

# Metamateriales hiperbólicos

W. Luis Mochán

11 de octubre de 2021

## 1. Introducción

Un metamaterial es un sistema artificial formado por *partículas* intercaladas de dos o mas materiales ordinarios. Su estudio ha adquirido importancia pues sus propiedades ópticas pueden diferir sustancialmente de las propiedades de cada una de sus componentes, e incluso, pueden ser propiedades exóticas que no existen en los materiales ordinarios. El propósito de estas notas es estudiar las propiedades de uno de los metamateriales más simples, una superred formada por la alternancia de dos películas. Cuando una de las películas es metálica y la otra aislante y bajo ciertas aproximaciones, el metamaterial puede tratarse como un medio homogéneo pero con propiedades dieléctricas anisotrópicas, como si fuera un cristal uniaxial. En particular, a bajas frecuencias la respuesta es de caracter metálico en la dirección normal a la superficie y aislante en la dirección perpendicular. Por ello, la relación de dispersión de los modos propios correspondientes a los rayos extraordinarios de los materiales uniaxiales, es de caracter hiperbólico en lugar de elíptico. Esto tiene consecuencias interesantes como el corresponder a una densidad infinita de estados fotónicos. En las presentes notas desarrollaremos la teoría de medio efectivo que describe este metamaterial, obtendremos expresiones para sus modos propios electromagnéticos de bulto y de superficie, desarrollaremos códigos computacionales para su cálculo y haremos un análisis de los resultados para un modelo sencillo. <sup>1</sup>

---

<sup>1</sup>Estas notas fueron preparadas usando el modo `Org` del editor `emacs` y exportadas a `LaTeX` para generar el archivo `pdf`. Los códigos fueron programados en el lenguaje `Perl` y su ampliación numérica `Perl Data Language`.

## 2. Medio efectivo

### 2.1. Teoría

Consideremos una superred metal-aislante formada por películas alternadas  $a$  y  $b$  de anchos  $d_a$  y  $d_b$  con funciones dieléctricas  $\epsilon_a$  y  $\epsilon_b$ . Me interesa el caso en que uno de los dos materiales, digamos  $a$  es un metal y el otro, digamos  $b$  es un dieléctrico. Me interesa calcular el plasmón de superficie del sistema. Como una primera aproximación, estudiaremos el caso en que  $d_a$  y  $d_b$  son muy pequeños.

Cuando las películas que conforman al sistema son muy delgadas comparadas con otras distancias relevantes como podrían ser la longitud de onda del campo o la distancia de penetración en cada uno de los materiales, la respuesta macroscópica del sistema puede hallarse de manera muy sencilla haciendo las siguientes consideraciones: Las proyecciones  $E_{\parallel}$  y  $D_{\perp}$  del campo eléctrico y del campo magnético son continuas al atravesar cada interfase, y estos campos son prácticamente constantes al atravesar cada película delgada. Por lo tanto puedo identificar estos campos como campos macroscópicos, i.e.,

$$E_{\parallel} = E_{\parallel}^M, \quad D_{\perp} = E_{\perp}^M. \quad (1)$$

Por lo tanto, podemos escribir

$$D_{\parallel} = \epsilon(z)E_{\parallel}(z) = \epsilon(z)E_{\parallel}^M, \quad E_{\perp} = \epsilon^{-1}(z)D_{\perp}(z) = \frac{1}{\epsilon(z)}D_{\perp}^M, \quad (2)$$

ignorando la variación espacial de los campo macroscópicos a lo largo de un periodo, donde

$$\epsilon(z) = \begin{cases} \epsilon_a, & \text{en las capas a} \\ \epsilon_b, & \text{en las capas b} \end{cases} \quad (3)$$

