad (2.34)$$

donde hemos denotado  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_{\perp}$  o bien  $\epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_{\perp}$  y  $\hat{c}_0$  es un autovector unitario correspondiente al autovalor no repetido  $\epsilon_{\parallel}$ . En la expresión 2.34,  $\hat{c}_0 \hat{c}_0$  denota el producto diádico de  $\hat{c}_0$  consigo

mismo. Utilizando la ecuación de dispersión 2.20, se encuentran dos posibles valores para el índice de refracción:

$$n_o = \frac{|\vec{k}_o|}{k_0} = \sqrt{\frac{\mu\epsilon_{\perp}}{\hat{k} \cdot \hat{k}}}, \quad (2.35)$$

$$n_e = \frac{|\vec{k}_e|}{k_0} = \sqrt{\frac{\mu\epsilon_{\perp}\epsilon_{\parallel}}{\hat{k} \cdot \vec{\epsilon} \cdot \hat{k}}}. \quad (2.36)$$

Podemos ver que uno de los posibles índices de refracción no depende de la dirección de propagación de la onda ( $n_o$ ), mientras que el otro depende de la orientación entre  $\hat{c}_0$  y  $\hat{k}$  ( $n_e$ ). Al primero se lo llama índice ordinario y al segundo extraordinario. Luego, cada dirección de propagación  $\hat{k}$  tiene asociados dos vectores de onda:  $\vec{k}_o$  y  $\vec{k}_e$ . Cada uno de estos vectores tiene fija la polarización del campo eléctrico:

$$\vec{e}_o = \vec{k}_o \times \hat{c}_0, \quad (2.37)$$

$$\vec{e}_e = k_0^2 \mu \epsilon_{\perp} \hat{c}_0 - (\vec{k}_e \cdot \hat{c}_0) \vec{k}_e. \quad (2.38)$$

La dirección del campo magnético se calcula utilizando la expresión:

$$\vec{h}_{o,e} = \frac{1}{k_0 \mu} (\vec{k}_{o,e} \times \vec{e}_{o,e}). \quad (2.39)$$

Es importante observar que el campo eléctrico asociado a la onda ordinaria es perpendicular a  $\hat{k}$  (como en los medios isótropos) y a la dirección del eje óptico. En cambio, el campo eléctrico asociado a la onda extraordinaria está contenido en el plano formado por  $\hat{k}$  y la dirección del eje óptico.

Hemos presentado en esta sección una síntesis sobre la propagación de ondas electromagnéticas en medios infinitos con anisotropía eléctrica. A continuación, consideraremos el problema de la red anisótropa y escribiremos las expresiones de los campos incidentes y difractados en este tipo de estructuras.

## 2.3. Campos incidentes

Consideramos casos en que la red es iluminada desde el material isótropo o desde el cristal por una onda plana monocromática de frecuencia  $\omega_0$ . En todos los casos, llamaremos  $\varphi$  al ángulo entre el plano  $x - y$  y el plano de incidencia.

### 2.3.1. Incidencia desde el medio isótropo

En este caso, el vector de onda incidente  $\vec{k}_i$  se escribe como:

$$\vec{k}_i = \alpha_0 \hat{x} - \beta_0 \hat{y} + \gamma_0 \hat{z}, \quad (2.40)$$

$$\alpha_0 = \frac{\omega_0}{c} (\epsilon_i \mu_i)^{1/2} \text{sen } \theta_0 \cos \varphi, \quad (2.41)$$

$$\beta_0 = \frac{\omega_0}{c} (\epsilon_i \mu_i)^{1/2} \cos \theta_0, \quad (2.42)$$

$$\gamma_0 = \frac{\omega_0}{c} (\epsilon_i \mu_i)^{1/2} \text{sen } \theta_0 \text{sen } \varphi, \quad (2.43)$$

donde  $\theta_0$  es el ángulo entre el vector de onda  $\vec{k}_i$  y el eje  $y$ . El campo eléctrico asociado con esta onda incidente es:

$$\vec{E}_1^i(x, y, z) = \frac{1}{\eta_0} \left[ \left( -\gamma_0 \alpha_0 R + \frac{\omega_0}{c} \mu_i \beta_0 S \right) \hat{x} + \left( \frac{\omega_0}{c} \mu_i \alpha_0 S + \gamma_0 \beta_0 R \right) \hat{y} + R \hat{z} \right] \exp(i \vec{k}_i \cdot \vec{r}), \quad (2.44)$$

mientras que el campo magnético incidente  $\vec{H}_1^i$  está dado por:

$$\vec{H}_1^i(x, y, z) = \frac{1}{\eta_0} \left[ \left( -\gamma_0 \alpha_0 S - \frac{\omega_0}{c} \epsilon_i \beta_0 R \right) \hat{x} + \left( -\frac{\omega_0}{c} \epsilon_i \alpha_0 R + \gamma_0 \beta_0 S \right) \hat{y} + S \hat{z} \right] \exp(i \vec{k}_i \cdot \vec{r}), \quad (2.45)$$

donde

$$\eta_0 = \frac{\omega_0^2 \mu_i \epsilon_i}{c^2} - \gamma_0^2,$$

y  $R$  y  $S$  son amplitudes complejas que determinan la polarización incidente. Pueden expresarse en términos de las amplitudes del campo eléctrico con polarización  $s$  y  $p$  en la forma:

$$R = A_s \cos \varphi + A_p \cos \theta_0 \operatorname{sen} \varphi , \quad (2.46)$$

$$S = \left( \frac{\epsilon_i}{\mu_i} \right)^{1/2} [-A_s \cos \theta_0 \operatorname{sen} \varphi + A_p \cos \varphi] . \quad (2.47)$$

### 2.3.2. Incidencia desde el medio anisótropo

Distinguiremos dos casos:

#### A) Cristal uniaxial

En este caso, la red puede ser iluminada por ondas del tipo ordinario o extraordinario. Si la polarización de la onda es ordinaria, el vector de onda incidente  $\vec{k}_o$  se escribe como:

$$\vec{k}_o = \alpha_o \hat{x} + \beta_o \hat{y} + \gamma_o \hat{z} , \quad (2.48)$$

$$\alpha_o = \frac{\omega_0}{c} (\epsilon_{\perp} \mu)^{1/2} \operatorname{sen} \theta_o \cos \varphi , \quad (2.49)$$

$$\beta_o = \frac{\omega_0}{c} (\epsilon_{\perp} \mu)^{1/2} \cos \theta_o , \quad (2.50)$$

$$\gamma_o = \frac{\omega_0}{c} (\epsilon_{\perp} \mu)^{1/2} \operatorname{sen} \theta_o \operatorname{sen} \varphi , \quad (2.51)$$

donde  $\epsilon_{\perp}$  es el autovalor repetido del tensor dieléctrico y  $\theta_o$  es el ángulo que forma el vector de onda  $\vec{k}_o$  con el eje  $y$ . En cambio, para una onda incidente extraordinaria, el vector de onda asociado  $\vec{k}_e$  está dado por:

$$\vec{k}_e = \alpha_e \hat{x} + \beta_e \hat{y} + \gamma_e \hat{z} , \quad (2.52)$$

$$\alpha_e = \pm \Upsilon(\theta_e) \operatorname{sen} \theta_e \cos \varphi , \quad (2.53)$$

$$\beta_e = \pm \Upsilon(\theta_e) \cos \theta_e , \quad (2.54)$$

$$\gamma_e = \pm \Upsilon(\theta_e) \operatorname{sen} \theta_e \operatorname{sen} \varphi , \quad (2.55)$$

con

$$\Upsilon(\theta_e) = \frac{\omega_0}{c} \left[ \frac{\mu \epsilon_{\perp} \epsilon_{\parallel}}{(\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp})(c_{0x} \sin \theta_e \cos \varphi + c_{0y} \cos \theta_e + c_{0z} \sin \theta_e \sin \varphi)^2 + \epsilon_{\perp}} \right]^{1/2} \quad (2.56)$$

En estas ecuaciones,  $\theta_e$  es el ángulo entre el vector de onda  $\vec{k}_e$  y el eje  $y$ . El signo superior (inferior) en 2.53, 2.54 y 2.55 corresponde al caso  $\Psi > 0$  ( $\Psi < 0$ ), donde:

$$\Psi = \epsilon_{\perp} \cos \theta_e + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) c_{0y} (c_{0x} \sin \theta_e \cos \varphi + c_{0y} \cos \theta_e + c_{0z} \sin \theta_e \sin \varphi) . \quad (2.57)$$

En las expresiones anteriores,  $c_{0x}$ ,  $c_{0y}$  y  $c_{0z}$  denotan las componentes cartesianas del versor  $\hat{c}_0$ .

Podemos escribir los campos asociados con la onda incidente desde el medio uniaxial como una superposición de ondas planas ordinarias y extraordinarias:

$$\vec{E}_2^i(x, y, z) = C_o \vec{e}_o \exp(i\vec{k}_o \cdot \vec{r}) + C_e \vec{e}_e \exp(i\vec{k}_e \cdot \vec{r}) , \quad (2.58)$$

$$\vec{H}_2^i(x, y, z) = C_o \vec{h}_o \exp(i\vec{k}_o \cdot \vec{r}) + C_e \vec{h}_e \exp(i\vec{k}_e \cdot \vec{r}) . \quad (2.59)$$

$C_o$  y  $C_e$  son amplitudes complejas que definen la polarización incidente. Para una onda ordinaria (extraordinaria) se tiene  $C_o = 1$  y  $C_e = 0$  ( $C_o = 0$  y  $C_e = 1$ ), respectivamente.

## B) Cristal biaxial

En este caso debemos encontrar los vectores de onda  $\vec{k}_j$  ( $j=1$  o  $2$ ) asociados con ondas incidentes del tipo 1 y 2, respectivamente. Para ello, escribimos un vector de onda incidente  $\vec{k}$  de la forma:

$$\vec{k} = k \hat{w}_i , \quad (2.60)$$

donde  $\hat{w}_i$  es un versor que apunta hacia la interfase:

$$\hat{w}_i = \sin \theta \cos \varphi \hat{x} + \cos \theta \hat{y} + \sin \theta \sin \varphi \hat{z} , \quad (2.61)$$



y  $\theta$  el ángulo que forma el versor  $\hat{w}_i$  con el eje  $y$ . Reemplazando la expresión 2.60 en la ecuación de dispersión 2.20, resulta:

$$(\hat{w}_i \cdot \tilde{\epsilon} \cdot \hat{w}_i) k^4 + k_0^2 \mu \hat{w}_i \cdot \tilde{C} \cdot \hat{w}_i k^2 + k_0^4 \mu^2 |\tilde{\epsilon}| = 0 . \quad (2.62)$$

La ecuación 2.62 tiene cuatro soluciones  $\vec{k}_l = k_l \hat{w}_i$  ( $l=1, 2, 3$  o  $4$ ). Teniendo en cuenta que las ondas que inciden desde el medio biaxial deben representar un flujo de energía hacia la interfase, seleccionamos aquellas soluciones (siempre hay dos [17]) para las cuales la componente en la dirección  $y$  del vector de Poynting ( $\vec{P}$ ) es mayor que cero. Para evaluar este vector, calculamos primero las polarizaciones de los campos asociados a cada solución  $k_l$  utilizando las expresiones de la sección 2.2.2. Una vez encontradas las soluciones de la ecuación 2.62 que satisfacen  $\vec{P} \cdot \hat{y} > 0$  ( $k_1$  y  $k_2$ ), el campo eléctrico incidente desde el medio biaxial se escribe como:

$$\vec{E}_2^i(x, y, z) = C_1 \vec{e}_1 \exp(i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}) + C_2 \vec{e}_2 \exp(i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}) , \quad (2.63)$$

$$\vec{H}_2^i(x, y, z) = C_1 \vec{h}_1 \exp(i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}) + C_2 \vec{h}_2 \exp(i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}) , \quad (2.64)$$

donde  $C_1$  y  $C_2$  son las amplitudes incidentes. Para una onda incidente del tipo 1 (2) se tiene  $C_1 \neq 0$  y  $C_2 = 0$  ( $C_1=0$  y  $C_2 \neq 0$ ).  $\vec{k}_1$  y  $\vec{k}_2$  son los vectores de onda asociados con ondas incidentes del tipo 1 y 2, respectivamente y están dados por:

$$\vec{k}_j = \alpha_j^b \hat{x} + \beta_j^b \hat{y} + \gamma_j^b \hat{z} , \quad (2.65)$$

donde

$$\alpha_j^b = k_j \text{sen } \theta_j \cos \varphi , \quad (2.66)$$

$$\beta_j^b = k_j \cos \theta_j , \quad (2.67)$$

$$\gamma_j^b = k_j \text{sen } \theta_j \text{sen } \varphi . \quad (2.68)$$

En estas expresiones, el subíndice  $j$  denota la polarización de la onda incidente ( $j=1,2$ ) y  $\theta_j$  es el ángulo entre el vector de onda  $\vec{k}_j$  y el eje  $y$ .

Debido a que se consideran redes unidimensionales y ondas planas incidentes, el problema es invariante frente a traslaciones en la dirección  $\hat{z}$ . Teniendo en cuenta la dependencia en  $z$  del campo incidente y una dependencia armónica en el tiempo, de la forma  $\exp(-i\omega_0 t)$ , cualquier componente  $\psi(x, y, z)$  del campo incidente o difractado, ya sea en el medio isótropo o en el cristal, se escribe como:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y) \exp[i(\gamma z - \omega_0 t)] , \quad (2.69)$$

donde  $\gamma$  denota la componente  $z$  del vector de onda incidente y está dada por la expresión 2.43 para una onda incidente desde el medio isótropo, por 2.51 o 2.55 para una onda incidente desde un cristal uniaxial (ordinaria o extraordinaria) o por 2.68 para una onda que incide desde un medio biaxial.

#### 2.4. Campos difractados

En esta sección encontraremos las expresiones de los campos en la región fuera de los surcos, tanto en el medio isótropo como en el cristal. Para ello, haremos uso de la propiedad de los campos difractados conocida como pseudoperiodicidad. El campo difractado (supraíndice  $d$ ) se define como el campo total menos el campo incidente (supraíndice  $i$ ) en el medio desde donde incide la onda y como el campo total en el otro medio. Luego, para una onda incidente desde el medio isótropo resulta:

$$\vec{E}_1^d(x, y, z) = \vec{E}_1(x, y, z) - \vec{E}_1^i(x, y, z) , \quad (2.70)$$

$$\vec{H}_1^d(x, y, z) = \vec{H}_1(x, y, z) - \vec{H}_1^i(x, y, z) , \quad (2.71)$$

$$\vec{E}_2^d(x, y, z) = \vec{E}_2(x, y, z) , \quad (2.72)$$

$$\vec{H}_2^d(x, y, z) = \vec{H}_2(x, y, z) , \quad (2.73)$$

y para una onda que incide desde el cristal:

$$\vec{E}_1^d(x, y, z) = \vec{E}_1(x, y, z) , \quad (2.74)$$

$$\vec{H}_1^d(x, y, z) = \vec{H}_1(x, y, z) , \quad (2.75)$$

$$\vec{E}_2^d(x, y, z) = \vec{E}_2(x, y, z) - \vec{E}_2^i(x, y, z) , \quad (2.76)$$

$$\vec{H}_2^d(x, y, z) = \vec{H}_2(x, y, z) - \vec{H}_2^i(x, y, z) . \quad (2.77)$$

Es fácil demostrar que las componentes de los vectores:

$$\vec{u}_e^+(x, y, z) = \vec{E}_1^d(x, y, z) \exp(-i\alpha x) , \quad (2.78)$$

$$\vec{u}_h^+(x, y, z) = \vec{H}_1^d(x, y, z) \exp(-i\alpha x) , \quad (2.79)$$

$$\vec{u}_e^-(x, y, z) = \vec{E}_2^d(x, y, z) \exp(-i\alpha x) , \quad (2.80)$$

$$\vec{u}_h^-(x, y, z) = \vec{H}_2^d(x, y, z) \exp(-i\alpha x) , \quad (2.81)$$

son periódicas en  $x$  con período igual al de la red [24].  $\alpha$  es la componente  $x$  del vector de onda incidente y está dada por la ecuación 2.41 para una onda incidente desde el medio isótropo, por 2.49 o 2.53 para una onda incidente desde un medio uniaxial (ordinaria o extraordinaria) o por 2.66 para una onda que incide desde un cristal biaxial. La periodicidad en  $x$  de las componentes de los vectores  $\vec{u}_e^+(x, y, z)$ ,  $\vec{u}_h^+(x, y, z)$ ,  $\vec{u}_e^-(x, y, z)$  y  $\vec{u}_h^-(x, y, z)$  permite expresar los campos difractados en la forma:

$$\vec{E}_1^d(x, y, z) = \vec{E}_1^d(x + d, y, z) \exp(-i\alpha d) , \quad (2.82)$$

$$\vec{H}_1^d(x, y, z) = \vec{H}_1^d(x + d, y, z) \exp(-i\alpha d) , \quad (2.83)$$

$$\vec{E}_2^d(x, y, z) = \vec{E}_2^d(x + d, y, z) \exp(-i\alpha d) , \quad (2.84)$$

$$\vec{H}_2^d(x, y, z) = \vec{H}_2^d(x + d, y, z) \exp(-i\alpha d) . \quad (2.85)$$

Esta propiedad de los campos difractados se conoce como pseudoperiodicidad. Debido a su periodicidad, cada componente cartesiana de los vectores  $\vec{u}_e^+(x, y, z)$ ,  $\vec{u}_h^+(x, y, z)$ ,  $\vec{u}_e^-(x, y, z)$  y  $\vec{u}_h^-(x, y, z)$  puede representarse mediante su desarrollo en serie de Fourier:

$$\vec{u}_e^+(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \vec{u}_{ne}^+(y) \exp[i(nKx + \gamma z)] , \quad (2.86)$$

$$\vec{u}_h^+(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \vec{u}_{nh}^+(y) \exp[i(nKx + \gamma z)] , \quad (2.87)$$

$$\vec{u}_e^-(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \vec{u}_{ne}^-(y) \exp[i(nKx + \gamma z)] , \quad (2.88)$$

$$\vec{u}_h^-(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \vec{u}_{nh}^-(y) \exp[i(nKx + \gamma z)] , \quad (2.89)$$

con  $K = 2\pi/d$ . Para escribir las expresiones anteriores, hemos tenido en cuenta que la dependencia en la variable  $z$  de los campos difractados está dada por el factor  $\exp(i\gamma z)$  (ecuación 2.69). Introduciendo estos desarrollos en las ecuaciones 2.78, 2.79, 2.80 y 2.81, se obtienen las siguientes expresiones para los campos difractados:

$$\vec{E}_1^d(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \vec{u}_{ne}^+(y) \exp[i(\alpha_n x + \gamma z)] , \quad (2.90)$$

$$\vec{H}_1^d(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \vec{u}_{nh}^+(y) \exp[i(\alpha_n x + \gamma z)] , \quad (2.91)$$

$$\vec{E}_2^d(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \vec{u}_{ne}^-(y) \exp[i(\alpha_n x + \gamma z)] , \quad (2.92)$$

$$\vec{H}_2^d(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \vec{u}_{nh}^-(y) \exp[i(\alpha_n x + \gamma z)] , \quad (2.93)$$

donde hemos definido:

$$\alpha_n = \alpha + nK . \quad (2.94)$$

El próximo paso es encontrar a partir de las ecuaciones de Maxwell las ecuaciones diferenciales que satisfacen los vectores  $\vec{u}_{ne}^+(y)$ ,  $\vec{u}_{nh}^+(y)$ ,  $\vec{u}_{ne}^-(y)$  y  $\vec{u}_{nh}^-(y)$ . Para ello, trabajaremos en la zona isótropa y en la zona del cristal por separado.

### 2.4.1. Medio isótopo

Combinando las ecuaciones de Maxwell, se encuentra que los campos en el medio isótopo ( $\vec{E}_1$  y  $\vec{H}_1$ ) deben satisfacer las siguientes ecuaciones de propagación:

$$\nabla^2 \vec{E}_1 + \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu_i \epsilon_i \vec{E}_1 = 0, \quad (2.95)$$

$$\nabla^2 \vec{H}_1 + \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu_i \epsilon_i \vec{H}_1 = 0. \quad (2.96)$$

Por lo tanto, los campos difractados  $\vec{E}_1^d$  y  $\vec{H}_1^d$  también deben ser solución de 2.95 y 2.96. Introduciendo en estas ecuaciones los desarrollos 2.90 y 2.91 y multiplicando por  $\exp[-i(\alpha x + \gamma z)]$  resulta:

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[ \frac{d^2 \vec{u}_{ne}^+(y)}{dy^2} + \left( \frac{\omega_0^2 \mu_i \epsilon_i}{c^2} - \alpha_n^2 - \gamma^2 \right) \vec{u}_{ne}^+(y) \right] \exp(inKx) = 0, \quad (2.97)$$

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[ \frac{d^2 \vec{u}_{nh}^+(y)}{dy^2} + \left( \frac{\omega_0^2 \mu_i \epsilon_i}{c^2} - \alpha_n^2 - \gamma^2 \right) \vec{u}_{nh}^+(y) \right] \exp(inKx) = 0. \quad (2.98)$$

Si  $y > \max[a(x)]$ , las ecuaciones 2.97 y 2.98 son válidas para cualquier valor de  $x$  y cada término de las series debe ser nulo, es decir que:

$$\frac{d^2 \vec{u}_{ne}^+(y)}{dy^2} + \left( \frac{\omega_0^2 \mu_i \epsilon_i}{c^2} - \alpha_n^2 - \gamma^2 \right) \vec{u}_{ne}^+(y) = 0, \quad (2.99)$$

$$\frac{d^2 \vec{u}_{nh}^+(y)}{dy^2} + \left( \frac{\omega_0^2 \mu_i \epsilon_i}{c^2} - \alpha_n^2 - \gamma^2 \right) \vec{u}_{nh}^+(y) = 0. \quad (2.100)$$

Las soluciones generales de estas ecuaciones diferenciales serán de la forma:

$$\vec{u}_{ne}^+(y) = \vec{K}_{1n}^+ \exp(-i\beta_n y) + \vec{K}_{2n}^+ \exp(i\beta_n y), \quad (2.101)$$

$$\vec{u}_{nh}^+(y) = \vec{K}_{3n}^+ \exp(-i\beta_n y) + \vec{K}_{4n}^+ \exp(i\beta_n y), \quad (2.102)$$

donde hemos definido

$$\beta_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{\omega_0^2}{c^2} \mu_i \epsilon_i - \alpha_n^2 - \gamma^2} & \text{si } \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu_i \epsilon_i \geq \alpha_n^2 + \gamma^2, \\ i \sqrt{\alpha_n^2 + \gamma^2 - \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu_i \epsilon_i} & \text{si } \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu_i \epsilon_i < \alpha_n^2 + \gamma^2. \end{cases} \quad (2.103)$$

Sin embargo, al imponer la condición de radiación:

$$\vec{E}_1^d(x, y, z) \xrightarrow{y \rightarrow +\infty} \text{ondas salientes}, \quad (2.104)$$

$$\vec{H}_1^d(x, y, z) \xrightarrow{y \rightarrow +\infty} \text{ondas salientes}, \quad (2.105)$$

deben descartarse los términos con  $\exp(-i\beta_n y)$ , ya que representan ondas entrantes cuando  $\omega_0^2 \mu_i \epsilon_i / c^2 > \alpha_n^2 + \gamma^2$  y no están acotadas para  $y \rightarrow +\infty$  cuando  $\omega_0^2 \mu_i \epsilon_i / c^2 < \alpha_n^2 + \gamma^2$ . Por lo tanto, para que se verifique la condición de radiación, los vectores  $\vec{K}_{1n}^+$  y  $\vec{K}_{3n}^+$  deben ser nulos. Se obtienen entonces los siguientes desarrollos para los campos difractados en el medio isótropo, válidos para  $y > \max[a(x)]$ :

$$\vec{E}_1^d(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \vec{K}_{2n}^+ \exp[i(\alpha_n x + \beta_n y + \gamma z)], \quad (2.106)$$

$$\vec{H}_1^d(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \vec{K}_{4n}^+ \exp[i(\alpha_n x + \beta_n y + \gamma z)], \quad (2.107)$$

donde los vectores  $\vec{K}_{2n}^+$  y  $\vec{K}_{4n}^+$  tienen componentes complejas desconocidas. Estas componentes no son independientes ya que los campos  $\vec{E}_1^d(x, y)$  y  $\vec{H}_1^d(x, y)$  están vinculados a través de las ecuaciones de Maxwell. Si se denota  $R_n$  ( $S_n$ ) a la componente en la dirección  $z$  del vector  $\vec{K}_{2n}^+$  ( $\vec{K}_{4n}^+$ ), los campos difractados en el medio isótropo se expresan como:

$$\vec{E}_1^d(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\eta} \left[ \left( -\gamma \alpha_n R_n - \frac{\omega_0}{c} \mu_i \beta_n S_n \right) \hat{x} + \left( \frac{\omega_0}{c} \mu_i \alpha_n S_n - \gamma \beta_n R_n \right) \hat{y} + R_n \hat{z} \right] \exp(i \vec{k}_{in} \cdot \vec{r}), \quad (2.108)$$

$$\vec{H}_1^d(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\eta} \left[ \left( -\gamma \alpha_n S_n + \frac{\omega_0}{c} \epsilon_i \beta_n R_n \right) \hat{x} + \left( -\frac{\omega_0}{c} \epsilon_i \alpha_n R_n - \gamma \beta_n S_n \right) \hat{y} + S_n \hat{z} \right] \exp(i \vec{k}_{in} \cdot \vec{r}), \quad (2.109)$$

donde

$$\vec{k}_{in} = \alpha_n \hat{x} + \beta_n \hat{y} + \gamma \hat{z}, \quad (2.110)$$

$$\eta = \frac{\omega_0^2 \mu_i \epsilon_i}{c^2} - \gamma^2. \quad (2.111)$$

Hemos demostrado que en la zona  $y > \max[a(x)]$ , el campo difractado está representado por los denominados "desarrollos de Rayleigh", es decir por una serie de ondas planas salientes que tienen la misma pseudo-periodicidad. Estas ondas planas pueden dividirse en dos categorías: si  $\beta_n$  (cc. 2.103) es imaginario, el término  $n$ -ésimo de los desarrollos 2.108 y 2.109 representa una onda evanescente; en cambio, si  $\beta_n$  es real, dicho término corresponde a una onda plana propagante en la dirección del vector de onda  $\vec{k}_n$ . En este caso el término  $n$ -ésimo de los desarrollos está asociado al orden  $n$  difractado en el medio isótropo.

#### 2.4.2. Medio anisótropo

En la zona anisótropa, combinando las ecuaciones de Maxwell se encuentra que los campos ( $\vec{E}_2$  y  $\vec{H}_2$ ) satisfacen las ecuaciones:

$$\nabla^2 \vec{E}_2 - \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{E}_2) + \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu \vec{\epsilon} \cdot \vec{E}_2 = 0, \quad (2.112)$$

$$\vec{\nabla} \times [\vec{\epsilon}^{-1} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{H}_2)] - \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu \vec{H}_2 = 0, \quad (2.113)$$

donde  $\vec{\epsilon}^{-1}$  denota la inversa del tensor  $\vec{\epsilon}$ . En particular, los campos difractados  $\vec{E}_2^d$  y  $\vec{H}_2^d$  también verifican las ecuaciones 2.112 y 2.113. Por simplicidad, en esta sección trabajaremos con la ecuación 2.112. Introduciendo el desarrollo 2.92 en esta ecuación y proyectando, se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales, válido cuando  $y < \min[a(x)]$ , que en forma matricial se escribe como:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \frac{d^2 \vec{u}_{ne}^-}{dy^2} + \begin{bmatrix} 0 & -i\alpha_n & 0 \\ -i\alpha_n & 0 & -i\gamma \\ 0 & -i\gamma & 0 \end{bmatrix} \frac{d\vec{u}_{ne}^-}{dy} + \begin{bmatrix} \epsilon'_{xx} - \gamma^2 & \epsilon'_{xy} & \epsilon'_{xz} + \alpha_n \gamma \\ \epsilon'_{yx} & \epsilon'_{yy} - (\alpha_n^2 + \gamma^2) & \epsilon'_{yz} \\ \epsilon'_{zx} + \alpha_n \gamma & \epsilon'_{zy} & \epsilon'_{zz} - \alpha_n^2 \end{bmatrix} \vec{u}_{ne}^- = 0, \quad (2.114)$$

donde se ha denotado  $\epsilon'_{ij} = k_0^2 \mu \epsilon_{ij}$ . La expresión 2.114 representa un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas de segundo orden con coeficientes *constantes*. Luego, si  $\vec{u}_{ne}^-$  es una solución del sistema, se tiene:

$$\vec{u}_{ne}^-(y) = \vec{V}_n \exp(isy), \quad (2.115)$$

donde  $\vec{V}_n$  es un vector columna con elementos constantes  $V_{1n}$ ,  $V_{2n}$  y  $V_{3n}$ . Reemplazando la expresión 2.115 en la ecuación matricial 2.114, se obtiene:

$$\begin{bmatrix} \epsilon'_{xx} - \gamma^2 - s^2 & \epsilon'_{xy} + \alpha_n s & \epsilon'_{xz} + \alpha_n \gamma \\ \epsilon'_{yx} + \alpha_n s & \epsilon'_{yy} - (\alpha_n^2 + \gamma^2) & \epsilon'_{yz} + \gamma s \\ \epsilon'_{zx} + \alpha_n \gamma & \epsilon'_{zy} + \gamma s & \epsilon'_{zz} - \alpha_n^2 - s^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_{1n} \\ V_{2n} \\ V_{3n} \end{bmatrix} = 0. \quad (2.116)$$

Este sistema de ecuaciones tendrá solución no trivial si el determinante de la matriz es nulo. Para encontrar dicha solución deben considerarse por separado el caso de cristal uniaxial y biaxial.

### A) Cristal uniaxial

Pidiendo que el determinante de la matriz en la ecuación 2.116 sea nulo y expresando los elementos del tensor dieléctrico en términos de sus autovalores y del eje óptico, se obtiene una ecuación para  $s$  cuyas soluciones son:

$$s_{n1} = \pm \sqrt{\frac{\omega_0^2}{c^2} \epsilon_{\perp} \mu - \alpha_n^2 - \gamma^2}, \quad (2.117)$$

$$s_{n2} = \frac{-(\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) c_{0y} (\alpha_n c_{0x} + \gamma c_{0z}) \pm (\Phi_n)^{1/2}}{\epsilon_{\perp} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) c_{0y}^2}, \quad (2.118)$$

donde

$$\begin{aligned} \Phi_n = & c_{0y}^2 (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp})^2 (\alpha_n c_{0x} + \gamma c_{0z})^2 - [\epsilon_{\perp} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) c_{0y}^2][(\alpha_n^2 + \gamma^2) \epsilon_{\perp} \\ & + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) (\alpha_n^2 c_{0x}^2 + \gamma^2 c_{0z}^2) + 2 \alpha_n \gamma (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) c_{0x} c_{0z} - \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu \epsilon_{\perp} \epsilon_{\parallel}]. \end{aligned} \quad (2.119)$$

La solución general del sistema de ecuaciones será entonces una combinación lineal de  $\exp(is_{n1a}y)$ ,  $\exp(is_{n1b}y)$ ,  $\exp(is_{n2a}y)$  y  $\exp(is_{n2b}y)$ , donde el subíndice  $a$  ( $b$ ) corresponde a elegir el signo  $+$  ( $-$ ) en las expresiones 2.117 y 2.118. Sin embargo, debemos pedir que la onda difractada en el cristal represente un flujo de energía que se propaga hacia  $y \rightarrow -\infty$ ; lo que implica que la componente en la dirección  $y$  del vector de Poynting debe ser menor o igual a cero. Imponiendo esta condición, los términos  $\exp(is_{n1a}y)$  y  $\exp(is_{n2a}y)$  quedan excluidos, obteniéndose la siguiente expresión para el



campo eléctrico difractado en el medio uniaxial:

$$\vec{E}_2^d = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[ C_{on} \vec{e}_{on} \exp(i\vec{k}_{on} \cdot \vec{r}) + C_{en} \vec{e}_{en} \exp(i\vec{k}_{en} \cdot \vec{r}) \right], \quad (2.120)$$

donde  $C_{on}$  y  $C_{en}$  son amplitudes complejas desconocidas y  $\vec{k}_{on}$  y  $\vec{k}_{en}$  son los vectores de onda asociados, respectivamente, con polarizaciones ordinarias y extraordinarias:

$$\vec{k}_{on} = \alpha_n \hat{x} + \beta_{on} \hat{y} + \gamma \hat{z}, \quad (2.121)$$

$$\beta_{on} = \begin{cases} -\sqrt{\frac{\omega_0^2}{c^2} \mu \epsilon_{\perp} - \alpha_n^2 - \gamma^2} & \text{si } \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu \epsilon_{\perp} \geq \alpha_n^2 + \gamma^2 \\ -i \sqrt{\alpha_n^2 + \gamma^2 - \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu \epsilon_{\perp}} & \text{si } \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu \epsilon_{\perp} < \alpha_n^2 + \gamma^2 \end{cases} \quad (2.122)$$

$$\vec{k}_{en} = \alpha_n \hat{x} + \beta_{en} \hat{y} + \gamma \hat{z}, \quad (2.123)$$

$$\beta_{en} = \frac{-(\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp})c_{0y} (\alpha_n c_{0x} + \gamma c_{0z}) - (\Phi_n)^{1/2}}{\epsilon_{\perp} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) c_{0y}^2}. \quad (2.124)$$

La raíz cuadrada en la expresión 2.124 se selecciona de forma tal que su parte imaginaria sea mayor que cero si  $\Phi_n < 0$ .

Podemos observar entonces que, al igual que lo que sucede en el medio isótropo, el campo eléctrico difractado se expresa como suma de términos que representan ondas planas propagantes o evanescentes del tipo ordinario y extraordinario. El término  $n$ -ésimo del desarrollo 2.120 corresponderá a una onda propagante ordinaria o extraordinaria si representa un flujo de energía hacia  $y < 0$ , es decir si la componente  $y$  del vector de Poynting asociado al mismo es menor que cero. En este caso dicho término representa al orden  $n$  difractado del tipo ordinario o extraordinario.

$\vec{e}_{on}$  y  $\vec{e}_{en}$  son los autovectores asociados a los autovalores  $\beta_{on}$  y  $\beta_{en}$ , respectivamente. Estos vectores definen la polarización del campo eléctrico asociado con el orden  $n$  difractado ordinario y extraordinario y se expresan como:

$$\vec{e}_{on} = \vec{k}_{on} \times \hat{c}_o, \quad (2.125)$$

$$\vec{e}_{en} = \frac{\omega_0^2}{c^2} \epsilon_{\perp} \mu \hat{c}_o - \vec{k}_{en} (\vec{k}_{en} \cdot \hat{c}_o). \quad (2.126)$$

Como se desprende de las ecuaciones 2.125 y 2.126, el campo eléctrico asociado con el orden  $n$  ordinario es perpendicular al plano determinado por la dirección de propagación ( $\vec{k}_{on}$ ) y el eje óptico ( $\hat{c}_0$ ). Contrariamente, el campo eléctrico asociado con el orden  $n$  extraordinario está contenido en el plano formado por la dirección de propagación ( $\vec{k}_{en}$ ) y el eje óptico ( $\hat{c}_0$ ).

Utilizando la expresión del campo eléctrico difractado 2.120 y teniendo en cuenta que:

$$\vec{H}_{2o} = \frac{c}{\omega_0 \mu} [\vec{k}_{on} \times \vec{E}_{2o}] , \quad (2.127)$$

$$\vec{H}_{2e} = \frac{c}{\omega_0 \mu} [\vec{k}_{en} \times \vec{E}_{2e}] , \quad (2.128)$$

donde  $\vec{H}_{2o}$  y  $\vec{H}_{2e}$  son el campo magnético asociado a las ondas difractadas ordinarias y extraordinarias, se obtiene:

$$\vec{H}_2^d = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} [C_{on} \vec{h}_{on} \exp(i\vec{k}_{on} \cdot \vec{r}) + C_{en} \vec{h}_{en} \exp(i\vec{k}_{en} \cdot \vec{r})] , \quad (2.129)$$

$$\vec{h}_{on} = \frac{c}{\omega_0 \mu} [\vec{k}_{on} \times \vec{e}_{on}] , \quad (2.130)$$

$$\vec{h}_{en} = \frac{\omega_0}{c} \epsilon_{\perp} (\vec{k}_{en} \times \hat{c}_o) . \quad (2.131)$$

## B) Cristal biaxial

Cuando el cristal es biaxial, la ecuación que se obtiene imponiendo que el determinante de la matriz en la ecuación 2.116 sea nulo no tiene soluciones analíticas. En este caso, las cuatro soluciones de la ecuación se obtienen en forma numérica y luego se seleccionan aquellas que satisfacen la condición de radiación ( $\beta_{1n}$  y  $\beta_{2n}$ ). Los campos difractados en el medio biaxial resultan:

$$\vec{E}_2^d = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_{1n} \vec{e}_{1n} \exp(i\vec{k}_{1n} \cdot \vec{r}) + C_{2n} \vec{e}_{2n} \exp(i\vec{k}_{2n} \cdot \vec{r}) , \quad (2.132)$$

donde

$$\vec{k}_{1n} = \alpha_n \hat{x} + \beta_{1n} \hat{y} + \gamma \hat{z} , \quad (2.133)$$

$$\vec{k}_{2n} = \alpha_n \hat{x} + \beta_{2n} \hat{y} + \gamma \hat{z} . \quad (2.134)$$

En la ecuación 2.132,  $C_{1n}$  y  $C_{2n}$  son amplitudes complejas desconocidas.  $\vec{e}_{1n}$  y  $\vec{e}_{2n}$  son los autovectores asociados a los autovalores  $\beta_{1n}$  y  $\beta_{2n}$  y especifican la polarización del campo eléctrico difractado asociado con el orden  $n$  del tipo 1 o 2. Análogamente, el campo magnético se escribe

$$\vec{H}_2^d = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_{1n} \vec{h}_{1n} \exp(i\vec{k}_{1n} \cdot \vec{r}) + C_{2n} \vec{h}_{2n} \exp(i\vec{k}_{2n} \cdot \vec{r}) . \quad (2.135)$$

Hemos visto entonces que en la zona  $y \geq \max[a(x)]$  e  $y \leq \min[a(x)]$  es posible resolver analíticamente las ecuaciones de propagación en ambos medios, obteniéndose que los campos difractados se representan mediante los desarrollos de Rayleigh 2.108 y 2.109 en  $y > \max[a(x)]$  y por 2.120 y 2.129 (cristal uniaxial) o 2.132 y 2.135 (cristal biaxial) en  $y < \min[a(x)]$ . En la zona entre los surcos, las ecuaciones diferenciales deben ser resueltas numéricamente. En los capítulos 3 y 4 se describirán los formalismos desarrollados en esta tesis para resolver las ecuaciones de propagación en dicha zona.

