Memoria TFG

Mario Díaz

October 2025

1 Polaritón plasmónico de grafeno (PPG)

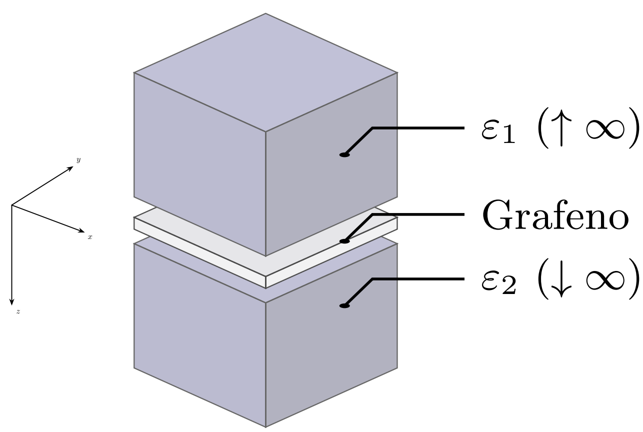

Figure 1: Stack: monocapa de grafeno separando dos medios semiinfinitos no dispersivos. Supondremos $\varepsilon_1 = 1$ (aire) y ε_2 constante.

Descripción. Monocapa de grafeno confinada entre dos medios semiinfinitos con permitividades ε_1 y ε_2 (no dispersivas). En adelante tomamos $\varepsilon_1 = 1$ (aire).

Ecuación característica Ecuación dada:

$$(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\,\omega^2 \;-\; 2\,c\,k_x\,\omega_D \;=\; 0. \tag{1}$$

Solución analítica (relación de dispersión). De (1) resulta inmediatamente:

$$\boxed{\omega^2(k_x) \;=\; \frac{2\,c\,k_x\,\omega_D}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}} \tag{2}$$

con $\omega(k_x) = \sqrt{\dfrac{2\,c\,k_x\,\omega_D}{\varepsilon_1+\varepsilon_2}}$.

graphics/PPG_dispersion.pdf

Figure 2: Relación de dispersión $\omega(k_x)$ del PPG dada por (2).

Agrupaciones y frecuencias de interfase. En este sistema puramente plasmonico no hay frecuencias de interfase (ω_T, ω_L) que delimiten bandas. Hay una única rama $\omega(k_x)$ monótona y sin gaps.

Asíntotas. **Límite $k_x \to 0$.** De $\omega(k_x) \propto \sqrt{k_x}$:

$$\omega(k_x) \xrightarrow[k_x\to 0]{} 0 \quad \text{(no hay frecuencia de corte).}$$

Límite $k_x \to \infty$.

$$\omega(k_x) = \sqrt{\frac{2\,c\,\omega_D}{\varepsilon_1+\varepsilon_2}}\,\sqrt{k_x} \sim \sqrt{k_x} \qquad (k_x \to \infty),$$

sin saturar en una constante (al no existir ω_T, ω_L del medio).

1 Dos monocapas de grafeno separadas $2d$ en ϵ_2, en contacto con ϵ_1

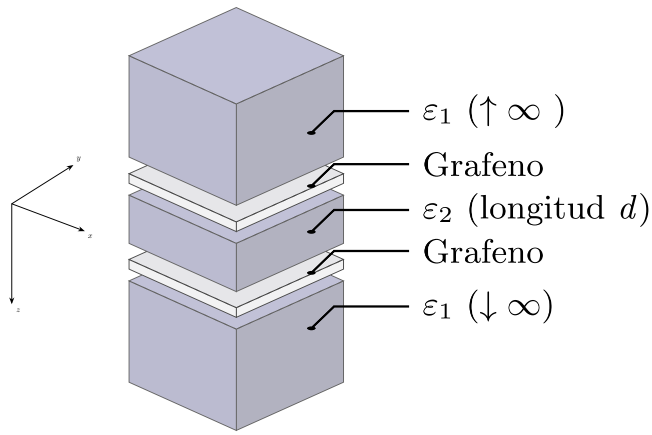

Figure 1: Dos monocapas de grafeno separadas $2d$. El espacio intermedio es ϵ_2; arriba y abajo hay ϵ_1 (dieléctricos no dispersivos).