Promediando las ecs. (2) obtenemos los campos macroscópicos

$$\begin{aligned} D_{\parallel}^M &= \langle D \rangle = \langle \epsilon(z)E_{\parallel}^M \rangle = \langle \epsilon(z) \rangle E_{\parallel}^M, \\ E_{\perp}^M &= \left\langle \frac{1}{\epsilon(z)} D_{\perp}^M \right\rangle = \left\langle \frac{1}{\epsilon(z)} \right\rangle D_{\perp}^M, \end{aligned} \quad (4)$$

de donde podemos identificar la respuesta macroscópica

$$\epsilon_{\parallel}^M = \langle \epsilon \rangle = f_a \epsilon_a + f_b \epsilon_b, \quad \frac{1}{\epsilon_{\perp}^M} = \left\langle \frac{1}{\epsilon(z)} \right\rangle = \frac{f_a}{\epsilon_a} + \frac{f_b}{\epsilon_b}, \quad (5)$$

donde  $f_a = d_a/d$  y  $f_b = d_b/d$  son las *fracciones de llenado* de los materiales  $a$  y  $b$ .

Como ejemplo, supongamos que  $a$  es un metal descrito por el modelo de Drude

$$\epsilon_a = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad (6)$$

y que  $b$  es un dieléctrico con una función dieléctrica constante. Entonces,

$$\begin{aligned} \epsilon_{\parallel}^M &= f_a + f_b \epsilon_b - f_a \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \\ \epsilon_{\perp}^M &= \frac{\epsilon_b}{f_a \epsilon_b + f_b} + \frac{f_a \epsilon_b^2 \omega_p^2 / (f_a \epsilon_b + f_b)^2}{\frac{f_b}{f_a \epsilon_b + f_b} \omega_p^2 - \omega^2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Puedo reescribir estas ecuaciones como

$$\epsilon_{\parallel}^M = \epsilon_{\parallel}^{\infty} - \frac{\omega_{D\parallel}^2}{\omega^2}, \quad \epsilon_{\perp}^M = \epsilon_{\perp}^{\infty} + \frac{\omega_{D\perp}^2}{\omega_{0\perp}^2 - \omega^2}, \quad (8)$$

donde

$$\epsilon_{\parallel}^{\infty} = f_a + f_b \epsilon_b, \quad \epsilon_{\perp}^{\infty} = \frac{\epsilon_b}{f_a \epsilon_b + f_b}, \quad (9)$$

son las respuestas asintóticas a alta frecuencia,

$$\omega_{D\parallel}^2 = f_a \omega_p^2, \quad \omega_{D\perp}^2 = \frac{f_a \epsilon_b^2 \omega_p^2}{(f_a \epsilon_b + f_b)^2} \quad (10)$$

son análogos a la frecuencia de Drude  $\sqrt{4\pi n e^2 / m}$ , con  $n$  la densidad de portadores de masa  $m$  y carga  $e$  en el modelo lorentziano, y

$$\omega_{0\perp}^2 = \frac{f_b}{f_a \epsilon_b + f_b} \omega_p^2, \quad (11)$$

es una frecuencia de resonancia.

Notamos que la respuesta en la dirección paralela es como la respuesta de un conductor, pero con una respuesta de alta frecuencia distinta de 1, debido a la contribución del aislante, y con una frecuencia de Drude disminuida debido a la fracción de llenado metálica. El cero de esta respuesta se halla en

$$\omega_{L\parallel} = \sqrt{\frac{f_a}{f_a + f_b \epsilon_b}} \omega_p. \quad (12)$$

Comparando con la ec. (11) notamos que para la fracción de llenado  $f_a = f_b = 0,5$  el polo de  $\epsilon_{\perp}^M$  coincide con el cero de  $\epsilon_{\parallel}^M$ .

