

# 1 Hibridación de polaritones fonónicos superficiales I: lámina polar de espesor $d$ sobre un sustrato polar infinito

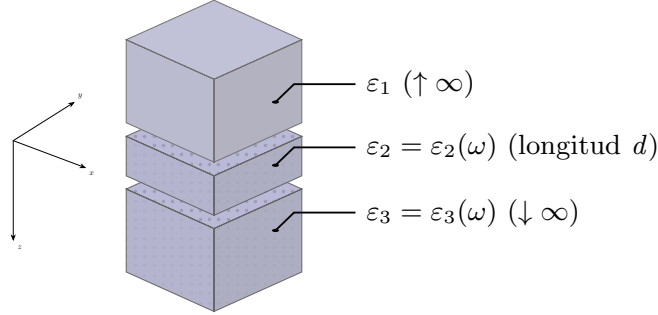


Figure 1: Esquema del sistema Hibridación de polaritones fonónicos superficiales.

**Ecuación general en  $u = \omega^2$ .**

$$\tanh(dk_x) \left[ \varepsilon_1 \varepsilon_{\infty 3} (\omega_{L3}^2 - u) (\omega_{T2}^2 - u)^2 + \varepsilon_{\infty 2}^2 (\omega_{L2}^2 - u)^2 (\omega_{T3}^2 - u) \right] + \varepsilon_{\infty 2} \varepsilon_{\infty 3} (\omega_{L2}^2 - u) (\omega_{L3}^2 - u) (\omega_{T2}^2 - u) + \varepsilon_1 \varepsilon_{\infty 2} (\omega_{L2}^2 - u) (\omega_{T3}^2 - u) (\omega_{T2}^2 - u) = 0.$$

**Forma polinómica.** Reordenando se obtiene un cúbico en  $u$ :

$$a_6 u^3 - a_4 u^2 + a_2 u - a_0 = 0, \quad (u = \omega^2). \quad (1)$$

**Definiciones “de interfaz” dependientes de  $k_x$ .** Sea  $\kappa := \coth(dk_x)$ . Definimos las frecuencias efectivas

$$\omega_{(2|1)}^2(\kappa) = \frac{\varepsilon_{\infty 2} \kappa \omega_{L2}^2 + \varepsilon_1 \omega_{T2}^2}{\varepsilon_{\infty 2} \kappa + \varepsilon_1}, \quad (2)$$

$$\omega_{(2|3)}^2(\kappa) = \frac{\varepsilon_{\infty 2} \kappa \omega_{L2}^2 + \varepsilon_{\infty 3} \omega_{T2}^2}{\varepsilon_{\infty 2} \kappa + \varepsilon_{\infty 3}}, \quad (3)$$

$$\omega_{(3|2)}^2(\kappa) = \frac{\varepsilon_{\infty 3} \kappa \omega_{L3}^2 + \varepsilon_{\infty 2} \omega_{T3}^2}{\varepsilon_{\infty 2} \kappa + \varepsilon_{\infty 3}}. \quad (4)$$

Producto “fonones superficiales” para el par (2|3), son el producto de soluciones del sistema anterior *POLAR3*:

$$\Delta_{\text{sph}}^{(2|3)} = \frac{\varepsilon_{\infty 2} \kappa \omega_{L2}^2 \omega_{T3}^2 + \varepsilon_{\infty 3} \omega_{L3}^2 \omega_{T2}^2}{\varepsilon_{\infty 2} \kappa + \varepsilon_{\infty 3}}. \quad (5)$$

Parámetro de acoplo (tiende a 0 cuando  $k_x \rightarrow \infty$ ):

$$\Delta(\kappa) = \frac{\varepsilon_{\infty 2}^2 (1 - \kappa)}{(\varepsilon_{\infty 2} \kappa + \varepsilon_1)(\varepsilon_{\infty 2} \kappa + \varepsilon_{\infty 3})}. \quad (6)$$

**Coeficientes del cúbico (1).**

$$a_6 = 1 + \Delta(\kappa), \quad (7)$$

$$a_4 = \omega_{(2|1)}^2(\kappa) + \omega_{(2|3)}^2(\kappa) + \omega_{(3|2)}^2(\kappa) + \Delta(\kappa) (2\omega_{L2}^2 + \omega_{T3}^2), \quad (8)$$

$$a_2 = \omega_{(2|1)}^2(\kappa) \left( \omega_{(2|3)}^2(\kappa) + \omega_{(3|2)}^2(\kappa) \right) + \Delta(\kappa) \left( \omega_{L2}^4 + 2\omega_{T3}^2 \omega_{L2}^2 \right) + \Delta_{\text{sph}}^{(2|3)}, \quad (9)$$

$$a_0 = \omega_{(2|1)}^2(\kappa) \Delta_{\text{sph}}^{(2|3)} + \Delta(\kappa) (\omega_{L2}^4 \omega_{T3}^2). \quad (10)$$

Se puede obtener una serie de soluciones analíticas pero son lo suficientemente grandes y largas como para que el FullSimplify de Mathematica colapse y no merezca la pena buscar como representarlas.