## 2.5. Potencia reflejada y transmitida

Se ha demostrado que los campos difractados en la región fuera de los surcos pueden ser escritos como desarrollos en ondas planas de órdenes discretos. En esta sección se encontrarán las eficiencias asociadas a cada uno de estos órdenes difractados. Estas se definen como la fracción de la potencia incidente que se dispersa en cada orden reflejado y transmitido.

### 2.5.1. Interfase isótropo-cristal

Primero se estudia el caso en el cual la red es iluminada desde un medio isótropo sin pérdidas por una onda plana con polarización  $s$  o  $p$ . Se define la eficiencia  $r_l^n$  ( $l = s, p$ ) del orden  $n$  reflejado cuando la incidencia es  $s$  ( $l = s$ ) o  $p$  ( $l = p$ ) como:

$$r_l^n = \frac{P_l^n}{P_l^i} , \quad (2.136)$$

donde  $p_i^n$  es la potencia asociada al orden reflejado  $n$  y se escribe:

$$p_i^n = \frac{c}{8\pi} \frac{k_0 \mu_i \epsilon_i}{\eta} \operatorname{Re}(\beta_n) \left( \frac{|R_n|^2}{\mu_i} + \frac{|S_n|^2}{\epsilon_i} \right). \quad (2.137)$$

$P_i^i$  representa la potencia incidente desde el medio isótropo y está dada por:

$$P_s^i = \frac{c}{8\pi} \left( \frac{\epsilon_i}{\mu_i} \right)^{1/2} \cos \theta_0 |A_s|^2, \quad (2.138)$$

para una onda incidente con polarización  $s$  y por:

$$P_p^i = \frac{c}{8\pi} \left( \frac{\epsilon_i}{\mu_i} \right)^{1/2} \cos \theta_0 |A_p|^2, \quad (2.139)$$

cuando la polarización incidente es  $p$ .

Como el orden cero reflejado está contenido en el plano de incidencia, la potencia reflejada en el orden cero se puede escribir como una suma de las contribuciones asociadas a las energías difractadas con polarización  $s$  y  $p$ :

$$p_i^0 = p_{is}^0 + p_{ip}^0, \quad (2.140)$$

$$p_{is}^0 = \frac{c}{8\pi} \left( \frac{\epsilon_i}{\mu_i} \right)^{1/2} \cos \theta_0 |B_s|^2, \quad (2.141)$$

$$p_{ip}^0 = \frac{c}{8\pi} \left( \frac{\epsilon_i}{\mu_i} \right)^{1/2} \cos \theta_0 |B_p|^2, \quad (2.142)$$

donde

$$B_s = \frac{\frac{\omega_0}{c} \left( \frac{\omega_0}{c} \mu_i \epsilon_i \cos \varphi R_0 + \mu_i \beta_0 \sin \varphi S_0 \right)}{\eta_0}, \quad (2.143)$$

$$B_p = \frac{\frac{\omega_0}{c} (\mu_i \epsilon_i)^{1/2} \left( -\beta_0 \sin \varphi R_0 + \frac{\omega_0}{c} \mu_i \cos \varphi S_0 \right)}{\eta_0}. \quad (2.144)$$

Llamamos  $r_{lj}^0$  ( $l=s$  o  $p$ ;  $j=s$  o  $p$ ) a la eficiencia de la componente  $s$  ( $j=s$ ) o  $p$  ( $j=p$ ) del orden cero reflejado, cuando la polarización incidente es  $s$  ( $l=s$ ) o  $p$  ( $l=p$ ). Esta se define como:

$$r_{lj}^0 = \frac{P_{lj}^0}{P_l^i}. \quad (2.145)$$

Esta expresión será de utilidad para estudiar la conversión de polarizaciones que se produce en las interfaces anisótropas.

Para definir la eficiencia de los órdenes transmitidos al medio anisótropo, distinguimos dos casos:

### A) Cristal uniaxial

En este caso, denotamos  $t_{lm}^n$  ( $l = s, p; m = o, e$ ) a la eficiencia del orden  $n$  transmitido al cristal con polarización ordinaria ( $m = o$ ) o extraordinaria ( $m = e$ ), cuando la red es iluminada por una onda con polarización  $s$  ( $l=s$ ) o  $p$  ( $l=p$ ). Las eficiencias están dadas por las siguientes expresiones:

$$t_{lo}^n = \frac{p_o^n}{P_l^i}, \quad (2.146)$$

$$t_{le}^n = \frac{p_e^n}{P_l^i}, \quad (2.147)$$

donde  $p_o^n$  es la potencia asociada al orden  $n$  transmitido ordinario y está dada por:

$$p_o^n = \begin{cases} \frac{c}{8\pi} |C_{on}|^2 \left[ -(\vec{e}_{on} \cdot \hat{z})(\vec{h}_{on} \cdot \hat{x}) + (\vec{e}_{on} \cdot \hat{x})(\vec{h}_{on} \cdot \hat{z}) \right], & \text{si } \beta_{on} \text{ es real} \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (2.148)$$

$p_e^n$  se calcula utilizando una expresión similar a 2.148, intercambiando el subíndice  $o$  por  $e$ .

### B) Cristal biaxial

Si el cristal es biaxial, deben distinguirse las eficiencias de los órdenes transmitidos del tipo 1 y del tipo 2. Denotamos  $t_{lj}^n$  a la eficiencia del orden  $n$  transmitido del tipo 1 ( $j=1$ ) o del tipo 2 ( $j=2$ ) cuando la incidencia es  $s$  ( $l = s$ ) o  $p$  ( $l=p$ ), luego:

$$t_{l1}^n = \frac{p_1^n}{P_l^i}, \quad (2.149)$$

$$t_{l2}^n = \frac{p_2^n}{P_l^i}, \quad (2.150)$$

donde

$$p_1^n = \frac{c}{8\pi} |C_{1n}|^2 \left[ -(\vec{e}_{1n} \cdot \hat{z})(\vec{h}_{1n} \cdot \hat{x}) + (\vec{e}_{1n} \cdot \hat{x})(\vec{h}_{1n} \cdot \hat{z}) \right], \quad (2.151)$$

y con una expresión análoga para  $p_2^n$  que se obtiene intercambiando el subíndice 1 por 2.

Ahora estudiamos el caso de una onda que incide desde el cristal. Nuevamente distinguimos dos situaciones:

### A) Cristal uniaxial

Llamamos  $r_{lm}^n$  ( $l, m = o, e$ ) a la eficiencia del orden  $n$  reflejado ordinario ( $m = o$ ) o extraordinario ( $m = e$ ) cuando la incidencia es ordinaria ( $l = o$ ) o extraordinaria ( $l = e$ ). En este caso,  $t_l^n$  ( $l = o, e$ ) denota la eficiencia transmitida en el orden  $n$  para incidencia ordinaria ( $l = o$ ) o extraordinaria ( $l = e$ ). Las expresiones de las eficiencias son:

$$r_{lo}^n = \frac{p_o^n}{P_l^u}, \quad (2.152)$$

$$r_{le}^n = \frac{p_e^n}{P_l^u}, \quad (2.153)$$

$$t_l^n = \frac{p_i^n}{P_l^u}, \quad (2.154)$$

donde  $P_l^u$  representa la potencia incidente desde el medio uniaxial y está dada por:

$$P_l^u = \frac{c}{8\pi} |C_l|^2 \left[ (\vec{e}_l \cdot \hat{z})(\vec{h}_l \cdot \hat{x}) - (\vec{e}_l \cdot \hat{x})(\vec{h}_l \cdot \hat{z}) \right], \quad (2.155)$$

con  $l = o$  para incidencia ordinaria y  $l = e$  para incidencia extraordinaria.

### B) Cristal biaxial

En este caso,  $r_{lk}^n$  denota la eficiencia del orden  $n$  reflejado del tipo 1 ( $k=1$ ) o 2 ( $k=2$ ) cuando la onda incidente es del tipo 1 ( $l=1$ ) o del tipo 2 ( $l=2$ ) y se escribe como:

$$r_{l1}^n = \frac{p_1^n}{P_l^b}, \quad (2.156)$$

$$r_{l2}^n = \frac{p_2^n}{P_l^b}, \quad (2.157)$$

donde  $P_l^b$  denota la potencia incidente desde el medio biaxial y está dada por:

$$P_l^b = \frac{c}{8\pi} |C_l|^2 \left[ (\vec{e}_l \cdot \hat{z})(\vec{h}_l \cdot \hat{x}) - (\vec{e}_l \cdot \hat{x})(\vec{h}_l \cdot \hat{z}) \right], \quad (2.158)$$

con  $l = 1$  para incidencia del tipo 1 y  $l = 2$  para incidencia del tipo 2. En cuanto a los órdenes transmitidos al medio isótropo, llamamos  $t_l^n$  a la eficiencia del orden  $n$  difractado cuando la onda incidente es del tipo 1 ( $l=1$ ) o 2 ( $l=2$ ):

$$t_l^n = \frac{p_i^n}{P_l^b}, \quad (2.159)$$

### 2.5.2. interfase cristal-metal

Si la red es iluminada desde el cristal (uniaxial o biaxial) pero el medio isótropo es un metal, se define las eficiencias reflejadas como antes pero en lugar de eficiencias transmitidas se calcula la potencia transmitida a través de la red utilizando la siguiente expresión:

$$p_{tr} = \frac{1}{d} \int_0^d \frac{c}{8\pi} \text{Re}[\vec{E}(x, a(x), z) \times \vec{H}^*(x, a(x), z)] \cdot \hat{n} \sqrt{1 + a'(x)^2} dx, \quad (2.160)$$

donde el asterisco denota al complejo conjugado.

Como hemos explicado en este capítulo, para resolver el problema de la difracción de una onda electromagnética en la red anisótropa, debemos encontrar las soluciones de las ecuaciones de propagación 2.95, 2.96, 2.112 y 2.113 que se derivan de las ecuaciones de Maxwell e imponer condiciones de contorno en la superficie de separación entre ambos medios. Hemos demostrado que estas ecuaciones pueden integrarse analíticamente en la región fuera de los surcos dando lugar a los desarrollos de Rayleigh para los campos difractados 2.108 y 2.109 en  $y > \max[a(x)]$  y 2.120 y 2.129 (2.132 y 2.135) en  $y < \min[a(x)]$  para un cristal uniaxial (biaxial). En la región entre los surcos, dichas ecuaciones deben integrarse numéricamente teniendo en cuenta las condiciones de contorno que satisfacen los campos en la interfase. Existen distintos métodos que han sido empleados para resolver redes isótropas y que podrían generalizarse para tratar este problema. Todos ellos utilizan los desarrollos de Rayleigh en las regiones fuera de los surcos, pero difieren en el tratamiento del problema en la

región entre los mismos. Como hemos mencionado anteriormente, hemos elegido en este trabajo utilizar métodos basados en el empleo de transformaciones de coordenadas que convierten la superficie periódica en un plano. Aplicaremos distintos tipos de transformaciones que permitirán simplificar el tratamiento matemático de las condiciones de contorno y hallar la solución del problema.



### 3. Método de transformaciones conformes y no conformes

En este capítulo se presenta un formalismo diferencial riguroso para resolver el problema de la difracción de una onda electromagnética en una red uniaxial en montaje clásico. Dicho formalismo se basa en el empleo de una transformación conforme de coordenadas en la región ocupada por el medio isótropo y de una no conforme en la región ocupada por el cristal. Como ejemplificación de la teoría desarrollada, se compara con los resultados obtenidos empleando el método basado en la hipótesis de Rayleigh [13] y se estudian interfases cicloidales entre un medio uniaxial y uno isótropo (vacío, dieléctrico y metal). También se ilustra el método de transformaciones conformes aplicado a interfases cristal- conductor perfecto en el caso de redes de perfil triangular.

#### 3.1. Ecuaciones de propagación

A partir de las ecuaciones de Maxwell se demuestra que las componentes cartesianas  $x$  e  $y$  (transversales) de los campos en el medio isótropo (subíndice  $+$ ) se pueden expresar en términos de las componentes  $z$  (longitudinales), que denotaremos  $f_+(x, y)$  y  $g_+(x, y)$ . Estas funciones son soluciones de las ecuaciones de Helmholtz:

$$\nabla^2 f_+ + \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu_i \epsilon_i f_+ = 0, \quad (3.1)$$

$$\nabla^2 g_+ + \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu_i \epsilon_i g_+ = 0, \quad (3.2)$$

que se obtienen proyectando las ecuaciones 2.95 y 2.96 en la dirección  $z$ .

Análogamente, se demuestra que las componentes transversales de los campos en el medio anisótropo (subíndice  $-$ ) también pueden expresarse en términos de las componentes longitudinales  $f_-(x, y)$  y  $g_-(x, y)$  [24]. Proyectando las ecuaciones 2.112 y 2.113 en la dirección  $z$  y utilizando las expresiones

antes mencionadas, se obtienen las siguientes ecuaciones de propagación en el medio uniaxial:

$$\nabla^2 f_- + \frac{\omega_0^2 \mu \epsilon_{\perp} \epsilon_{\parallel}}{c^2 \Gamma} f_- + \frac{i \omega_0 \mu \Delta}{c} \left( c_{0x} \frac{\partial g_-}{\partial y} - c_{0y} \frac{\partial g_-}{\partial x} \right) = 0, \quad (3.3)$$

$$A \frac{\partial^2 g_-}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 g_-}{\partial y^2} + C \frac{\partial^2 g_-}{\partial x \partial y} + \frac{i \omega_0 \Delta}{c} \left( c_{0x} \frac{\partial f_-}{\partial y} - c_{0y} \frac{\partial f_-}{\partial x} \right) + \frac{\omega_0^2 \mu}{c^2} g_- = 0, \quad (3.4)$$

donde

$$\begin{aligned} \Gamma &= \epsilon_{\perp} c_{0z}^2 + \epsilon_{\parallel} (1 - c_{0z}^2), \\ \Delta &= \frac{(\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) c_{0z}}{\Gamma}, \\ A &= \frac{(c_{0y}^2 + c_{0z}^2) + \epsilon_{\parallel} / \epsilon_{\perp} (1 - c_{0z}^2 - c_{0y}^2)}{\Gamma}, \\ B &= \frac{(c_{0x}^2 + c_{0z}^2) + \epsilon_{\parallel} / \epsilon_{\perp} (1 - c_{0z}^2 - c_{0x}^2)}{\Gamma}, \\ C &= \frac{2(\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) c_{0x} c_{0y}}{\epsilon_{\perp} \Gamma}. \end{aligned}$$

Contrariamente a lo que sucede en el medio isótropo, vemos que las ecuaciones de propagación 3.3 y 3.4 están acopladas, cada una de ellas tiene dos incógnitas: las componentes en la dirección  $\hat{z}$  del campo eléctrico y del magnético ( $f_-$  y  $g_-$ ). Es decir entonces que, debido a la presencia del medio anisótropo, las ondas difractadas no tendrán, en general, la misma polarización que la onda incidente.

Es fácil verificar que en el caso de tener  $\epsilon_{\perp} = \epsilon_{\parallel}$  (medio isótropo) de las ecuaciones 3.3 y 3.4 se recuperan las ecuaciones de Helmholtz 3.1 y 3.2.

### 3.2. Condiciones de contorno

Hasta ahora hemos encontrado las ecuaciones de propagación que deben satisfacer la componente longitudinal del campo eléctrico y del magnético en la zona isótropa (3.1 y 3.2) y en la zona del cristal (3.3 y 3.4). Estas ecuaciones serán integradas numéricamente en la región entre los surcos

( $\min[a(x)] \leq y \leq \max[a(x)]$ ) teniendo en cuenta las siguientes condiciones de contorno impuestas por las ecuaciones de Maxwell en  $y = a(x)$ :

$$f_+(x, a(x)) = f_-(x, a(x)) , \quad (3.5)$$

$$g_+(x, a(x)) = g_-(x, a(x)) , \quad (3.6)$$

$$\frac{1}{\mu_i} \frac{\partial f_+(x, a(x))}{\partial \hat{n}} = \frac{1}{\mu} \frac{\partial f_-(x, a(x))}{\partial \hat{n}} , \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\epsilon_i} \frac{\partial g_+(x, a(x))}{\partial \hat{n}} = & (n_y I + n_x J) \frac{\partial g_-(x, a(x))}{\partial x} + (n_x I + n_y K) \frac{\partial g_-(x, a(x))}{\partial y} \\ & + \frac{i\omega_0}{c} \Delta(n_y c_{0x} - n_x c_{0y}) f_-(x, a(x)) , \end{aligned} \quad (3.8)$$

donde

$$\begin{aligned} I &= \frac{C}{2} , \\ J &= \frac{\epsilon_{\perp} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp})c_{0x}^2}{\epsilon_{\perp}\Gamma} , \\ K &= \frac{\epsilon_{\perp} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp})c_{0y}^2}{\epsilon_{\perp}\Gamma} , \end{aligned}$$

y  $\hat{n} = (n_x, n_y)$  es un versor normal a la superficie de la red que apunta hacia el medio isótropo. Estas son las condiciones de contorno que se utilizarán para resolver el problema. Las ecuaciones 3.5 y 3.6 implican la continuidad de las componentes en la dirección  $\hat{z}$  de los campos eléctricos ( $f_-$  y  $f_+$ ) y de los campos magnéticos ( $g_-$  y  $g_+$ ). La ecuación 3.8 involucra a las derivadas con respecto al versor normal a la superficie ( $\hat{n}$ ) y mezcla las componentes antes mencionadas. Como control, puede observarse que las condiciones de contorno se reducen a las de medio isótropo cuando  $\epsilon_{\perp} = \epsilon_{\parallel}$ .

El problema consiste entonces en resolver las ecuaciones diferenciales 3.1, 3.2, 3.3 y 3.4 con las condiciones de contorno 3.5, 3.6, 3.7 y 3.8. Es decir que la forma de plantear el problema es similar

a la que se utiliza en [5] en el caso de redes isótropas. Sin embargo, las ecuaciones diferenciales y las condiciones de contorno que se obtienen para la red anisótropa muestran una diferencia fundamental con el caso isótropo, ya que acoplan las incógnitas del problema. Por este motivo el problema no es separable en dos polarizaciones independientes, como sucede en el caso isótropo y las ondas reflejadas y transmitidas no tendrán, en general, la misma polarización que la onda incidente.

En el caso en el que el medio isótropo es un conductor perfecto, las condiciones de contorno que se derivan de las ecuaciones de Maxwell son:

$$0 = f_-(x, a(x)) , \quad (3.9)$$

$$0 = (n_y I + n_x J) \frac{\partial g_-(x, a(x))}{\partial x} + (n_x I + n_y K) \frac{\partial g_-(x, a(x))}{\partial y} + \frac{i\omega_0}{c} \Delta(n_y c_{0x} - n_x c_{0y}) f_-(x, a(x)) . \quad (3.10)$$

### 3.3. Tratamiento para la zona isótropa usando el método de transformaciones conformes

Para resolver nuestro problema, introducimos un procedimiento ya empleado en el caso de redes isótropas en montaje clásico [5, 21, 22]. La idea es simplificar el tratamiento matemático de las condiciones de contorno utilizando transformaciones de coordenadas. Utilizamos una transformación conforme de coordenadas en la región  $y \geq a(x)$  mediante la cual el plano original:

$$u = x + iy , \quad (3.11)$$

se transforma en:

$$U = X + iY , \quad (3.12)$$

de forma tal que la zona  $y \geq a(x)$  en el espacio original corresponde al semiplano  $Y \geq 0$  en el espacio transformado (figura 3.1).

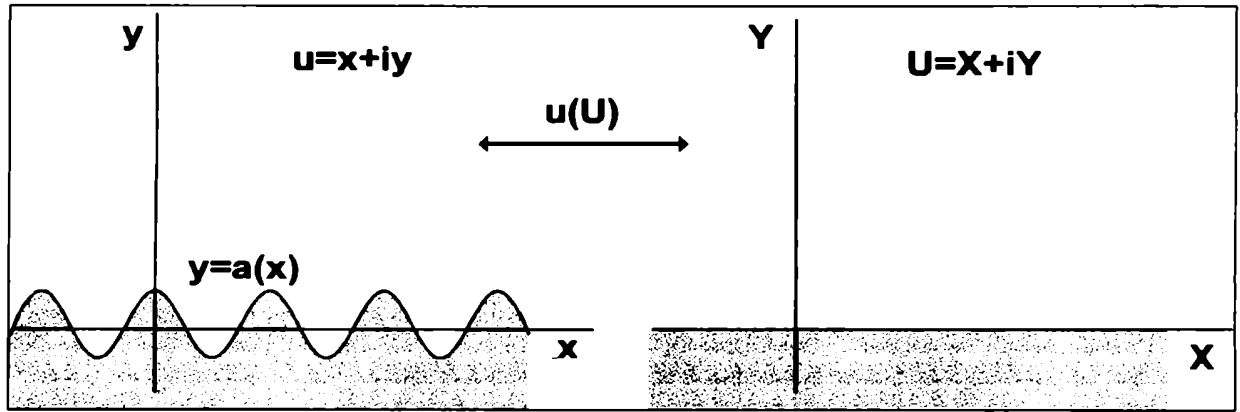


Figura 3.1: Transformación de coordenadas utilizada.

Se buscan transformaciones de la forma:

$$u = U + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \exp\left(in\frac{2\pi}{d}U\right) \quad , \quad y \geq a(x) \quad , \quad (3.13)$$

donde  $b_n$  son constantes complejas a determinar en cada perfil particular imponiendo que la imagen de  $u = x + ia(x)$  sea  $U = X$ . La transformación de coordenadas 3.13 conserva la pseudoperiodicidad de los campos y la condición de radiación, pero transforma las ecuaciones de propagación 3.1 y 3.2.

Definiendo los campos transformados como:

$$F_+(X, Y) = f_+(x(X, Y), y(X, Y)) \quad , \quad (3.14)$$

$$G_+(X, Y) = g_+(x(X, Y), y(X, Y)) \quad , \quad (3.15)$$

y transformando las ecuaciones de propagación 3.1 y 3.2 de acuerdo con 3.13, obtenemos:

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\omega_0^2 \mu_i \epsilon_i}{c^2} \left| \frac{du}{dU} \right|^2 \right) \begin{bmatrix} F_+(X, Y) \\ G_+(X, Y) \end{bmatrix} = 0 \quad , \quad (3.16)$$

donde  $du/dU$  es el jacobiano de la transformación.

De la ecuación 3.13 vemos que cuando  $Y \rightarrow +\infty$ ,  $u$  tiende a  $U$ . Podemos suponer que  $u \cong U$  cuando

$Y \geq Y_0^+$  (donde  $Y_0^+$  es un número positivo a determinar de acuerdo con la precisión deseada). Por lo tanto, los campos en la región  $Y \geq Y_0^+$  estarán representados por los desarrollos de Rayleigh 2.108 y 2.109, ya que en esta zona el plano transformado es idéntico al real. Es decir que las ecuaciones de propagación 3.1 y 3.2 sólo se transforman en la zona  $0 \leq Y \leq Y_0^+$ , donde deberán integrarse numéricamente.

### 3.4. Tratamiento para la zona del cristal usando transformaciones no conformes

En la región  $y < a(x)$  podríamos utilizar un tratamiento similar al empleado en la región correspondiente al medio isótropo. Sin embargo, esto requiere encontrar otra transformación conforme para  $y < a(x)$ . La dificultad que se presenta en este caso es que a dos puntos vecinos en el espacio real (uno a cada lado de la interfase), le corresponden puntos en posiciones distantes en el espacio transformado, lo que dificulta el tratamiento de las condiciones de contorno.

Sin embargo, podemos encontrar una transformación tal que  $u \cong U$  cuando  $y \rightarrow -\infty$ , que transforma la interfase  $y = a(x)$  en  $Y = 0$  y la región  $y < a(x)$  en  $Y < 0$ , pero tal que a dos puntos vecinos en el espacio original le corresponden puntos vecinos en el espacio transformado. Esta transformación está definida por:

$$u = U + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \exp\left(in\frac{2\pi}{d}\bar{U}\right) \quad , \quad y \leq a(x) \quad , \quad (3.17)$$

y es una transformación no conforme debido a que involucra al complejo conjugado de la variable  $U$  ( $\bar{U}$ ). El uso de esta transformación de coordenadas tiene la ventaja de aprovechar la información contenida en los coeficientes  $b_n$  que se determinan en la zona isótropa y además permite empalmar en forma sencilla las soluciones de las ecuaciones diferenciales en la interfase.

Utilizando la transformación de coordenadas 3.17 en la zona del cristal, las ecuaciones de propagación

3.3 y 3.4 se transforman en:

$$0 = \left[ \mathcal{A} \frac{\partial}{\partial X} + \mathcal{B} \frac{\partial}{\partial Y} + \mathcal{C} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \mathcal{E} \frac{\partial^2}{\partial X \partial Y} + \mathcal{F} \right] F_-(X, Y) + \left[ \mathcal{G} \frac{\partial}{\partial X} + \mathcal{H} \frac{\partial}{\partial Y} \right] G_-(X, Y), \quad (3.18)$$

$$0 = \left[ \mathcal{I} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \mathcal{J} \frac{\partial}{\partial X} + \mathcal{K} \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \mathcal{L} \frac{\partial}{\partial Y} + \mathcal{M} \frac{\partial^2}{\partial X \partial Y} + \mathcal{N} \right] G_-(X, Y) + \frac{1}{\mu} \left[ \mathcal{G} \frac{\partial}{\partial X} + \mathcal{H} \frac{\partial}{\partial Y} \right] F_-(X, Y). \quad (3.19)$$

Las coeficientes denotados con letras caligráficas en las ecuaciones 3.18 y 3.19 son funciones de las nuevas coordenadas  $X$  e  $Y$  y están dados por:

$$\mathcal{A}(X, Y) = \nabla^2 X, \quad (3.20)$$

$$\mathcal{B}(X, Y) = \nabla^2 Y, \quad (3.21)$$

$$\mathcal{C}(X, Y) = |\vec{\nabla} X|^2, \quad (3.22)$$

$$\mathcal{D}(X, Y) = |\vec{\nabla} Y|^2, \quad (3.23)$$

$$\mathcal{E}(X, Y) = 2(\vec{\nabla} X) \cdot (\vec{\nabla} Y), \quad (3.24)$$

$$\mathcal{F}(X, Y) = \frac{\omega_0^2 \epsilon_{\perp} \epsilon_{\parallel} \mu}{c^2 \Gamma}, \quad (3.25)$$

$$\mathcal{G}(X, Y) = \frac{i\omega_0 \mu \Delta}{c} \left( c_{0x} \frac{\partial X}{\partial y} - c_{0y} \frac{\partial X}{\partial x} \right), \quad (3.26)$$

$$\mathcal{H}(X, Y) = \frac{i\omega_0 \mu \Delta}{c} \left( c_{0x} \frac{\partial Y}{\partial y} - c_{0y} \frac{\partial Y}{\partial x} \right), \quad (3.27)$$

$$\mathcal{I}(X, Y) = A \left( \frac{\partial X}{\partial x} \right)^2 + B \left( \frac{\partial X}{\partial y} \right)^2 + C \frac{\partial X}{\partial y} \frac{\partial X}{\partial x}, \quad (3.28)$$

$$\mathcal{J}(X, Y) = A \left( \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} \right) + B \left( \frac{\partial^2 X}{\partial y^2} \right) + C \frac{\partial^2 X}{\partial x \partial y}, \quad (3.29)$$

$$\mathcal{K}(X, Y) = A \left( \frac{\partial Y}{\partial x} \right)^2 + B \left( \frac{\partial Y}{\partial y} \right)^2 + C \frac{\partial Y}{\partial y} \frac{\partial Y}{\partial x}, \quad (3.30)$$

$$\mathcal{L}(X, Y) = A \left( \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} \right) + B \left( \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} \right) + C \frac{\partial^2 Y}{\partial x \partial y}, \quad (3.31)$$

$$\mathcal{M}(X, Y) = 2A \frac{\partial X}{\partial x} \frac{\partial Y}{\partial x} + 2B \frac{\partial X}{\partial y} \frac{\partial Y}{\partial y} + C \left( \frac{\partial X}{\partial y} \frac{\partial Y}{\partial x} + \frac{\partial Y}{\partial y} \frac{\partial X}{\partial x} \right), \quad (3.32)$$

$$\mathcal{N}(X, Y) = \omega_0^2 / c^2 \mu, \quad (3.33)$$

donde el operador  $\bar{\nabla}$  involucra derivadas con respecto a las variables sin transformar  $x$  e  $y$ . Como hemos mencionado anteriormente, la transformación no conforme es tal que  $u \cong U$  cuando  $Y \rightarrow -\infty$ . Por lo tanto, al igual que en la zona isótropa, podemos introducir un parámetro  $Y_0^-$  a determinar numéricamente (con  $Y_0^- < 0$ ) tal que cuando  $Y \leq Y_0^-$  el plano original y el transformado coinciden. Luego, en la zona  $Y \leq Y_0^-$  los campos estarán representados por los desarrollos de Rayleigh 2.120 y 2.129 y por lo tanto las ecuaciones diferenciales 3.18 y 3.19 deberán ser resueltas numéricamente sólo en la zona  $Y_0^- \leq Y \leq 0$ .

### 3.5. Transformación de las condiciones de contorno

Ahora veremos cómo se transforman las condiciones de contorno 3.5, 3.6, 3.7 y 3.8 cuando el plano original se transforma de acuerdo con la ecuación 3.13 (3.17) si  $y \geq a(x)$  ( $y \leq a(x)$ ). La continuidad de los campos 3.5 y 3.6 implica la continuidad de los campos transformados en  $Y = 0$ :

$$F_+(X, 0) = F_-(X, 0), \quad (3.34)$$

$$G_+(X, 0) = G_-(X, 0). \quad (3.35)$$

Para transformar las condiciones 3.7 y 3.8, utilizamos la definición de derivada normal y expresamos el versor normal a la curva  $y = a(x)$  en la forma:

$$\hat{n} = \left( \frac{\partial x}{\partial X} \hat{y} - \frac{\partial y}{\partial X} \hat{x} \right)_{Y=0} \left[ \left( \frac{\partial x}{\partial X} \right)^2 + \left( \frac{\partial y}{\partial X} \right)^2 \right]_{Y=0}^{-1/2} \quad (3.36)$$



Utilizando la ecuación 3.36, las transformaciones 3.13 y 3.17 y aplicando la regla de la cadena a las derivadas respecto de  $x$  e  $y$ , se obtiene:

$$\frac{1}{\mu_i} \frac{\partial F_+(X, 0)}{\partial Y} = \frac{1}{\mu} \left[ \mathcal{O}(X) \frac{\partial}{\partial X} + \mathcal{P}(X) \frac{\partial}{\partial Y} \right] F_-(X, 0), \quad (3.37)$$

$$\frac{1}{\epsilon_i} \frac{\partial G_+(X, 0)}{\partial Y} = \left[ \mathcal{Q}(X) \frac{\partial}{\partial X} + \mathcal{R}(X) \frac{\partial}{\partial Y} \right] G_-(X, 0) + \mathcal{S}(X) F_-(X, 0), \quad (3.38)$$

donde se han definido las funciones:

$$\mathcal{O}(X) = \left( \frac{\partial x}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial y} - \frac{\partial y}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial x} \right)_{Y=0}, \quad (3.39)$$

$$\mathcal{P}(X) = \left( \frac{\partial x}{\partial X} \frac{\partial Y}{\partial y} - \frac{\partial y}{\partial X} \frac{\partial Y}{\partial x} \right)_{Y=0}, \quad (3.40)$$

$$\mathcal{Q}(X) = \left[ \left( I \frac{\partial x}{\partial X} - J \frac{\partial y}{\partial X} \right) \frac{\partial X}{\partial x} + \left( K \frac{\partial x}{\partial X} - I \frac{\partial y}{\partial X} \right) \frac{\partial X}{\partial y} \right]_{Y=0}, \quad (3.41)$$

$$\mathcal{R}(X) = \left[ \left( I \frac{\partial x}{\partial X} - J \frac{\partial y}{\partial X} \right) \frac{\partial Y}{\partial x} + \left( K \frac{\partial x}{\partial X} - I \frac{\partial y}{\partial X} \right) \frac{\partial Y}{\partial y} \right]_{Y=0}, \quad (3.42)$$

$$\mathcal{S}(X) = \left[ \frac{i\omega_0 \Delta}{c} \left( \frac{\partial x}{\partial X} c_{0x} + \frac{\partial y}{\partial X} c_{0y} \right) \right]_{Y=0}. \quad (3.43)$$

Vemos que al aplicar el método de transformaciones conformes y no conformes, el problema se reduce a encontrar las funciones  $F_+(X, Y)$  y  $G_+(X, Y)$  ( $F_-(X, Y)$  y  $G_-(X, Y)$ ) que son soluciones de las ecuaciones de propagación 3.16 (3.18 y 3.19) con las condiciones de contorno 3.34, 3.35, 3.37 y 3.38.