Por otro lado, la respuesta en la dirección perpendicular es como la de un aislante pero con una resonancia en  $\omega_{0\perp}$ . El sistema es aislante a bajas frecuencias pues los dieléctricos impiden el paso de carga en la dirección normal a las interfaces, pero tiene una resonancia asociada al movimiento colectivo de carga en la dirección normal dentro de la película metálica: electrones acumulados en una interface son acelerados hacia la interface opuesta hasta que su acumulación en esta frena su movimiento e inicia un movimiento hacia la interface original, produciendo un movimiento. Para una película aislada en el vacío, la frecuencia natural sería la frecuencia de plasma  $\omega_p$ , pero en este sistema se ve modificada por polarización del dieléctrico. Curiosamente,  $\epsilon_{\perp}^M = 0$  en la frecuencia  $\omega_{L\perp} = \omega_p$ , al igual que el metal homogéneo.

En resumen, una superred de periodo pequeño se comporta como un sistema homogéneo pero anisotrópico, con respuestas diferentes a lo largo de las interfaces y en la dirección perpendicular. En el caso de una superred conductor-aislante, la respuesta es como un conductor de menor densidad a lo largo de la superficie y como un aislante con una resonancia lorentziana en la dirección perpendicular.

## 2.2. Código

A continuación presento un código para calcular las funciones respuesta discutidas arriba. Iniciamos cargando los encabezados usuales y los paquetes requeridos.

```
use v5.12;
use warnings;
use Getopt::Long;
use IO::Prompter;
use PDL;
use PDL::NiceSlice;
use PDL::Graphics::Gnuplot;
```

Figura 1: paquetes

Declara e inicializa los parámetros,

```
my $wp; # frecuencia de plasma medio a
my $epsb; # función dieléctrica del medio b
my $fa; # fracción de llenado del metal
my ($wmin, $wmax, $Nw); # frecuencias mínima, máxima y número
my ($e0, $e1); # Minimum and maximum epsilons to plot
my $options=q(
```

```

'wp=f'=>\$wp, # frecuencia de plasma medio a
'epsb=f'=>\$epsb, # función dieléctrica del medio b
'fa=f'=>\$fa, # fracción de llenado del metal
'wmin=f'=>\$wmin, 'wmax=f'=>\$wmax, 'Nw=i'=>\$Nw, # frecuencias mínima, máxima y
'e0=f'=>\$e0, 'e1=f'=>\$e1, # Minimum and maximum epsilons to plot
);
my %options=(eval $options);
die "Error en definición de opciones; $@" if $@;
GetOptions(%options) or usage($options, "Opciones erróneas");
usage($options, "Faltan parámetros")
    unless List::Util::all {defined $_} ($wp, $epsb, $fa, $wmin, $wmax, $Nw);
usage($options, "La fracción de llenado debe estar entre 0 y 1") unless 0<=$fa<=1;
my $fb=1-$fa; # fraccion de llenado del aislante.
my $w=zeros($Nw)->xlinvals($wmin,$wmax); # Arreglo de frecuencias
my $sepsa=1-$wp**2/$w**2; # Drude

```

Figura 2: inicializa

Necesitamos una rutina para explicar el uso si hubiera un error.

```

sub usage {
    my ($options, $message)=@_;
    say $message if defined $message;
    say $options;
    exit 1;
}

```

Figura 3: uso

Calcula la respuesta macroscópica,

```

# calcula la respuesta directamente
my $eM_par=$fa*$sepsa+$fb*$sepsb;
my $eM_perp=1/($fa/$sepsa+$fb/$sepsb);
# # verifica calculándola mediante las expresiones lorentzianas
# my $e_par_inf=$fa+$fb*$sepsb;
# my $e_perp_inf=$sepsb/($fa*$sepsb+$fb);
# my $wD2_par=$fa*$wp**2;
# my $wD2_perp=$fa*($sepsb*$wp/($fa*$sepsb+$fb))**2;
# my $wO2_perp=$fb/($fa*$sepsb+$fb)*$wp**2;
# my $eM_par1=$e_par_inf-$wD2_par/$w**2;
# my $eM_perp1=$e_perp_inf+$wD2_perp/($wO2_perp-$w**2);