Descripción. Dos monocapas de grafeno separadas una distancia 2d. El espacio entre las dos monocapas est´a relleno con un material de constante diel´ectrica 2. Tanto la monocapa superior como la inferior est´an en contacto con el diel´ectrico 1.

Ecuación característica.

$$\frac{e^{2dk_x}\left[(\epsilon_1+\epsilon_2)\,\omega^2-2\,c\,k_x\,\omega_D\right]^2-\left[(\epsilon_2-\epsilon_1)\,\omega^2+2\,c\,k_x\,\omega_D\right]^2}{c\,k_x\,\omega}=0. \tag{1}$$

Soluciones analíticas (relaciones de dispersión).

$$\omega_1^2(k_x)=\frac{2\,c\,k_x\,\omega_D\,\sinh\!\left(\frac{d\,k_x}{2}\right)}{\epsilon_1\,\sinh\!\left(\frac{d\,k_x}{2}\right)+\epsilon_2\,\cosh\!\left(\frac{d\,k_x}{2}\right)} \tag{2}$$

$$\omega_2^2(k_x)=\frac{2\,c\,k_x\,\omega_D\,\cosh\!\left(\frac{d\,k_x}{2}\right)}{\epsilon_1\,\sinh\!\left(\frac{d\,k_x}{2}\right)+\epsilon_2\,\cosh\!\left(\frac{d\,k_x}{2}\right)} \tag{3}$$

Asíntotas. **Límite $k_x \to 0$.** Escribiendo $x = \frac{dk_x}{2}$ y usando $\sinh x \approx x$, $\cosh x \approx 1$:

$$\omega_1^2(k_x) \approx \frac{2ck_x\omega_D\, x}{\epsilon_1 x + \epsilon_2} = \frac{c\, d\, \omega_D}{\epsilon_2}\, k_x^2 \quad \Rightarrow \quad \omega_1(k_x) \sim \sqrt{\frac{c\, d\, \omega_D}{\epsilon_2}}\, k_x,$$

$$\omega_2^2(k_x) \approx \frac{2ck_x\omega_D}{\epsilon_1 x + \epsilon_2} \to \frac{2c\omega_D}{\epsilon_2}\, k_x \quad \Rightarrow \quad \omega_2(k_x) \sim \sqrt{\frac{2c\omega_D}{\epsilon_2}}\, k_x^{1/2}.$$

Límite $k_x \to \infty$. Con $\sinh x \sim \cosh x \sim \frac{1}{2}e^x$:

$$\omega_{1,2}^2(k_x) \to \frac{2\, c\, k_x\, \omega_D}{\epsilon_1 + \epsilon_2}.$$

Agrupaciones.

- Ramas: ω_1 (antisimétrica, $\propto k_x$ a $k_x \to 0$) y ω_2 (simétrica, $\propto \sqrt{k_x}$ a $k_x \to 0$).
- Asíntota común en $k_x \to \infty$: $\omega_\infty^2 = \dfrac{2ck_x\omega_D}{\epsilon_1 + \epsilon_2}$.

graphics/GG_2layers_dispersion.pdf

Figure 2: Relaciones de dispersión $\omega_{1,2}(k_x)$ y sus asíntotas en $k_x \to 0$ y $k_x \to \infty$.

1 Polaritón plasmónico de grafeno acústico I

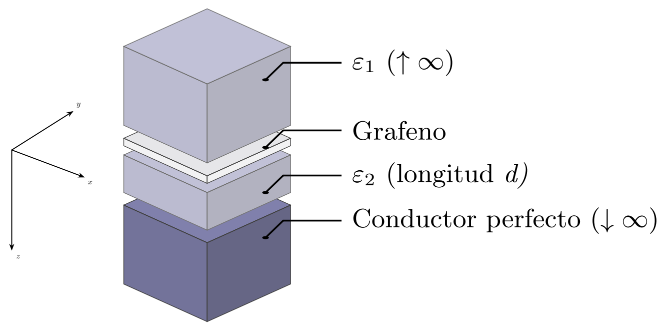

Figure 1: Esquema del sistema AGP-I.