### 3.6. Reducción a ecuaciones diferenciales ordinarias

En la región  $0 \leq Y \leq Y_0^+$  la pseudoperiodicidad de los campos transformados permite escribir los siguientes desarrollos para las componentes de los campos paralelas a los surcos:

$$F_+(X, Y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} F_n^+(Y) \exp(i\alpha_n X), \quad (3.44)$$

$$G_+(X, Y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} G_n^+(Y) \exp(i\alpha_n X), \quad (3.45)$$

y como la transformación 3.13 es periódica en  $X$  (período  $d$ ), tenemos:

$$\left| \frac{du}{dU} \right|^2 = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} a_n(Y) \exp(inKX), \quad (3.46)$$

donde

$$a_n(Y) = \frac{1}{d} \int_0^d \left| \frac{du}{dU} \right|^2 \exp(-inKX) dX. \quad (3.47)$$

y  $K = 2\pi/d$ . Introduciendo las series 3.44, 3.45 y 3.46 en las ecuaciones de propagación transformadas 3.16 y usando la ortogonalidad de las funciones  $\exp(i\alpha_n X)$  en el intervalo  $[0, d]$ , obtenemos un sistema de ecuaciones diferenciales cuyas soluciones son las funciones  $F_n^+(Y)$  y  $G_n^+(Y)$  (con  $-\infty \leq n \leq +\infty$ ):

$$\frac{d^2 F_n^+(Y)}{dY^2} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \mathcal{V}_{nm}^+(Y) F_m^+(Y), \quad -\infty \leq n \leq +\infty, \quad (3.48)$$

$$\frac{d^2 G_n^+(Y)}{dY^2} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \mathcal{V}_{nm}^+(Y) G_m^+(Y), \quad -\infty \leq n \leq +\infty, \quad (3.49)$$

donde

$$\mathcal{V}_{nm}^+(Y) = \alpha_n^2 \delta_{nm} - \omega_0^2 / c^2 \mu_i \epsilon_i a_{n-m}(Y), \quad (3.50)$$

y  $\delta_{nm}$  es la función delta de Kronecker. Análogamente, usando la pseudoperiodicidad de los campos en la zona  $Y_0^- \leq Y \leq 0$ , podemos escribir:

$$F_-(X, Y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} F_n^-(Y) \exp(i\alpha_n X), \quad (3.51)$$

$$G_-(X, Y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} G_n^-(Y) \exp(i\alpha_n X). \quad (3.52)$$

Debido a su periodicidad en  $X$ , cualquiera de las funciones periódicas  $\mathcal{T}$  denotadas con letras caligráficas en las ecuaciones 3.18 y 3.19 pueden desarrollarse en series de Fourier:

$$\mathcal{T}(X, Y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \mathcal{T}_n(Y) \exp(inKX), \quad (3.53)$$

con

$$T_n(Y) = \frac{1}{d} \int_0^d T(X, Y) \exp(-inKX) dX . \quad (3.54)$$

Introduciendo los desarrollos 3.51, 3.52 y 3.53 en las ecuaciones de propagación 3.18 y 3.19, obtenemos un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas de segundo orden cuyas soluciones son las funciones  $F_n^-(Y)$  y  $G_n^-(Y)$ :

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} \mathcal{D}_{n-m}(Y) \frac{d^2 F_m^-(Y)}{dY^2} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \mathcal{W}_{nm}^{(1)}(Y) \frac{dF_m^-(Y)}{dY} + \mathcal{X}_{nm}(Y) \frac{dG_m^-(Y)}{dY} + \mathcal{V}_{nm}^{(1)}(Y) F_m^-(Y) + \mathcal{Y}_{nm}(Y) G_m^-(Y) , \quad (3.55)$$

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} \mathcal{K}_{n-m}(Y) \frac{d^2 G_m^-(Y)}{dY^2} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{\mathcal{X}_{nm}(Y)}{\mu} \frac{dF_m^-(Y)}{dY} + \mathcal{W}_{nm}^{(2)}(Y) \frac{dG_m^-(Y)}{dY} + \frac{\mathcal{Y}_{nm}(Y)}{\mu} F_m^-(Y) + \mathcal{V}_{nm}^{(2)}(Y) G_m^-(Y) , \quad (3.56)$$

donde

$$\mathcal{W}_{nm}^{(1)}(Y) = -\mathcal{B}_{n-m}(Y) - i\alpha_m \mathcal{E}_{n-m}(Y) , \quad (3.57)$$

$$\mathcal{X}_{nm}(Y) = -\mathcal{H}_{n-m}(Y) , \quad (3.58)$$

$$\mathcal{V}_{nm}^{(1)}(Y) = \alpha_m^2 \mathcal{C}_{n-m}(Y) - i\alpha_m \mathcal{A}_{n-m}(Y) - \mathcal{F}_{n-m}(Y) , \quad (3.59)$$

$$\mathcal{Y}_{nm}(Y) = -i\alpha_m \mathcal{G}_{n-m}(Y) , \quad (3.60)$$

$$\mathcal{W}_{nm}^{(2)}(Y) = -\mathcal{L}_{n-m}(Y) - i\alpha_m \mathcal{M}_{n-m}(Y) , \quad (3.61)$$

$$\mathcal{V}_{nm}^{(2)}(Y) = \alpha_m^2 \mathcal{I}_{n-m}(Y) - i\alpha_m \mathcal{J}_{n-m}(Y) - \mathcal{N}_{n-m}(Y) . \quad (3.62)$$

### 3.7. Empalme de soluciones en $Y = 0$

Para empalmar las funciones  $F_n^+$ ,  $G_n^+$ ,  $F_n^-$  y  $G_n^-$  en  $Y = 0$ , proyectamos las ecuaciones 3.34, 3.35, 3.37 y 3.38 en la base de funciones de Rayleigh. De esta manera, obtenemos:

$$F_n^+(0) = F_n^-(0) , \quad (3.63)$$

$$G_n^+(0) = G_n^-(0), \quad (3.64)$$

$$\frac{1}{\mu_i} \frac{dF_n^+(0)}{dY} = \frac{1}{\mu} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i\alpha_m \mathcal{O}_{n-m}(0) F_m^-(0) + \mathcal{P}_{n-m}(0) \frac{dF_m^-(0)}{dY}, \quad (3.65)$$

$$\frac{1}{\epsilon_i} \frac{dG_n^+(0)}{dY} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i\alpha_m \mathcal{Q}_{n-m}(0) G_m^-(0) + \mathcal{R}_{n-m}(0) \frac{dG_m^-(0)}{dY} + \mathcal{S}_{n-m}(0) F_m^-(0). \quad (3.66)$$

### 3.8. Empalme de soluciones en $Y = Y_0^+$ y en $Y = Y_0^-$

Si suponemos que fuera de la región  $Y_0^- \leq Y \leq Y_0^+$  vale la aproximación  $u \approx U$ , las soluciones de las ecuaciones diferenciales deben empalmarse con los desarrollos de Rayleigh 2.108 y 2.109 en  $Y = Y_0^+$  y 2.120 y 2.129 en  $Y = Y_0^-$  (con  $\gamma = 0$ ). Esto requiere la continuidad de las componentes de los campos paralelos a los surcos y de sus derivadas normales en  $Y = Y_0^+$  y en  $Y = Y_0^-$ . Escribiendo estas condiciones y proyectando en la base de funciones de Rayleigh, se obtiene en  $Y = Y_0^+$ :

$$F_n^+(Y_0^+) = R \exp(-i\beta_0 Y_0^+) \delta_{n,0} + R_n \exp(i\beta_n Y_0^+), \quad (3.67)$$

$$\frac{dF_n^+(Y_0^+)}{dY} = -i\beta_0 R \exp(-i\beta_0 Y_0^+) \delta_{n,0} + i\beta_n R_n \exp(i\beta_n Y_0^+), \quad (3.68)$$

$$G_n^+(Y_0^+) = S \exp(-i\beta_0 Y_0^+) \delta_{n,0} + S_n \exp(i\beta_n Y_0^+), \quad (3.69)$$

$$\frac{dG_n^+(Y_0^+)}{dY} = -i\beta_0 S \exp(-i\beta_0 Y_0^+) \delta_{n,0} + i\beta_n S_n \exp(i\beta_n Y_0^+), \quad (3.70)$$

y en  $Y = Y_0^-$  resulta:

$$F_n^-(Y_0^-) = (\alpha_n c_{0y} - \beta_{on} c_{0x}) C_{on} \exp(i\beta_{on} Y_0^-) + \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu \epsilon_{\perp} c_{0z} C_{en} \exp(i\beta_{en} Y_0^-) \\ + (\alpha_o c_{0y} - \beta_o c_{0x}) C_o \exp(i\beta_o Y_0^-) \delta_{n,0} + \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu \epsilon_{\perp} c_{0z} C_e \exp(i\beta_e Y_0^-) \delta_{n,0}, \quad (3.71)$$

$$\frac{dF_n^-(Y_0^-)}{dY} = i\beta_{on} (\alpha_n c_{0y} - \beta_{on} c_{0x}) C_{on} \exp(i\beta_{on} Y_0^-) + i\beta_{en} \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu \epsilon_{\perp} c_{0z} C_{en} \exp(i\beta_{en} Y_0^-) \\ + i\beta_o (\alpha_o c_{0y} - \beta_o c_{0x}) C_o \exp(i\beta_o Y_0^-) \delta_{n,0} + i\beta_e \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu \epsilon_{\perp} c_{0z} C_e \exp(i\beta_e Y_0^-) \delta_{n,0}, \quad (3.72)$$

$$G_n^-(Y_0^-) = -\frac{c}{\omega_0 \mu} (\alpha_n^2 + \beta_{on}^2) c_{0z} C_{on} \exp(i\beta_{on} Y_0^-) + \frac{\omega_0}{c} \epsilon_{\perp} (\alpha_n c_{0y} - \beta_{en} c_{0x}) C_{en} \exp(i\beta_{en} Y_0^-)$$

$$-\frac{c}{\omega_0\mu}(\alpha_o^2 + \beta_o^2) c_{0z} C_o \exp(i\beta_o Y_0^-) \delta_{n,0} + \frac{\omega_0}{c} \epsilon_{\perp} (\alpha_e c_{0y} - \beta_e c_{0x}) C_e \exp(i\beta_e Y_0^-) \delta_{n,0} , \quad (3.73)$$

$$\begin{aligned} \frac{dG_n^-(Y_0^-)}{dY} = & -i\beta_{on} \frac{c}{\omega_0\mu} (\alpha_n^2 + \beta_{on}^2) c_{0z} C_{on} \exp(i\beta_{on} Y_0^-) + i\frac{\omega_0}{c} \epsilon_{\perp} \beta_{en} (\alpha_n c_{0y} - \beta_{en} c_{0x}) \\ & \times C_{en} \exp(i\beta_{en} Y_0^-) - i\beta_o \frac{c}{\omega_0\mu} (\alpha_o^2 + \beta_o^2) c_{0z} C_o \exp(i\beta_o Y_0^-) \delta_{n,0} + i\frac{\omega_0}{c} \epsilon_{\perp} \beta_e (\alpha_e c_{0y} - \beta_e c_{0x}) \\ & \times C_e \exp(i\beta_e Y_0^-) \delta_{n,0} . \end{aligned} \quad (3.74)$$

### 3.9. Resolución numérica

Si admitimos que son suficientes  $2N + 1$  términos en las expresiones 3.44, 3.45, 3.51 y 3.52 para describir los campos transformados  $F_+(X, Y)$ ,  $G_+(X, Y)$ ,  $F_-(X, Y)$  y  $G_-(X, Y)$ , el problema inicial se reduce a calcular  $2N + 1$  funciones  $F_n^+(Y)$  ( $F_n^-(Y)$ ) y  $2N + 1$  funciones  $G_n^+(Y)$  ( $G_n^-(Y)$ ) en el intervalo  $[Y_0^-, 0]$  ( $[0, Y_0^+]$ ). Si llamamos  $L = 2N + 1$ , las ecuaciones 3.48 y 3.49 (3.55 y 3.56) representan un sistema de  $2L$  ecuaciones diferenciales acopladas, de segundo orden y a coeficientes variables. Las incógnitas son las funciones  $F_n(Y)$  y  $G_n(Y)$  ( $2L$  incógnitas) en cada una de las zonas. Este sistema es equivalente a otro de primer orden pero con  $4L$  incógnitas: las funciones  $F_n(Y)$ ,  $G_n(Y)$  y sus derivadas primeras ( $F_n'(Y)$  y  $G_n'(Y)$ ). El vector solución  $\mathcal{Z}$  de este sistema equivalente de ecuaciones diferenciales está dado por:

$$\mathcal{Z} = \begin{bmatrix} F \\ G \\ F' \\ G' \end{bmatrix} ,$$

y su comportamiento queda completamente determinado si se conoce una base de soluciones del sistema. Esta base estará formada por  $4L$  vectores linealmente independientes  $\vec{\mathcal{Z}}^j$  de  $4L$  componentes. La independencia de las soluciones  $\vec{\mathcal{Z}}^j$  queda asegurada eligiendo  $4L$  condiciones iniciales:

$$\vec{\mathcal{Z}}^j(Y_0^-) \quad j = 1, \dots, 4L ,$$

linealmente independientes. Los vectores  $\vec{Z}^j(Y_0^-)$  pueden tomarse como los elementos de la base canónica en el espacio de dimensión  $4L$ :

$$\mathcal{Z}_n^j(Y_0^-) = \delta_{nj}.$$

Habiendo hecho esta identificación, se puede comenzar a integrar numéricamente el sistema de ecuaciones diferenciales en la zona  $Y < 0$  desde  $Y = Y_0^-$ . Así se obtienen los vectores  $\mathcal{Z}^j(0^-)$ , a partir de los cuales, utilizando los empalmes en  $Y = 0$  ( 3.63, 3.64, 3.65 y 3.66) se encuentran los  $\mathcal{Z}^j(0^+)$ . Partiendo de estos últimos, se pueden integrar las ecuaciones en la zona  $Y > 0$ . Se obtienen así los vectores  $\mathcal{Z}_j(Y_0^+)$ , que son la solución del sistema con condiciones iniciales arbitrarias, ya que no se han usado todavía los empalmes en  $Y = Y_0^-$  y en  $Y = Y_0^+$ . La solución más general del sistema de ecuaciones diferenciales está dada por el vector  $\vec{Z}(Y)$ , que se construye como combinación lineal de los  $\vec{Z}^j(Y)$ :

$$\vec{Z}(Y) = \sum_{j=1}^{4L} S_j \vec{Z}^j(Y), \quad (3.75)$$

donde quedan por determinar los coeficientes  $S_j$  mediante los empalmes antes mencionados (ecs. 3.67, 3.68, 3.69, 3.70, 3.71, 3.72, 3.73 y 3.74).

Utilizando la definición del vector  $\vec{Z}(Y)$  y los empalmes en  $Y = Y_0^+$ , se obtiene:

$$\sum_{j=1}^{4L} \left[ \mathcal{Z}_{n+N_2}^j(Y_0^+) - i\beta_n \mathcal{Z}_n^j(Y_0^+) \right] S_j = -2i\beta_0 R \exp(-i\beta_0 Y_0^+) \delta_{n,0}, \quad n = 1, \dots, L, \quad (3.76)$$

$$\sum_{j=1}^{4L} \left[ \mathcal{Z}_{n+N_3}^j(Y_0^+) - i\beta_n \mathcal{Z}_{n+N_1}^j(Y_0^+) \right] S_j = -2i\beta_0 S \exp(-i\beta_0 Y_0^+) \delta_{n,0}, \quad n = 1, \dots, L, \quad (3.77)$$

donde se ha denotado  $N_1 = L$ ,  $N_2 = 2L$  y  $N_3 = 3L$ . De los empalmes en  $Y = Y_0^-$ , resulta:

$$S_n - \Xi_n C_{on} - \Omega_n C_{en} = (K_1 + K_2)\delta_{n,0}, \quad (3.78)$$

$$S_{n+N_2} - i\beta_{on} \Xi_n C_{on} - i\beta_{en} \Omega_n C_{en} = (i\beta_o K_1 + i\beta_e K_2)\delta_{n,0}, \quad (3.79)$$

$$S_{n+N_1} + \Theta_n C_{on} - \Lambda_n C_{en} = (K_3 + K_4)\delta_{n,0} , \quad (3.80)$$

$$S_{n+N_3} + i\beta_{on} \Theta_n C_{on} - i\beta_{en} \Lambda_n C_{en} = (i\beta_o K_3 + i\beta_e K_4)\delta_{n,0} , \quad (3.81)$$

con:

$$\Xi_n = (\alpha_n c_{oy} - \beta_{on} c_{ox}) \exp(i\beta_{on} Y_0^-) , \quad (3.82)$$

$$\Omega_n = \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu \epsilon_{\perp} c_{oz} \exp(i\beta_{en} Y_0^-) , \quad (3.83)$$

$$\Theta_n = \frac{c}{\omega_0 \mu} c_{oz} (\alpha_n^2 + \beta_{on}^2) \exp(i\beta_{on} Y_0^-) , \quad (3.84)$$

$$\Lambda_n = \frac{\omega_0}{c} \epsilon_{\perp} (\alpha_n c_{oy} - \beta_{en} c_{ox}) \exp(i\beta_{en} Y_0^-) , \quad (3.85)$$

$$K_1 = C_o (\alpha_o c_{oy} - \beta_o c_{ox}) \exp(i\beta_o Y_0^-) , \quad (3.86)$$

$$K_2 = C_e \frac{\omega_0^2}{c^2} \mu \epsilon_{\perp} c_{oz} \exp(i\beta_e Y_0^-) , \quad (3.87)$$

$$K_3 = -C_o \frac{c}{\omega_0 \mu} c_{oz} (\alpha_o^2 + \beta_o^2) \exp(i\beta_o Y_0^-) , \quad (3.88)$$

$$K_4 = C_e \frac{\omega_0}{c} \epsilon_{\perp} (\alpha_e c_{oy} - \beta_e c_{ox}) \exp(i\beta_e Y_0^-) . \quad (3.89)$$

Las ecuaciones 3.76, 3.77, 3.78, 3.79, 3.80 y 3.81, forman un sistema de  $6L$  ecuaciones con  $6L$  incógnitas: las  $4L$  componentes  $S_j$ ,  $L C_{on}$  y  $L C_{en}$ .

Eliminando de las ecuaciones 3.78, 3.79, 3.80 y 3.81  $C_{on}$  y  $C_{en}$ , se obtiene:

$$\frac{-i\beta_{on} S_n}{\Omega_n} + \frac{i\beta_{on} S_{n+N_1}}{\Lambda_n} + \frac{S_{n+N_2}}{\Omega_n} - \frac{S_{n+N_3}}{\Lambda_n} = i \left[ \left( \frac{K_3}{\Lambda_n} - \frac{K_1}{\Omega_n} \right) (\beta_{on} - \beta_o) + \left( \frac{K_4}{\Lambda_n} - \frac{K_2}{\Omega_n} \right) (\beta_{on} - \beta_e) \right] \delta_{n,0} . \quad (3.90)$$

$$\frac{-i\beta_{en} S_n}{\Xi_n} - \frac{i\beta_{en} S_{n+N_1}}{\Theta_n} + \frac{S_{n+N_2}}{\Xi_n} + \frac{S_{n+N_3}}{\Theta_n} = -i \left[ \left( \frac{K_1}{\Xi_n} + \frac{K_3}{\Theta_n} \right) (\beta_{en} - \beta_o) + \left( \frac{K_2}{\Xi_n} + \frac{K_4}{\Theta_n} \right) (\beta_{en} - \beta_e) \right] \delta_{n,0} . \quad (3.91)$$

Se llega así a un sistema de  $4L$  ecuaciones con las  $4L$  incógnitas  $S_j$ . El sistema de ecuaciones a resolver puede expresarse en forma matricial del siguiente modo:

$$M \cdot \vec{S} = \vec{A} , \quad (3.92)$$

donde  $M \in C^{4L \times 4L}$  y está formada por los siguientes bloques:

$$\left[ \begin{array}{c} \hline M0 \\ \hline M1 \\ \hline M2 & M3 & M4 & M5 \\ \hline M6 & M7 & M8 & M9 \\ \hline \end{array} \right] \begin{bmatrix} S_n \\ S_{n+N_1} \\ S_{n+N_2} \\ S_{n+N_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{1n} \\ A_{2n} \\ A_{3n} \\ A_{4n} \end{bmatrix},$$

con  $M0, M1 \in C^{L \times 4L}$  y  $M3, \dots, M9 \in C^{L \times L}$ . Los elementos de cada una de estas matrices están definidos por:

$$M0|_{nj} = \mathcal{Z}_{n+N_2}^j(Y_0^+) - i\beta_n \mathcal{Z}_n^j(Y_0^+), \quad (3.93)$$

$$M1|_{nj} = \mathcal{Z}_{n+N_3}^j(Y_0^+) - i\beta_n \mathcal{Z}_{n+N_1}^j(Y_0^+), \quad (3.94)$$

$$M2|_{nj} = -i\beta_{on} \delta_{nj} / \Omega_n, \quad (3.95)$$

$$M3|_{nj} = i\beta_{on} \delta_{nj} / \Lambda_n, \quad (3.96)$$

$$M4|_{nj} = \delta_{nj} / \Omega_n, \quad (3.97)$$

$$M5|_{nj} = -\delta_{nj} / \Lambda_n, \quad (3.98)$$

$$M6|_{nj} = -i\beta_{en} \delta_{nj} / \Xi_n, \quad (3.99)$$

$$M7|_{nj} = -i\beta_{en} \delta_{nj} / \Theta_n, \quad (3.100)$$

$$M8|_{nj} = \delta_{nj} / \Xi_n, \quad (3.101)$$

$$M9|_{nj} = \delta_{nj} / \Theta_n, \quad (3.102)$$

y

$$A_{1n} = -2i\beta_0 R \exp(-i\beta_0 Y_0^+) \delta_{n,0}, \quad (3.103)$$

$$A_{2n} = -2i\beta_0 S \exp(-i\beta_0 Y_0^+) \delta_{n,0}, \quad (3.104)$$

$$A_{3n} = i \left[ \left( \frac{K_3}{\Lambda_n} - \frac{K_1}{\Omega_n} \right) (\beta_{on} - \beta_o) + \left( \frac{K_4}{\Lambda_n} - \frac{K_2}{\Omega_n} \right) (\beta_{on} - \beta_e) \right] \delta_{n,0}, \quad (3.105)$$

$$A_{4n} = -i \left[ \left( \frac{K_1}{\Xi_n} + \frac{K_3}{\Theta_n} \right) (\beta_{en} - \beta_o) + \left( \frac{K_2}{\Xi_n} + \frac{K_4}{\Theta_n} \right) (\beta_{en} - \beta_e) \right] \delta_{n,0}. \quad (3.106)$$



Para obtener el vector  $\vec{S}$ , debemos invertir la matriz  $M$  y multiplicar la ecuación 3.92 a izquierda por  $M^{-1}$ , con lo cual:

$$\vec{S} = M^{-1} \cdot \vec{A}. \quad (3.107)$$

Una vez obtenido  $\vec{S}$ , de las ecuaciones 3.78 y 3.80, se obtienen las amplitudes de los órdenes difractados en el cristal:

$$C_{om} = \frac{\Lambda_n S_n - \Omega_n S_{n+N_1} + [\Omega_n(K_3 + K_4) - \Lambda_n(K_1 + K_2)]\delta_{n,0}}{\Xi_n \Lambda_n + \Theta_n \Omega_n}, \quad (3.108)$$

$$C_{en} = \frac{\Theta_n S_n + \Xi_n S_{n+N_1} - [\Theta_n(K_1 + K_2) + \Xi_n(K_3 + K_4)]\delta_{n,0}}{\Xi_n \Lambda_n + \Theta_n \Omega_n}, \quad (3.109)$$

A partir de estas amplitudes y utilizando las expresiones definidas en la sección 2.5, se obtienen las eficiencias de los órdenes difractados ordinarios y extraordinarios. En cuanto a los campos difractados en el medio isótropo, reemplazando el vector solución 3.75 evaluado en  $Y = Y_0^+$  en las ecuaciones 3.67 y 3.69, se obtienen las amplitudes  $R_n$  y  $S_n$ :

$$R_n = \sum_{j=1}^L S_j \mathcal{Z}_n^j(Y_0^+) e^{-i\beta_n Y_0^+} - R e^{-2i\beta_0 Y_0} \delta_{n,0} \quad (3.110)$$

$$S_n = \sum_{j=1}^L S_j \mathcal{Z}_{n+N_2}^j(Y_0^+) e^{-i\beta_n Y_0^+} - S e^{-2i\beta_0 Y_0} \delta_{n,0} \quad (3.111)$$

a partir de las cuales se calculan las eficiencias de los órdenes difractados en el medio isótropo.

Hasta aquí hemos aplicado el método de transformaciones conformes y no conformes a la resolución de una red uniaxial-isótropo (dieléctrico, metal o conductor perfecto) en montaje clásico. Hemos visto que el uso de una transformación no conforme en la zona uniaxial no complica el tratamiento numérico, facilita el empalme en la superficie de la red y tiene la ventaja de aprovechar la información contenida en los coeficientes  $b_n$  que se determinan numérica o analíticamente al tratar la zona isótropa. Sin embargo, existe una limitación en la aplicación del formalismo ya que existen

perfiles para los cuales la transformación no conforme no es inversible. Esta dificultad puede ser evitada en el caso de una red entre un cristal uniaxial y un conductor perfecto transformando la zona anisótropa mediante una transformación conforme, como ilustraremos en la próxima sección.

### 3.10. Método de transformaciones conformes para una red uniaxial-conductor perfecto

Hasta el momento, el semiespacio ocupado por el medio uniaxial ha sido transformado utilizando la transformación de coordenadas no conforme 3.17:

$$u = U + a(\bar{U}), \quad (3.112)$$

El jacobiano asociado a esta transformación no conforme es:

$$J_{nc} = 1 - \left( \frac{\partial a_I}{\partial Y} \right)^2 - \left( \frac{\partial a_R}{\partial Y} \right)^2 = 1 - \left| \frac{da(U)}{dU} \right|^2, \quad (3.113)$$

donde  $a(U) = a_R(X, Y) + ia_I(X, Y)$ . Como  $a(U)$  tiende exponencialmente a cero cuando  $Y$  tiende a infinito, es posible que para algunos perfiles  $J_{nc}$  tenga un cambio de signo, por lo cual la transformación no resulta biyectiva. Esto es lo que sucede con los perfiles para los cuales:

$$\left| \frac{da}{dU} \right|_{Y=0}^2 \geq 1. \quad (3.114)$$

Como consecuencia, la transformación no conforme no puede ser usada para estudiar redes cuyos perfiles verifican 3.114. Esta dificultad puede ser evitada en las redes entre un cristal uniaxial y un conductor perfecto. En este caso, sólo es necesario transformar la región ocupada por el medio anisótropo, ya que los campos en el conductor son nulos. Por lo tanto, resulta conveniente emplear en esta zona una transformación conforme de coordenadas, ya que la biyectividad de esta transformación está asegurada para cualquier forma y profundidad del perfil. El procedimiento consiste entonces en transformar las ecuaciones de propagación en la zona del cristal 3.3 y 3.4 y las condiciones de contorno 3.9 y 3.10 utilizando la transformación conforme 3.13 (en vez de la no conforme empleada

anteriormente). Para que la transformación no diverja cuando  $y \rightarrow -\infty$ , tomamos el eje  $y$  apuntando hacia el cristal, por lo cual debemos redefinir los vectores de onda incidente y difractados teniendo en cuenta que ellos deben representar un flujo de energía hacia  $y < 0$  ó  $y > 0$ , respectivamente. Es fácil ver que en este caso los vectores de onda se escriben como:

$$\vec{k}_o^c = \alpha_o^c \hat{x} + \beta_o^c \hat{y} , \quad (3.115)$$

$$\alpha_o^c = \frac{\omega_0}{c} (\epsilon_{\perp} \mu)^{1/2} \text{sen } \theta_o , \quad (3.116)$$

$$\beta_o^c = -\frac{\omega_0}{c} (\epsilon_{\perp} \mu)^{1/2} \text{cos } \theta_o , \quad (3.117)$$

para una onda incidente ordinaria. Si la polarización incidente es extraordinaria:

$$\vec{k}_e^c = \alpha_e^c \hat{x} + \beta_e^c \hat{y} , \quad (3.118)$$

$$\alpha_e^c = \pm \Upsilon^c(\theta_e) \text{sen } \theta_e , \quad (3.119)$$

$$\beta_e^c = \pm \Upsilon^c(\theta_e) \text{cos } \theta_e , \quad (3.120)$$

$$(3.121)$$

con

$$\Upsilon^c(\theta_e) = \frac{\omega_0}{c} \left[ \frac{\mu \epsilon_{\perp} \epsilon_{\parallel}}{(\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp})(c_{0x} \text{sen } \theta_e - c_{0y} \text{cos } \theta_e)^2 + \epsilon_{\perp}} \right]^{1/2} \quad (3.122)$$

El signo superior (inferior) en 3.119 y 3.120 corresponde al caso  $\Psi^c < 0$  ( $\Psi^c > 0$ ), donde

$$\Psi^c = -\epsilon_{\perp} \text{cos } \theta_e + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) c_{0y} (c_{0x} \text{sen } \theta_e - c_{0y} \text{cos } \theta_e) . \quad (3.123)$$

En las expresiones anteriores, el supraíndice  $c$  distingue a estos vectores de onda de los definidos en 2.48 y 2.52, donde se consideró el eje  $y$  apuntando hacia el medio isótropo.

Para los campos difractados se tiene:

$$\vec{k}_{on}^c = \alpha_n \hat{x} + \beta_{on}^c \hat{y} , \quad (3.124)$$

$$\vec{k}_{en}^c = \alpha_n \hat{x} + \beta_{en}^c \hat{y}, \quad (3.125)$$

donde  $\alpha_n$  está dado por 2.94.

$$\beta_{on}^c = -\beta_{on}, \quad (3.126)$$

$$\beta_{en}^c = \frac{-(\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp})c_{0x}c_{0y}\alpha_n + (\Phi_n)^{1/2}}{\epsilon_{\perp} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp})c_{0y}^2}, \quad (3.127)$$

$$\Phi_n = \frac{\omega_0^2}{c^2} \epsilon_{\parallel} \epsilon_{\perp} \mu [(\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp})c_{0y}^2 + \epsilon_{\perp}] + \alpha_n^2 \epsilon_{\perp} [\epsilon_{\parallel}(c_{0z}^2 - 1) - \epsilon_{\perp}c_{0z}^2]. \quad (3.128)$$

Siguiendo el procedimiento descrito en la sección anterior, transformando las ecuaciones de propagación 3.3 y 3.4 de acuerdo con 3.13 se obtiene:

$$0 = \left[ \mathcal{C}^c \left( \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} \right) + \mathcal{F} \right] F_-(X, Y) + \left[ \mathcal{G}^c \frac{\partial}{\partial X} + \mathcal{H}^c \frac{\partial}{\partial Y} \right] G_-(X, Y), \quad (3.129)$$

$$0 = \left[ \mathcal{I}^c \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \mathcal{J}^c \frac{\partial}{\partial X} + \mathcal{K}^c \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \mathcal{L}^c \frac{\partial}{\partial Y} + \mathcal{M}^c \frac{\partial^2}{\partial X \partial Y} + \mathcal{N} \right] G_-(X, Y) + \frac{1}{\mu} \left[ \mathcal{G}^c \frac{\partial}{\partial X} + \mathcal{H}^c \frac{\partial}{\partial Y} \right] F_-(X, Y). \quad (3.130)$$

Las funciones denotadas con letras caligráficas son funciones de las nuevas coordenadas  $X$  e  $Y$  y están dadas por:

$$\mathcal{C}^c(X, Y) = |\vec{\nabla} X|^2, \quad (3.131)$$

$$\mathcal{G}^c(X, Y) = \frac{i\omega_0\mu\Delta}{c} \left( c_{0x} \frac{\partial X}{\partial y} - c_{0y} \frac{\partial X}{\partial x} \right), \quad (3.132)$$

$$\mathcal{H}^c(X, Y) = \frac{i\omega_0\mu\Delta}{c} \left( c_{0x} \frac{\partial Y}{\partial y} - c_{0y} \frac{\partial Y}{\partial x} \right), \quad (3.133)$$

$$\mathcal{I}^c(X, Y) = A \left( \frac{\partial X}{\partial x} \right)^2 + B \left( \frac{\partial X}{\partial y} \right)^2 + C \frac{\partial X}{\partial y} \frac{\partial X}{\partial x}, \quad (3.134)$$

$$\mathcal{J}^c(X, Y) = A \left( \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} \right) + B \left( \frac{\partial^2 X}{\partial y^2} \right) + C \frac{\partial^2 X}{\partial x \partial y}, \quad (3.135)$$

$$\mathcal{K}^c(X, Y) = A \left( \frac{\partial Y}{\partial x} \right)^2 + B \left( \frac{\partial Y}{\partial y} \right)^2 + C \frac{\partial Y}{\partial y} \frac{\partial Y}{\partial x}, \quad (3.136)$$

$$\mathcal{L}^c(X, Y) = A \left( \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} \right) + B \left( \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} \right) + C \frac{\partial^2 Y}{\partial x \partial y}, \quad (3.137)$$

$$\mathcal{M}^c(X, Y) = 2A \frac{\partial X}{\partial x} \frac{\partial Y}{\partial x} + 2B \frac{\partial X}{\partial y} \frac{\partial Y}{\partial y} + C \left( \frac{\partial X}{\partial y} \frac{\partial Y}{\partial x} + \frac{\partial Y}{\partial y} \frac{\partial X}{\partial x} \right), \quad (3.138)$$

donde el operador  $\vec{\nabla}$  involucra derivadas con respecto a las variables sin transformar  $x$  e  $y$  y el supraíndice  $c$  denota que, a diferencia de las funciones definidas en la sección anterior, las variables  $x$ ,  $y$ ,  $X$  e  $Y$  están vinculadas por la transformación conforme 3.13. Análogamente, transformando las condiciones de contorno 3.9 y 3.10, resulta:

$$0 = F_-(X, 0), \quad (3.139)$$

$$0 = \left[ \mathcal{Q}^c(X) \frac{\partial}{\partial X} + \mathcal{R}^c(X) \frac{\partial}{\partial Y} \right] G_-(X, 0), \quad (3.140)$$

donde se han definido las funciones:

$$\mathcal{Q}^c(X) = \left[ \left( I \frac{\partial x}{\partial X} - J \frac{\partial y}{\partial X} \right) \frac{\partial X}{\partial x} + \left( K \frac{\partial x}{\partial X} - I \frac{\partial y}{\partial X} \right) \frac{\partial X}{\partial y} \right]_{Y=0}, \quad (3.141)$$

$$\mathcal{R}^c(X) = \left[ \left( I \frac{\partial x}{\partial X} - J \frac{\partial y}{\partial X} \right) \frac{\partial Y}{\partial x} + \left( K \frac{\partial x}{\partial X} - I \frac{\partial y}{\partial X} \right) \frac{\partial Y}{\partial y} \right]_{Y=0}. \quad (3.142)$$

Notar nuevamente que el supraíndice  $c$  indica que las variables originales y transformadas están vinculadas por la transformación 3.13. La forma de resolución es completamente similar a la explicada anteriormente: haciendo uso de la pseudoperiodicidad de los campos transformados y de la periodicidad en  $X$  de las funciones denotadas con letras caligráficas, las ecuaciones de propagación se reducen al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas de segundo orden:

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} \mathcal{C}_{n-m}^c(Y) \frac{d^2 F_m^-(Y)}{dY^2} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \mathcal{X}_{nm}^c(Y) \frac{dG_m^-(Y)}{dY} \mathcal{V}_{nm}^{(1c)}(Y) F_m^-(Y) + \mathcal{Y}_{nm}^c(Y) G_m^-(Y), \quad (3.143)$$

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} \mathcal{K}_{n-m}^c(Y) \frac{d^2 G_m^-(Y)}{dY^2} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{\mathcal{X}_{nm}^c(Y)}{\mu} \frac{dF_m^-(Y)}{dY} + \mathcal{W}_{nm}^{(2c)}(Y) \frac{dG_m^-(Y)}{dY}$$

$$+\frac{\mathcal{Y}_{nm}^c}{\mu}(Y)F_m^-(Y) + \mathcal{V}_{nm}^{(2c)}(Y)G_m^-(Y) , \quad (3.144)$$

donde las funciones  $F_n^-(Y)$  y  $G_n^-(Y)$  son las incógnitas del problema y:

$$\mathcal{X}_{nm}^c(Y) = -\mathcal{H}_{n-m}^c(Y) , \quad (3.145)$$

$$\mathcal{V}_{nm}^{(1c)}(Y) = \alpha_m^2 \mathcal{C}_{n-m}^c(Y) - \mathcal{F}_{n-m}(Y) , \quad (3.146)$$

$$\mathcal{Y}_{nm}^c(Y) = -i\alpha_m \mathcal{G}_{n-m}^c(Y) , \quad (3.147)$$

$$\mathcal{W}_{nm}^{(2c)}(Y) = -\mathcal{L}_{n-m}^c(Y) - i\alpha_m \mathcal{M}_{n-m}^c(Y) , \quad (3.148)$$

$$\mathcal{V}_{nm}^{(2c)}(Y) = \alpha_m^2 \mathcal{I}_{n-m}^c(Y) - i\alpha_m \mathcal{J}_{n-m}^c(Y) - \mathcal{N}_{n-m}(Y) . \quad (3.149)$$

Por otra parte, de las condiciones de contorno 3.139 y 3.140, se desprende que las funciones  $F_n^-(Y)$  y  $G_n^-(Y)$  deben satisfacer:

$$0 = F_n^-(0) , \quad (3.150)$$

$$0 = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[ i\alpha_m \mathcal{Q}_{n-m}^c(0) G_m^-(0) + \mathcal{R}_{n-m}^c(0) \frac{dG_m^-(0)}{dY} \right] , \quad (3.151)$$

y las condiciones 3.71, 3.72, 3.73 y 3.74 con  $Y_0^- > 0$  y reemplazando  $\alpha_o, \alpha_e, \beta_o, \beta_e, \beta_{om}$  y  $\beta_{en}$  por  $\alpha_o^c, \alpha_e^c, \beta_o^c, \beta_e^c, \beta_{om}^c$  y  $\beta_{en}^c$ , respectivamente.

El problema consiste entonces en resolver las ecuaciones 3.143 y 3.144 con los empalmes en  $Y = 0$  3.150 y 3.151 y en  $Y = Y_0^-$ . La resolución numérica es completamente análoga a la utilizada en la sección anterior. La única diferencia radica en que se trabaja ahora con una base de  $2L$  vectores linealmente independientes de  $2L$  componentes ya que las condiciones de contorno en  $Y = 0$  determinan el valor de  $F_n^-(0)$  y  $dG_n^-/dY(0)$ .

Presentaremos a continuación ejemplos de aplicación de los métodos investigados en este capítulo.

### 3.11. Ejemplos de aplicación

El formalismo desarrollado fue implementado numéricamente en redes cuyos perfiles admiten transformaciones de coordenadas biyectivas de la forma 3.13 y 3.17. Los coeficientes de Fourier fueron calculados utilizando el método de Gauss-Legendre. En los ejemplos que se mostrarán a continuación, se ha elegido considerar redes de perfil cicloidal definido por las siguientes ecuaciones paramétricas (figura 3.2):

$$\left. \begin{aligned} x &= X - a \operatorname{sen}(2\pi X/d) \\ y &= a \operatorname{cos}(2\pi X/d) \end{aligned} \right\} 0 \leq X \leq d. \quad (3.152)$$

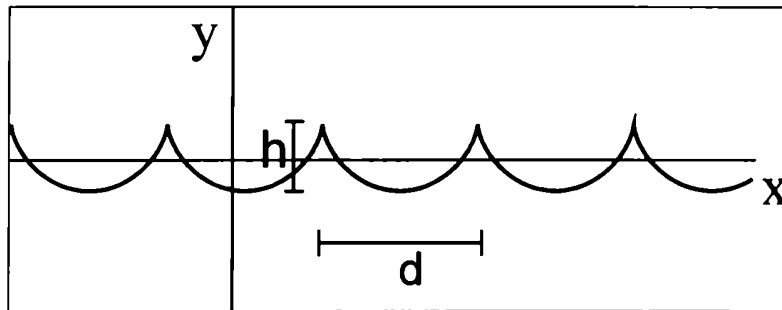


Figura 3.2: Perfil cicloidal

Para este perfil, las transformaciones 3.13 y 3.17 tienen un único término no nulo ( $n = 1$ ), luego:

$$u = U + i \frac{h}{2} \exp(iU) \quad Y \geq 0, \quad (3.153)$$

$$u = U + i \frac{h}{2} \exp(i\bar{U}) \quad Y \leq 0, \quad (3.154)$$

lo que reduce el tiempo de cómputo de los coeficientes  $a_n(Y)$ ,  $\mathcal{A}_n(Y)$ ,  $\mathcal{B}_n(Y)$ , etc. Más aún, en este caso los coeficientes de Fourier pueden evaluarse analíticamente, lo que permite controlar la precisión de la integración numérica que se efectúa utilizando el algoritmo de Adams-Moulton [33]. Para proceder a la integración numérica, deben seleccionarse el número de términos en los desarrollos

de Rayleigh ( $L$ ), el número de pasos para integrar los sistemas de ecuaciones diferenciales en la zona isótropa (NP1) y en la zona del cristal (NP2) y el intervalo de integración  $[Y_0^-, Y_0^+]$ . Estos parámetros fueron seleccionados imponiendo que: (1) se verifique la conservación de la energía con un error menor que 0.1% y (2) que las eficiencias de los órdenes difractados converjan dentro del mismo error. En los ejemplos que mostraremos a continuación, estas condiciones se cumplen para  $L=11$ ,  $NP1=NP2=120$  y  $|Y_0^-|=|Y_0^+|=d$ .