```

Figura 4: calcula

Grafica los resultados

```
my $gw=gpwin();
my $S="{/Symbol %s}";
$gw->plot({title=>sprintf("Respuesta macroscópica ${S}_p=%s ${S}_b=%s f_a=%s f_b=%s",
    'w', $wp, 'e', $epsb, $fa, $fb),
    ylabel=>'{/Symbol e}^M', xlabel=>'Frecuencia {/Symbol w}',
    yrange=>[$e0,$e1], xzeroaxis=>1},
    {legend=>'par', with=>'lines',}, $w, $eM_par,
    {legend=>'perp', with=>'lines',}, $w, $eM_perp,
    # {legend=>'par alt', with=>'lines',}, $w, $eM_par1,
    # {legend=>'perp alt', with=>'lines',}, $w, $eM_perp1,
);
prompt -single, -void, "Listo?";
```

Figura 5: grafica

Finalmente, coloca todo junto.

```
#Calcula la respuesta macroscópica de una superred metal aislante.
<<paquetes>>
<<inicializa>>
<<calcula>>
<<grafica>>
<<uso>>
```

Figura 6: todo

### 2.3. Resultados

Corrimos el programa 6 como en la fig. 7, normalizando las frecuencias a la frecuencia de plasma indicando una función dieléctrica  $\epsilon_b = 2$ , y haciendo cálculos para 1000 frecuencias entre .1 y 3.5, empleando momentos angulares  $l = 0, 1, \dots 10$ .

```
./epsilonM.pl -wp=1 -epsb=2 -fa= .5 -wmin=.01 -wmax=2 -Nw=100\  
-e0=-40 -e1=40  
./epsilonM.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.25 -wmin=.01 -wmax=2 -Nw=100\  
-e0=-40 -e1=40  
./epsilonM.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.75 -wmin=.01 -wmax=2 -Nw=100\  
-e0=-40 -e1=40
```

Figura 7: Ejecución del programa 6.

En la fig. 8 mostramos las respuestas macroscópicas  $\epsilon_{\parallel}^M$  y  $\epsilon_{\perp}^M$  para una superred hecha de un metal de Drude con  $\omega_p = 1$  y un dieléctrico con  $\epsilon_b = 2$  con fracciones de llenado simétricas  $f_a = f_b = 0,5$ . Verificamos que la respuesta es metálica en la dirección paralela y dieléctrica en la dirección perpendicular. En esta última hay una resonancia que coincide con el cero de la respuesta paralela, y hay un cero en  $\omega_p$ .

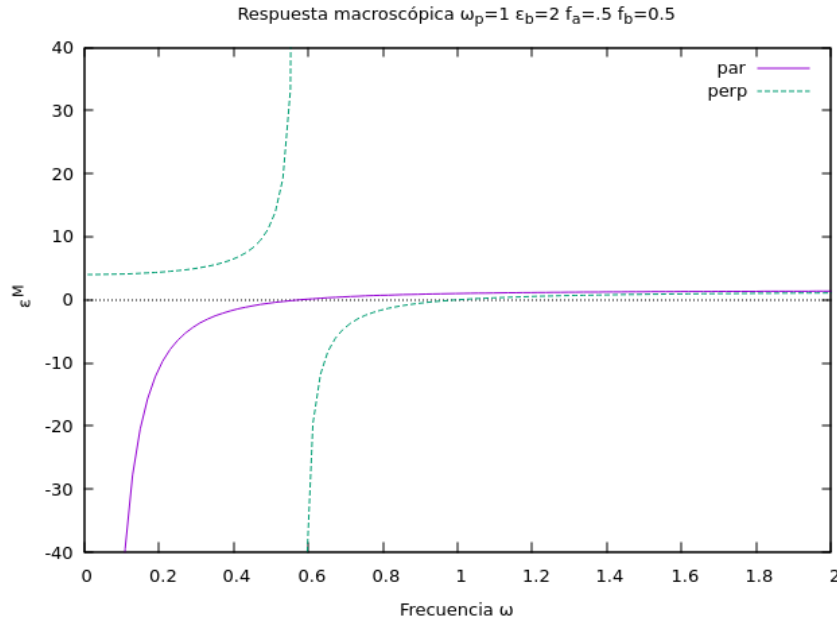


Figura 8:  $\epsilon_{\parallel}^M$  y  $\epsilon_{\perp}^M$  para una superred metal-aislante con  $\omega_p = 1$ ,  $\epsilon_b = 2$  y con fracciones de llenado  $f_a = f_b = 0,5$ .