Descripción. Polaritón plasmónico de grafeno acústico I: Una monocapa de grafeno a una distancia d de un sustrato metálico infinito que asumirás que es un conductor perfecto. El espacio entre la monocapa y el metal está relleno con un material de constante dieléctrica ϵ_2. La monocapa está en contacto con un dieléctrico ϵ_1. Comparar con los resultados del punto anterior. Estudiar el caso límite $d \to \infty$.

Ecuación característica.

$$\epsilon_2\omega^2 \cosh(dk_x) \;+\; (\epsilon_1\omega^2 - 2ck_x\omega_D)\sinh(dk_x) \;=\; 0. \tag{1}$$

Dividiendo por $\cosh(dk_x)$ queda la forma con tanh:

$$\epsilon_2\omega^2 + (\epsilon_1\omega^2 - 2ck_x\omega_D)\tanh(dk_x) \;=\; 0, \qquad \Longrightarrow \qquad \tanh(dk_x) \;=\; \frac{\epsilon_2\omega^2}{2ck_x\omega_D - \epsilon_1\omega^2}. \tag{2}$$

Relación de dispersión.

$$\omega^2(k_x) \;=\; \frac{2\,c\,k_x\,\omega_D\,\sinh(dk_x)}{\epsilon_1\,\sinh(dk_x) + \epsilon_2\,\cosh(dk_x)}. \tag{3}$$

Asíntotas. **Límite $k_x \to 0$.** Con $x = dk_x$, usando $\sinh x \approx x$ y $\cosh x \approx 1$:

$$\omega^2(k_x) \approx \frac{2ck_x\omega_D\,x}{\epsilon_1 x + \epsilon_2} = \frac{2cd\omega_D}{\epsilon_2}\,k_x^2 \quad \Longrightarrow \quad \boxed{\omega(k_x) \sim \sqrt{\frac{2cd\omega_D}{\epsilon_2}}\;k_x}.$$

Límite $k_x \to \infty$. Con $\sinh x \sim \cosh x \sim \frac{1}{2}e^x$:

$$\omega^2(k_x) \to \frac{2\,c\,k_x\,\omega_D}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \quad \Longrightarrow \quad \boxed{\omega(k_x) \sim \sqrt{\frac{2c\omega_D}{\epsilon_1 + \epsilon_2}}\,\sqrt{k_x}}\,.$$

Agrupaciones.

- Asíntota baja (AGP acústico): $\omega \propto k_x$ para $k_x \to 0$.
- Asíntota alta común: $\omega^2 \to \dfrac{2ck_x\omega_D}{\epsilon_1 + \epsilon_2}$.

graphics/AGP1_dispersion.pdf

Figure 2: Relación de dispersión $\omega(k_x)$ del AGP-I (Ec. (3)) y sus asíntotas.

1 Polaritón plasmónico de grafeno acústico II

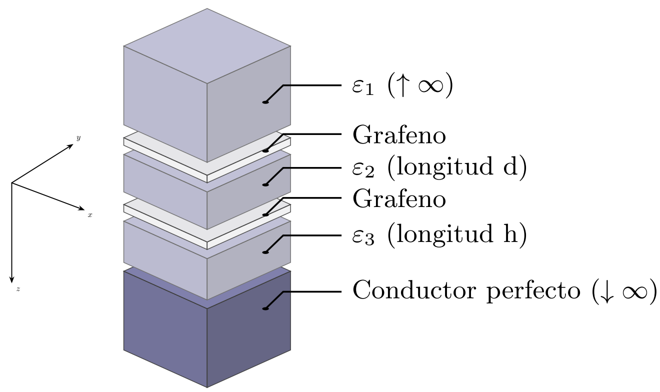

Figure 1: Esquema del sistema AGP-II (dos monocapas + metal a distancia h).

Descripción. Polarit´on plasm´onico de grafeno ac´ustico II: Dos monocapas de grafeno separadas una distancia d. La segunda de las monocapas se encuentra a una distancia h de un sustrato de conductor perfecto. El espacio entre las monocapas est´a relleno de un diel´ectrico no dispersivo 2 y el espacio entre la segunda monocapa y el metal est´a relleno con un diel´ectrico no dispersivo 3.