Se han realizado distintos chequeos para estudiar la consistencia de los resultados obtenidos con el código numérico. En primer término, se ha considerado el caso de una red casi plana eligiendo  $h/d$  (profundidad total sobre período)  $\approx 10^{-3}$ . En este caso, los valores de las eficiencias de los órdenes difractados son despreciables, excepto para los órdenes difractados con  $n = 0$  para los cuales se recuperan los coeficientes de reflexión y transmisión para una interfase plana entre un medio isótropo y un cristal uniaxial (apéndice A) [17].

### 3.11.1. Comparación con el método de Rayleigh

También se han comparado los resultados con los obtenidos utilizando el método de Rayleigh [13, 15]. En las tablas que se muestran a continuación, se presentan comparaciones entre las eficiencias de los órdenes reflejados y transmitidos, calculadas con el método riguroso de transformaciones conformes y no conformes (TCNC) y con el método basado en la hipótesis de Rayleigh (MR) para valores de  $h/d$  que exceden el límite de Rayleigh para conductor perfecto ( $h/d = 0.14$ ). Consideramos una red cicloidal del nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$  y  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$ ) con  $\hat{c}_0 = (\cos 40^\circ, 0, \sin 40^\circ)$ . La red es iluminada desde vacío por una onda con  $\lambda/d = 1$  (longitud de onda en vacío sobre período),  $\theta_0 = 5^\circ$  y polarización  $s$  (tabla 1) o  $p$  (tabla 2). La columna denotada con PC en ambas tablas muestra la suma de las eficiencias de los órdenes difractados, lo que permite controlar la conservación de la energía.



h/d		$r_{ss}^0$	$r_{sp}^0$	$t_{so}^0$	$t_{sc}^0$	PC
0.2	MR	$2.3499408 \cdot 10^{-2}$	$9.2912376 \cdot 10^{-4}$	0.5003882	0.3817185	0.999999
	TCNC	$2.3496660 \cdot 10^{-2}$	$9.3080794 \cdot 10^{-4}$	0.5004017	0.3817262	1.000574
0.28	MR	$1.8245516 \cdot 10^{-2}$	$7.2814030 \cdot 10^{-4}$	0.4819141	0.3734616	0.999988
	TCNC	$1.8271223 \cdot 10^{-2}$	$7.3011112 \cdot 10^{-4}$	0.4820557	0.3735013	1.001060
0.3	MR	$1.7799218 \cdot 10^{-2}$	$7.1314581 \cdot 10^{-4}$	0.4802781	0.3727218	0.999976
	TCNC	$1.7467225 \cdot 10^{-2}$	$7.0242068 \cdot 10^{-4}$	0.4820743	0.3733610	0.9988754

Tabla 1

h/d		$r_{ps}^0$	$r_{pp}^0$	$t_{po}^0$	$t_{pc}^0$	PC
0.2	MR	$9.2914164 \cdot 10^{-4}$	$1.5028942 \cdot 10^{-2}$	0.3808179	0.5782137	0.999999
	TCNC	$9.2834542 \cdot 10^{-4}$	$1.5030622 \cdot 10^{-2}$	0.3809170	0.5783031	1.000396
0.28	MR	$7.2845844 \cdot 10^{-4}$	$1.1780034 \cdot 10^{-2}$	0.3766673	0.5794421	0.999920
	TCNC	$7.2822438 \cdot 10^{-4}$	$1.1783635 \cdot 10^{-2}$	0.3769724	0.5796611	1.000639
0.3	MR	$7.1355747 \cdot 10^{-4}$	$1.1586352 \cdot 10^{-2}$	0.3762650	0.5795436	0.999846
	TCNC	$7.0156688 \cdot 10^{-4}$	$1.1589857 \cdot 10^{-2}$	0.3769473	0.5796857	1.000621

Tabla 2

Podemos observar que la coincidencia de los resultados obtenidos con ambos métodos es muy buena, aún para valores de  $h/d$  cercanos a  $1/\pi$ , para los cuales se espera que la hipótesis de Rayleigh no dé buenos resultados debido a que el perfil cicloidal presenta regiones de curvatura alta.

### 3.11.2. Interfase vacío-cristal uniaxial

Como primer ejemplo de aplicación del formalismo desarrollado, se estudiaron los efectos que aparecen al introducir un corrugado en una interfase periódica entre vacío y un cristal uniaxial iluminada desde el medio isótropo. Se eligió una superficie periódica de perfil cicloidal que separa vacío ( $\epsilon_i = 1, \mu_i = 1$ ) de nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51, \epsilon_{\parallel} = 1.78$  y  $\mu = 1$ ) con  $c_{0x} = c_{0y} = c_{0z}$  y se representaron las eficiencias del orden cero reflejado (fig. 3.3), transmitido ordinario (fig. 3.4) y transmitido extraordinario (fig. 3.5) para  $h/d$  (profundidad total sobre período) igual a 0.1 y a 0.2. La onda incidente tiene polarización  $s$  o  $p$  y su relación longitud de onda-período ( $\lambda/d$ ) es 0.5 o 1.

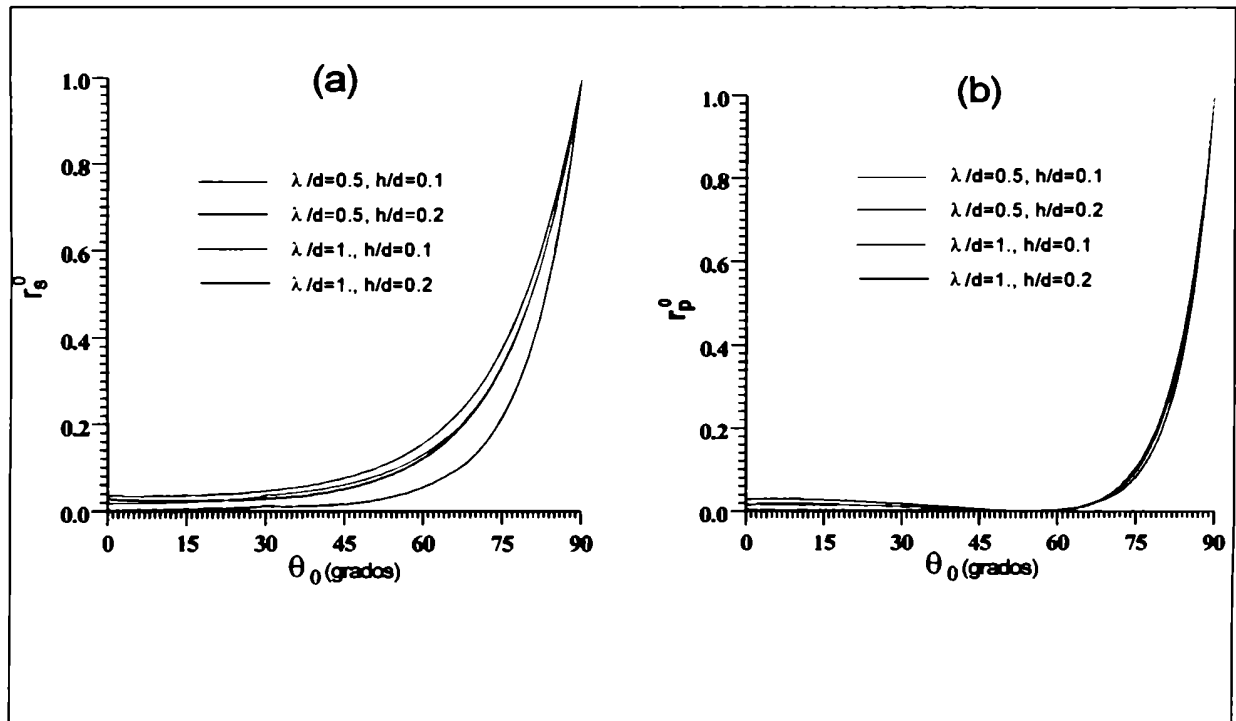


Figura 3.3: Eficiencia del orden cero reflejado en función del ángulo de incidencia para una red cicloidal entre vacío ( $\epsilon_i = 1$  y  $\mu_i = 1$ ) y nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51, \epsilon_{\parallel} = 1.78$  y  $\mu = 1$ ). La orientación del eje óptico es tal que  $c_{0x} = c_{0y} = c_{0z}$ . (a) la onda incidente tiene polarización  $s$ . (b) la onda incidente tiene polarización  $p$ .

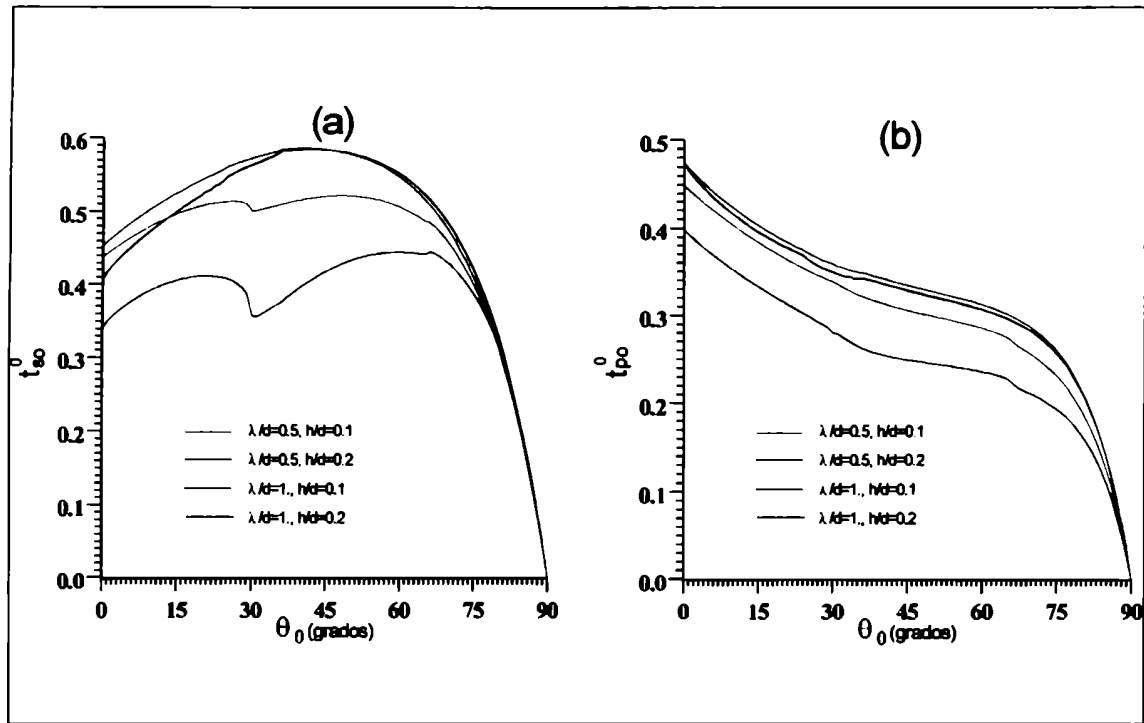


Figura 3.4: Eficiencia del orden cero transmitido ordinario en función del ángulo de incidencia para la configuración considerada en la figura anterior. (a) la onda incidente tiene polarización  $s$ . (b) la onda incidente tiene polarización  $p$ .

En todas las figuras se observa que para  $\lambda/d = 1$ , los valores de las eficiencias no presentan cambios notables al incrementar la profundidad de la red, ya que al ser la longitud de onda y el período del mismo orden, la superficie con corrugado periódico produce un efecto equivalente al de una interfase plana con un índice de refracción promedio. En cambio, las modificaciones son significativas al considerar  $\lambda/d=0.5$ .

Para ambos valores de  $\lambda/d$ , podemos observar que la eficiencia del orden cero reflejado es muy baja cuando el ángulo de incidencia es pequeño (fig. 3.3). Para estos ángulos la mayor parte de la energía incidente se transmite al cristal y se distribuye entre el orden cero transmitido ordinario y extraordinario (fig. 3.4 y 3.5).

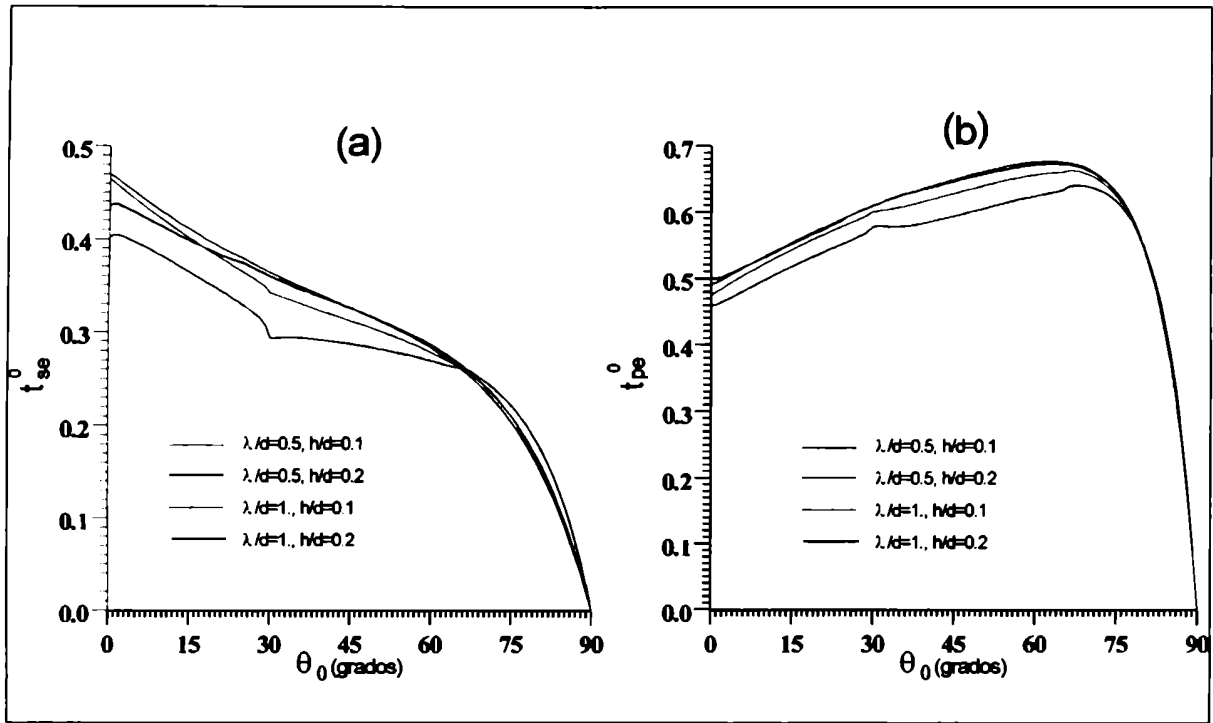


Figura 3.5: Eficiencia del orden cero transmitido extraordinario en función del ángulo de incidencia para la configuración considerada en la figura anterior. (a) la onda incidente tiene polarización *s*. (b) la onda incidente tiene polarización *p*.

Contrariamente, cuando la incidencia es casi rasante, la eficiencia del orden cero reflejado especularmente tiende a 1 y no hay energía transmitida al medio uniaxial.

En todos los gráficos las curvas presentan puntos de inflexión en aquellos de ángulos de incidencia donde algún orden difractado se convierte en evanescente. Estos ángulos se conocen, en el caso isótropo, como anomalías de Rayleigh y son aquellos para los cuales las componentes en la dirección *y* de los vectores de onda de los órdenes difractados son iguales a cero.

Si  $\beta_n$  es cero, el orden *n* reflejado se convierte en evanescente y las anomalías de Rayleigh se presentan en los ángulos de incidencia  $\theta_R$  tales que:

$$\text{sen } \theta_R = \left[ \pm \frac{\omega_0}{c} (\mu_i \epsilon_i)^{1/2} - n \frac{2\pi}{d} \right] \frac{c}{\omega_0 (\mu_i \epsilon_i)^{1/2}} . \quad (3.155)$$

Para el orden  $n$  transmitido, los ángulos  $\theta_R$  están dados por:

$$\text{sen } \theta_R = \left[ \pm \frac{\omega_0}{c} (\mu \epsilon_{\perp})^{1/2} - n \frac{2\pi}{d} \right] \frac{c}{\omega_0 (\mu_i \epsilon_i)^{1/2}} , \quad (3.156)$$

si la polarización es ordinaria o por:

$$\text{sen } \theta_R = \left[ \pm \left[ \frac{\omega_0^2 / c^2 \mu \epsilon_{\perp} \epsilon_{\parallel} (\epsilon_{\perp} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) c_{0y}^2)}{\epsilon_{\perp}^2 c_{0z}^2 + \epsilon_{\perp} \epsilon_{\parallel} (1 - c_{0z}^2)} \right]^{1/2} - n \frac{2\pi}{d} \right] \frac{c}{\omega_0 (\epsilon_i \mu_i)^{1/2}} , \quad (3.157)$$

si es extraordinaria.

En nuestro ejemplo observamos puntos de inflexión en  $\theta_0 \approx 30^\circ$  cuando  $\lambda/d = 0.5$ , lo que corresponde, de acuerdo con la ecuación 3.155, a la desaparición del orden 1 reflejado.

### 3.11.3. Interfase dieléctrico-cristal uniaxial

En este ejemplo estudiaremos una interfase periódica entre un dieléctrico y un cristal uniaxial cuando el índice de refracción del medio isótropo ( $n_i$ ) es mayor que los índices de refracción ordinario ( $n_o$ ) y extraordinario ( $n_e$ ).

Sabemos que en una interfase plana dieléctrico-cristal uniaxial iluminada desde el lado isótropo se transmiten dos ondas al cristal: una ordinaria y otra extraordinaria. Si los medios son tales que  $n_i > n_o$  y  $n_i > n_e$ , pueden encontrarse ángulos de incidencia  $\theta_R^o$  y  $\theta_R^e$  tales que si  $\theta_0 \geq \theta_R^o$  ( $\theta_0 \geq \theta_R^e$ ) la onda ordinaria (extraordinaria) se convierte en evanescente. Es decir que si el ángulo de incidencia  $\theta_0$  es tal que  $\theta_0 \geq \max(\theta_R^o, \theta_R^e)$  no hay flujo de energía hacia el cristal y toda la energía incidente vuelve al medio isótropo. Este fenómeno se conoce como reflexión total e implica que ambas ondas transmitidas (ordinaria y extraordinaria) se han transformado en evanescentes. Al introducir un corrugado, la reflexión total desaparece debido a la presencia de otros órdenes que se propagan en el

medio uniaxial. Para ilustrar este fenómeno, consideramos una onda plana con  $\lambda/d = 0.5$  que incide desde un medio isótropo con  $\epsilon_i = 3.5$  y  $\mu_i = 1$  a una red de nitrato de sodio con  $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$ ,  $\mu = 1$  y  $c_{0x} = c_{0y} = c_{0z}$ .

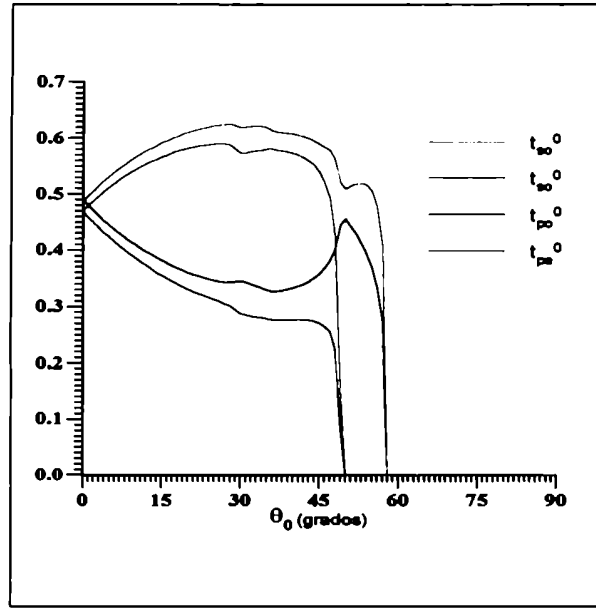


Figura 3.6: Eficiencia del orden cero transmitido ordinario y extraordinario en función del ángulo de incidencia para ambas polarizaciones de la onda incidente ( $s$  y  $p$ ). Un perfil cicloidal separa un medio dieléctrico ( $\epsilon_i = 3.5$  y  $\mu_i = 1$ ) de nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$  y  $\mu = 1$ ). Otros parámetros son  $c_{0x} = c_{0y} = c_{0z}$ ,  $\lambda/d = 0.5$  y  $h/d = 0.1$ .

En la figura 3.6 se han representado las eficiencias del orden cero transmitido ordinario y extraordinario en función del ángulo de incidencia y para ambas polarizaciones de la onda incidente ( $s$  y  $p$ ).

Como puede apreciarse en el gráfico, el orden cero transmitido ordinario (extraordinario) se propaga para ángulos de incidencia tales que  $0 \leq \theta_0 \leq 57.85^\circ$  ( $0 \leq \theta_0 \leq 49.06^\circ$ ). Es decir que si la superficie fuera plana, en la región  $\theta_0 \geq 57.85^\circ$  se produciría el fenómeno de reflexión total. En la región donde el orden cero de ambos tipos se propaga ( $0 \leq \theta_0 \leq 49.06^\circ$ ) la eficiencia asociada al orden ordinario

es mayor que la correspondiente al extraordinario cuando la polarización de la onda incidente es  $s$ , contrariamente a lo que se observa cuando la polarización incidente es  $p$ .

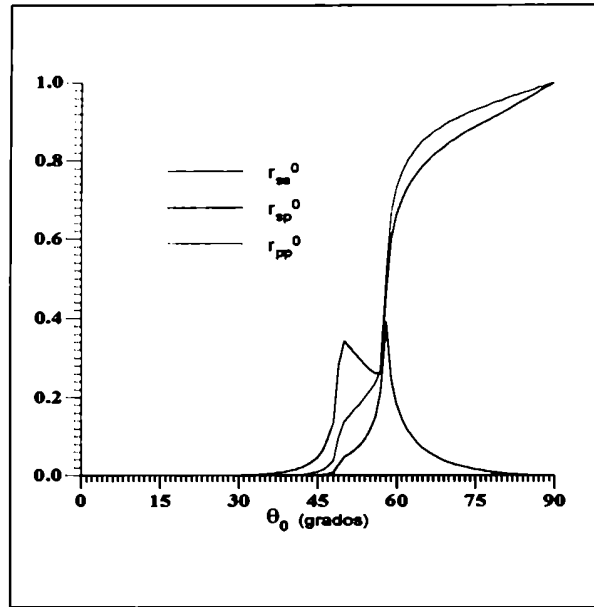


Figura 3.7: Eficiencia del orden cero reflejado en función del ángulo de incidencia para ambas polarizaciones de la onda incidente ( $s$  y  $p$ ). Un perfil cicloidal separa un medio dieléctrico ( $\epsilon_i = 3.5$  y  $\mu_i = 1$ ) de nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$  y  $\mu = 1$ ). Otros parámetros son  $c_{0x} = c_{0y} = c_{0z}$ ,  $\lambda/d = 0.5$  y  $h/d = 0.1$ .

En la figura 3.7 se muestran las eficiencias del orden cero reflejado ( $r_{ss}^0$ ,  $r_{pp}^0$  y  $r_{sp}^0$ ) en función del ángulo de incidencia.

Puede observarse que la fracción de la potencia incidente que no cambia su polarización al reflejarse en la interfase ( $r_{ss}$  y  $r_{pp}$ ) aumenta para aquellos ángulos de incidencia tales que  $\theta_0 \geq 57.85^\circ$ , es decir en la región donde se observa reflexión total para el caso de una superficie plana. Por otra parte, la curva correspondiente a  $r_{sp}^0$  muestra que la conversión de polarizaciones es muy baja excepto para ángulos de incidencia cercanos a  $57.85^\circ$ , donde presenta un valor máximo (aproximadamente el 40% de la energía incidente) y luego decae bruscamente al aumentar el valor de  $\theta_0$ .

#### 3.11.4. Interfase cristal uniaxial-metal

Investigaremos ahora el caso de una interfase periódica cristal uniaxial-metal iluminada desde el medio uniaxial. En este caso la reflexión de la onda incidente (ordinaria o extraordinaria) da lugar a órdenes difractados del tipo ordinario y extraordinario, que tienen diferentes polarizaciones y se propagan en direcciones distintas.

En los próximos ejemplos mostraremos algunos de los efectos novedosos asociados con la excitación de plasmones superficiales en interfaces anisótropas, pero primeramente recordaremos algunos aspectos esenciales del caso isótropo. Un plasmón superficial es una onda electromagnética que se propaga en la superficie de un metal [34]. Sabemos que en interfaces entre un medio dieléctrico y un metal, bajo ciertas condiciones, pueden acoplarse plasmones superficiales con fotones. Si la interfase es plana el acoplamiento no se produce, porque la constante de propagación del plasmón es mayor que el número de onda correspondiente a radiación electromagnética en el medio dieléctrico. Sin embargo, si la superficie es rugosa (como en una red) es posible acoplar la energía de la radiación electromagnética con los plasmones superficiales [34]. En este caso, la interacción fotón-plasmón produce una intensificación del campo electromagnético sobre la superficie de la red y una importante reducción de la intensidad de la luz reflejada.

Análogamente a lo que sucede en el caso isótropo, es posible excitar plasmones superficiales (bajo ciertas condiciones) en interfaces anisótropas. Mostraremos a continuación algunos ejemplos de este fenómeno, ilustrando los cambios que produce en la potencia absorbida en el metal (PA).

Consideramos una red cicloidal ( $h/d = 0.1$ ) entre nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$ ) y un metal. Ambos medios son no magnéticos ( $\mu_i = \mu = 1$ ) y  $\lambda/d = 1$ .

En las figuras 3.8 y 3.9 se muestra la potencia absorbida por un metal con distintos valores de su índice de refracción en función del ángulo de incidencia y considerando el eje óptico paralelo a los



surcos ( $\hat{c}_0 = (0, 0, 1)$ ). La figura 3.8 ( 3.9) corresponde al caso de una onda incidente con polarización ordinaria (extraordinaria).

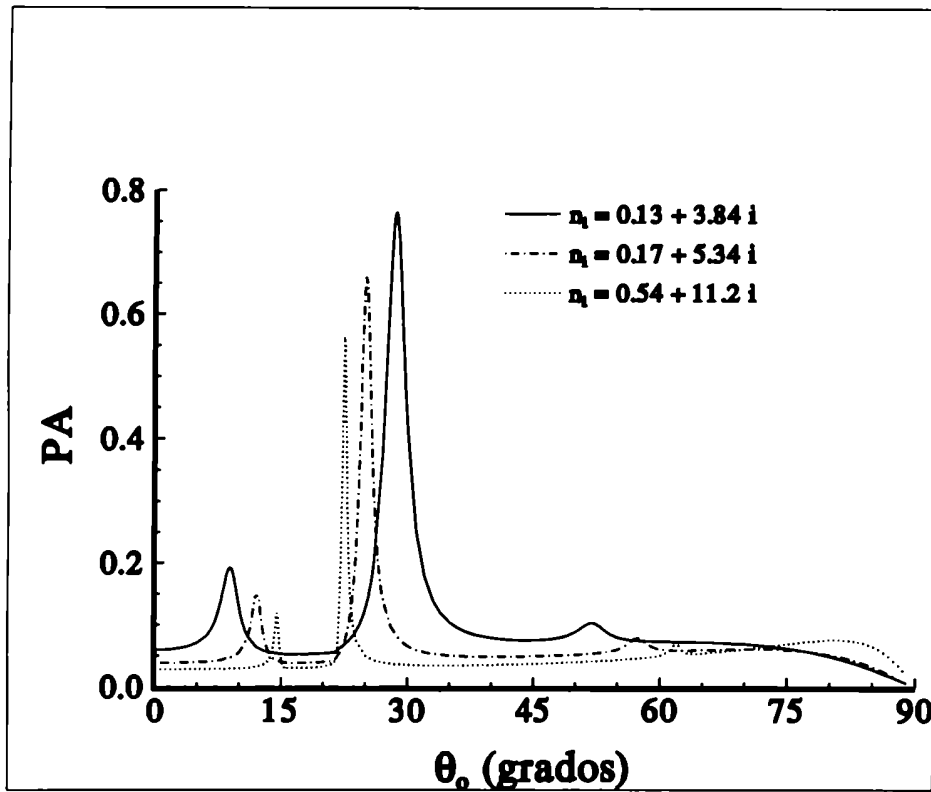


Figura 3.8: Potencia absorbida en función del ángulo de incidencia para una red cicloidal entre un metal y nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$ ). Ambos medios son no magnéticos. Otros parámetros son  $\hat{c}_0 = (0, 0, 1)$ ,  $h/d = 0.1$  y  $\lambda/d = 1$ . La polarización de la onda incidente es ordinaria.

Podemos observar que se presentan picos de absorción cuando la polarización de la onda incidente es ordinaria. Mostraremos ahora que estos máximos en la potencia absorbida por el metal están relacionados con la excitación de plasmones superficiales en la interfase.

Los ángulos de incidencia en los cuales se excitan los plasmones superficiales se encuentran resolviendo el problema de la red sin campos incidentes (problema homogéneo). Sin embargo, sólo es posible encontrar expresiones analíticas de estos ángulos en términos de los parámetros constitutivos

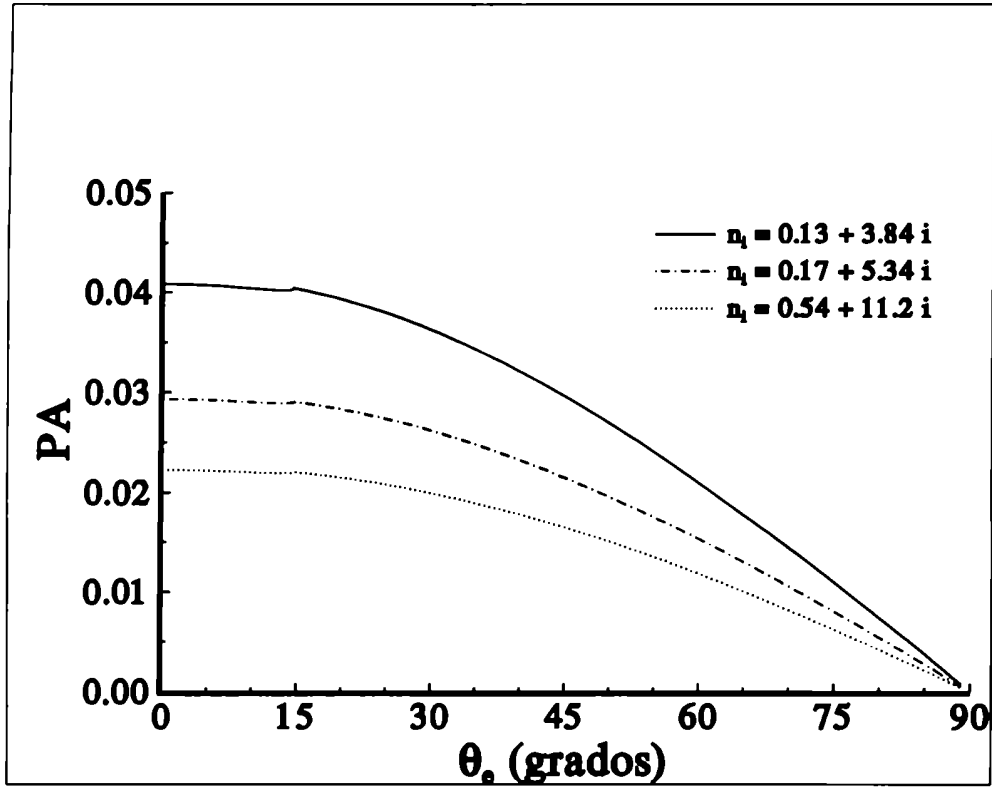


Figura 3.9: Potencia absorbida en función del ángulo de incidencia para una red cicloidal entre un metal y nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$ ). Ambos medios son no magnéticos. Otros parámetros son  $\hat{c}_0 = (0, 0, 1)$ ,  $h/d = 0.1$  y  $\lambda/d = 1$ . La polarización de la onda incidente es extraordinaria.

y geométricos de la interfase cuando la superficie es plana [35]. Si se asume que la presencia de un corrugado no perturba apreciablemente la propagación del plasmón, la posición de los picos puede determinarse en forma aproximada considerando una superficie plana entre un cristal uniaxial y un metal. En este caso, el campo eléctrico en el metal se escribe como:

$$\vec{E} = \left[ R_0 \hat{z} - \frac{c}{\omega_0 \epsilon_i} S_0 (\vec{k} \times \hat{z}) \right] \exp [i(\tilde{\alpha}_0 x + \tilde{\beta}_0 y)] , \quad (3.158)$$

donde  $\vec{k}$  es un vector de componentes complejas dado por:

$$\vec{k} = \tilde{\alpha}_0 \hat{x} + \tilde{\beta}_0 \hat{y} \quad (3.159)$$

y  $\tilde{\alpha}_0^2 + \tilde{\beta}_0^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \mu_i \epsilon_i$ . Por otra parte, el campo eléctrico en el medio uniaxial está dado por el término con  $n = 0$  en la ecuación 2.120:

$$\vec{E} = \left[ C_{o0} \vec{e}_{o0} \exp(i\vec{k}_{o0} \cdot \vec{r}) + C_{e0} \vec{e}_{e0} \exp(i\vec{k}_{e0} \cdot \vec{r}) \right], \quad (3.160)$$

donde los vectores  $\vec{e}_{o0}$  and  $\vec{e}_{e0}$  se obtienen a partir de las ecuaciones 2.125 y 2.126.

La constante compleja de propagación del plasmón  $\tilde{\alpha}_0$  se encuentra utilizando las condiciones de contorno en la interfase. De este modo se obtiene un sistema de cuatro ecuaciones lineales homogéneas con cuatro incógnitas ( $R_0$ ,  $S_0$ ,  $C_{o0}$  and  $C_{e0}$ ):

$$R_0 - (\vec{e}_{o0} \cdot \hat{z})C_{o0} - (\vec{e}_{e0} \cdot \hat{z})C_{e0} = 0, \quad (3.161)$$

$$S_0 - (\vec{h}_{o0} \cdot \hat{z})C_{o0} - (\vec{h}_{e0} \cdot \hat{z})C_{e0} = 0, \quad (3.162)$$

$$-\frac{c\tilde{\beta}_0}{\omega\epsilon_1} S_0 - (\vec{e}_{o0} \cdot \hat{x})C_{o0} - (\vec{e}_{e0} \cdot \hat{x})C_{e0} = 0, \quad (3.163)$$

$$\frac{c\tilde{\beta}_0}{\omega\mu_i} R_0 - (\vec{h}_{o0} \cdot \hat{x})C_{o0} - (\vec{h}_{e0} \cdot \hat{x})C_{e0} = 0. \quad (3.164)$$

Para que este sistema de ecuaciones tenga soluciones no triviales, su determinante debe ser igual a cero. Para el caso de interés en este ejemplo (eje óptico paralelo a los surcos), imponiendo esta condición se obtiene:

$$\tilde{\alpha}_0 = \left[ \frac{\omega_0^2 \epsilon_{\perp} \epsilon_i (\mu_i \epsilon_{\perp} - \mu \epsilon_i)}{c^2 (\epsilon_{\perp}^2 - \epsilon_i^2)} \right]^{1/2} \quad (3.165)$$

Reemplazando el valor de  $\tilde{\alpha}_0$  dado por la ecuación 3.165 en las condiciones de contorno, se obtiene la polarización del campo asociado al plasmón superficial en ambos medios. En este caso,  $R_0 = C_{e0} = 0$ , es decir que la polarización del campo eléctrico en el metal es  $p$  y en el cristal es del tipo ordinaria. Suponiendo que un corrugado periódico no cambia apreciablemente el valor de  $\tilde{\alpha}_0$  que se obtiene de la ecuación 3.165, podemos concluir que el acoplamiento entre fotones y plasmones se producirá solamente para un estado de polarización definido de la onda incidente (ordinaria) y en aquellos

ángulos de incidencia para los cuales algún  $\alpha_n$  (dado por la ecuación 2.94) sea igual a la parte real de  $\tilde{\alpha}_0$  (dado por la ecuación 3.165), es decir que:

$$\text{Re}(\tilde{\alpha}_0) = \alpha_n . \quad (3.166)$$

En este ejemplo, hemos verificado que los ángulos de incidencia que se obtienen de la condición 3.166 difieren en menos de  $0.5^\circ$  de aquellos en los cuales se observa los máximos en la figura 3.8. Por ejemplo, la curva en dicha figura que corresponde a  $n_i = 0.17 + 5.34 i$  presenta picos en  $\theta_o = 12.0^\circ, 25.0^\circ$  y  $57.4^\circ$ , mientras que los ángulos que predice la ecuación 3.166 son  $12.4^\circ, 24.5^\circ$  y  $57.8^\circ$ . Por lo tanto, si bien el corrugado produce leves diferencias entre los valores de  $\alpha$  correspondientes a los máximos y la constante de propagación de los plasmones, podemos concluir que en este ejemplo los picos de absorción están asociados con la excitación de plasmones superficiales en la interfase. Por otra parte, como puede observarse en las figuras 3.8 y 3.9, también se verifica que con esta orientación del eje óptico, el acoplamiento entre los fotones y los plasmones superficiales sólo se produce cuando la onda incidente es del tipo ordinario.

En este punto es interesante resaltar que el caso mostrado en este ejemplo equivale al de una red isótropa: una onda incidente ordinaria equivale a una onda con polarización  $p$  que se propaga en un medio dieléctrico con índice de refracción  $n_i = (\epsilon_\perp)^{1/2}$ , mientras que cuando la polarización incidente es extraordinaria, el problema es análogo al de un medio isótropo con índice de refracción  $n_i = (\epsilon_\parallel)^{1/2}$  iluminado por una onda con polarización  $s$ . Es decir que estas figuras reproducen el fenómeno de excitación de ondas superficiales en una red isótropa, que ocurre solamente cuando el campo eléctrico incidente tiene componente en el plano  $x - y$  (polarización  $p$ ).

Puede observarse que cuando no hay acoplamiento la potencia absorbida para ambas polarizaciones incidentes es muy baja (aproximadamente el 5% en este ejemplo) pero su valor crece abruptamente al 80% de la potencia incidente en la región de excitación de plasmones cuando  $n_i = 0.13 + 3.84i$ .