La fig. 9 es análoga a la fig. 8 pero con una fracción de llenado menor para el metal y mayor para el dieléctrico,  $f_a = 0,25$  y  $f_b = 0,75$ . En este caso hay dos regiones,  $\omega < 0,38\omega_p$  y  $\omega > 0,79\omega_p$  en las que una o la otra respuesta es negativa, mientras que en la región  $0,38\omega_p < \omega < 0,79\omega_p$  ambas respuestas son positivas. La fig. 10 es análoga a las dos anteriores pero con una fracción de llenado mayor para el metal,  $f_a = 0,75$  y  $f_b = 0,25$ . En este caso, para  $\omega < 0,38\omega_p$  una de las respuestas es negativa y la otra positiva, y para  $\omega > \omega_p$  ambas son positivas, pero para  $0,38\omega_p < \omega < \omega_p$  ambas funciones dieléctricas son negativas.

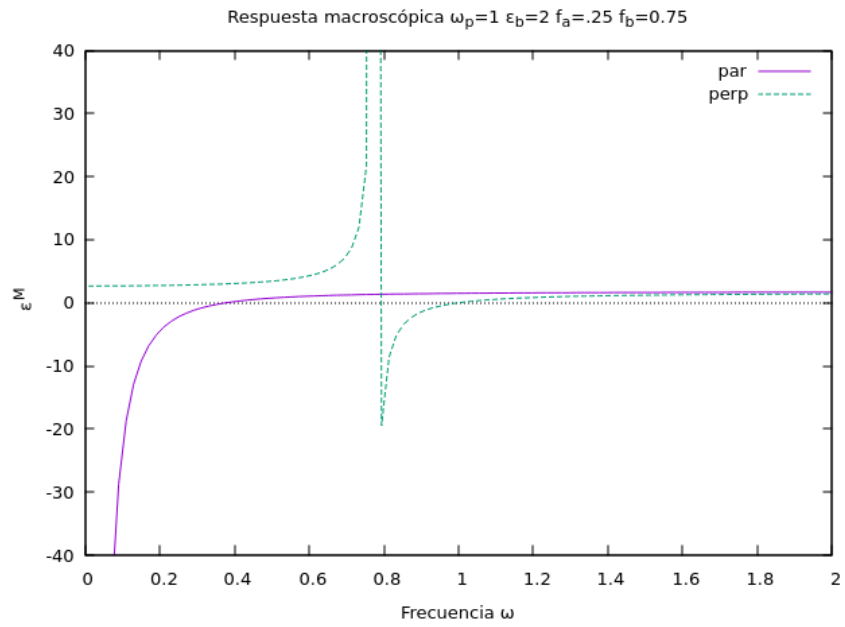


Figura 9:  $\epsilon_{\parallel}^M$  y  $\epsilon_{\perp}^M$  como en la fig. 8 pero  $f_a=0,25$  y  $f_b = 0,25$ .