Ecuación característica.

$$\epsilon_2\,\omega^2\cosh(dk_x)\Big(\epsilon_3\,\omega^2\cosh(hk_x)+(\epsilon_1\,\omega^2-4ck_x\omega_D)\sinh(hk_x)\Big)+\sinh(dk_x)\Big(\epsilon_3\,\omega^2(\epsilon_1\,\omega^2-2ck_x\omega_D)\cosh(hk_x)+(\epsilon_2^2\omega \tag{1}$$

Soluciones analíticas (relaciones de dispersión). Sea $S_d = \sinh(dk_x)$, $C_d = \cosh(dk_x)$, $S_h = \sinh(hk_x)$, $C_h = \cosh(hk_x)$. Definimos

$$\mathcal{D}(k_x) = 2\epsilon_3\,C_h\,(\epsilon_2\,C_d + \epsilon_1\,S_d)\;+\;2\epsilon_2\,(\epsilon_1\,C_d + \epsilon_2\,S_d)\,S_h,$$

$$\mathcal{N}_1(k_x) = \epsilon_3\,C_h\,S_d\;+\;(2\epsilon_2\,C_d + \epsilon_1\,S_d)\,S_h,$$

$$\mathcal{N}_2(k_x) = \big((-\,\epsilon_1^2 + 8\epsilon_2^2 + \epsilon_1^2\cosh(2dk_x))\,S_h^2\big)\;+\;2\epsilon_3\,S_d^2\,\big(\epsilon_3\,C_h^2 - \epsilon_1\,\sinh(2hk_x)\big).$$

Entonces, las dos ramas pueden escribirse de forma compacta como

$$\boxed{\omega_{1,2}(k_x) = \sqrt{\frac{2\,c\,k_x\,\omega_D\,\mathcal{N}_1(k_x)\;\mp\;\sqrt{2}\,c\,k_x\,\omega_D\,\sqrt{\mathcal{N}_2(k_x)}}{\mathcal{D}(k_x)}}}. \tag{2}$$

Asíntotas (derivación). Sea $u = \omega^2$.

Límite $k \to 0$ (dos ramas acústicas). Suponemos un comportamiento acústico $u \sim a\,k^2$ ($\omega \sim \sqrt{a}\,k$). Usando $S_d \simeq dk$, $C_d \simeq 1$, $S_h \simeq hk$, $C_h \simeq 1$, se obtienen los términos líderes:

$$k^4\Big[\epsilon_2\epsilon_3 a^2 - 2c\omega_D a(\epsilon_3 d + 2\epsilon_2 h) + 4c^2\omega_D^2 dh\Big]$$

El coeficiente de k^4 debe anularse, dando:

$$\epsilon_2\epsilon_3\, a^2 - 2c\omega_D(\epsilon_3 d + 2\epsilon_2 h)\, a + 4c^2\omega_D^2 dh = 0,$$

cuyas raíces son

$$a_\pm = \frac{c\,\omega_D}{\epsilon_2\epsilon_3}\Big[(\epsilon_3 d + 2\epsilon_2 h) \pm \sqrt{(\epsilon_3 d + 2\epsilon_2 h)^2 - 4\epsilon_2\epsilon_3 dh}\Big]. \tag{3}$$

Por tanto,

$$\boxed{\omega_{1,2}(k) \;\sim\; \sqrt{a_\pm}\,k\,, \qquad k \to 0.} \tag{4}$$

Límite $k \to \infty$ (dos asíntotas distintas). Usamos $S_{d,h} \sim \frac{1}{2}e^{dk,hk}$, $C_{d,h} \sim \frac{1}{2}e^{dk,hk}$. Factorizando $e^{(2d+h)k}$ la ecuación se reduce:

$$\underbrace{(\epsilon_1+\epsilon_2)(\epsilon_2+\epsilon_3)}_{=:A}\, u^2 - \underbrace{2(\epsilon_1 + 2\epsilon_2 + \epsilon_3)\, ck\omega_D}_{=:B}\, u + \underbrace{4c^2k^2\omega_D^2}_{=:C} = 0.$$

Resolviendo $Au^2 - Bu + C = 0$ y usando $B^2 - 4AC = 4c^2k^2\omega_D^2\,(\epsilon_1 - \epsilon_3)^2$, se obtiene

$$u_\pm = \frac{B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A} = \frac{2ck\omega_D}{(\epsilon_1+\epsilon_2)(\epsilon_2+\epsilon_3)}\Big[(\epsilon_1 + 2\epsilon_2 + \epsilon_3) \pm |\epsilon_1 - \epsilon_3|\Big].$$