Para otras orientaciones del eje óptico, a diferencia de lo que sucede en el caso isótropo, ambas polarizaciones incidentes pueden excitar plasmones superficiales.

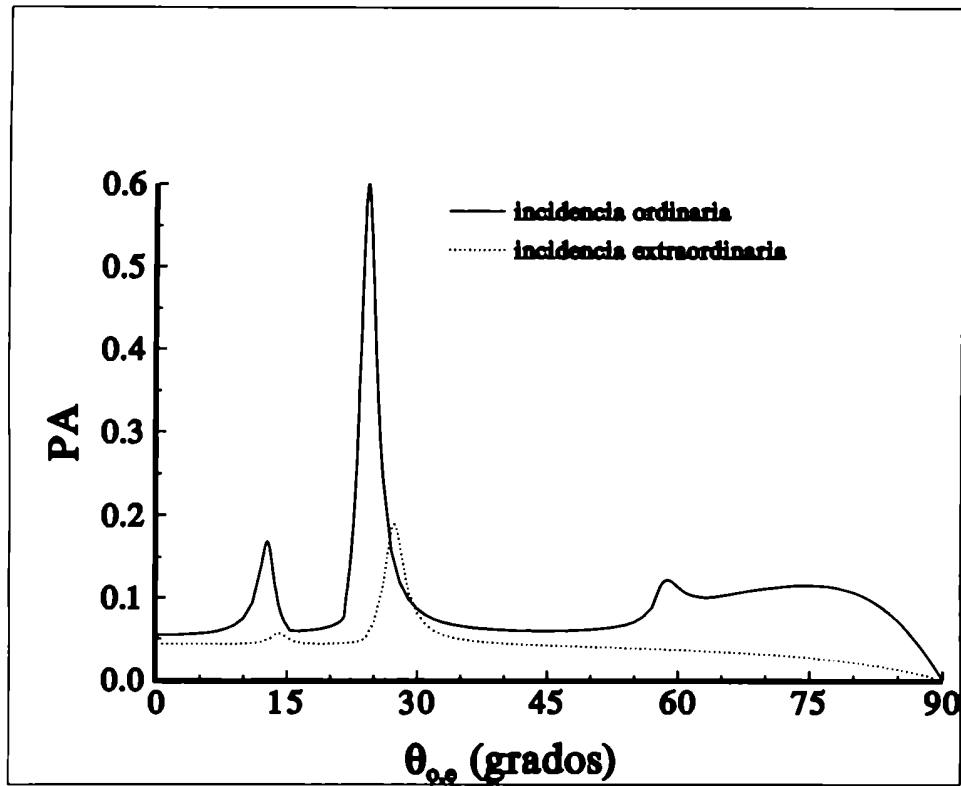


Figura 3.10: Potencia absorbida en función del ángulo de incidencia para una red cicloidal entre un metal ( $n_i = 0.13 + 3.84i$  y  $\mu_i = 1$ ) y nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$  y  $\mu = 1$ ). Otros parámetros son  $\hat{c}_0 = 2^{-1/2}(0, 1, 1)$ ,  $h/d = 1$  y  $\lambda/d = 1$ .

En la figura 3.10 se muestra la potencia absorbida (PA) en función del ángulo de incidencia en una red con  $\hat{c}_0$  en el plano  $y - z$  y  $n_i = 0.13 + 3.84i$  para incidencia ordinaria y extraordinaria.

Con esta orientación del eje óptico, el campo eléctrico del modo ordinario y del extraordinario tiene componente en el plano  $x - y$ , dando lugar al acoplamiento entre plasmones y fotones para ambas polarizaciones del campo incidente, como lo indica la presencia de picos de absorción en ambas curvas representadas en esta figura.

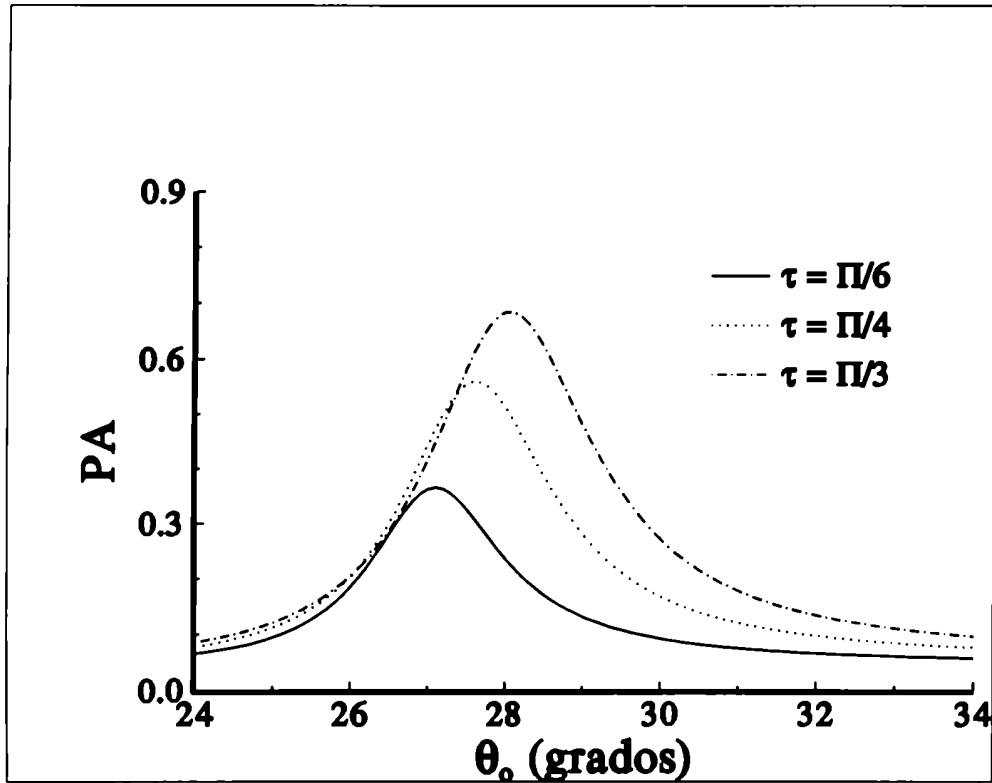


Figura 3.11: Potencia absorbida en función del ángulo de incidencia para una red cicloidial entre un metal ( $n_i = 0.13 + 3.84i$  y  $\mu_i = 1$ ) y nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$  y  $\mu = 1$ ). El eje óptico está en el plano de la interfase y forma un ángulo  $\tau$  con el eje  $x$ . Otros parámetros son  $h/d = 0.1$  y  $\lambda/d = 1$ . La onda incidente tiene polarización ordinaria.

Finalmente, en las figuras 3.11 y 3.12 se ha representado la potencia absorbida (PA) en función del ángulo de incidencia para una red con  $n_i = 0.13 + 3.84i$  y considerando el eje óptico contenido en el plano de la interfase pero formando distintos ángulos con el eje  $x$  ( $\tau$ ). Puede apreciarse en estos gráficos el corrimiento de los picos de absorción debido a los cambios en las orientaciones relativas de  $\hat{c}_0$  respecto a la dirección de los surcos.

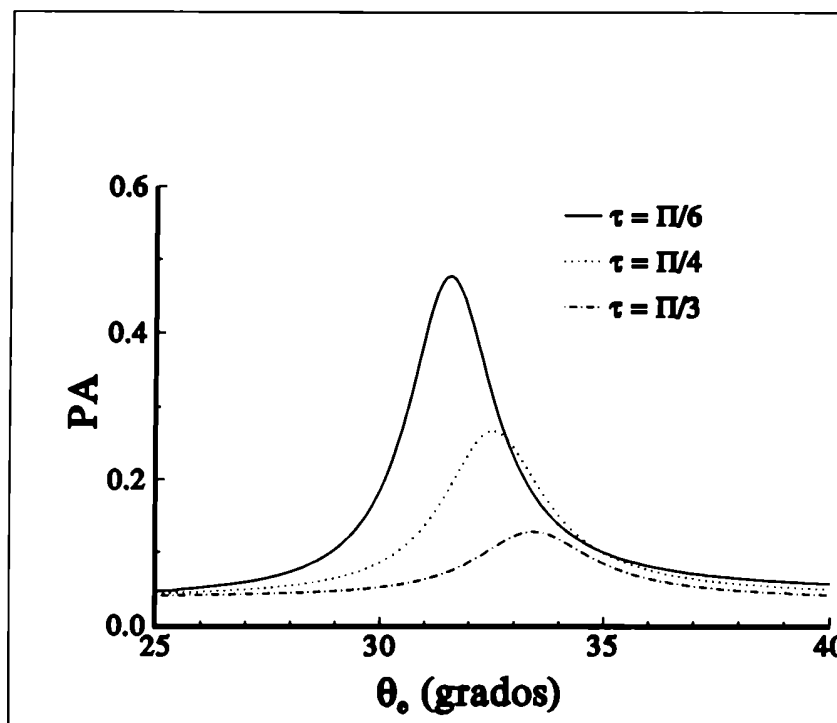


Figura 3.12: Potencia absorbida en función del ángulo de incidencia para una red cicloidal entre un metal ( $n_i = 0.13 + 3.84i$  y  $\mu_i = 1$ ) y nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$  y  $\mu = 1$ ). El eje óptico está en el plano de la interfase y forma un ángulo  $\tau$  con el eje  $x$ . Otros parámetros son  $h/d = 0.1$  y  $\lambda/d = 1$ . La onda incidente tiene polarización extraordinaria.

### 3.11.5. Interfase cristal uniaxial-conductor perfecto

Como hemos visto en la sección 3.10, el método de transformaciones conformes aplicado a redes entre un cristal uniaxial y un conductor perfecto permite tratar redes de profundidad y perfil arbitrarios. En este ejemplo estudiaremos redes de perfil triangular con  $h/d$  fijo para distintos valores de los ángulos  $\delta_1$  y  $\delta_2$  que forman los lados del triángulo con el eje  $x$  (fig. 3.13).

Consideramos tres combinaciones de valores de  $\delta_1$  y  $\delta_2$  que determinan la misma relación  $h/d$ :

- a)  $\delta_1 = 10.6^\circ$  y  $\delta_2 = 81.4^\circ$
- b)  $\delta_1 = \delta_2 = 20^\circ$

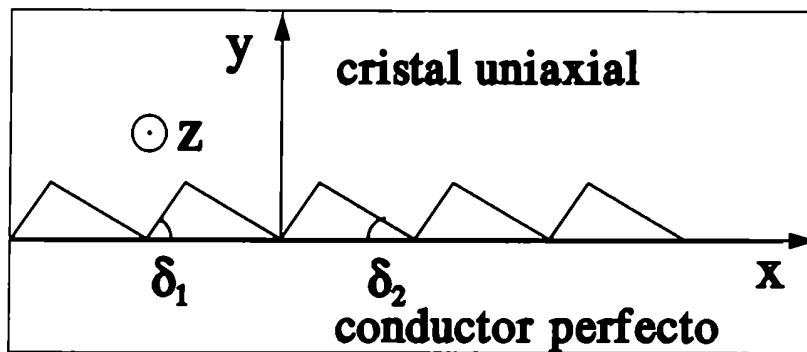


Figura 3.13: Red triangular entre un cristal uniaxial y un conductor perfecto. Los lados del triángulo forman ángulos  $\delta_1$  y  $\delta_2$  con el eje  $x$ .

c)  $\delta_1 = 44.4^\circ$  y  $\delta_2 = 12.6^\circ$ .

Para este ejemplo se ha elegido  $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$  (nitrato de sodio),  $c_{0x} = c_{0y} = c_{0z}$  y  $\lambda/d = 1$ .

Las figuras 3.14- 3.17 muestran la eficiencia de los órdenes reflejados 0 y -1 en función del ángulo de incidencia. Las figuras 3.14 y 3.15 corresponden a los órdenes difractados del tipo ordinario producidos por una onda incidente ordinaria ( $r_{oo}^0$  y  $r_{oo}^{-1}$ ), mientras las figuras 3.16 y 3.17 corresponden a los órdenes difractados extraordinarios producidos por una onda incidente con polarización extraordinaria ( $r_{ee}^0$  y  $r_{ee}^{-1}$ ).

En todos los gráficos se observa que las curvas dependen fuertemente del valor de  $\delta_1$  y  $\delta_2$ . Por ejemplo, las figuras 3.15 y 3.17 muestran que las eficiencias del orden reflejado -1 disminuye al aumentar el valor de  $\delta_1$ . Este es un resultado muy interesante que podría ser utilizado para caracterizar diferentes tipos de perfil triangular de acuerdo con la energía transportada por este orden.

Nuevamente, en todas las figuras se observan anomalías de Rayleigh en aquellos ángulos de incidencia  $\theta_R$  para los cuales un orden reflejado (ordinario o extraordinario) se convierte en evanescente. Como hemos mencionado anteriormente, los ángulos  $\theta_R$  se obtienen pidiendo que  $\beta_{om}$  en la ecuación 2.122 (para un orden ordinario) o  $\Phi_n$  en la ecuación 2.124 sea igual a cero. Para calcular los valores de



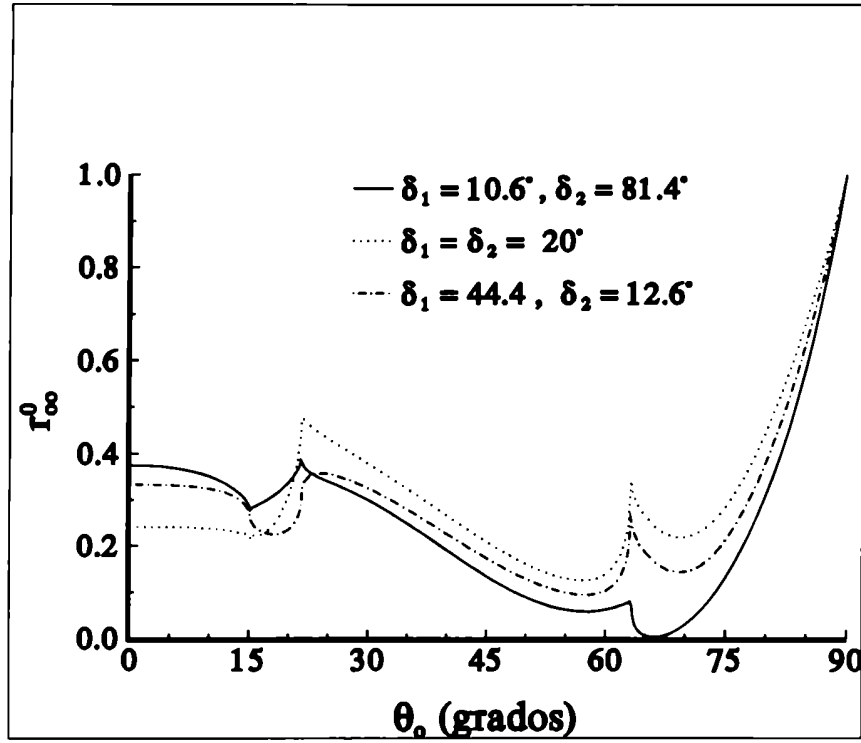


Figura 3.14: Eficiencia del orden cero reflejado ordinario en función del ángulo de incidencia para una red triangular entre un conductor perfecto y nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$ ).  $c_{0x} = c_{0y} = c_{0z}$  y  $\lambda_0/d = 1$ . La onda incidente tiene polarización ordinaria.

$\theta_R$ , consideramos dos casos:

1) La polarización de la onda incidente es ordinaria

Combinando las ecuaciones 2.49 y 2.122 o 2.49 y 2.119, se obtiene para el orden  $n$  reflejado del tipo ordinario:

$$\text{sen } \theta_R = \pm 1 - \frac{cn2\pi}{d\omega_0(\epsilon_{\perp}\mu)^{1/2}}, \quad (3.167)$$

y para el extraordinario:

$$\text{sen } \theta_R = \left[ \pm \left[ \frac{\omega_0^2/c^2 \mu \epsilon_{\perp} \epsilon_{\parallel} (\epsilon_{\perp} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) c_{0y}^2)}{\epsilon_{\perp}^2 c_{0z}^2 + \epsilon_{\perp} \epsilon_{\parallel} (1 - c_{0z}^2)} \right]^{1/2} - n \frac{2\pi}{d} \right] \frac{c}{\omega_0(\epsilon_{\perp}\mu)^{1/2}}. \quad (3.168)$$

2) La polarización de la onda incidente es extraordinaria

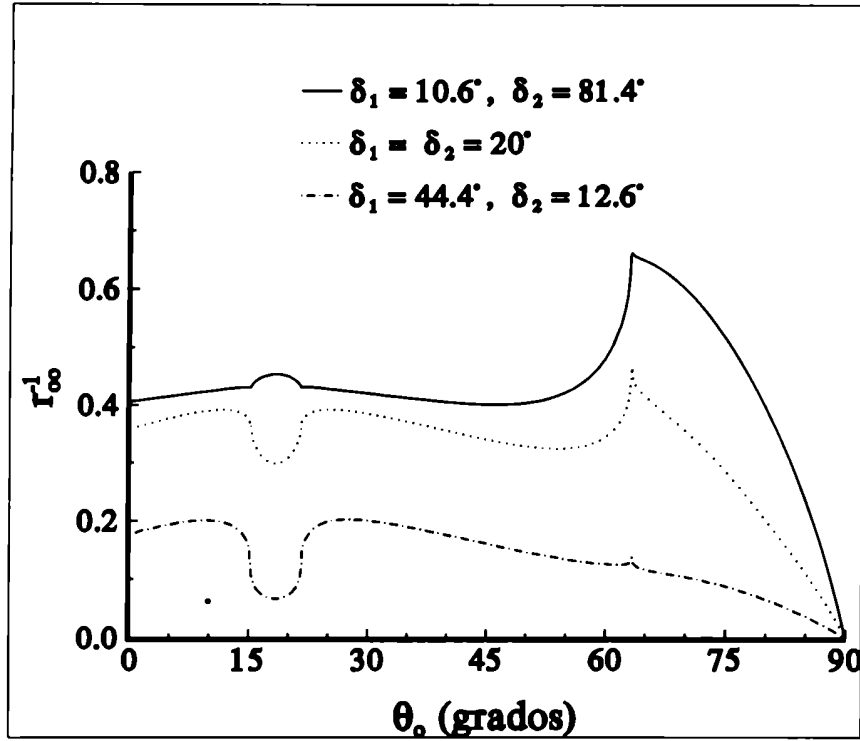


Figura 3.15: Eficiencia del orden -1 reflejado ordinario en función del ángulo de incidencia para una red triangular entre un conductor perfecto y nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$ ).  $c_{0x} = c_{0y} = c_{0z}$  y  $\lambda_0/d = 1$ . La onda incidente tiene polarización ordinaria.

En este caso,  $\beta_e$  en la ecuación 2.54 puede escribirse en términos de  $\alpha_e$  como:

$$\beta_e = \frac{-(\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp})c_{0x}c_{0y}\alpha_e - (\Phi_0)^{1/2}}{\epsilon_{\perp} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp})c_{0y}^2}, \quad (3.169)$$

donde

$$\Phi_0 = \frac{\omega_0^2}{c^2} \epsilon_{\parallel} \epsilon_{\perp} \mu [(\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp})c_{0y}^2 + \epsilon_{\perp}] + \alpha_e^2 \epsilon_{\perp} [\epsilon_{\parallel}(c_{0z}^2 - 1) - \epsilon_{\perp}c_{0z}^2]. \quad (3.170)$$

Utilizando esta expresión y el hecho de que  $\tan \theta_e = \alpha_e/\beta_e$ , puede verse que los ángulos  $\theta_R$  para los cuales se observan las anomalías de Rayleigh están dados por:

$$\tan \theta_R = \frac{\alpha_e [\epsilon_{\perp} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp})c_{0y}^2]}{(\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel})c_{0x}c_{0y}\alpha_e - (\Phi_0)^{1/2}}, \quad (3.171)$$

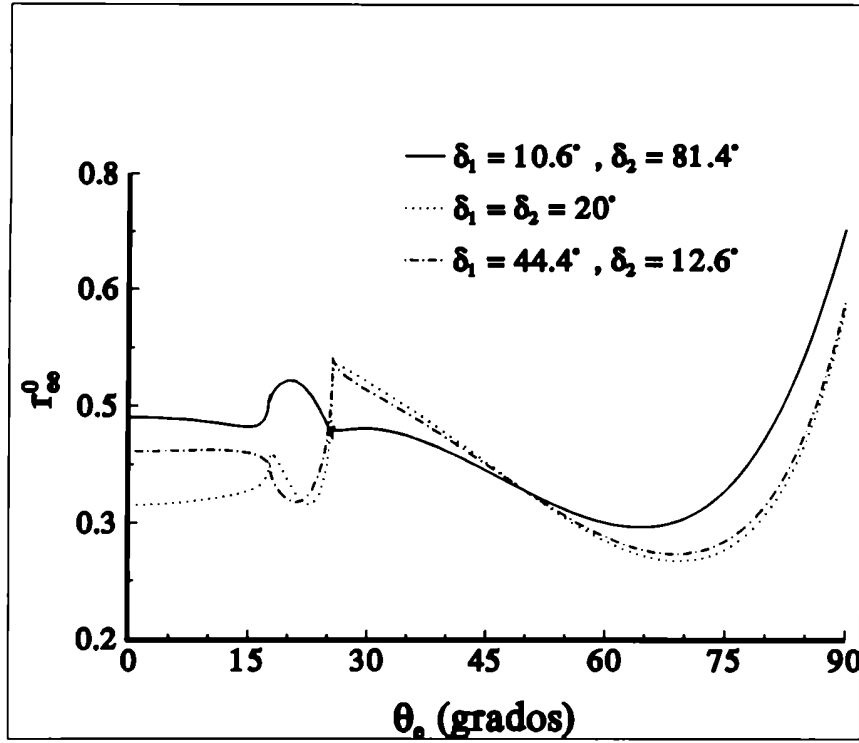


Figura 3.16: Eficiencia del orden cero reflejado extraordinario en función del ángulo de incidencia para una red triangular entre un conductor perfecto y nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$ ).  $c_{0x} = c_{0y} = c_{0z}$  y  $\lambda/d = 1$ . La onda incidente tiene polarización extraordinaria.

donde  $\alpha_c$  es la componente  $x$  del vector de onda incidente que satisface la condición  $\beta_{om} = 0$  para un orden reflejado ordinario o  $\Phi_n = 0$  para un orden del tipo extraordinario.

Utilizando la ecuación 2.122 se obtiene:

$$\alpha_c = \pm \frac{\omega_0}{c} (\mu\epsilon_{\perp})^{1/2} - n \frac{2\pi}{d}, \quad (3.172)$$

para un orden ordinario, mientras que de la ecuación 2.119 resulta:

$$\alpha_c = \left[ \pm \left[ \frac{\omega_0^2/c^2 \mu\epsilon_{\perp}\epsilon_{\parallel}(\epsilon_{\perp} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp})c_{0y}^2)}{\epsilon_{\perp}^2 c_{0z}^2 + \epsilon_{\perp}\epsilon_{\parallel}(1 - c_{0z}^2)} \right]^{1/2} - n \frac{2\pi}{d} \right], \quad (3.173)$$

para un orden difractado extraordinario.

Para el caso ilustrado en las figuras 3.14 y 3.15, de la ecuación 3.167 se obtiene  $\theta_R = 15.23^\circ$

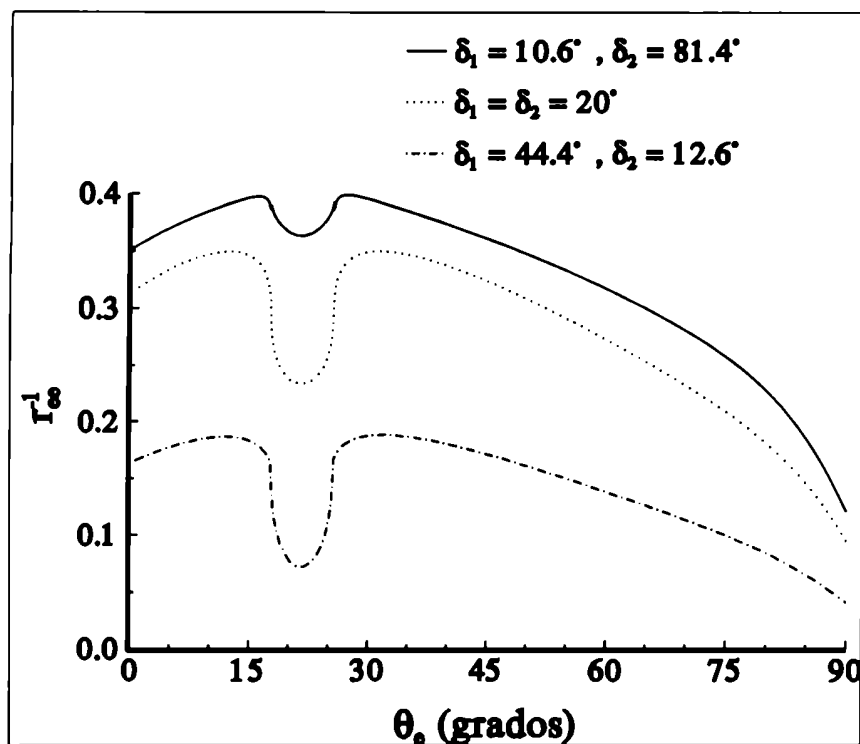


Figura 3.17: Eficiencia del orden -1 reflejado extraordinario en función del ángulo de incidencia para una red triangular entre un conductor perfecto y nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$ ).  $c_{0x} = c_{0y} = c_{0z}$  y  $\lambda_0/d = 1$ . La onda incidente tiene polarización extraordinaria.

(orden -2 ordinario),  $15.13^{\circ}$  (orden 1 extraordinario),  $21.63^{\circ}$  (orden 1 ordinario),  $21.74^{\circ}$  (orden -2 extraordinario),  $63.16^{\circ}$  (orden 0 extraordinario) y  $63.37^{\circ}$  (orden -3 ordinario) mientras que para el caso de las figuras 3.16 y 3.17 la ecuación 3.173 predice anomalías de Rayleigh en  $\theta_R = 17.64^{\circ}$  (orden 1 extraordinario),  $17.76^{\circ}$  (orden -2 ordinario),  $25.62^{\circ}$  (orden 1 ordinario) y  $25.75^{\circ}$  (orden -2 extraordinario). Estos valores concuerdan con los ángulos de incidencia para los cuales las curvas en las figuras 3.14- 3.17 presentan anomalías de Rayleigh.

Hemos resuelto en este capítulo el problema de la difracción de luz en redes uniaxiales en montaje clásico utilizando un formalismo diferencial riguroso. Este ha sido el primer formalismo riguroso que aparece en la literatura para tratar superficies periódicas entre un medio isótropo y un cristal uniaxial [25, 26, 27]. El método desarrollado emplea transformaciones conformes y no conformes y reduce el problema a la resolución numérica de un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas de segundo orden y con coeficientes variables. Los chequeos y las comparaciones realizadas con el método de Rayleigh en situaciones en que se espera que éste dé resultados confiables confirman que el método conduce a códigos computacionales seguros y con un amplio rango de aplicaciones. Sin embargo, el formalismo presenta la dificultad de encontrar cuál es la transformación conforme 3.13 que convierte cada superficie periódica en un plano. Por otra parte, si bien el hecho de encontrar la transformación no conforme 3.17 a partir de la transformación conforme 3.13 resulta ventajoso pues permite aprovechar la información contenida en los coeficientes  $b_n$  (determinados al tratar la zona isótropa), no asegura la biyectividad de la transformación no conforme para cualquier tipo de perfil. Estos inconvenientes no se presentan en el poderoso formalismo basado en las transformaciones covariantes que fue desarrollado por Chandezon [28, 29] para resolver redes isótropas. En el capítulo siguiente se generalizará dicho formalismo para investigar el caso de la difracción de luz en una red anisótropa en montaje clásico y cónico.

#### 4. Método de transformaciones covariantes

En este capítulo se continuará con el estudio de métodos que permiten resolver las ecuaciones de propagación en la zona de los surcos y simplificar el tratamiento de las condiciones de contorno utilizando transformaciones de coordenadas. Con el objeto de superar las limitaciones que presenta el método de transformaciones conformes y no conformes, se utilizará otro tipo de transformación (no conforme) que fue empleada con éxito para tratar redes isótropas con estratos corrugados en montaje clásico y cónico [28, 29]. Aplicaremos dicha transformación a la resolución del problema de una superficie periódica entre un medio isótropo (dieléctrico, metal o conductor perfecto) y un cristal (uniaxial o biaxial) iluminada desde cualquiera de los medios por una onda cuyo vector de onda tiene una orientación arbitraria con respecto a los surcos (montaje cónico). Como aplicación del formalismo desarrollado, se comparan los resultados con los obtenidos utilizando el método de Rayleigh [16] y se estudia la conversión de polarizaciones  $s - p$  en redes uniaxiales profundas y la excitación de plasmones superficiales en interfases metal-cristal uniaxial y metal-cristal biaxial.

La transformación que se empleará en este capítulo está definida por [28, 29]

$$\begin{aligned}u &= x , \\v &= y - a(x) , \\w &= z ,\end{aligned}\tag{4.1}$$

donde  $(x, y, z)$  y  $(u, v, w)$  son las coordenadas originales y transformadas, respectivamente. Cuando utilizamos esta transformación de coordenadas la interfase periódica se transforma en un plano y las coordenadas  $x$  y  $z$  no cambian. A diferencia de las transformaciones conformes y no conformes utilizadas en el capítulo anterior con las cuales sólo transformamos las dependencias de los campos, emplearemos 4.1 para convertir los versores cartesianos en una terna de versores no ortogonales en

el espacio transformado.

#### 4.1. Ecuaciones de propagación

Escribiremos ahora las ecuaciones de Maxwell 2.1 y 2.2 en el espacio transformado en la zona del medio isotrópico y en la zona del cristal. Como se verá a continuación, las ecuaciones de propagación en el medio anisótropo serán formuladas considerando la forma más general posible para el tensor dieléctrico, y por lo tanto resultarán válidas tanto para un cristal uniaxial como para un biaxial.

##### 4.1.1. Medio isotrópico

En el sistema de coordenadas transformado, la ecuación 2.1 se escribe como:

$$\left[ \bar{v}^1 \frac{\partial}{\partial u} + \bar{v}^2 \frac{\partial}{\partial v} + \bar{v}^3 \frac{\partial}{\partial w} \right] (E_u \bar{v}_1 + E_v \bar{v}_2 + E_w \bar{v}_3) = \frac{i\omega_0}{c} \mu_i (H_u \bar{v}_1 + H_v \bar{v}_2 + H_w \bar{v}_3) , \quad (4.2)$$

donde hemos supuesto una dependencia armónica del tiempo de la forma  $\exp(-i\omega_0 t)$ . Los vectores  $\bar{v}$  son los vectores contravariantes y covariantes y para este sistema están dados por [36]:

$$\begin{aligned} \bar{v}^1 &= \hat{x}, \quad \bar{v}^2 = \hat{y} - a' \hat{x}, \quad \bar{v}^3 = \hat{z}, \\ \bar{v}_1 &= \hat{x} + a' \hat{y}, \quad \bar{v}_2 = \hat{y}, \quad \bar{v}_3 = \hat{z}, \end{aligned}$$

donde  $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$  son los versores cartesianos en el espacio original y  $a'$  es la derivada de  $a(u)$  respecto de  $u$ .

Análogamente, la ecuación 2.2 se transforma en:

$$\left[ \bar{v}^1 \frac{\partial}{\partial u} + \bar{v}^2 \frac{\partial}{\partial v} + \bar{v}^3 \frac{\partial}{\partial w} \right] (H_u \bar{v}_1 + H_v \bar{v}_2 + H_w \bar{v}_3) = -\frac{i\omega_0}{c} \epsilon_i (E_u \bar{v}_1 + E_v \bar{v}_2 + E_w \bar{v}_3) . \quad (4.3)$$

Desarrollando las ecuaciones 4.2 y 4.3 se obtiene un sistema de seis ecuaciones con seis incógnitas ( $E_u, E_v, E_w, H_u, H_v$  y  $H_w$ ). Siguiendo la notación presentada en [29], este sistema se escribe en forma matricial como:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{C} \end{bmatrix} \mathbf{G} = \frac{i\omega_0}{c} \begin{bmatrix} \mathbf{O} & \mu_i \mathbf{T}_1 \\ -\epsilon_i \mathbf{T}_1 & \mathbf{O} \end{bmatrix} \mathbf{G} , \quad (4.4)$$

donde  $\mathbf{O}$  es una matriz de ceros ( $3 \times 3$ ). Las matrices  $\mathbf{C}$  ( $3 \times 3$ ) y  $\mathbf{T}_1$  ( $3 \times 3$ ) están dadas por:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} -a' \frac{\partial}{\partial w} & \frac{-\partial}{\partial w} & \frac{\partial}{\partial v} \\ a' \frac{\partial}{\partial u} + a'' - [1 + a'^2] \frac{\partial}{\partial v} & \frac{\partial}{\partial u} - a' \frac{\partial}{\partial v} & 0 \\ \frac{\partial}{\partial w} & 0 & \frac{-\partial}{\partial u} + a' \frac{\partial}{\partial v} \end{bmatrix}, \quad (4.5)$$

$$\mathbf{T}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a' & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (4.6)$$

y  $\mathbf{G}$  es un vector formado por las incógnitas del problema:

$$\begin{bmatrix} E_u \\ E_v \\ E_w \\ H_u \\ H_v \\ H_w \end{bmatrix}.$$

Es fácil demostrar que las ecuaciones pueden ser reescritas de forma tal que el número de incógnitas en el sistema 4.4 se reduzca a cuatro: las componentes de los campos paralelas a la interfase. Esto resulta muy útil, ya que una reducción a un sistema de cuatro incógnitas permite una resolución numérica más rápida y eficiente. Más aún, el uso de las componentes paralelas a la superficie de la red resulta muy adecuado para imponer la continuidad de las componentes tangenciales de  $\vec{E}$  y  $\vec{H}$  en la interfase. Por lo tanto, consideramos un sistema de  $4 \times 4$ , donde las incógnitas son las componentes  $E_{\parallel}$ ,  $E_w$ ,  $H_{\parallel}$  y  $H_w$ , siendo las componentes  $\parallel$  aquellas tangenciales a la superficie de la red en el plano  $x - y$ :

$$H_{\parallel} = [1 + a'^2] H_u + a' H_v, \quad (4.7)$$

$$E_{\parallel} = [1 + a'^2] E_u + a' E_v. \quad (4.8)$$

mientras que las componentes  $w$  son tangenciales a la superficie de la red y paralelas a los surcos:

$$H_w = H_z, \quad (4.9)$$

$$E_w = E_z. \quad (4.10)$$



Escribiendo la ecuación 4.4 en términos de las componentes  $\parallel$  y  $w$  de los campos, se obtiene:

$$\frac{\partial E_{\parallel}}{\partial v} = \frac{\partial}{\partial u} \left[ \mathcal{Y}^2(u) E_{\parallel} - \frac{\mathcal{Y}^1(u)}{\epsilon_i} \left( \frac{c\gamma}{\omega_0} H_{\parallel} + \frac{ic}{\omega_0} \frac{\partial H_w}{\partial u} \right) \right] - \frac{i\omega_0 \mu_i}{c} H_w, \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial E_w}{\partial v} = \mathcal{Y}^1(u) \left[ \left( \frac{i\omega_0 \mu_i}{c} - \frac{i\gamma^2 c}{\omega_0 \epsilon_i} \right) H_{\parallel} + \frac{c\gamma}{\omega_0 \epsilon_i} \frac{\partial H_w}{\partial u} \right] + \mathcal{Y}^2(u) \frac{\partial E_w}{\partial u}, \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial H_{\parallel}}{\partial v} = \frac{\partial}{\partial u} \left[ \mathcal{Y}^2(u) H_{\parallel} + \mathcal{Y}^1(u) \left( \frac{c\gamma}{\omega_0 \mu_i} E_{\parallel} + \frac{ic}{\omega_0 \mu_i} \frac{\partial E_w}{\partial u} \right) \right] + \frac{i\omega_0 \epsilon_i}{c} E_w, \quad (4.13)$$

$$\frac{\partial H_w}{\partial v} = \mathcal{Y}^1(u) \left[ \left( -\frac{i\omega_0 \epsilon_i}{c} + \frac{ic\gamma^2}{\omega_0 \mu_i} \right) E_{\parallel} - \frac{c\gamma}{\omega_0 \mu_i} \frac{\partial E_w}{\partial u} \right] + \mathcal{Y}^2(u) \frac{\partial H_w}{\partial u}, \quad (4.14)$$

donde hemos considerado el hecho de que la única dependencia en  $z$  de los campos es aquella debida a la componente  $z$  del vector de onda incidente, es decir que cada componente de los campos  $F$  depende de la coordenada  $w$  en la forma:

$$F(u, v, w) = F(u, v) \exp(i\gamma w), \quad (4.15)$$

y por lo tanto  $\partial/\partial w = i\gamma$ .  $\mathcal{Y}^1(u)$  e  $\mathcal{Y}^2(u)$  son funciones periódicas que dependen del perfil de la red y cuyas expresiones son:

$$\mathcal{Y}^1(u) = \frac{1}{1 + a'^2},$$

$$\mathcal{Y}^2(u) = \frac{a'}{1 + a'^2}.$$

#### 4.1.2. Medio anisótropo

Al igual que en el medio isótropo, en la zona anisótropa la ecuación 2.1 se transforma en:

$$\left[ \bar{v}^1 \frac{\partial}{\partial u} + \bar{v}^2 \frac{\partial}{\partial v} + \bar{v}^3 \frac{\partial}{\partial w} \right] (E_u \bar{v}_1 + E_v \bar{v}_2 + E_w \bar{v}_3) = \frac{i\omega_0}{c} \mu (H_u \bar{v}_1 + H_v \bar{v}_2 + H_w \bar{v}_3), \quad (4.16)$$

donde hemos reemplazado  $\mu_i$  por  $\mu$ .