**Límites asintóticos**

$k_x \rightarrow 0$ .  $\tanh(dk_x) \rightarrow 0$  y  $\kappa = \coth(dk_x) \rightarrow \infty$ . De la ecuación original:

$$(\omega_{L2}^2 - u)(\omega_{T2}^2 - u) [\varepsilon_{\infty 3}(\omega_{L3}^2 - u) + \varepsilon_1(\omega_{T3}^2 - u)] = 0,$$

de donde

$$\omega_{\text{HibridaciónI}}^2 \in \left\{ \omega_{L2}^2, \omega_{T2}^2, \omega_{(3|1)}^2 \right\}, \quad \omega_{(3|1)}^2 := \frac{\varepsilon_{\infty 3} \omega_{L3}^2 + \varepsilon_1 \omega_{T3}^2}{\varepsilon_{\infty 3} + \varepsilon_1}. \quad (11)$$

$k_x \rightarrow \infty$ .  $\tanh(dk_x) \rightarrow 1$ ,  $\kappa \rightarrow 1$  y  $\Delta(\kappa) \rightarrow 0$ . Las soluciones se desacoplan como:

$$\omega_{\text{HibridaciónI}}^2 \rightarrow \omega_{(2|1)}^2, \quad (12)$$

$$\omega_{\text{HibridaciónI}}^2 \rightarrow \frac{\omega_{(2|3)}^2 + \omega_{(3|2)}^2 \mp \sqrt{(\omega_{(2|3)}^2 + \omega_{(3|2)}^2)^2 - 4\Delta_{\text{sph}}^{(2|3)}}}{2}, \quad (13)$$

es decir, una rama ligada a la interfaz (2|1) y dos ramas acopladas del par (2|3).

Hibridación de polaritones fonónicos superficiales I (sin sliders)  
Apilamiento: Al arriba / Si abajo — H = 20.0 nm, X\_max = 9.86634902 eV

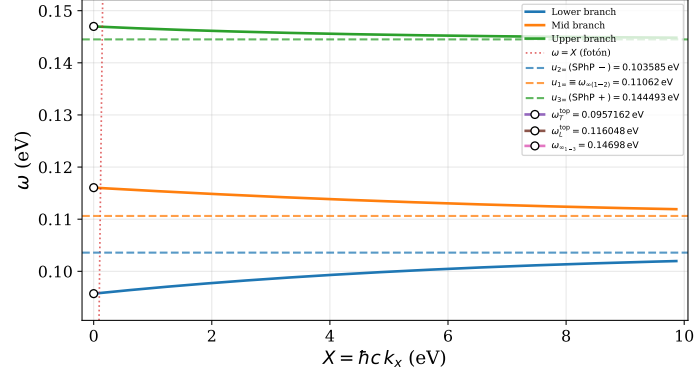


Figure 2: Al → Si

Hibridación de polaritones fonónicos superficiales I (sin sliders)  
Apilamiento: Si arriba / Al abajo — H = 20.0 nm, X\_max = 9.86634902 eV

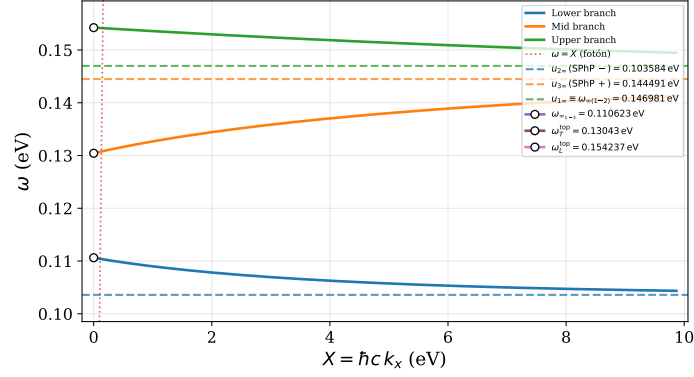


Figure 3: Si → Al