Por consiguiente,

$$\boxed{\omega_+^2(k) \;\to\; \frac{2ck\omega_D}{\epsilon_2+\epsilon_3}, \qquad \omega_-^2(k) \;\to\; \frac{2ck\omega_D}{\epsilon_1+\epsilon_2}, \qquad k \to \infty,} \tag{5}$$

es decir, cada rama “ve” asintóticamente el par de medios adyacentes a su monocapa.

graphics/AGP2_dispersion.pdf

Figure 2: Relaciones de dispersión $\omega_{1,2}(k_x)$ (Ec. (2)) y asíntotas (Ecs. (**??**), (**??**)).

1 Polaritones fonónicos de volumen

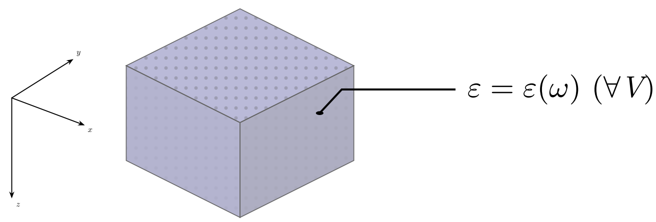

Figure 1: Medio homogéneo polar $(\varepsilon_\infty, \omega_T, \omega_L)$.

Descripción. En un medio homogéneo infinito, la ecuación característica es simplemente la condición de propagación que se obtiene al sustituir la solución tipo onda plana en las ecuaciones de Maxwell, $\varepsilon(\omega)\,\omega^2 = c^2 k_x^2$. Sustituir en esta expresión la función dieléctrica de un material polar (Ec. 1.2) con $\gamma_O = 0$ y obtener la relación de dispersión $\omega(k_x)$ y sus límites asintóticos.

Ecuación característica. Usamos

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2} \qquad (\gamma_O = 0),$$

de modo que la condición de propagación queda

$$\varepsilon_\infty \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2}\,\omega^2 = c^2 k_x^2. \tag{1}$$

Relación de dispersión (dos ramas). Definimos $\omega_\infty^2(k_x) = \dfrac{c^2 k_x^2}{\varepsilon_\infty}$. Resolviendo (1) para ω, con $u = \omega^2$, el cuadrático queda

$$u^2 - (\omega_L^2 + \omega_\infty^2)\,u + \varepsilon_\infty\,\omega_\infty^2\,\omega_T^2 = 0,$$

y por tanto $\omega_\pm(k_x) = \sqrt{u_\pm(k_x)}$:

$$\omega_-(k_x) = \sqrt{\frac{\omega_\infty^2 + \omega_L^2 - \sqrt{(\omega_\infty^2 + \omega_L^2)^2 - 4\,\varepsilon_\infty\,\omega_\infty^2\,\omega_T^2}}{2}}, \tag{2}$$

$$\omega_+(k_x) = \sqrt{\frac{\omega_\infty^2 + \omega_L^2 + \sqrt{(\omega_\infty^2 + \omega_L^2)^2 - 4\,\varepsilon_\infty\,\omega_\infty^2\,\omega_T^2}}{2}}. \tag{3}$$

Asíntotas. Sea $k \equiv k_x$ y $\omega_\infty = \omega_\infty(k) = ck/\sqrt{\varepsilon_\infty}$.

(i) Límite $k \to 0$ (equivalente a $\omega_\infty \to 0$). Expandiendo en series:

$$\boxed{\omega_-(k) = \frac{\omega_T}{\omega_L}\,\omega_\infty} \quad \text{(acústica, lineal en } \omega_\infty\text{)}, \qquad \boxed{\omega_+(k) = \omega_L + \frac{1}{2\omega_L}\left(1 - \frac{\omega_T^2}{\omega_L^2}\right)\omega_\infty^2}.$$

(ii) Límite $k \to \infty$ (equivalente a $\omega_\infty \to \infty$).

$$\boxed{\omega_+(k) = \omega_\infty + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{2\,\omega_\infty}} \qquad \boxed{\omega_-(k) = \omega_T}.$$

Así, la rama superior tiende a la línea $\omega = \omega_\infty = ck/\sqrt{\varepsilon_\infty}$ y la inferior a ω_T.