Siguiendo un procedimiento similar, la ecuación 2.2 se escribe como:

$$\left[ \bar{v}^1 \frac{\partial}{\partial u} + \bar{v}^2 \frac{\partial}{\partial v} + \bar{v}^3 \frac{\partial}{\partial w} \right] (H_u \bar{v}_1 + H_v \bar{v}_2 + H_w \bar{v}_3) = -\frac{i\omega_0}{c} (D_u \bar{v}_1 + D_v \bar{v}_2 + D_w \bar{v}_3). \quad (4.17)$$

Teniendo en cuenta la ecuación 2.5, las componentes  $D_u$ ,  $D_v$  y  $D_w$  se escriben en términos de  $E_u$ ,  $E_v$  y  $E_w$  como sigue:

$$D_u = \epsilon_{uu}E_u + \epsilon_{uv}E_v + \epsilon_{uw}E_w, \quad (4.18)$$

$$D_v = \epsilon_{vu}E_u + \epsilon_{vv}E_v + \epsilon_{vw}E_w, \quad (4.19)$$

$$D_w = \epsilon_{wu}E_u + \epsilon_{wv}E_v + \epsilon_{ww}E_w, \quad (4.20)$$

donde  $\epsilon_{i,j}$  ( $i, j = u, v$  o  $w$ ) son los elementos del tensor  $\bar{\epsilon}$  en el espacio transformado. Expresando las componentes  $D_u$ ,  $D_v$  y  $D_w$  en la ecuación 4.17 en términos de  $E_u$ ,  $E_v$  y  $E_w$ , las ecuaciones 4.16 y 4.17 representan un sistema de seis ecuaciones con seis incógnitas, que en notación matricial se escribe:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{C} \end{bmatrix} \mathbf{G} = \frac{i\omega_0}{c} \begin{bmatrix} \mathbf{O} & \mu \mathbf{T}_1 \\ -\mathbf{T}_2 & \mathbf{O} \end{bmatrix} \mathbf{G}, \quad (4.21)$$

donde  $\mathbf{C}$ ,  $\mathbf{O}$ ,  $\mathbf{T}_1$  y  $\mathbf{G}$  han sido definidas anteriormente y:

$$\mathbf{T}_2 = \begin{bmatrix} \epsilon_{uu} & \epsilon_{uv} & \epsilon_{uw} \\ a' \epsilon_{uu} + \epsilon_{vu} & a' \epsilon_{uv} + \epsilon_{vv} & a' \epsilon_{uw} + \epsilon_{vw} \\ \epsilon_{wu} & \epsilon_{wv} & \epsilon_{ww} \end{bmatrix}. \quad (4.22)$$

Los elementos del tensor dieléctrico en el espacio transformado se expresan en términos de aquellos en la base cartesiana como:

$$\epsilon_{uu} = \epsilon_{xx} + a' \epsilon_{xy}, \quad (4.23)$$

$$\epsilon_{uv} = \epsilon_{xy}, \quad (4.24)$$

$$\epsilon_{uw} = \epsilon_{xz}, \quad (4.25)$$

$$\epsilon_{vu} = a' (\epsilon_{yy} - \epsilon_{xx}) + (1 - a'^2) \epsilon_{xy}, \quad (4.26)$$

$$\epsilon_{vv} = -a' \epsilon_{xy} + \epsilon_{yy}, \quad (4.27)$$

$$\epsilon_{vw} = -a' \epsilon_{xz} + \epsilon_{yz}, \quad (4.28)$$

$$\epsilon_{wu} = a' \epsilon_{zy} + \epsilon_{zz} , \quad (4.29)$$

$$\epsilon_{wv} = \epsilon_{zy} , \quad (4.30)$$

$$\epsilon_{ww} = \epsilon_{zz} . \quad (4.31)$$

Análogamente a lo que sucede en la zona isótropa, el sistema 4.21 puede reducirse a un sistema en el cual las incógnitas son las componentes tangenciales a la superficie de la red  $E_{\parallel}$ ,  $E_w$ ,  $H_{\parallel}$  y  $H_w$ :

$$\frac{\partial E_{\parallel}}{\partial v} = \frac{\partial}{\partial u} \left[ \mathcal{X}^5(u) E_{\parallel} + \mathcal{X}^2(u) \left( -\frac{c\gamma}{\omega_0} H_{\parallel} - \frac{ic}{\omega_0} \frac{\partial H_w}{\partial u} - \epsilon_{vw} E_w \right) \right] - \frac{i\omega_0\mu}{c} H_w , \quad (4.32)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_w}{\partial v} &= \left[ \frac{i\omega_0\mu}{c} \mathcal{Y}^1(u) - \frac{i\gamma^2 c}{\omega_0} \mathcal{X}^2(u) \right] H_{\parallel} + i\gamma \mathcal{X}^3(u) E_{\parallel} + \frac{c\gamma}{\omega_0} \mathcal{X}^2(u) \frac{\partial H_w}{\partial u} \\ &\quad - i\gamma \mathcal{X}^4(u) E_w + \mathcal{Y}^2(u) \frac{\partial E_w}{\partial u} , \end{aligned} \quad (4.33)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_{\parallel}}{\partial v} &= \frac{\partial}{\partial u} \left[ \mathcal{Y}^2(u) H_{\parallel} + \mathcal{Y}^1(u) \left( \frac{c\gamma}{\omega_0\mu} E_{\parallel} + \frac{ic}{\omega_0\mu} \frac{\partial E_w}{\partial u} \right) \right] + \frac{i\omega_0}{c} \mathcal{X}^7(u) E_{\parallel} \\ &\quad + i\gamma \mathcal{X}^8(u) H_{\parallel} - \mathcal{X}^8(u) \frac{\partial H_w}{\partial u} + \frac{i\omega_0}{c} \mathcal{X}^{10}(u) E_w , \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_w}{\partial v} &= \left[ -\frac{i\omega_0}{c} \mathcal{X}^{11}(u) + \frac{ic\gamma^2}{\omega_0\mu} \mathcal{Y}^1(u) \right] E_{\parallel} + i\gamma \left[ \mathcal{X}^{12}(u) + \mathcal{Y}^2(u) \right] H_{\parallel} - \mathcal{X}^{12}(u) \frac{\partial H_w}{\partial u} \\ &\quad + \frac{i\omega_0}{c} \mathcal{X}^{13}(u) E_w - \frac{c\gamma}{\omega_0\mu} \mathcal{Y}^1(u) \frac{\partial E_w}{\partial u} . \end{aligned} \quad (4.35)$$

Las funciones denotadas con  $\mathcal{X}$  en las ecuaciones 4.32, 4.33, 4.34 y 4.35 se definen como:

$$\begin{aligned} \mathcal{X}^1(u) &= 1 + a'^2 - a' \frac{\epsilon_{vu}}{\epsilon_{vv}} , \\ \mathcal{X}^2(u) &= \frac{1}{\epsilon_{vv} \mathcal{X}^1(u)} , \\ \mathcal{X}^3(u) &= \frac{\mathcal{X}^1(u) - (1 + a'^2)}{(1 + a'^2) a' \mathcal{X}^1(u)} , \\ \mathcal{X}^4(u) &= \epsilon_{vw} \mathcal{X}^2(u) , \\ \mathcal{X}^5(u) &= \frac{\mathcal{X}^1(u) - 1}{a' \mathcal{X}^1(u)} , \\ \mathcal{X}^6(u) &= \mathcal{X}^4(u) , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{X}^7(u) &= \frac{\epsilon_{wu}}{\mathcal{X}^1(u)} + \epsilon_{wv} \left[ \frac{\mathcal{X}^1(u) - (1 + a'^2)}{a' \mathcal{X}^1(u)} \right] , \\
\mathcal{X}^8(u) &= \frac{a' \epsilon_{wu}}{\epsilon_{vv} \mathcal{X}^1(u)} - \frac{\epsilon_{wv} (1 + a'^2)}{\epsilon_{vv} \mathcal{X}^1(u)} , \\
\mathcal{X}^{10}(u) &= \mathcal{X}^8(u) \epsilon_{vw} + \epsilon_{wv} , \\
\mathcal{X}^{11}(u) &= \frac{\epsilon_{uu}}{\mathcal{X}^1(u)} + \epsilon_{uv} \left[ \frac{\mathcal{X}^1(u) - (1 + a'^2)}{a' \mathcal{X}^1(u)} \right] , \\
\mathcal{X}^{12}(u) &= -\frac{a' \epsilon_{uu}}{\epsilon_{vv} \mathcal{X}^1(u)} + \frac{\epsilon_{uv} (1 + a'^2)}{\epsilon_{vv} \mathcal{X}^1(u)} , \\
\mathcal{X}^{13}(u) &= \mathcal{X}^{12}(u) \epsilon_{vw} - \epsilon_{uv} .
\end{aligned}$$

## 4.2. Transformación de los campos incidentes y difractados

Hemos encontrado en la sección anterior las ecuaciones de propagación que se derivan de las ecuaciones de Maxwell en el espacio transformado. El próximo paso es transformar las expresiones de los campos incidentes y difractados en el medio isótropo y en el cristal.

### 4.2.1. Medio isótropo

Comenzamos transformando los campos en la región isótropa. Partiendo de la ecuación 2.44, la componente  $w$  del campo eléctrico incidente  $E_{1w}^i$  se escribe en el espacio transformado como:

$$E_{1w}^i(u, v, w) = R \exp(i \gamma_0 w - i \beta_0 v) \exp[i \alpha_0 u - i \beta_0 a(u)] , \quad (4.36)$$

mientras que la componente  $w$  del campo magnético es (ec. 2.45):

$$H_{1w}^i(u, v, w) = S \exp(i \gamma_0 w - i \beta_0 v) \exp[i \alpha_0 u - i \beta_0 a(u)] . \quad (4.37)$$

Utilizando un desarrollo en series de Fourier, las ecuaciones 4.36 y 4.37 se reescriben como:

$$E_{1w}^i(u, v, w) = R \sum_m L_m(\beta_0) \exp[i(\alpha_m u - \beta_0 v + \gamma_0 w)] , \quad (4.38)$$

y

$$H_{1w}^i(u, v, w) = S \sum_m L_m(\beta_0) \exp[i(\alpha_m u - \beta_0 v + \gamma_0 w)] , \quad (4.39)$$

donde

$$L_m(s) = \frac{1}{d} \int_0^d \exp[-i [a(u) s + m K u]] du , \quad (4.40)$$

con  $K = 2\pi/d$ . El siguiente paso es encontrar las componentes  $\parallel$  de los campos incidentes. Insertando los desarrollos 4.36 y 4.37 en las ecuaciones de propagación 4.12 y 4.14, se encuentra que estas componentes se expresan como:

$$E_{1\parallel}^i(u, v, w) = \frac{1}{f1} \sum_m \left[ \left( \frac{\alpha_0}{\beta_0} m K - \beta_0 \right) S + (\alpha_0 + m K) \frac{\gamma_0 c}{\omega_0 \mu_i} R \right] L_m(\beta_0) \exp[i(\alpha_m u - \beta_0 v + \gamma_0 w)] , \quad (4.41)$$

$$H_{1\parallel}^i(u, v, w) = \frac{1}{f2} \sum_m \left[ \left( \frac{\alpha_0}{\beta_0} m K - \beta_0 \right) R - (\alpha_0 + m K) \frac{\gamma_0 c}{\omega_0 \epsilon_i} S \right] L_m(\beta_0) \exp[i(\alpha_m u - \beta_0 v + \gamma_0 w)] , \quad (4.42)$$

donde

$$f1 = \frac{c \gamma_0^2}{\omega_0 \mu_i} - \frac{\omega_0 \epsilon_i}{c} ,$$

$$f2 = -\frac{c \gamma_0^2}{\omega_0 \epsilon_i} + \frac{\omega_0 \mu_i}{c} .$$

Queremos ahora obtener las expresiones de los campos difractados en el espacio transformado. Utilizando un procedimiento análogo al empleado con los campos incidentes y las ecuaciones 2.108 y 2.109, se obtiene que las componentes  $w$  de los campos difractados en el medio isótropo están dadas por:

$$E_{1w}^d(u, v, w) = \sum_n \sum_m R_n L_{m-n}(-\beta_n) \exp[i(\alpha_m u + \beta_n v + \gamma w)] , \quad (4.43)$$

$$H_{1w}^d(u, v, w) = \sum_n \sum_m S_n L_{m-n}(-\beta_n) \exp[i(\alpha_m u + \beta_n v + \gamma w)] , \quad (4.44)$$

donde el índice  $n$  numera el orden propagante difractado en el medio isótropo. Insertando estas expresiones en las ecuaciones 4.12 y 4.14, se encuentran las componentes  $\parallel$  de los campos difractados:

$$E_{1\parallel}^d(u, v, w) = \frac{1}{f_1} \sum_n \sum_m \left[ \left[ -\frac{\alpha_n}{\beta_n} (m-n) K + \beta_n \right] S_n + [\alpha_n + (m-n) K] \frac{\gamma c}{\omega_0 \mu_i} R_n \right] \times L_{m-n}(-\beta_n) \exp[i(\alpha_m u + \beta_n v + \gamma w)] , \quad (4.45)$$

$$H_{1\parallel}^d(u, v, w) = \frac{1}{f_2} \sum_n \sum_m \left[ \left[ -\frac{\alpha_n}{\beta_n} (m-n) K + \beta_n \right] R_n - [\alpha_n + (m-n) K] \frac{\gamma c}{\omega_0 \epsilon_i} S_n \right] \times L_{m-n}(-\beta_n) \exp[i(\alpha_m u + \beta_n v + \gamma w)] . \quad (4.46)$$

#### 4.2.2. Medio anisótropo

Ahora transformaremos el campo incidente y difractado en el medio anisótropo. Acá debemos distinguir las expresiones en los cristales uniaxiales de las correspondientes a los cristales biaxiales. Siguiendo el procedimiento empleado en la zona isótropa, partiendo de las ecuaciones 2.58, 2.59, 2.63 y 2.64, se encuentra que las componentes  $w$  de los campos incidentes están dadas por:

$$E_{2w}^i(u, v, w) = C_{o,e} (\vec{e}_{o,e} \cdot \hat{z}) \sum_m [L_m(-\beta_{o,e}) \exp[i(\alpha_m u + \beta_{o,e} v + \gamma_{o,e} w)] , \quad (4.47)$$

$$H_{2w}^i(u, v, w) = C_{o,e} (\vec{h}_{o,e} \cdot \hat{z}) \sum_m [L_m(-\beta_{o,e}) \exp[i(\alpha_m u + \beta_{o,e} v + \gamma_{o,e} w)] , \quad (4.48)$$

si el cristal es uniaxial o por:

$$E_{2w}^i(u, v, w) = C_{1,2} (\vec{e}_{1,2} \cdot \hat{z}) \sum_m L_m(-\beta_{1,2}^b) \exp[i(\alpha_m u + \beta_{1,2}^b v + \gamma_{1,2}^b w)] , \quad (4.49)$$

$$H_{2w}^i(u, v, w) = C_{1,2} (\vec{h}_{1,2} \cdot \hat{z}) \sum_m L_m(-\beta_{1,2}^b) \exp[i(\alpha_m u + \beta_{1,2}^b v + \gamma_{1,2}^b w)] , \quad (4.50)$$

si es biaxial.

Combinando las ecuaciones 4.33 y 4.35 se obtienen las componentes  $\parallel$  de los campos incidentes.

Para un cristal uniaxial se tiene:

$$E_{2\parallel}^i(u, v, w) = \sum_m [(i\beta_{o,e} J_{1n} + i\alpha_m J_{4n} + J_{5n}) (\vec{e}_{o,e} \cdot \hat{z}) + (i\beta_{o,e} J_{2n} + i\alpha_m J_{3n}) (\vec{h}_{o,e} \cdot \hat{z})] \times C_{o,e} L_m(-\beta_{o,e}) \exp[i(\alpha_m u + \beta_{o,e} v + \gamma_{o,e} w)] , \quad (4.51)$$

$$H_{2\parallel}^i(u, v, w) = \sum_m [(i\beta_{o,e} I_{1n} + i\alpha_m I_{4n} + I_{5n}) (\vec{e}_{o,e} \cdot \hat{z}) + (i\beta_{o,e} I_{2n} + i\alpha_m I_{3n}) (\vec{h}_{o,e} \cdot \hat{z})] \times C_{o,e} L_m(-\beta_{o,e}) \exp[i(\alpha_m u + \beta_{o,e} v + \gamma_{o,e} w)] , \quad (4.52)$$

mientras que si el cristal es biaxial, las expresiones son:

$$E_{2\parallel}^i(u, v, w) = \sum_m [(i\beta_{1,2}^b J_{1n} + i\alpha_m J_{4n} + J_{5n}) (\vec{e}_{1,2} \cdot \hat{z}) + (i\beta_{1,2}^b J_{2n} + i\alpha_m J_{3n}) (\vec{h}_{1,2} \cdot \hat{z})] \times C_{1,2} L_m(-\beta_{1,2}^b) \exp[i(\alpha_m u + \beta_{1,2}^b v + \gamma_{1,2}^b w)] , \quad (4.53)$$

$$H_{2\parallel}^i(u, v, w) = \sum_m [(i\beta_{1,2}^b I_{1n} + i\alpha_m I_{4n} + I_{5n}) (\vec{e}_{1,2} \cdot \hat{z}) + (i\beta_{1,2}^b I_{2n} + i\alpha_m I_{3n}) (\vec{h}_{1,2} \cdot \hat{z})] \times C_{1,2} L_m(-\beta_{1,2}^b) \exp[i(\alpha_m u + \beta_{1,2}^b v + \gamma_{1,2}^b w)] . \quad (4.54)$$

Las  $I$ 's y las  $J$ 's son las transformadas de Fourier de las siguientes funciones:

$$I_1(u) = \left[ \frac{i\omega_0 \mu}{c} \mathcal{Y}^1(u) - \frac{ic\gamma^2}{\omega_0} \mathcal{X}^2(u) + \frac{i\gamma^2 \mathcal{X}^3(u) [\mathcal{X}^{12}(u) + \mathcal{Y}^2(u)]}{\frac{\omega_0}{c} \mathcal{X}^{11}(u) - \frac{c\gamma^2}{\omega_0 \mu} \mathcal{Y}^1(u)} \right]^{-1} ,$$

$$I_2(u) = \frac{\gamma \mathcal{X}^3(u) I_1(u)}{\frac{\omega_0}{c} \mathcal{X}^{11}(u) - \frac{c\gamma^2}{\omega_0 \mu} \mathcal{Y}^1(u)} ,$$

$$I_3(u) = I_2(u) \mathcal{X}^{12}(u) - \frac{c\gamma}{\omega_0} \mathcal{X}^2(u) I_1(u) ,$$

$$I_4(u) = \frac{c\gamma}{\omega_0 \mu} \mathcal{Y}^1(u) I_2(u) - \mathcal{Y}^2(u) I_1(u) ,$$

$$I_5(u) = -\frac{i\omega_0}{c} \mathcal{X}^{13}(u) I_2(u) + i\gamma \mathcal{X}^4(u) I_1(u) ,$$

$$J(u) = -\frac{i\omega_0}{c} \mathcal{X}^{11}(u) + \frac{ic\gamma^2}{\omega_0 \mu} \mathcal{Y}^1(u) ,$$

$$J_1(u) = -I_1(u) \gamma i [\mathcal{X}^{12}(u) + \mathcal{Y}^2(u)] / J ,$$

$$J_2(u) = [1 - I_2(u) \gamma i [\mathcal{X}^{12}(u) + \mathcal{Y}^2(u)]] / J ,$$

$$\begin{aligned}
J_3(u) &= [\mathcal{X}^{12}(u) - I_3(u) \gamma i [\mathcal{X}^{12}(u) + \mathcal{Y}^2(u)]] / J, \\
J_4(u) &= \left[ \frac{c \gamma}{\omega_0 \mu} \mathcal{Y}^1(u) - I_4(u) \gamma i [\mathcal{X}^{12}(u) + \mathcal{Y}^2(u)] \right] / J, \\
J_5(u) &= \left[ -I_5(u) \gamma i [\mathcal{X}^{12}(u) + \mathcal{Y}^2(u)] - \frac{i \omega_0}{c} \mathcal{X}^{13}(u) \right] / J.
\end{aligned}$$

Transformaremos ahora los campos difractados en el medio anisótropo. Si el cristal es uniaxial, las componentes  $\parallel$  de estos campos están dadas por:

$$\begin{aligned}
E_{2\parallel}^d(u, v, w) &= \sum_{n,m,p} \{ [i \beta_{on} (e_{onz} J_{1p} + h_{onz} J_{2p}) + i \alpha_m h_{onz} J_{3p} + (i \alpha_m J_{4p} + J_{5p}) e_{onz}] C_{on} \\
&\times L_{m-n}(-\beta_{on}) \exp(i \beta_{on} v) + [i \beta_{en} (e_{enz} J_{1p} + h_{enz} J_{2p}) + i \alpha_m h_{enz} J_{3p} + (i \alpha_m J_{4p} + J_{5p}) e_{enz}] \\
&\times C_{en} L_{m-n}(-\beta_{en}) \exp(i \beta_{en} v) \} \exp[i(\alpha_m u + \gamma w)], \tag{4.55}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{2\parallel}^d(u, v, w) &= \sum_{n,m,p} \{ [i \beta_{on} (e_{onz} I_{1p} + h_{onz} I_{2p}) + i \alpha_m h_{onz} I_{3p} + (i \alpha_m I_{4p} + I_{5p}) e_{onz}] C_{on} \\
&\times L_{m-n}(-\beta_{on}) \exp(i \beta_{on} v) + [i \beta_{en} (e_{enz} I_{1p} + h_{enz} I_{2p}) + i \alpha_m h_{enz} I_{3p} + (i \alpha_m I_{4p} + I_{5p}) e_{enz}] \\
&\times C_{en} L_{m-n}(-\beta_{en}) \exp(i \beta_{en} v) \} \exp[i(\alpha_m u + \gamma w)], \tag{4.56}
\end{aligned}$$

mientras que las componentes  $w$  se escriben como (ecs. 2.120 y 2.129):

$$\begin{aligned}
E_{2w}^d(u, v, w) &= \sum_{n,m} [C_{on} e_{onz} L_{m-n}(-\beta_{on}) \exp(i \beta_{on} v) + C_{en} e_{enz} L_{m-n}(-\beta_{en}) \exp(i \beta_{en} v)] \\
&\times \exp[i(\alpha_m u + \gamma w)], \tag{4.57}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{2w}^d(u, v, w) &= \sum_{n,m} [C_{on} h_{onz} L_{m-n}(-\beta_{on}) \exp(i \beta_{on} v) + C_{en} h_{enz} L_{m-n}(-\beta_{en}) \exp(i \beta_{en} v)] \\
&\times \exp[i(\alpha_m u + \gamma w)], \tag{4.58}
\end{aligned}$$

donde  $e_{onz}$ ,  $h_{onz}$ ,  $e_{enz}$  y  $h_{enz}$  son las componentes  $z$  de los vectores  $\vec{e}_{on}$ ,  $\vec{h}_{on}$ ,  $\vec{e}_{en}$  y  $\vec{h}_{en}$ , respectivamente.

Si el medio es biaxial, de las ecuaciones 2.132 y 2.135 se obtiene:

$$E_{2w}^d(u, v, w) = \sum_{n,m} [C_{1n} e_{1nz} L_{m-n}(-\beta_{1n}) \exp(i \beta_{1n} v) + C_{2n} e_{2nz} L_{m-n}(-\beta_{2n}) \exp(i \beta_{2n} v)]$$



$$\times \exp(i\alpha_m u + \gamma w) , \quad (4.59)$$

$$H_{2w}^d(u, v, w) = \sum_{n,m} [C_{1n} h_{1nz} L_{m-n}(-\beta_{1n}) \exp(i\beta_{1n} v) + C_{2n} h_{2nz} L_{m-n}(-\beta_{2n}) \exp(i\beta_{2n} v)] \\ \times \exp(i\alpha_m u + \gamma w) , \quad (4.60)$$

y reemplazando en las ecuaciones de propagación 4.33 y 4.35, resulta:

$$E_{2\parallel}^d(u, v, w) = \sum_{n,m,p} [[i\beta_{1n} (e_{1nz} J_{1p} + h_{1nz} J_{2p}) + i\alpha_m h_{1nz} J_{3p} + (i\alpha_m J_{4p} + J_{5p}) e_{1nz}] C_{1n} \\ \times L_{m-n}(-\beta_{1n}) \exp(i\beta_{1n} v) + [i\beta_{2n} (e_{2nz} J_{1p} + h_{2nz} J_{2p}) + i\alpha_m h_{2nz} J_{3p} + (i\alpha_m J_{4p} + J_{5p}) e_{2nz}] \\ \times C_{2n} L_{m-n}(-\beta_{2n}) \exp(i\beta_{2n} v)] \exp[i(\alpha_m u + \gamma w)] , \quad (4.61)$$

$$H_{2\parallel}^d(u, v, w) = \sum_{n,m,p} [[i\beta_{1n} (e_{1nz} I_{1p} + h_{1nz} I_{2p}) + i\alpha_m h_{1nz} I_{3p} + (i\alpha_m I_{4p} + I_{5p}) e_{1nz}] C_{1n} \\ \times L_{m-n}(-\beta_{1n}) \exp(i\beta_{1n} v) + [i\beta_{2n} (e_{2nz} I_{1p} + h_{2nz} I_{2p}) + i\alpha_m h_{2nz} I_{3p} + (i\alpha_m I_{4p} + I_{5p}) e_{2nz}] \\ \times C_{2n} L_{m-n}(-\beta_{2n}) \exp(i\beta_{2n} v)] \exp[i(\alpha_m u + \gamma w)] . \quad (4.62)$$

### 4.3. Resolución numérica

Para resolver el problema debemos encontrar las soluciones de las ecuaciones 4.11- 4.14 en el medio isótropo y de las ecuaciones 4.32- 4.35 en el medio anisótropo. Desarrollamos todas las funciones del perfil de la red en series de Fourier, es decir que cada función  $\mathcal{Y}$  en las ecuaciones 4.11- 4.14 y  $\mathcal{X}$  en las ecuaciones 4.32- 4.35 puede escribirse como:

$$\mathcal{Y}(u) = \sum_q \mathcal{Y}_q \exp(i q K u) , \quad (4.63)$$

y

$$\mathcal{X}(u) = \sum_q \mathcal{X}_q \exp(i q K u) . \quad (4.64)$$

Análogamente, cada componente de los campos  $F$  se expresa como:

$$\mathbf{F}(u, v, w) = \sum_m \mathbf{F}_m(v) \exp(i\alpha_m u + \gamma w) , \quad (4.65)$$

donde el vector  $\mathbf{F}$  representa las cuatro componentes incógnita de los campos. Introduciendo estos desarrollos en las ecuaciones 4.11- 4.14 se obtiene:

$$-i \frac{\partial E_j^{\parallel}}{\partial v} = \sum_m \alpha_j \mathcal{Y}_{j-m}^2 E_m^{\parallel} - \frac{c \gamma}{\omega_0 \epsilon_i} \alpha_j \mathcal{Y}_{j-m}^1 H_m^{\parallel} + \left[ \frac{c}{\omega_0 \epsilon_i} \alpha_j \alpha_m \mathcal{Y}_{j-m}^1 - \frac{\omega_0}{c} \mu_i \delta_{j,m} \right] H_m^w \quad (4.66)$$

$$-i \frac{\partial E_j^w}{\partial v} = \sum_m \alpha_m \mathcal{Y}_{j-m}^2 E_m^w + \left[ \frac{\omega_0}{c} \mu_i - \frac{\gamma^2 c}{\omega_0 \epsilon_i} \right] \mathcal{Y}_{j-m}^1 H_m^{\parallel} + \frac{c \gamma}{\omega_0 \epsilon_i} \alpha_m \mathcal{Y}_{j-m}^1 H_m^w, \quad (4.67)$$

$$-i \frac{\partial H_j^{\parallel}}{\partial v} = \sum_m \frac{c \gamma \alpha_j}{\omega_0 \mu_i} \mathcal{Y}_{j-m}^1 E_m^{\parallel} + \left[ -\frac{c}{\omega_0 \mu_i} \alpha_j \alpha_m \mathcal{Y}_{j-m}^1 + \frac{\omega_0}{c} \epsilon_i \delta_{j,m} \right] E_m^w + \alpha_j \mathcal{Y}_{j-m}^2 H_m^{\parallel} \quad (4.68)$$

$$-i \frac{\partial H_j^w}{\partial v} = \sum_m \left[ \frac{c \gamma^2}{\omega_0 \mu_i} - \frac{\omega_0}{c} \epsilon_i \right] \mathcal{Y}_{j-m}^1 E_m^{\parallel} - \frac{c \gamma}{\omega_0 \mu_i} \alpha_m \mathcal{Y}_{j-m}^1 E_m^w + \alpha_m \mathcal{Y}_{j-m}^2 H_m^w. \quad (4.69)$$

Para resolver numéricamente estas ecuaciones, truncamos las series de manera tal que los índices  $j$  y  $m$  toman valores entre  $-N$  y  $N$ . Definimos el vector  $\boldsymbol{\xi}$  formado por los desarrollos de las componentes del campo eléctrico y del magnético 4.65:

$$\boldsymbol{\xi}(v) = \begin{bmatrix} E_{\parallel} \\ E_w \\ H_{\parallel} \\ H_w \end{bmatrix},$$

donde cada componente de los campos se expande desde  $-N$  a  $N$ ; por lo tanto  $\boldsymbol{\xi}$  es un vector de  $8N + 4$  elementos. Utilizando este desarrollo de los campos, las ecuaciones 4.66- 4.69 se reescriben en forma matricial como:

$$-i \frac{d\boldsymbol{\xi}(v)}{dv} = \mathbf{Z}_1(v) \boldsymbol{\xi}(v), \quad (4.70)$$

donde  $\mathbf{Z}_1$  es una matriz de  $(8N + 4) \times (8N + 4)$  elementos de la forma:

$$\mathbf{Z}_1 = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{O}_1 & \mathbf{C}_1 & \mathbf{D}_1 \\ \mathbf{O}_1 & \mathbf{F}_1 & \mathbf{G}_1 & \mathbf{H}_1 \\ \mathbf{I}_1 & \mathbf{J}_1 & \mathbf{A}_1 & \mathbf{O}_1 \\ \mathbf{M}_1 & \mathbf{N}_1 & \mathbf{O}_1 & \mathbf{F}_1 \end{bmatrix}, \quad (4.71)$$

y

$$\mathbf{A}_1 = \alpha_j \mathcal{Y}_{j-m}^2, \quad (4.72)$$

$$\mathbf{C}_1 = -\frac{c\gamma}{\omega_0 \epsilon_i} \alpha_j \mathcal{Y}_{j-m}^1, \quad (4.73)$$

$$\mathbf{D}_1 = \frac{c}{\omega_0 \epsilon_i} \alpha_j \alpha_m \mathcal{Y}_{j-m}^1 - \frac{\omega_0}{c} \mu_i \delta_{j,m}, \quad (4.74)$$

$$\mathbf{F}_1 = \mathcal{Y}_{j-m}^2 \alpha_m, \quad (4.75)$$

$$\mathbf{G}_1 = \left[ \frac{\omega_0}{c} \mu_i - \frac{\gamma^2 c}{\omega_0 \epsilon_i} \right] \mathcal{Y}_{j-m}^1, \quad (4.76)$$

$$\mathbf{H}_1 = \frac{c\gamma}{\omega_0 \epsilon_i} \alpha_m \mathcal{Y}_{j-m}^1, \quad (4.77)$$

$$\mathbf{I}_1 = \frac{c\gamma \alpha_j}{\omega_0 \mu_i} \mathcal{Y}_{j-m}^1, \quad (4.78)$$

$$\mathbf{J}_1 = -\frac{c}{\omega_0 \mu_i} \alpha_j \alpha_m \mathcal{Y}_{j-m}^1 + \frac{\omega_0}{c} \epsilon_i \delta_{j,m}, \quad (4.79)$$

$$\mathbf{M}_1 = \left[ \frac{c\gamma^2}{\omega_0 \mu_i} - \frac{\omega_0}{c} \epsilon_i \right] \mathcal{Y}_{j-m}^1, \quad (4.80)$$

$$\mathbf{N}_1 = -\frac{c\gamma}{\omega_0 \mu_i} \alpha_m \mathcal{Y}_{j-m}^1, \quad (4.81)$$

$$\mathbf{O}_1 = 0, \quad (4.82)$$

son matrices de  $(2N + 1) \times (2N + 1)$  elementos. Las ecuaciones 4.32- 4.35 se reescriben como:

$$\begin{aligned} -i \frac{\partial E_j^{\parallel}}{\partial v} &= \sum_m \alpha_j \mathcal{X}_{j-m}^5 E_m^{\parallel} - \alpha_j \mathcal{X}_{j-m}^6 E_m^w - \frac{c\gamma}{\omega_0} \alpha_j \mathcal{X}_{j-m}^2 H_m^{\parallel} \\ &+ \left[ \frac{c}{\omega_0} \alpha_j \alpha_m \mathcal{X}_{j-m}^2 - \frac{\omega_0}{c} \mu \delta_{j,m} \right] H_m^w, \end{aligned} \quad (4.83)$$

$$\begin{aligned} -i \frac{\partial E_j^w}{\partial v} &= \sum_m \gamma \mathcal{X}_{j-m}^3 E_m^{\parallel} + (\mathcal{Y}_{j-m}^2 \alpha_m - \gamma \mathcal{X}_{j-m}^4) E_m^w \\ &+ \left[ \frac{\omega_0}{c} \mu \mathcal{Y}_{j-m}^1 - \frac{\gamma^2 c}{\omega_0} \mathcal{X}_{j-m}^2 \right] H_m^{\parallel} + \frac{c\gamma}{\omega_0} \alpha_m \mathcal{X}_{j-m}^2 H_m^w, \end{aligned} \quad (4.84)$$

$$\begin{aligned} -i \frac{\partial H_j^{\parallel}}{\partial v} &= \sum_m \left[ \frac{c\gamma \alpha_j}{\omega_0 \mu} \mathcal{Y}_{j-m}^1 + \frac{\omega_0}{c} \mathcal{X}_{j-m}^7 \right] E_m^{\parallel} + \left[ -\frac{c}{\omega_0 \mu} \alpha_j \alpha_m \mathcal{Y}_{j-m}^1 + \frac{\omega_0}{c} \mathcal{X}_{j-m}^{10} \right] E_m^w \\ &+ [\alpha_j \mathcal{Y}_{j-m}^2 + \gamma \mathcal{X}_{j-m}^8] H_m^{\parallel} - \mathcal{X}_{j-m}^8 \alpha_m H_m^w, \end{aligned} \quad (4.85)$$

$$\begin{aligned} -i \frac{\partial H_j^w}{\partial v} &= \sum_m \left[ \frac{c\gamma^2}{\omega_0 \mu} \mathcal{Y}_{j-m}^1 - \frac{\omega_0}{c} \mathcal{X}_{j-m}^{11} \right] E_m^{\parallel} + \left[ \frac{\omega_0}{c} \mathcal{X}_{j-m}^{13} - \frac{c\gamma}{\omega_0 \mu} \alpha_m \mathcal{Y}_{j-m}^1 \right] E_m^w \\ &+ \gamma [\mathcal{X}_{j-m}^{12} + \mathcal{Y}_{j-m}^2] H_m^{\parallel} - \alpha_m \mathcal{X}_{j-m}^{12} H_m^w, \end{aligned} \quad (4.86)$$

y este sistema de ecuaciones se expresa en forma matricial:

$$-i \frac{d\boldsymbol{\xi}(v)}{dv} = \mathbf{Z}_2(v) \boldsymbol{\xi}(v) , \quad (4.87)$$

donde  $\mathbf{Z}_2$  es una matriz de  $(8N + 4) \times (8N + 4)$  de la forma:

$$\mathbf{Z}_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_2 & \mathbf{B}_2 & \mathbf{C}_2 & \mathbf{D}_2 \\ \mathbf{E}_2 & \mathbf{F}_2 & \mathbf{G}_2 & \mathbf{H}_2 \\ \mathbf{I}_2 & \mathbf{J}_2 & \mathbf{K}_2 & \mathbf{L}_2 \\ \mathbf{M}_2 & \mathbf{N}_2 & \mathbf{O}_2 & \mathbf{P}_2 \end{bmatrix} , \quad (4.88)$$

y  $\mathbf{A}_2 \dots \mathbf{P}_2$  son matrices de  $(2N + 1) \times (2N + 1)$  elementos dados por:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_2 &= \alpha_j \mathcal{X}_{j-m}^5 , \\ \mathbf{B}_2 &= -\alpha_j \mathcal{X}_{j-m}^6 , \\ \mathbf{C}_2 &= -\frac{c\gamma}{\omega_0} \alpha_j \mathcal{X}_{j-m}^2 , \\ \mathbf{D}_2 &= \frac{c}{\omega_0} \alpha_j \alpha_m \mathcal{X}_{j-m}^2 - \frac{\omega_0}{c} \mu \delta_{j,m} , \\ \mathbf{E}_2 &= \gamma \mathcal{X}_{j-m}^3 , \\ \mathbf{F}_2 &= (\mathcal{Y}_{j-m}^2 \alpha_m - \gamma \mathcal{X}_{j-m}^4) , \\ \mathbf{G}_2 &= \frac{\omega_0}{c} \mu \mathcal{Y}_{j-m}^1 - \frac{\gamma^2 c}{\omega_0} \mathcal{X}_{j-m}^2 , \\ \mathbf{H}_2 &= \frac{c\gamma}{\omega_0} \alpha_m \mathcal{X}_{j-m}^2 , \\ \mathbf{I}_2 &= \frac{c\gamma\alpha_j}{\omega_0\mu} \mathcal{Y}_{j-m}^1 + \frac{\omega_0}{c} \mathcal{X}_{j-m}^7 , \\ \mathbf{J}_2 &= -\frac{c}{\omega_0\mu} \alpha_j \alpha_m \mathcal{Y}_{j-m}^1 + \frac{\omega_0}{c} \mathcal{X}_{j-m}^{10} , \\ \mathbf{K}_2 &= \alpha_j \mathcal{Y}_{j-m}^2 + \gamma \mathcal{X}_{j-m}^8 , \\ \mathbf{L}_2 &= -\mathcal{X}_{j-m}^8 \alpha_m , \\ \mathbf{M}_2 &= \frac{c\gamma^2}{\omega_0\mu} \mathcal{Y}_{j-m}^1 - \frac{\omega_0}{c} \mathcal{X}_{j-m}^{11} , \\ \mathbf{N}_2 &= \frac{\omega_0}{c} \mathcal{X}_{j-m}^{13} - \frac{c\gamma}{\omega_0\mu} \alpha_m \mathcal{Y}_{j-m}^1 , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{O}_2 &= \gamma [\mathcal{X}_{j-m}^{12} + \mathcal{Y}_{j-m}^2], \\ \mathbf{P}_2 &= -\alpha_m \mathcal{X}_{j-m}^{12}.\end{aligned}$$