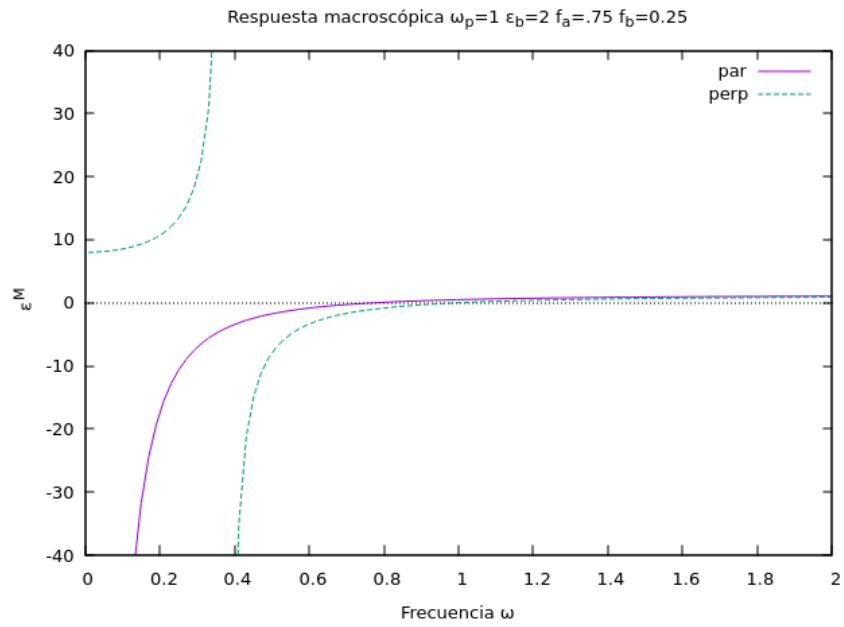


Figura 10:  $\epsilon_{\parallel}^M$  y  $\epsilon_{\perp}^M$  como en la fig. 8 pero  $f_a = 0,75$  y  $f_b = 0,25$ .

### 3. Modos propios

En la sección anterior vimos que una superred con un periodo muy pequeño puede describirse como un material homogéneo anisotrópico con una respuesta dieléctrica paralela  $\epsilon_{\parallel}^M$  y una respuesta perpendicular  $\epsilon_{\perp}^M$ , en general distintas.

#### 3.1. Bulto

Consideremos una onda con polarización TM que se propaga con frecuencia  $\omega$  y con vector de onda  $\mathbf{k}$ . La ecuación de onda para el campo eléctrico puede escribirse como

$$\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) = -q^2 \mathbf{D}, \quad (13)$$

donde abreviamos  $q = \omega/c$  y omitimos el índice  $M$  para denotar macroscópico por ya no ser necesario. Escribiendo  $D_{\parallel} = \epsilon_{\parallel} E_{\parallel}$  y  $D_{\perp} = \epsilon_{\perp} E_{\perp}$  y desarrollando el triple producto vectorial, podemos reescribir la ec. (13) como la ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} k_{\perp}^2 - \epsilon_{\parallel} q^2 & -k_{\perp} k_{\parallel} \\ -k_{\perp} k_{\parallel} & k_{\parallel}^2 - \epsilon_{\perp} q^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\parallel} \\ E_{\perp} \end{pmatrix} = 0, \quad (14)$$

Los modos propios de la superred están dados entonces por los ceros del determinante,

$$\det \begin{pmatrix} k_{\perp}^2 - \epsilon_{\parallel} q^2 & -k_{\perp} k_{\parallel} \\ -k_{\perp} k_{\parallel} & k_{\parallel}^2 - \epsilon_{\perp} q^2 \end{pmatrix} = 0, \quad (15)$$

lo cual se puede escribir como

$$\frac{k_{\perp}^2}{\epsilon_{\parallel}} + \frac{k_{\parallel}^2}{\epsilon_{\perp}} = q^2. \quad (16)$$

#### 3.2. Superficie

Consideremos una superred semiinfinita, cortada a lo largo de sus interfaces. Consideremos una onda que incide desde el vacío con un vector de onda  $\mathbf{k}^i$  y frecuencia  $\omega = qc$ , y llamemos  $Q$  a su proyección sobre la interface  $Q = k_{\parallel}^i$ , la cual, por conservación del ímpetu es igual a la proyección  $k_{\parallel}^t = Q$  del vector de onda  $\mathbf{k}^t$  de la onda transmitida. Las componentes perpendiculares están dadas entonces por

$$(k_{\perp}^i)^2 = q^2 - Q^2, \quad (k_{\perp}^t)^2 = \epsilon_{\parallel} q^2 - \epsilon_{\perp} \frac{Q^2}{\epsilon_{\perp}}. \quad (17)$$