Diferencia $\Delta\omega$ y mínimo. Definimos $\Delta\omega(k) = \omega_+(k) - \omega_-(k)$. Para $\omega_\infty \to \infty$, $\Delta\omega \sim \omega_\infty - \omega_T$ (crece linealmente en ω_∞); para $\omega_\infty \to 0$, $\Delta\omega \to \omega_L$. Una estimación del mínimo se obtiene con la intersección $\omega_\infty = \omega_T$:

$$\boxed{\omega_\infty(k_{\min}) \approx \omega_T \implies k_{\min} \approx \frac{\sqrt{\varepsilon_\infty}}{c}\,\omega_T}.$$

graphics/BULK_diff_dispersion.pdf

Figure 2: Diferencia $\Delta\omega = \omega_+ - \omega_-$ para dos materiales (p. ej., Si y Al). Se marcan el mínimo numérico y la estimación $k_{\min} \approx \sqrt{\varepsilon_\infty}\omega_T/c$.

1 Fonones superficiales

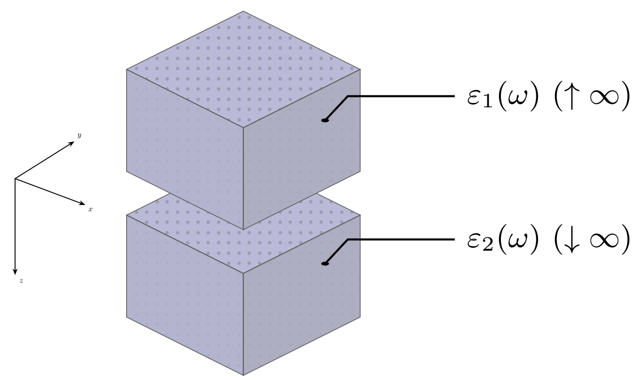

Figure 1: Interfase $z = 0$ entre dos medios polares semiinfinitos.

2 Fonones superficiales

Descripción. Fonones superficiales: Dos medios polares semiinfinitos cuya superficie de contacto es el plano XY.

Ecuación característica.

$$\varepsilon_{\infty 1} \frac{\omega_{L1}^2 - \omega^2}{\omega_{T1}^2 - \omega^2} \;+\; \varepsilon_{\infty 2} \frac{\omega_{L2}^2 - \omega^2}{\omega_{T2}^2 - \omega^2} \;=\; 0.$$

Frecuencias de interfase (definición).

$$\boxed{\omega_{(2|1)}^2 := \frac{\varepsilon_{\infty 2}\,\omega_{L2}^2 + \varepsilon_{\infty 1}\,\omega_{T2}^2}{\varepsilon_{\infty 1} + \varepsilon_{\infty 2}}, \qquad \omega_{(1|2)}^2 := \frac{\varepsilon_{\infty 1}\,\omega_{L1}^2 + \varepsilon_{\infty 2}\,\omega_{T1}^2}{\varepsilon_{\infty 1} + \varepsilon_{\infty 2}}}$$

Relaciones de dispersión (constantes en k_x, forma compacta). Definimos las frecuencias de interfase (ya arriba):

$$\omega_{(2|1)}^2 = \frac{\varepsilon_{\infty 2}\,\omega_{L2}^2 + \varepsilon_{\infty 1}\,\omega_{T2}^2}{\varepsilon_{\infty 1} + \varepsilon_{\infty 2}}, \qquad \omega_{(1|2)}^2 = \frac{\varepsilon_{\infty 1}\,\omega_{L1}^2 + \varepsilon_{\infty 2}\,\omega_{T1}^2}{\varepsilon_{\infty 1} + \varepsilon_{\infty 2}}.$$

El término de acoplo entre ambas interfaces es

$$\Delta \;=\; \frac{\varepsilon_{\infty 1}\,\varepsilon_{\infty 2}}{\left(\varepsilon_{\infty 1} + \varepsilon_{\infty 2}\right)^2} \left(\omega_{L2}^2 - \omega_{T2}^2\right) \left(\omega_{L1}^2 - \omega_{T1}^2\right) \;\; \geq 0.$$