Por lo tanto el problema de la difracción se reduce a encontrar las soluciones de los sistemas 4.70 y 4.87 con condiciones de contorno apropiadas en la superficie de separación entre ambos medios. Notemos que en las matrices  $\mathbf{Z}_1$  y  $\mathbf{Z}_2$  aparecen derivadas primeras y segundas de la función  $a(x)$ , que no están definidas si el perfil presenta bordes abruptos. Sin embargo, el método puede ser aplicado también en estos casos reemplazando la función  $a(x)$  por su desarrollo en serie. Como se muestra en [28, 29] el vector incógnita  $\xi$  en las ecuaciones 4.70 y 4.87 puede desarrollarse en términos de los autovalores y autovectores de las matrices  $\mathbf{Z}_1$  y  $\mathbf{Z}_2$ , respectivamente. Es decir que, en cada medio,  $\xi$  se escribe como:

$$\xi(v) = \sum_{q=1}^{8N+4} b_q^l \mathbf{V}_q^l \exp(i r_q^l v), \quad (4.89)$$

donde  $\mathbf{V}_q^l (r_q^l)$  denota el autovector  $q$  (autovalor) en el medio  $l$  ( $l=1$  isótropo y  $l=2$  cristal) y  $b_q^l$  son amplitudes complejas desconocidas. El problema se reduce entonces a encontrar los valores de los coeficientes  $b_q^l$  en cada medio. Para ello, imponemos condiciones de contorno en la interfase. Utilizando la ecuación 4.89, la continuidad de  $\xi$  en  $u = 0$  implica:

$$\mathbf{R}^1 \mathbf{b}^1 = \mathbf{R}^2 \mathbf{b}^2, \quad (4.90)$$

donde  $\mathbf{R}^1$  y  $\mathbf{R}^2$  son matrices de  $(8N + 4) \times (8N + 4)$  elementos cuyas columnas son los autovectores de  $\mathbf{Z}^1$  y  $\mathbf{Z}^2$ , respectivamente.  $\mathbf{b}^1$  y  $\mathbf{b}^2$  son vectores de  $8N + 4$  elementos cuyas componentes son las amplitudes  $b_q^1$  y  $b_q^2$ , respectivamente. Sin embargo, para que se cumpla la condición de radiación en el medio isótropo, sólo deben retenerse en  $\mathbf{b}^1$  aquellas componentes para las cuales los autovalores  $r_q^1$  corresponden a una onda que decae cuando  $y \rightarrow +\infty$  o que se propaga hacia  $y > 0$ . Como la dependencia en  $v$  de esta onda es de la forma  $\exp(ir_q^1 v)$ , las condiciones anteriores equivalen a

seleccionar aquellos  $r_q^1$  tales que:

$$\text{Im}(r_q^1) > 0, \text{ or } \text{Im}(r_q^1) = 0 \text{ and } \text{Re}(r_q^1) > 0. \quad (4.91)$$

Análogamente, se demuestra que la condición de radiación en el medio anisótropo implica que se retienen en  $\mathbf{b}^2$  sólo aquellas componentes para las cuales los autovalores  $r_q^2$  satisfacen:

$$\text{Im}(r_q^2) < 0, \text{ or } \text{Im}(r_q^2) = 0 \text{ and } \text{Re}(r_q^2) < 0, \quad (4.92)$$

es decir que representan ondas cuyas amplitudes decrecen cuando  $y \rightarrow -\infty$  o que se propagan hacia  $y < 0$ . Para determinar los vectores incógnita  $\mathbf{b}^1$  y  $\mathbf{b}^2$  separamos en ambos medios el campo asintótico difractado del campo evanescente. El campo difractado está dado por los desarrollos 4.43, 4.44, 4.45 y 4.46 en el medio isótropo y por 4.55, 4.56, 4.57 y 4.58 (4.59, 4.60, 4.61 y 4.62) en el cristal uniaxial (biaxial), mientras que el campo evanescente se expresa como suma de exponenciales como en la ecuación 4.89. Se obtiene:

$$\mathbf{T}^1 \mathbf{b}^1 + \mathbf{1}^1 + \mathbf{U}^1 \mathbf{B}^1 = \mathbf{T}^2 \mathbf{b}^2 + \mathbf{1}^2 + \mathbf{U}^2 \mathbf{B}^2, \quad (4.93)$$

donde el primer término del miembro izquierdo (derecho) es el campo evanescente, el segundo el campo incidente y el tercero el campo propagante en el medio 1 (2), respectivamente. La matriz  $\mathbf{T}^1$  en el miembro izquierdo de esta ecuación tiene  $(8N + 4) \times (4N + 2 - 2P)$  elementos y sus columnas son los autovectores de la matriz  $\mathbf{Z}_1$  asociados con los  $4N + 2 - 2P$  autovalores  $r_q^1$  que tienen parte imaginaria positiva y  $P$  es el número de órdenes propagantes en el dieléctrico. Estos autovalores son los que corresponden a ondas que decaen cuando  $y \rightarrow +\infty$ .  $\mathbf{b}^1$  es un vector incógnita de  $(4N + 2 - 2P)$  elementos. El vector  $\mathbf{1}^1$  está formado por cuatro vectores de  $2N + 1$  elementos que definen los campos incidentes  $E_{\parallel}$ ,  $E_w$ ,  $H_{\parallel}$  y  $H_w$  (4.38, 4.39, 4.41 y 4.42), donde el índice del vector reemplaza al índice  $m$  de las sumatorias en dichas ecuaciones. Debemos notar que este vector es nulo para una onda

incidente desde el cristal.  $\mathbf{U}^1$  es una matriz formada por los desarrollos de los campos difractados dados por las ecuaciones 4.43, 4.44, 4.45 y 4.46. El índice  $m$  de la sumatoria es ahora el índice de las filas de la matriz y el índice  $n$  el de las columnas, elegido solamente para los órdenes propagantes ( $\beta_n$  real).  $\mathbf{B}^1$  es un vector ( $2P$  elementos) formado por las incógnitas  $R_n$  y  $S_n$  que determinan las amplitudes de los campos difractados en el medio isótropo.

Análogamente, en el miembro derecho se tiene la matriz  $\mathbf{T}^2$  de  $(8N + 4) \times (4N + 2 - P_o - P_e)$  elementos. Estos son los autovectores de  $\mathbf{Z}_2$  asociados con los  $4N + 2 - P_o - P_e$  autovalores con parte imaginaria negativa (que corresponden a ondas que decaen cuando  $y \rightarrow -\infty$ ).  $P_o$  y  $P_e$  denotan el número de órdenes propagantes en el cristal (los subíndices  $o$  y  $e$  distinguen las dos polarizaciones de las ondas que pueden propagarse en el medio anisótropo). Debemos recordar que estos órdenes son aquellos que representan un flujo de energía hacia  $y < 0$ , es decir que la componente  $y$  del vector de Poynting asociado es menor que cero.

$\mathbf{b}^2$  es un vector incógnita de  $(4N + 2 - P_o - P_e)$  elementos.  $\mathbf{1}^2$  es el vector que contiene los desarrollos asociados con el campo incidente desde el cristal: 4.47, 4.48, 4.51 y 4.52 si el cristal es uniaxial o 4.49, 4.50, 4.53 y 4.54 si es biaxial.  $\mathbf{U}^2$  es una matriz formada por las amplitudes difractadas definidas en las ecuaciones 4.55, 4.56, 4.57 y 4.58 (4.59, 4.60, 4.61 y 4.62) y  $\mathbf{B}^2$  es un vector incógnita que contiene a las amplitudes  $C_{on}$  y  $C_{en}$  ( $C_{1n}$  y  $C_{2n}$ ) de las ondas que se propagan en el cristal uniaxial (biaxial). Vemos entonces que la ecuación 4.93 representa un sistema de  $8N + 4$  ecuaciones con  $8N + 4$  incógnitas:  $4N + 2 - 2P$  en  $\mathbf{b}^1$ ,  $2P$  en  $\mathbf{B}^1$ ,  $4N + 2 - P_o - P_e$  en  $\mathbf{b}^2$  y  $P_o + P_e$  en  $\mathbf{B}^2$ . La solución de este sistema determina las amplitudes incógnitas  $R_n$ ,  $S_n$ ,  $C_{on}$  y  $C_{en}$  si el cristal es uniaxial o  $C_{1n}$  y  $C_{2n}$  si es biaxial.

Debemos notar que la ecuación 4.93 es válida cuando el medio isótropo es un dieléctrico. Para un metal no tiene sentido separar el campo en órdenes evanescentes y propagantes y sólo son posibles

las incidencias desde el cristal. En este caso la ecuación 4.93 se escribe como:

$$\mathbf{T}_m^1 \mathbf{b}_m^1 = \mathbf{T}^2 \mathbf{b}^2 + \mathbf{1}^2 + \mathbf{U}^2 \mathbf{B}^2, \quad (4.94)$$

donde  $\mathbf{T}_m^1$  tiene ahora  $(8N + 4) \times (4N + 2)$  elementos que son los autovectores de la matriz  $\mathbf{Z}_1$  que corresponden a los  $(4N + 2)$  autovalores que son reales y positivos o que tienen parte imaginaria positiva y  $\mathbf{b}_m^1$  es un vector incógnita de  $(8N + 4)$  elementos. La resolución numérica es idéntica a la explicada anteriormente.

#### 4.4. Ejemplos de aplicación

Hemos visto que el método de transformaciones covariantes conduce a la resolución de un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden y con coeficientes constantes cuya solución se obtiene mediante el cálculo de autovalores y autovectores de una matriz en cada medio.

Para proceder a la aplicación numérica, es necesario truncar los vectores y las matrices que aparecen en la ecuación 4.93. El número de términos ( $N$ ) que se retienen en los desarrollos en serie de los campos fue seleccionado de forma tal que se verifique la conservación de la energía con un error menor que  $\pm 0.01\%$  y que las eficiencias de los órdenes difractados converjan con la misma tolerancia. El código numérico fue controlado en situaciones particulares, como interfases quasi-planas entre un cristal y un medio isótropo [17] y redes isótropas en montajes clásico y cónico [23]. Las comparaciones realizadas con los resultados obtenidos utilizando el método de transformaciones conformes y no conformes desarrollado en el capítulo anterior, muestran que ambos métodos dan resultados adecuados en redes uniaxiales en montaje clásico.

##### 4.4.1. Comparación con el método de Rayleigh

Los resultados fueron comparados con los obtenidos utilizando el método de Rayleigh [15, 16]. En la tabla 3 se presentan comparaciones entre las eficiencias del orden cero reflejado y transmitido (modo



1 y modo 2) calculadas con el método de transformaciones covariantes (TCOV) y con el método de Rayleigh (MR). Se considera una red sinusoidal con distintos valores de  $h/d$  (0.1, 0.2 y 0.3) entre vacío y un cristal biaxial ( $\epsilon_1 = 2.4087$ ,  $\epsilon_2 = 2.5027$ ,  $\epsilon_3 = 2.5217$ ,  $\mu = 1$ ,  $\vec{u}_1 = (1, 1, 1)$ ,  $\vec{u}_3 = (-1, 2, -1)$ ). La red es iluminada desde vacío por una onda con polarización  $s$  o  $p$ . Otros parámetros son  $\lambda/d = 1$ ,  $\theta_0 = 30^\circ$ , y  $\varphi = 0^\circ$  y  $40^\circ$ .

$h/d$	$\varphi$	$m$	Met.	$r_{m1}^0$	$r_{m2}^0$	$t_{m1}^0$	$t_{m2}^0$
0.1	$0^\circ$	$s$	MR	$5.997989 \cdot 10^{-2}$	$1.901122 \cdot 10^{-6}$	0.580259	0.336339
			TCOV	$5.997988 \cdot 10^{-2}$	$1.901121 \cdot 10^{-6}$	0.580259	0.336339
		$p$	MR	$1.486069 \cdot 10^{-5}$	$2.488716 \cdot 10^{-2}$	0.349391	0.608361
			TCOV	$1.486068 \cdot 10^{-5}$	$2.488715 \cdot 10^{-2}$	0.349391	0.608361
	$40^\circ$	$s$	MR	$6.128979 \cdot 10^{-2}$	$2.270411 \cdot 10^{-5}$	0.909314	$4.682309 \cdot 10^{-3}$
			TCOV	$6.128978 \cdot 10^{-2}$	$2.270410 \cdot 10^{-5}$	0.909314	$4.682309 \cdot 10^{-3}$
		$p$	MR	$2.215565 \cdot 10^{-5}$	$2.525636 \cdot 10^{-2}$	$5.631685 \cdot 10^{-3}$	0.945608
			TCOV	$2.215564 \cdot 10^{-5}$	$2.525635 \cdot 10^{-2}$	$5.631684 \cdot 10^{-3}$	0.945608
0.2	$0^\circ$	$s$	MR	$3.816434 \cdot 10^{-2}$	$1.518097 \cdot 10^{-6}$	0.558038	0.324631
			TCOV	$3.816433 \cdot 10^{-2}$	$1.518096 \cdot 10^{-6}$	0.558038	0.324631
		$p$	MR	$8.390706 \cdot 10^{-6}$	$1.056041 \cdot 10^{-2}$	0.338674	0.592164
			TCOV	$8.390706 \cdot 10^{-6}$	$1.056041 \cdot 10^{-2}$	0.338674	0.592164
	$40^\circ$	$s$	MR	$3.781793 \cdot 10^{-2}$	$2.769623 \cdot 10^{-4}$	0.872062	$4.542721 \cdot 10^{-3}$
			TCOV	$3.781792 \cdot 10^{-2}$	$2.769622 \cdot 10^{-4}$	0.872062	$4.542721 \cdot 10^{-3}$
		$p$	MR	$2.833107 \cdot 10^{-4}$	$1.291228 \cdot 10^{-2}$	$7.220303 \cdot 10^{-3}$	0.900600
			TCOV	$2.833107 \cdot 10^{-4}$	$1.291228 \cdot 10^{-2}$	$7.220302 \cdot 10^{-3}$	0.900600
0.3	$0^\circ$	$s$	MR	$2.022546 \cdot 10^{-2}$	$2.444889 \cdot 10^{-6}$	0.529819	0.309071
			TCOV	$2.022542 \cdot 10^{-2}$	$2.444761 \cdot 10^{-6}$	0.529819	0.309071
		$p$	MR	$2.282072 \cdot 10^{-6}$	$1.238970 \cdot 10^{-3}$	0.324319	0.570789
			TCOV	$2.282064 \cdot 10^{-6}$	$1.238972 \cdot 10^{-3}$	0.324318	0.570788
	$40^\circ$	$s$	MR	$1.716479 \cdot 10^{-2}$	$8.156204 \cdot 10^{-4}$	0.821836	$5.320113 \cdot 10^{-3}$
			TCOV	$1.716477 \cdot 10^{-2}$	$8.156237 \cdot 10^{-4}$	0.821836	$5.320116 \cdot 10^{-3}$
		$p$	MR	$8.363852 \cdot 10^{-4}$	$3.285689 \cdot 10^{-3}$	$9.495026 \cdot 10^{-3}$	0.847899
			TCOV	$8.363836 \cdot 10^{-4}$	$3.285677 \cdot 10^{-3}$	$9.495006 \cdot 10^{-3}$	0.847899

Tabla 3

En la tabla anterior puede observarse una perfecta coincidencia entre los resultados obtenidos con ambos métodos. Si bien el rango de validez de la hipótesis de Rayleigh en redes anisótropas se desconoce, observamos que los resultados obtenidos son adecuados, aún para valores de  $h/d$  en los que se espera que no dé resultados confiables, ya que exceden el valor del límite de Rayleigh para redes isotropas perfectamente conductoras ( $h/d = 0.14$ ). Como hemos mencionado en el capítulo anterior, en el caso isotropo también ha sido observada la buena performance del método de Rayleigh para valores de  $h/d$  que superan el valor teórico encontrado para las redes perfectamente conductoras.

#### 4.4.2. Conversión de polarizaciones $s - p$ en redes uniaxiales profundas

Sabemos que cuando una red anisótropa es iluminada desde un medio dieléctrico por una onda con polarización  $s$  o  $p$ , las ondas reflejadas en la interfase no conservan en general la polarización incidente. La fracción de la potencia incidente que cambia su polarización al reflejarse en una red uniaxial depende de los parámetros constitutivos de los medios, de la orientación del eje óptico, de la profundidad de los surcos y de la longitud de onda de la luz incidente. En este ejemplo analizaremos las modificaciones que se observan en la eficiencia de conversión  $s - p$  del orden reflejado especularmente cuando se varía la altura del corrugado.

Consideramos un perfil sinusoidal que separa un medio isotropo sin pérdidas ( $\epsilon_i = 3.5$  y  $\mu_i = 1$ ) de nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.58$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.71$  y  $\mu = 1$ ). La orientación del eje óptico ( $\hat{c}_0 = 0.688\hat{y} + 0.725\hat{z}$ ) es tal que produce una conversión de polarizaciones máxima cuando la interfase es plana ( $h/d = 0$ ). Otros parámetros son  $\lambda/d = 1$  y  $\varphi = 0$ .

En la figura 4.1 se representa la eficiencia de conversión  $s - p$  ( $r_{sp}^0$ ) como función del ángulo de incidencia ( $\theta_0$ ) y con  $h/d$  como parámetro.

Para una interfase plana la máxima conversión se observa en el ángulo de incidencia para el cual ambas ondas transmitidas (ordinaria y extraordinaria) se convierten en evanescentes (reflexión total).

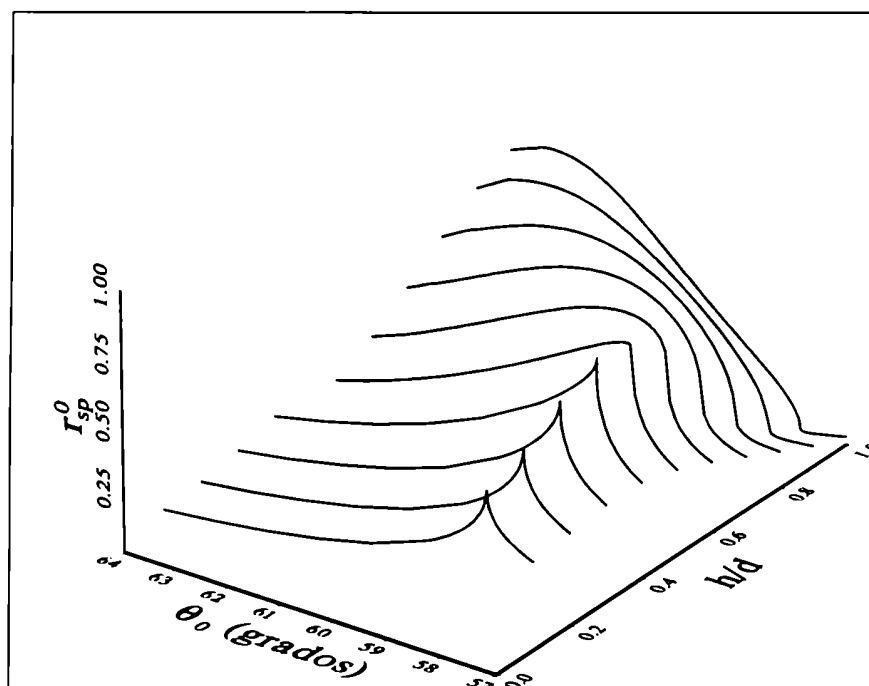


Figura 4.1: Eficiencia de conversión del orden cero reflejado ( $r_{sp}^0$ ) en función del ángulo de incidencia ( $\theta_0$ ) en la región de máxima conversión  $s-p$  ( $57^\circ \leq \theta_0 \leq 64^\circ$ ) para una red sinusoidal con diferentes valores de  $h/d$  ( $0.1 \leq h/d \leq 1$ , en pasos de 0.1). La onda incide desde un medio dieléctrico ( $\epsilon_i = 3.5$  y  $\mu_i = 1$ ) hacia nitrato de sodio ( $\epsilon_\perp = 2.51$ ,  $\epsilon_\parallel = 1.78$  y  $\mu = 1$ ) con  $\hat{c}_0 = (0, 0.688, 0.7251)$ . Otros parámetros son  $\lambda/d = 1$  y  $\varphi = 0$ .

Para los parámetros elegidos en este ejemplo, este ángulo es  $\theta_0 = 57.85^\circ$  (el orden cero transmitido ordinario desaparece en  $\theta_0 = 57.85^\circ$  y el extraordinario en  $\theta_0 = 45.57^\circ$ ).

Al introducir un corrugado, aparecen otros órdenes reflejados y transmitidos que destruyen la condición de reflexión total y reducen la potencia reflejada en la dirección especular. Sin embargo, como puede apreciarse en la figura 4.1, la eficiencia de conversión del orden cero reflejado no disminuye, sino que aumenta a medida que se incrementa la profundidad de los surcos. Para  $h/d \leq 0.4$  las curvas presentan picos de conversión en  $\theta_0 = 57.85^\circ$  donde los órdenes cero transmitidos se convierten en evanescentes. Para redes más profundas ( $h/d > 0.4$ ) se observa un ensanchamiento y un corrimiento

en la posición de los picos, como se muestra en la figura 4.2, donde se ha representado la eficiencia de conversión del orden cero reflejado ( $r_{sp}^0$ ) como función del ángulo de incidencia ( $\theta_0$ ) para  $h/d$  entre 0.5 y 1.

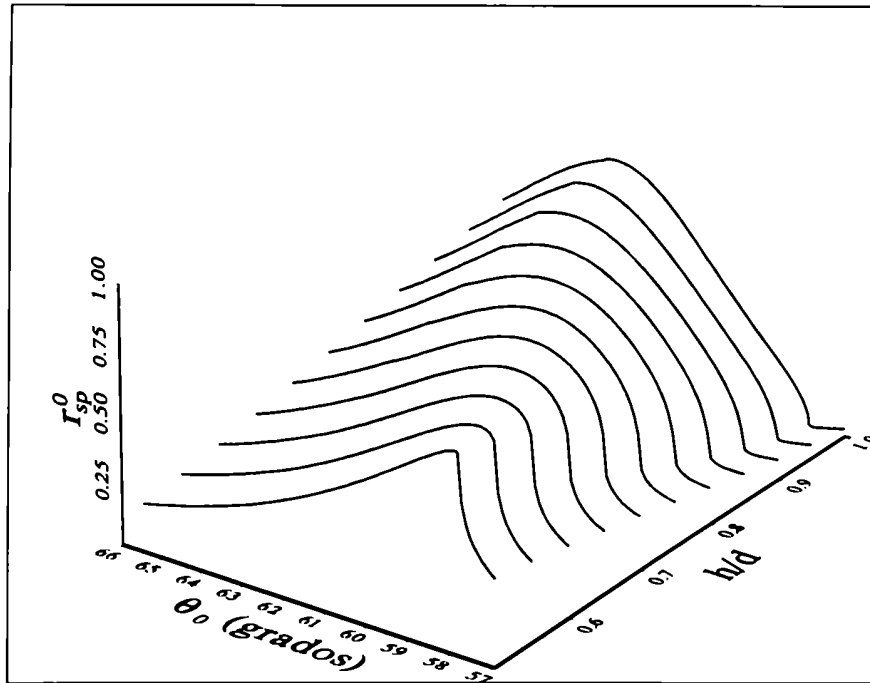


Figura 4.2: Eficiencia de conversión del orden cero reflejado ( $r_{sp}^0$ ) en función del ángulo de incidencia ( $\theta_0$ ) en la región de máxima conversión  $s - p$  ( $57^\circ \leq \theta_0 \leq 64^\circ$ ) y con  $h/d$  como parámetro ( $0.5 \leq h/d \leq 1$ , en pasos de 0.05) para la configuración considerada en la figura anterior.

#### 4.4.3. Excitación de plasmones superficiales en redes anisótropas

##### Interfase metal-cristal uniaxial

En el capítulo anterior (sección 3.11.4), hemos aplicado el método de transformaciones conformes y no conformes al estudio de algunos ejemplos de excitación de plasmones superficiales en interfases cicloidales metal-cristal uniaxial. Sin embargo, también resulta de interés investigar este fenómeno en redes con otros perfiles (el sinusoidal, por ejemplo) que son muy utilizados en redes y que no

pueden ser fácilmente tratados con dicho método debido a la dificultad de encontrar la transformación conforme que los convierte en un plano. Por este motivo, en esta sección emplearemos el método de las transformaciones covariantes para analizar redes sinusoidales en las que se produce el acoplamiento entre fotones y plasmones superficiales. En particular, prestaremos especial atención a los efectos que aparecen al variar la profundidad de los surcos de la red.

Consideramos una interfase sinusoidal entre un metal ( $\epsilon_i = -21.6 + 1.4i$  y  $\mu_i = 1$ ) y nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.58$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.71$  y  $\mu = 1$ ). La orientación del eje óptico es tal que  $c_{ox} = c_{oy} = c_{oz}$ . Otros parámetros son  $\lambda/d = 1.7424$  y  $\varphi = 0$ .

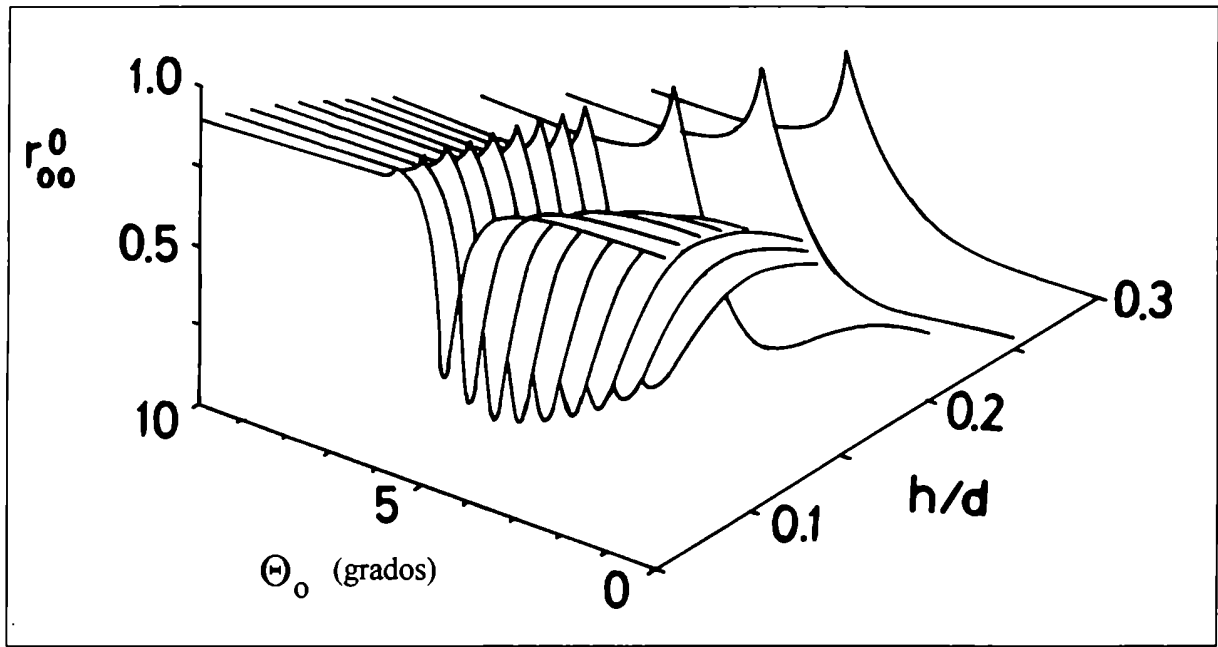


Figura 4.3: Eficiencia de la componente del orden cero reflejado con polarización igual a la incidente (ordinaria) ( $r_{oo}^0$ ) en función del ángulo de incidencia ( $\theta_o$ ) y con  $h/d$  como parámetro ( $0 \leq h/d \leq 0.3$ ) en la región ( $0^\circ \leq \theta_o \leq 10^\circ$ ) para una red sinusoidal entre un metal ( $\epsilon_i = -21.6 + 1.4i$  y  $\mu_i = 1$ ) y nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$  y  $\mu = 1$ ).  $c_{ox} = c_{oy} = c_{oz}$ ,  $\lambda/d = 1$  y  $\varphi = 0$ .

En la figuras 4.3 y 4.4 se muestra la fracción de la potencia incidente que se refleja en el orden cero sin

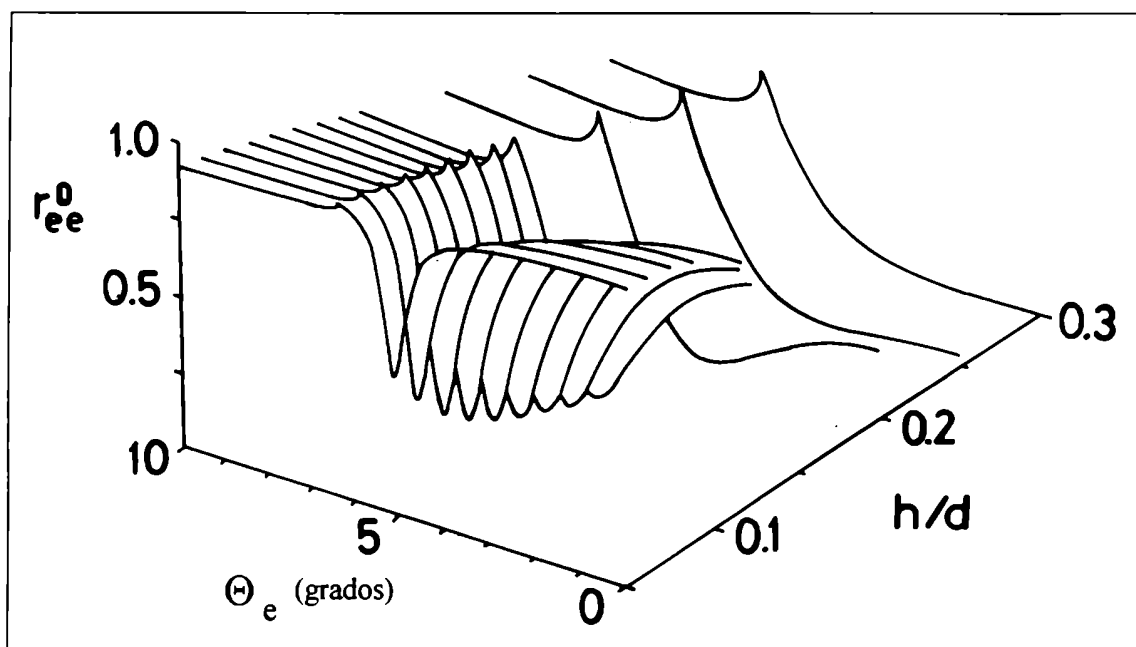


Figura 4.4: Eficiencia de la componente del orden cero reflejado con polarización igual a la incidente (extraordinaria) ( $r_{ee}^0$ ) en función del ángulo de incidencia ( $\theta_e$ ) y con  $h/d$  como parámetro ( $0 \leq h/d \leq 0.3$ ) en la región ( $0^\circ \leq \theta_e \leq 10^\circ$ ) para la configuración considerada en la figura anterior.

cambiar su polarización ( $r_{oo}^0$  y  $r_{ee}^0$ ) como función del ángulo de incidencia ( $\theta_o$  y  $\theta_e$ , respectivamente) y con  $h/d$  como parámetro.

En la figura 4.3 se observan mínimos pronunciados en la región  $4^\circ < \theta_o < 4.6^\circ$  cuando  $h/d$  varía entre 0.05 y 0.13. Un comportamiento similar puede apreciarse en la figura 4.4, donde los mínimos se presentan cuando  $4.5^\circ < \theta_e < 5.2^\circ$ .

La relación entre estos mínimos y la excitación de plasmones superficiales es sugerida por el hecho de que los valores de  $\alpha$  que corresponden a los mínimos coinciden con la parte real de la constante de propagación del plasmón. Hemos visto en la sección 3.11.4 que dicha constante se determina resolviendo el problema de la red sin campos incidentes y hemos calculado su valor aproximado para un cristal con el eje óptico paralelo a los surcos considerando una interfase plana. En general,

puede demostrarse que la constante de propagación de plasmones está dada por la parte real del polo complejo del determinante de la matriz de reflexión correspondiente a una interfase plana metal-cristal uniaxial [35]. El corrugado perturba esta constante de propagación, como puede deducirse del corrimiento en la posición de los mínimos que ocurre a medida que se incrementa la profundidad de los surcos.

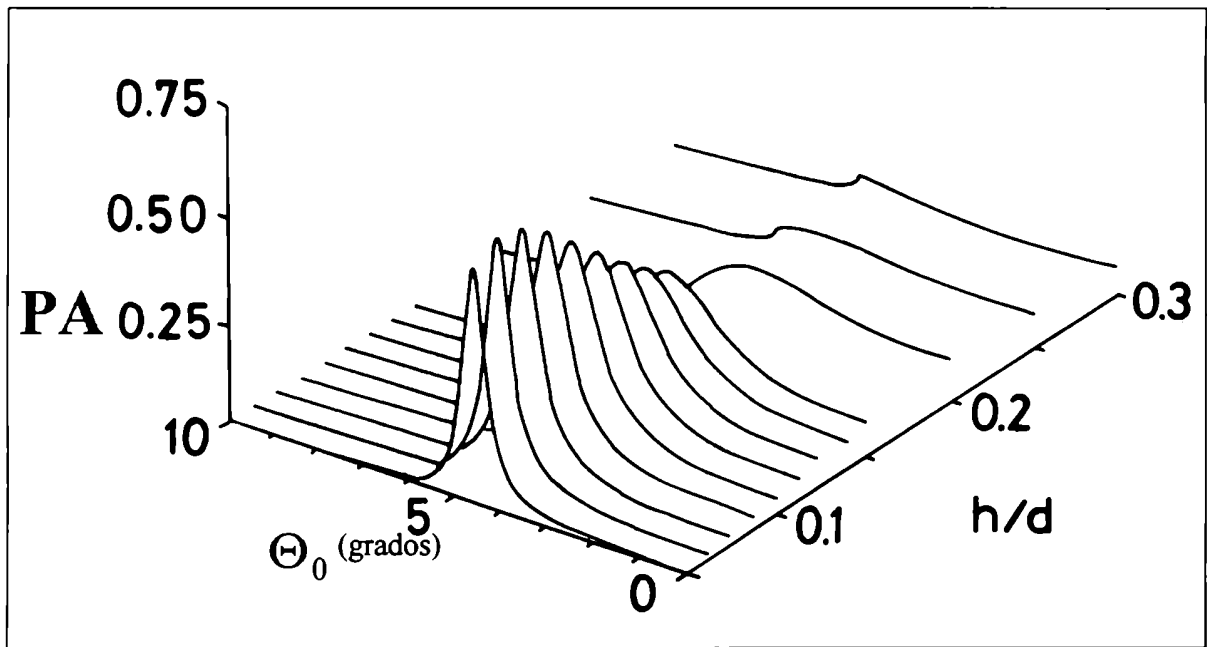


Figura 4.5: Potencia absorbida por el metal normalizada con la potencia incidente (PA) en función del ángulo de incidencia ( $\theta_o$ ) y con  $h/d$  como parámetro ( $0 \leq h/d \leq 0.3$ ) en la región ( $0^\circ \leq \theta_o \leq 10^\circ$ ) para una red sinusoidal entre un metal ( $\epsilon_i = -21.6 + 1.4i$  y  $\mu_i = 1$ ) y nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$  y  $\mu = 1$ ).  $c_{0x} = c_{0y} = c_{0z}$ ,  $\lambda/d = 1$  y  $\varphi = 0$ . La polarización incidente es ordinaria.