A partir de la ecuación de Ampère-Maxwell podemos obtener la impedancia superficial para las ondas incidente y transmitida

$$Z^i = \frac{k_{\perp}^i c}{\omega}, \quad Z^t = \frac{k_{\perp}^t c}{\epsilon_{\parallel} \omega}. \quad (18)$$

De aquí podemos obtener la amplitud de reflexión  $r_p = (Z^i - Z^t)/(Z^i + Z^t)$  y los plasmones polaritones de superficie, dados intrínsecamente por  $Z^i + Z^t = 0$ . Sustituyendo la ec. (18) tenemos

$$k_{\perp}^t = -\epsilon_{\parallel} k_{\perp}^i. \quad (19)$$

Elevando al cuadrado ambos lados de esta ecuación, sustituyendo la ec. (17) y despejando  $Q^2$  obtenemos

$$Q^2 = \frac{(\epsilon_{\parallel} - 1)\epsilon_{\perp} \omega^2}{\epsilon_{\parallel}\epsilon_{\perp} - 1} \frac{1}{c^2}. \quad (20)$$

Podemos verificar que en el caso isotrópico  $\epsilon_{\parallel} = \epsilon_{\perp} = \epsilon$  esta ecuación se reduce al resultado usual  $Q^2 = (\epsilon/(\epsilon + 1))\omega^2/c^2$ .

Es importante notar que al elevar al cuadrado la ec. (19) aparecen en la misma soluciones de la ecuación  $k_{\perp}^t = \epsilon_{\parallel} k_{\perp}^i$  que no describen a un plasmón-polaritón de superficie, sino más bien, a la condición de Brewster de tener reflectancia cero.

Para el límite no retardado, cuando  $Q \rightarrow \infty$ , podemos obtener la frecuencia asintótica a partir del cero del denominador de la ec. (20),  $\epsilon_{\parallel}\epsilon_{\perp} = 1$ . Despejando  $\omega$  obtenemos

$$\omega_{\text{spp}}^2 = \frac{2\epsilon_b f_a - f_b + \epsilon_b^2 f_b - \sqrt{f_b^2 + \epsilon_b^4 f_b^2 + \epsilon_b^2(4f_a^2 - 2f_b^2)}}{(\epsilon_b^2 - 1)f_b} \frac{\omega_p^2}{2}. \quad (21)$$

### 3.3. Código. Modos de bulto.

A continuación elaboraremos un programa para graficar la relación de dispersión en el bulto de una superred metal-aislante.

Empezamos con encabezados y paquetes, para lo cual tomaremos prestado el de la fig. 1. Luego declaramos e inicializamos los parámetros.

```
my $wp; # frecuencia de plasma medio a
my $epsb; # función dieléctrica del medio b
my $fa; # fracción de llenado del metal
my ($wmin, $wmax, $Nw); # frecuencias mínima, máxima y número
```

```

my ($Qmin, $Qmax, $NQ); # vector de onda paralelo mínimo y máximo
my ($k0, $k1); # rango de k's para graficar
my $options=q(
  'wp=f'=>\$wp, # frecuencia de plasma medio a
  'epsb=f'=>\$epsb, # función dieléctrica del medio b
  'fa=f'=>\$fa, # fracción de llenado del metal
  'wmin=f'=>\$wmin, 'wmax=f'=>\$wmax, 'Nw=i'=>\$Nw, # frecuencias mínima, máxima y
  'Qmin=f'=>\$Qmin, 'Qmax=f'=>\$Qmax, 'NQ=f'=>\$NQ, # vector de onda paralelo mínimo
  'k0=f'=>\$k0, 'k1=f'=>\$k1, # rango de k's para graficar
);
my %options=(eval $options);
die "Error en definición de opciones; @$@" if @$@;
GetOptions(%options) or usage($options, "Opciones erróneas");
usage($options, "Faltan parámetros")
  unless List::Util::all {defined $_} ($wp, $epsb, $fa, $wmin, $wmax, $Nw, $Qmin,
usage($options, "La fracción de llenado debe estar entre 0 y 1") unless 0<=$fa<=1;
my $fb=1-$fa; # fraccion de llenado del aislante.
my $w=zeros($Nw)->xlivals($wmin,$wmax); # Arreglo de frecuencias
my $c=1;
my $q=$w/$c; # números de onda en el vacío. Supongo c=1
my $Q=$NQ>=2?zeros($NQ)->xlivals($Qmin, $Qmax)
  :pdl([$Qmin]); # Arreglo de vectores paralelos
my $sepsa=1-$wp**2/$w**2; # Drude