Entonces las dos soluciones del problema (en $u = \omega^2$) son

$$\boxed{\omega_{\pm}^2 = \frac{\omega_{(2|1)}^2 + \omega_{(1|2)}^2}{2} \; \pm \; \frac{1}{2}\sqrt{\left(\omega_{(2|1)}^2 - \omega_{(1|2)}^2\right)^2 + 4\,\Delta}\,,} \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\omega_{\pm} = \sqrt{\omega_{\pm}^2}\,.}$$

Casos límite. Si uno de los medios es no polar ($\omega_{Lj}^2 = \omega_{Tj}^2$ para algún j), entonces $\Delta = 0$ y $\omega_{\pm}^2 = \{\omega_{(2|1)}^2, \omega_{(1|2)}^2\}$.

"Asíntotas". No hay asíntotas en $k_x \to 0$ ni $k_x \to \infty$, ya que $\omega_{\pm}$ son constantes.

1 Lámina de material polar de espesor d sobre un sustrato metálico infinito

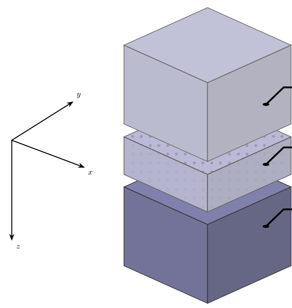

Figure 1: Lámina polar (medio 2) de espesor d sobre metal perfecto; superstrate ϵ_1.

Descripción. L´amina de material polar de espesor d sobre un sustrato met´alico infinito, que supondremos que se comporta como un conductor perfecto. Estudiar el caso l´ımite d → .

Ecuación característica . Ecuación dada:

$$-\epsilon_1 + \epsilon_{\infty,2}\frac{\omega_{L2}^2 - \omega^2}{\omega_{T2}^2 - \omega^2} \; + \; e^{2dk_x}\left(\epsilon_1 + \epsilon_{\infty,2}\frac{\omega_{L2}^2 - \omega^2}{\omega_{T2}^2 - \omega^2}\right) = 0.$$

$$\Longrightarrow \quad \boxed{\epsilon_2(\omega) = -\,\epsilon_1\,\tanh\Big(\frac{dk_x}{2}\Big)}.$$

Relación de dispersión Sea $t := \tanh\big(\frac{dk_x}{2}\big)$. Resolver $\epsilon_{\infty,2}\frac{\omega_{L2}^2-\omega^2}{\omega_{T2}^2-\omega^2} = -\epsilon_1 t$ para $u = \omega^2$ da

$$\boxed{\omega^2(k_x) = \frac{\epsilon_{\infty,2}\,\omega_{L2}^2 + \epsilon_1\,t\,\omega_{T2}^2}{\epsilon_{\infty,2} + \epsilon_1\,t}\,, \qquad t = \tanh\Big(\frac{dk_x}{2}\Big).} \tag{1}$$

Definición y uso de la frecuencia de interfase. Definimos la frecuencia de interfase (límite $t \to 1$, i.e., $k_x \to \infty$ o $d \to \infty$):

$$\boxed{\omega_{\mathrm{IF}}^2 := \frac{\epsilon_{\infty,2}\,\omega_{L2}^2 + \epsilon_1\,\omega_{T2}^2}{\epsilon_{\infty,2} + \epsilon_1}} \tag{2}$$

Límites $k_x \to 0$ ($t \to 0$):

$$\omega^2(k_x) \;\to\; \frac{\epsilon_{\infty,2}\,\omega_{L2}^2}{\epsilon_{\infty,2}} = \omega_{L2}^2 \quad\Rightarrow\quad \boxed{\omega(k_x) \to \omega_{L2}}.$$

$k_x \to \infty$ ($t \to 1$):

$$\omega^2(k_x) \;\to\; \omega_{\mathrm{IF}}^2 \quad\Rightarrow\quad \boxed{\omega(k_x) \to \omega_{\mathrm{IF}}}.$$

$d \to \infty$ (a k_x fijo): $t \to 1$ y de nuevo $\omega \to \omega_{\mathrm{IF}}$.