La excitación de plasmones superficiales produce también un aumento significativo de la potencia absorbida por el metal. En las figuras 4.5 y 4.6 se representa la potencia absorbida por el metal normalizada con la potencia incidente (PA) como función del ángulo de incidencia ( $\theta_o$  y  $\theta_c$ ) y con  $h/d$  como parámetro para las mismas configuraciones consideradas en las figuras 4.3 y 4.4, respecti-

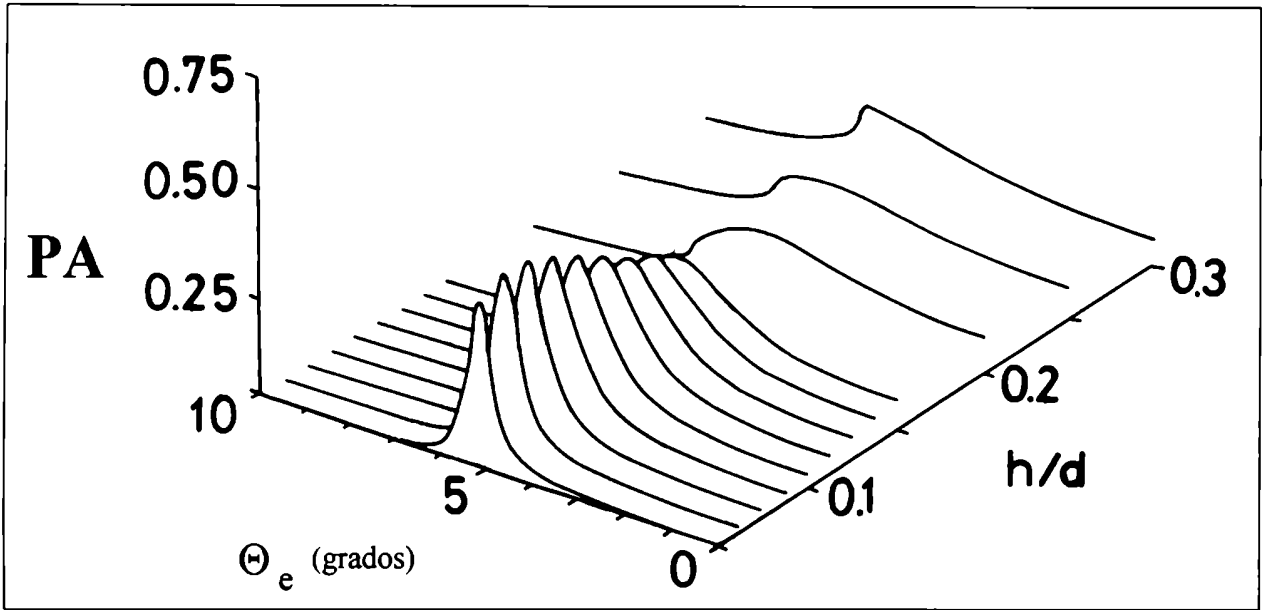


Figura 4.6: Potencia absorbida por el metal normalizada con la potencia incidente (PA) en función del ángulo de incidencia ( $\theta_o$ ) y con  $h/d$  como parámetro ( $0 \leq h/d \leq 0.3$ ) en la región ( $0^\circ \leq \theta_o \leq 10^\circ$ ) para una red sinusoidal entre un metal ( $\epsilon_i = -21.6 + 1.4i$  y  $\mu_i = 1$ ) y nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$  y  $\mu = 1$ ).  $c_{0x} = c_{0y} = c_{0z}$ ,  $\lambda/d = 1$  y  $\varphi = 0$ . La polarización incidente es extraordinaria.

vamente.

Ambas figuras muestran picos de absorción en aquellos ángulos de incidencia donde aparecen los mínimos de  $r_{oo}^0$  y  $r_{ee}^0$ . Estos picos aumentan a medida que se incrementa la profundidad de la red, alcanzando su valor máximo cuando  $h/d \approx 0.075$ . En este caso el 59% de la potencia incidente es absorbida por el metal cuando la onda incidente es ordinaria o el 43.4% cuando la polarización incidente es extraordinaria. Para  $h/d > 0.075$  los picos se ensanchan y disminuyen hasta desaparecer cuando  $h/d \approx 0.3$ .

Es decir que partiendo de una superficie plana de muy alta reflectividad, los picos en la potencia absorbida aumentan al incrementar el valor de  $h/d$  hasta que  $h/d \approx 0.075$ , donde aproximadamente el 50 % de la potencia incidente se disipa en el metal. Esto muestra que, al igual que lo que sucede



cuando las redes son isotópicas, en las redes uniaxiales existe una profundidad crítica para la cual el acoplamiento entre fotones y plasmones es óptimo (en este ejemplo,  $h/d \approx 0.075$ ). La existencia de una profundidad crítica que maximiza la potencia absorbida sugiere que bajo ciertas condiciones es posible lograr una absorción total de la energía [35].

Hasta el momento hemos estudiado redes uniaxiales en montaje clásico, es decir considerando el plano de incidencia perpendicular a la dirección de los surcos. Mostraremos a continuación cómo se modifican las eficiencias de los órdenes reflejados cuando el plano de incidencia tiene una orientación arbitraria con respecto a la dirección de los surcos (montaje cónico).

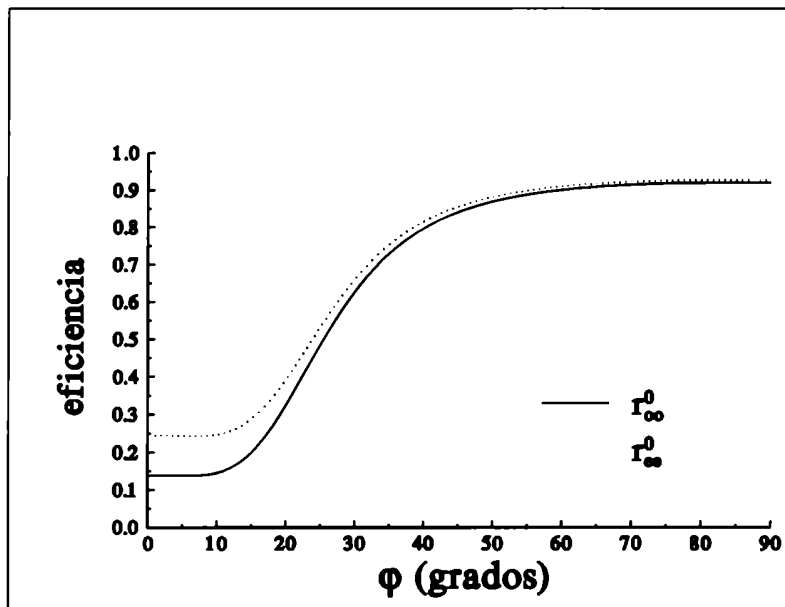


Figura 4.7: Eficiencias del orden cero reflejado con polarización igual a la incidente ( $r_{oo}^0$  y  $r_{ce}^0$ ) en función del ángulo  $\varphi$  para una red sinusoidal entre un metal ( $\epsilon_i = -21.6 + 1.4i$  y  $\mu_i = 1$ ) y nitrato de sodio ( $\epsilon_{\perp} = 2.51$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 1.78$  y  $\mu = 1$ ). Otros parámetros son  $c_{0x} = c_{0y} = c_{0z}$ ,  $\lambda/d = 1$   $h/d = 0.075$ ,  $\theta_0 = 4.53^\circ$  y  $\theta_e = 5.06^\circ$ .

En la figura 4.7 se representa la fracción de la potencia incidente que se refleja en el orden cero sin cambiar su polarización ( $r_{oo}^0$  y  $r_{ce}^0$ ) como función de  $\varphi$  para las mismas configuraciones consideradas

en las figuras 4.3 y 4.4, respectivamente. El valor de  $\theta$  y la profundidad de la red son tales que minimizan las eficiencias  $r_{oo}^0$  ( $\theta_o = 4.53^\circ$  y  $h/d = 0.075$ ) y  $r_{ee}^0$  ( $\theta_e = 5.06^\circ$  y  $h/d = 0.075$ ) cuando  $\varphi = 0$ .

Puede apreciarse en la figura que las eficiencias dependen fuertemente de la orientación relativa entre el plano de incidencia y los surcos. Cuando el montaje es clásico ( $\varphi = 0$ ),  $r_{oo}^0$  y  $r_{ee}^0$  tienen sus valores mínimos (0.138 para  $r_{oo}^0$  y 0.244 para  $r_{ee}^0$ ). Al incrementar  $\varphi$  las eficiencias aumentan, alcanzando sus valores máximos cuando  $\varphi = 90^\circ$  ( $r_{oo}^0 = 0.919$  y  $r_{ee}^0 = 0.927$ ).

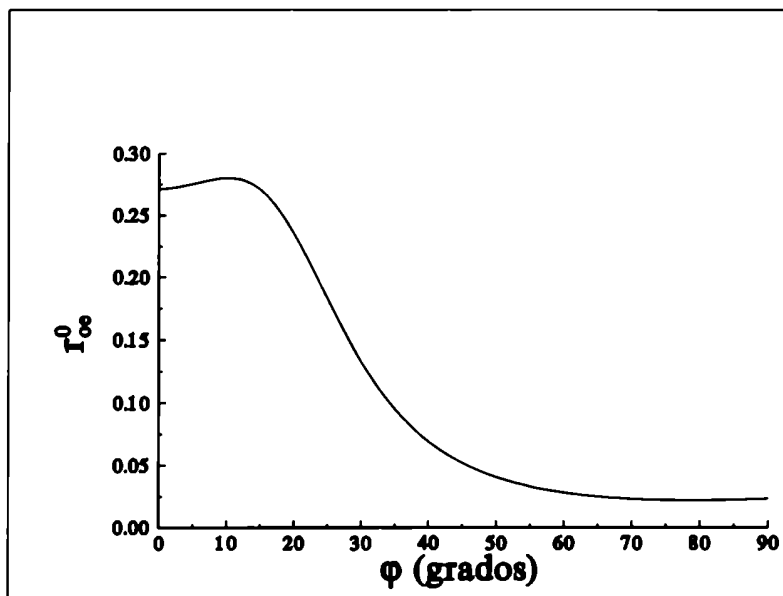


Figura 4.8: Eficiencia de conversión del orden cero reflejado ( $r_{oo}^0$ ) en función del ángulo  $\varphi$  para la misma configuración considerada en la figura anterior.

Todo lo contrario sucede con la eficiencia de conversión ordinaria-extraordinaria, que alcanza sus valores máximos cuando  $\varphi < 15^\circ$  (figura 4.8).

#### Interfase metal-cristal biaxial

Cuando el medio anisótropo es un cristal biaxial se observa un comportamiento similar al de las redes

uniaxiales. Consideramos un perfil sinusoidal entre  $\text{NaNO}_2$  ( $\epsilon_1 = 1.8$ ,  $\epsilon_2 = 1.99$  y  $\epsilon_3 = 2.72$ ) y un metal ( $\epsilon_i = -21.6 + 1.4i$  y  $\mu_i = 1$ ). Otros parámetros son  $\lambda/d = 2$ ,  $\varphi = 0$ ,  $\hat{u}_1 = (-0.087, 0., 0.996)$  y  $\hat{u}_3 = (0.996, 0., 0.887)$ . En la figura 4.9 se representa la potencia absorbida en el metal normalizada con la potencia incidente (PA) como función del ángulo de incidencia  $\theta_1$  para distintos valores de  $h/d$  y para una onda incidente del tipo 1.

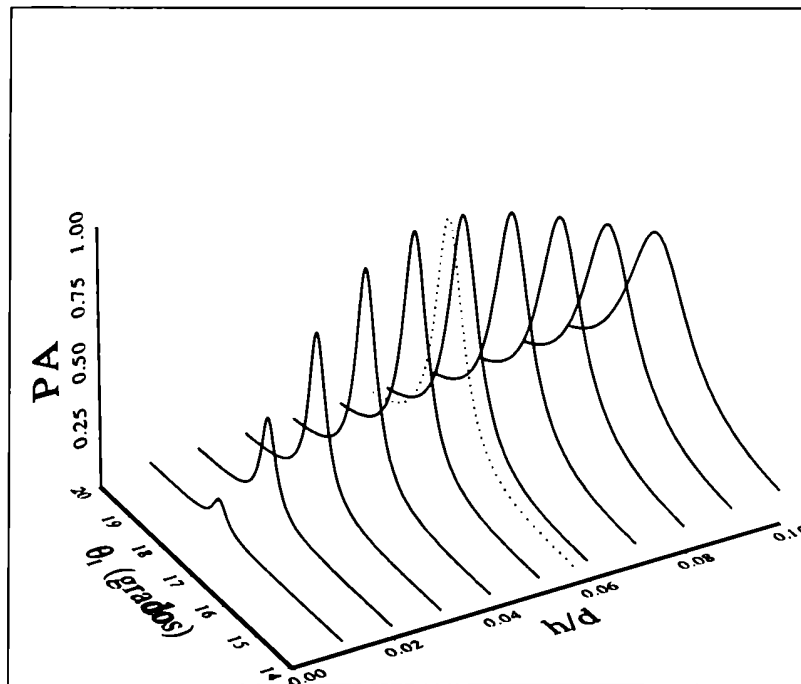


Figura 4.9: Potencia absorbida por el metal normalizada con la potencia incidente (PA) en función del ángulo de incidencia ( $\theta_1$ ) para distintos valores de  $h/d$  ( $0 \leq h/d \leq 0.1$ ) en la región ( $14^\circ \leq \theta_1 \leq 20^\circ$ ) para una red sinusoidal entre un metal ( $\epsilon_i = -21.6 + 1.4i$  y  $\mu_i = 1$ ) y  $\text{NaNO}_2$  ( $\epsilon_1 = 1.8$ ,  $\epsilon_2 = 1.99$ ,  $\epsilon_3 = 2.72$  y  $\mu = 1$ ). Otros parámetros son  $\lambda/d = 2$ ,  $\varphi = 0$ ,  $\hat{u}_1 = (-0.087, 0., 0.996)$  y  $\hat{u}_3 = (0.996, 0., 0.887)$ . La onda incidente es del tipo 1.

Para cada valor de  $h/d$  puede observarse un pico de absorción en  $\theta_1 \approx 17.7^\circ$ . A medida que se incrementa el valor de  $h/d$ , la potencia absorbida aumenta su valor, alcanzando un máximo ( $\approx 0.994$ ) cuando  $h/d = 0.057$ . Esto sugiere que, al igual que en las redes uniaxiales, existe una profundidad

del corrugado crítica para la cual el acoplamiento entre plasmones y fotones es máximo. Los picos de absorción que se muestran en la figura 4.9 se corresponden con eficiencias muy bajas de los órdenes reflejados especularmente, como puede apreciarse en la figura 4.10, donde se ha representado la eficiencia del orden cero reflejado del tipo 1 como función del ángulo de incidencia con  $h/d$  como parámetro.

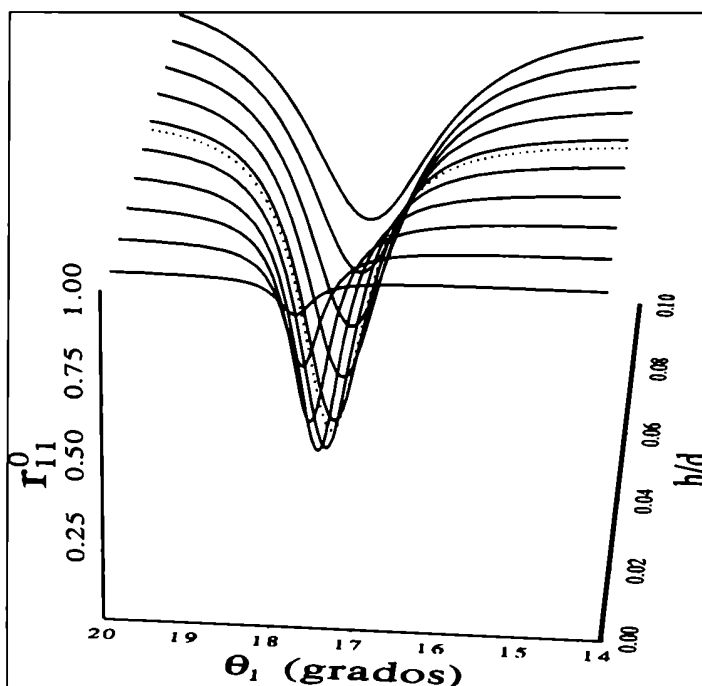


Figura 4.10: Eficiencia del orden cero reflejado del tipo 1 ( $r_{11}^0$ ) en función del ángulo de incidencia ( $\theta_1$ ) para distintos valores de  $h/d$  ( $0 \leq h/d \leq 0.1$ ) en la región ( $14^\circ \leq \theta_1 \leq 20^\circ$ ) para la configuración considerada en la figura anterior.

Al aumentar  $h/d$ , el valor del mínimo de  $r_{11}^0$  disminuye, siendo del orden de  $10^{-4}$  en  $\theta_1 = 17.7^\circ$  cuando  $h/d = 0.057$ .

Notemos que la posición y el valor de los picos de absorción dependen fuertemente de la orientación de los ejes ópticos del cristal. Este fenómeno se ilustra en la figura 4.11, donde se representa la

fracción de la potencia incidente absorbida por el metal para diferentes posiciones de los ejes ópticos del cristal. En el ejemplo hemos considerado ambos ejes en el plano de la interfase, formando ángulos  $\tau_1$  y  $\tau_2$  con respecto al semieje positivo de las  $x$ . El valor de  $h/d$  es 0.06. Los otros parámetros son los mismos que en las figuras anteriores.

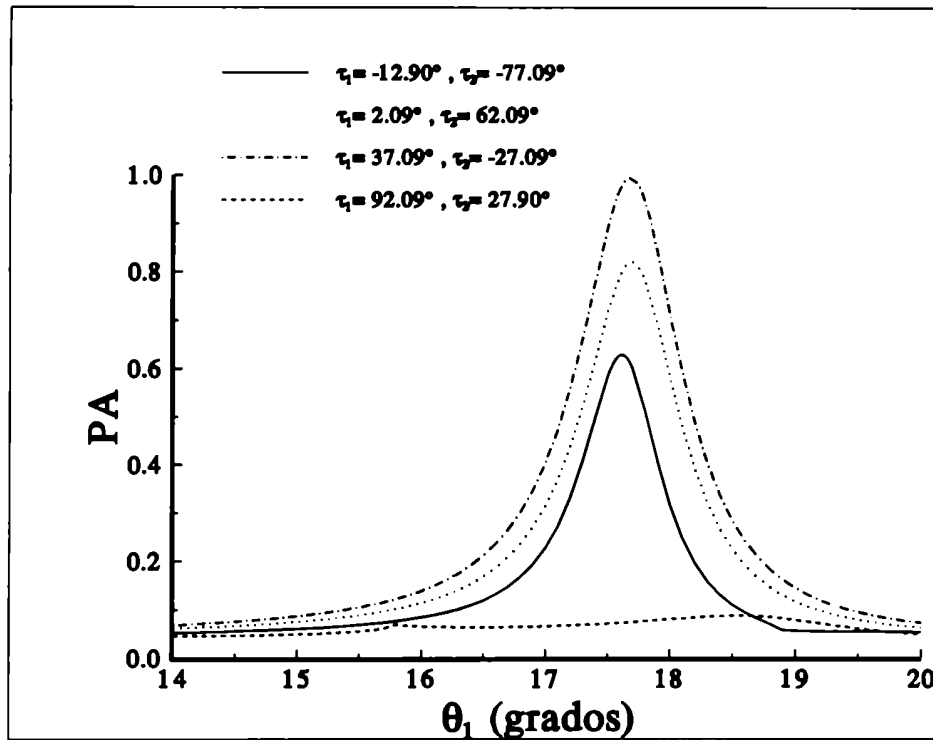


Figura 4.11: Potencia absorbida por el metal normalizada con la potencia incidente (PA) en función del ángulo de incidencia  $\theta_1$  para diferentes orientaciones de los ejes ópticos del cristal (ambos en la interfase, formando ángulos  $\tau_1$  y  $\tau_2$  con el semieje positivo de las  $x$ ). La red separa un metal ( $\epsilon_i = -21.6 + 1.4i$ ,  $\mu_i = 1$ ) de  $\text{NaNO}_2$  ( $\epsilon_1 = 1.8$ ,  $\epsilon_2 = 1.99$ ,  $\epsilon_3 = 2.72$  y  $\mu = 1$ ). Otros parámetros son  $\lambda/d = 2$ ,  $\varphi = 0$  y  $h/d = 0.06$ .

## 5. Conclusiones

En esta tesis se han investigado y desarrollado nuevos métodos rigurosos para resolver el problema de la difracción de ondas electromagnéticas en interfases periódicamente corrugadas entre un medio isótropo (dieléctrico, metal o conductor perfecto) y un medio anisótropo (cristal uniaxial o biaxial). De los métodos utilizados en la resolución de las redes isótropas y que podrían generalizarse a este problema, se ha elegido emplear aquellos basados en el uso de transformaciones de coordenadas que simplifican el tratamiento matemático de las condiciones de contorno en la superficie de separación entre ambos medios. Estas transformaciones convierten la superficie periódica en un plano y reducen el problema a la resolución numérica de sistemas de ecuaciones diferenciales acopladas cuyas características dependen del tipo de transformación utilizada.

Se han investigado tres líneas teóricas que involucran tres tipos de transformaciones: i) conformes contravariantes, ii) conformes y no conformes contravariantes y iii) no conformes covariantes. En las dos primeras se transforma la dependencia espacial de las componentes de los campos manteniendo la base cartesiana original, mientras que iii) también se transforman las componentes de los campos a una base no ortogonal especialmente apta para imponer las condiciones de contorno. Se ha demostrado que las transformaciones conformes resultan adecuadas para tratar cualquier interfase periódica entre un cristal y un metal ideal (perfectamente conductor) y no presentan limitaciones en cuanto a la geometría de la red. Los métodos de tipo ii) y iii) en cambio permiten tratar metales reales (de conductividad finita). El método con transformaciones de tipo ii) tiene el interés histórico de haber sido el primer método riguroso en la literatura para tratar problemas de scattering electromagnético en medios anisótropos, pero tiene la limitación de que para algunas geometrías no siempre es posible encontrar la transformación no conforme biyectiva a partir de la conforme. Hemos visto que el empleo de transformaciones de tipo iii) no sólo permite superar esta limitación sino

que también permite obtener un método versátil para tratar la situación más general en cuanto a geometría, condiciones de incidencia y materiales.

Los formalismos desarrollados en esta tesis son los primeros estudios electromagnéticos rigurosos para tratar el problema de la difracción en superficies anisótropas corrugadas periódicamente de cualquier forma y profundidad. Los trabajos previos utilizaban en su formulación la hipótesis de Rayleigh (una aproximación) o consideraban orientaciones muy particulares de los ejes ópticos, físicamente análogas al caso isótropo. Se ha comprobado que todos los métodos presentados en este trabajo reproducen los resultados físicos ya conocidos en situaciones particulares más sencillas, como superficies quasi-planas, medios anisótropos con orientaciones de alta simetría y medios isótropos. En situaciones más generales donde no existían métodos rigurosos alternativos, se ha visto que los nuevos métodos dan resultados cualitativos físicamente aceptables en términos de criterios generales como conservación de la energía, o fácilmente interpretables en términos de fenómenos ópticos fundamentales como la reflexión total o el acoplamiento de luz con plasmones superficiales. Mas allá de estos aspectos cualitativos, se ha observado una excelente coincidencia cuantitativa con los resultados predichos utilizando la aproximación de Rayleigh. En este sentido, un resultado lateral sugerido por este trabajo es la comprobación de la validez de dicha aproximación, nunca antes estudiada en medios anisótropos en el caso general aquí considerado.

La consistencia de los métodos investigados fue estudiada mediante el análisis de situaciones límites y comparando los resultados con los obtenidos utilizando el método basado en la hipótesis de Rayleigh. Estas comparaciones han permitido mostrar la validez de dicha hipótesis para tratar redes anisótropas de profundidades aún mayores que el límite de Rayleigh encontrado teóricamente para redes isótropas perfectamente conductoras.

Como ejemplos de aplicación de los formalismos presentados en este trabajo, se han analizado la

conversión entre modos de polarización y la excitación de plasmones superficiales. Si bien no es el objetivo de la tesis realizar un estudio exhaustivo de estos fenómenos, los ejemplos presentados muestran efectos interesantes, como la existencia de profundidades críticas del corrugado para las cuales la conversión entre modos de polarización es máxima y la posibilidad de lograr absorciones totales en interfases metal-cristal cuando se excitan plasmones superficiales. Estos últimos serán estudiados en forma rigurosa en futuros trabajos extendiendo los métodos investigados al plano complejo.

En síntesis, en esta tesis hemos desarrollado los primeros formalismos rigurosos para resolver el problema de la difracción de luz en interfases anisótropas corrugadas periódicamente. Hemos visto que las transformaciones de coordenadas covariantes conducen a un método versátil con el que se obtienen resultados adecuados. Por este motivo, se espera en futuros trabajos aplicar dicho método al estudio de otras situaciones de interés que involucren medios anisótropos, como el caso de redes con estratos corrugados e interfases con rugosidades no periódicas.



## A. Matrices de reflexión y transmisión

Calcularemos en esta sección los coeficientes de reflexión y de transmisión en una interfase plana entre un medio isótropo y un cristal (uniaxial o biaxial) iluminada desde el medio isótropo.

El campo incidente puede descomponerse en una componente perpendicular y otra paralela al plano de incidencia:

$$\vec{E}_1^i(x, y, t) = [R \hat{z} + S (\hat{k}^i \times \hat{z})] \exp[i(\alpha_0 x + \beta_0 y - \omega_0 t)] \quad (\text{A.1})$$

donde  $\hat{k}^i = \vec{k}_i/|\vec{k}_i|$  y  $R$  y  $S$  son constantes conocidas. El campo reflejado se escribe:

$$\vec{E}_1^r(x, y, t) = [R_0 \hat{z} + S_0 (\hat{k}^r \times \hat{z})] \exp[i(\alpha_0 x + \beta_0 y - \omega_0 t)] \quad (\text{A.2})$$

donde  $\hat{k}^r = \vec{k}_r/|\vec{k}_r|$ . En las expresiones anteriores,  $\vec{k}_i$ ,  $\alpha_0$ ,  $\beta_0$  están dados en la sección 2.3.

El campo transmitido al cristal se escribe como una combinación lineal de dos ondas cuyas polarizaciones están determinadas (término con  $n = 0$  en la ecuación 2.120):

$$\vec{E}_2^t(x, y, t) = C_{o0} \hat{e}_o \exp[i(\alpha_0 x + \beta_{o0} y - \omega_0 t)] + C_{e0} \hat{e}_e \exp[i(\alpha_0 x + \beta_{e0} y - \omega_0 t)] , \quad (\text{A.3})$$

donde  $\hat{e}_o = \vec{e}_{o0}/|\vec{e}_{o0}|$  y  $\hat{e}_e = \vec{e}_{e0}/|\vec{e}_{e0}|$ . Los vectores  $\vec{e}_{o0}$  y  $\vec{e}_{e0}$  se calculan a partir de las expresiones dadas en la sección 2.3.

Las expresiones para los campos magnéticos incidente, reflejado y transmitido se obtienen fácilmente utilizando la ley de inducción de Faraday para ondas planas.

En las expresiones anteriores se desconocen  $R_0$ ,  $S_0$ ,  $C_{o0}$  y  $C_{e0}$ . Para determinar estas amplitudes incógnitas, imponemos condiciones de contorno en la interfase:

$$(\vec{E}_1^i + \vec{E}_1^r - \vec{E}_2^t)|_{y=0} \times \hat{y} = 0 , \quad (\text{A.4})$$

$$(\vec{H}_1^i + \vec{H}_1^r - \vec{H}_2^t)|_{y=0} \times \hat{y} = 0 . \quad (\text{A.5})$$

Reemplazando en las ecuaciones anteriores las expresiones de los campos, se obtiene un sistema de cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas. Trabajando algebraicamente dichas ecuaciones, se obtiene:

$$\begin{pmatrix} R_0 \\ S_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{ss} & R_{sp} \\ R_{ps} & R_{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ S \end{pmatrix}, \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{pmatrix} C_{o0} \\ C_{e0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{os} & T_{op} \\ T_{es} & R_{ep} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_o \\ C_e \end{pmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

Los elementos de la matriz de reflexión son:

$$R_{ss} = \frac{1}{\delta} [E_+(F_- - H_-) + E_-(H_+ - F_+)], \quad (\text{A.8})$$

$$R_{sp} = \frac{1}{\delta} (D_+ E_- - D_- E_+), \quad (\text{A.9})$$

$$R_{ps} = \frac{1}{\delta} [F_+(G_- + H_-) + G_+(H_- - F_-) - H_+(G_- + F_-)], \quad (\text{A.10})$$

$$R_{pp} = \frac{1}{\delta} [D_-(G_+ + H_+) - D_+(G_- + H_-)], \quad (\text{A.11})$$

y los de la matriz de transmisión son:

$$T_{os} = \frac{2}{\delta} q_i (F_- - H_-), \quad (\text{A.12})$$

$$T_{op} = -\frac{2}{\delta} q_i D_-, \quad (\text{A.13})$$

$$T_{es} = \frac{2}{\delta} q_i (H_+ - F_+), \quad (\text{A.14})$$

$$T_{ep} = \frac{2}{\delta} q_i D_+, \quad (\text{A.15})$$

donde

$$\delta = D_+(F_- - H_-) + D_-(H_+ - F_+), \quad (\text{A.16})$$

$$D_{\pm} = \left( q_i + \frac{q_{\pm}}{\mu_r} \right) \hat{e}_{o0,e0} \cdot \hat{z}, \quad (\text{A.17})$$

$$E_{\pm} = \left( q_i - \frac{q_{\pm}}{\mu_r} \right) \hat{e}_{o0,e0} \cdot \hat{z}, \quad (\text{A.18})$$

$$F_{\pm} = \left(1 + \frac{q_i q_{\pm}}{\mu_r}\right) \hat{e}_{o0,e0} \cdot \hat{x}, \quad (\text{A.19})$$

$$G_{\pm} = \left(1 - \frac{q_i q_{\pm}}{\mu_r}\right) \hat{e}_{o0,e0} \cdot \hat{x}, \quad (\text{A.20})$$

$$H_{\pm} = \frac{q_i q'_i}{\mu_r} \hat{e}_{\pm} \cdot \hat{y}, \quad (\text{A.21})$$

$$q_{\pm} = c\beta_{o0,e0}/(\omega_0 \sqrt{\mu_i \epsilon_i}), \quad (\text{A.22})$$

$$q_i = c\beta_0/(\omega_0 \sqrt{\mu_i \epsilon_i}), \quad (\text{A.23})$$

$$q'_i = c\alpha_0/(\omega_0 \sqrt{\mu_i \epsilon_i}), \quad (\text{A.24})$$

$$\mu_r = \mu/\mu_i. \quad (\text{A.25})$$

## Referencias

- [1] Para una visión actual del tema pueden consultarse los fascículos especiales de agosto y septiembre del Journal of the Optical Society of America A **7** (1990).
- [2] Rayleigh, "On the dynamical theory of gratings", Proc. Roy. Soc. A **79**, 399 (1907).
- [3] D. Maystre, "Electromagnetic theories of diffraction gratings", *Progress in Optics*, XXI, editado por E. Wolf (Amsterdam, Elsevier, 1984).
- [4] R. Petit, ed., *Electromagnetic Theory of Gratings*, (Heidelberg, Springer, 1980).
- [5] R. A. Depine, "Teoría de eficiencia de redes de difracción", Tesis Doctoral, Universidad de Buenos Aires (1983).
- [6] J. R. Fox, *Optica Acta*, **27**, 289 (1980).
- [7] K. Rokushima and J. Yamakita, "Analysis of anisotropic dielectric gratings", J. Opt. Soc. Am. **73**, 901 (1983).
- [8] E. Glytsis and T. Gaylord, "Rigorous three-dimensional coupled wave diffraction analysis of single and cascaded anisotropic gratings", J. Opt. Soc. Am. A **4**, 2061 (1987).
- [9] E. Glytsis and T. Gaylord, "Three-dimensional (vector) rigorous coupled-wave analysis of anisotropic grating diffraction", J. Opt. Soc. Am. A **7**, 1399 (1990).
- [10] S. Mori, K. Mukai, J. Yamakita y K. Rokushima, "Analysis of dielectric lamellar gratings coated with anisotropic layers", J. Opt. Soc. Am. A **7**, 1661 (1990).
- [11] G. Tayeb, M. Cadilhac and R. Petit, "Sur l'étude théorique des réseaux de diffraction constitués de matériaux anisotropes", C. r. Acad. Sci. (Paris), 307 II, 711 (1988).

- [12] G. Tayeb, "Sur l'étude numérique des réseaux de diffraction constitués de matériaux anisotropes", C. r. Acad. Sci. (Paris), 307 II, 1501 (1988).
- [13] R. A. Depine, V. L. Brudny and A. Lakhtakia, "T-matrix approach for calculating the electromagnetic fields diffracted by a corrugated, anisotropic grating", J. Mod. Opt. **39**, 589 (1992).
- [14] A. Lakhtakia, R. A. Depine, M. E. Inchaussandague and V. L. Brudny, "Scattering by a periodically-corrugated interface between free space and a gyroelectromagnetic uniaxial medium", Appl. Opt. **32**, 2765 (1993).
- [15] R. A. Depine and M. L. Gigli, "Conversion between polarization states at the sinusoidal boundary of a uniaxial crystal", Physical Review B **49**, 8437 (1994).
- [16] M. L. Gigli and R. A. Depine, "Conical diffraction from uniaxial gratings", J. Mod. Opt. **42**, 1281 (1995).
- [17] H. C. Chen, *Theory of electromagnetic waves: A coordinate free approach* ( McGraw-Hill, New York, 1983).
- [18] M. Nevière et M.Cadilhac, "Sur une nouvelle formulation du probleme de la diffraction d'une onde plane par un reseau infiniment conducteur-cas general", Opt.Comm. **3**, 379 (1971).
- [19] R. A. Depine and J. M. Simon, "Diffraction grating efficiencies: conformal mapping method for a good real conductor", Optica Acta **29**, 1459 (1982).
- [20] R. A. Depine and J. M. Simon, "Surface impedance boundary condition for metallic diffraction gratings in the optical and infrared range", Optica Acta **30**, 313 (1983).

- [21] R. A. Depine, "Conformal mapping method for finitely conducting diffraction gratings in conical mountings", *Optik* **81**, 95 (1989).
- [22] R. A. Depine and J. M. Simon, "Diffraction grating efficiencies. An exact differential algorithm valid for high conductivities", *Optica Acta* **30**, No. 9, 1273 (1983).
- [23] R. A. Depine y C. I. Valencia, "Diffraction from corrugated dielectric gratings: general case of oblique incidence", *Journal of Modern Optics* **39**, 2089 (1992).
- [24] M. E. Inchaussandague, "Redes de difracción en cristales uniaxiales", Tesis de Licenciatura, Universidad de Buenos Aires (1992).
- [25] R. A. Depine and M. E. Inchaussandague, "Corrugated diffraction gratings in uniaxial crystals", *J. Opt. Soc. Am. A* **11**, 173 (1994).
- [26] M. E. Inchaussandague and R. A. Depine, "Diffraction gratings in uniaxial crystals with arbitrary orientation of the optic axis", *J. Opt. Soc. Am A* **12**, 1261 (1995).
- [27] M. E. Inchaussandague and R. A. Depine, "Conformal mapping method for electromagnetic scattering at the boundary of a uniaxial crystal and a corrugated perfect conductor", *Optik* **101**, 147 (1996).
- [28] J. Chandezon, M. Dupuis, G. Cornet and D. Maystre, "Multicoated gratings: a differential formalism applicable in the entire optical region", *Opt. Soc. Am. A* **72**, 839 (1982).
- [29] S. J. Elston, G. P. Bryan-Brown and J. R. Sambles, "Polarization conversion from diffraction gratings", *Physical Review B* **44**, 6393 (1991).

- [30] M. E. Inchaussandague and R. A. Depine, "Polarization conversion from diffraction gratings made of uniaxial crystals", (Phys. Rev. E, en prensa, 1996).
- [31] M. E. Inchaussandague and R. A. Depine, "Rigorous vector theory for diffraction gratings made of biaxial crystals" (J. Mod. Opt., en prensa, 1996).
- [32] M. L. Gigli, "Propagación de ondas electromagnéticas en medios anisótropos", monografía para el curso "Tópicos avanzados de electrodinámica", Universidad de Buenos Aires (1996).
- [33] E. Coddington and N. Levinson, *Theory of ordinary differential equations* (Mc Graw Hill, 1955).
- [34] H. Raether, *Surface plasmons on smooth and rough surfaces and on gratings* (Heidelberg-Springer, 1988).
- [35] R. A. Depine and M. L. Gigli, "Total conversion from photons to surface plasmons at the corrugated boundary of a uniaxial crystal", Opt. Commun. **129**, 318 (1996).
- [36] L.A. Santaló, *Vectores y tensores con sus aplicaciones* (EUDEBA, 1993).

## B. Título y resumen en inglés

**Title:** Diffraction of electromagnetic waves at periodically corrugated anisotropic media

**Abstract:** We present new rigorous theoretical formalisms to solve the problem of diffraction of light at a periodically corrugated boundary between an isotropic medium (dielectric, metal or perfect conductor) and a crystal (uniaxial or biaxial).

The formalisms are based upon the use of coordinate transformations that map the periodic interface onto a plane, thus simplifying the treatment of the boundary conditions. Starting from Maxwell's equations in the transformed frame, the original problem is reduced to the numerical solution of systems of coupled differential equations.

Two kinds of transformations are used: contravariant and covariant. The method of covariant transformations applies to gratings illuminated either from the isotropic or from the crystal side by waves with wave vectors inclined at an arbitrary angle with respect to the grooves.

The theory is validated in the limiting cases of an almost flat interface and isotropic gratings. Moreover, the results agree with those obtained with a simplified formalism invoking the Rayleigh hypothesis.

As examples of application, we study conversion between polarization states upon reflection and resonant excitation of surface plasmons.



## C. Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecerle a Ricardo Depine por haberme dado la oportunidad de ser su tesista, por la confianza que depositó en mí al empezar este trabajo y por el respaldo que me dio durante estos años. Por sobre todas las cosas, quiero darle las gracias por su calidez, su paciencia a toda prueba y por el optimismo que me transmitió siempre y que me ha ayudado a realizar esta tesis con gusto y entusiasmo.

Quiero agradecer también a todos los integrantes del Grupo de Electromagnetismo Aplicado, quienes de una u otra forma contribuyeron en la realización de este trabajo. En especial, a Diana Skigin por su amistad de tantos años y a Miriam Gigli, por las corridas, los gráficos, el software, en fin, por la ayuda que me brindó en todo momento.

A mi familia, en especial a mis padres y a mi esposo, por su cariño, su apoyo y su aliento para finalizar esta tesis.

A BPD Consultores, por haberme facilitado su centro de cómputos.

Al Departamento de Física por haberme brindado un lugar de trabajo para desarrollar esta tesis y por haber contribuido a mi formación profesional.

Finalmente, agradezco al CONICET el apoyo económico recibido a través de sus becas de iniciación, perfeccionamiento y post-doctoral.