```

Figura 11: inicializa1

Calcula la respuesta macroscópica reciclando el código de la fig. 4, y la emplea para obtener la relación de dispersión del bulto usando las ec. (16).

```

my $k_perp=sqrt(($eM_par*($q**2-$Q->dummy(0)**2/$eM_perp))->r2C)->re;

```

Figura 12: reldisB

Grafica el resultado.

```

my $gw=gpwin();
my $S="{/Symbol %s}";
$gw->plot({title=>sprintf("Relación de dispersión normal ${S}_p=%s ${S}_b=%s f_a=%s f_b=%s",
  'w', $wp, 'e', $epsb, $fa, $fb, $Qmin, $Qmax),
  xlabel=>'Vector de onda k^M_{perp}', ylabel=>'Frecuencia {/Symbol w}',
  xrange=>[$k0,$k1],
  xzeroaxis=>1},

```

```

with=>'lines', $k_perp, $w,);
prompt -single, -void, "Listo?";

```

Figura 13: grafica1

Finalmente, coloca todo junto.

```

#Calcula la respuesta macroscópica de una superred metal aislante.
<<paquetes>>
<<inicializa1>>
<<calcula>>
<<reldisB>>
<<grafica1>>
<<uso>>

```

Figura 14: todo

### 3.4. Resultados: Relación de dispersión de bulto

Podemos correr el programa como en la fig. 15.

```

./reldisB.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.5 -wmin=.01 -wmax=3 -Nw=100 -Qmin 0 \
-Qmax=1 -NQ=10 -k1 4
./reldisB.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.25 -wmin=.01 -wmax=3 -Nw=100 -Qmin 0 \
-Qmax=1 -NQ=10 -k1 4
./reldisB.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.75 -wmin=.01 -wmax=3 -Nw=100 -Qmin 0 \
-Qmax=1 -NQ=10 -k1 4

```

Figura 15: corrida1

Para la superred simétrica el resultado se ve en la fig. 16 para distintos valores de  $Q$ . Para  $Q = 0$  hay propagación empezando en  $\omega_{L\parallel} \approx 0,58\omega_p$  y continúa ascendiendo como una hipérbola. Al aumentar  $Q$  aparece un cambio cualitativo. El modo tiene una asíntota  $Q \rightarrow \infty$  en  $\omega = \omega_p$  y tras una pequeña brecha prohibida reaparece como una nueva hipérbola con una frecuencia  $\omega > \omega_p$  para  $k_{\perp} = 0$ . Además aparece un nuevo modo de frecuencia baja con velocidad de grupo negativa. Para ilustrar este comportamiento, en la fig. 17 mostramos sólo una de las curvas de la fig. 16.

Podemos entender este resultado a partir de la fig. 8 y la relación de dispersión (16). Como en este caso una función dieléctrica es negativa y la otra positiva para  $\omega < \omega_p$ , por lo que la dispersión es hiperbólica, pero los papeles de  $\epsilon_{\parallel}$  y  $\epsilon_{\perp}$  se intercambian en la resonancia  $\omega_{0\perp}$ . Por ello hay dos

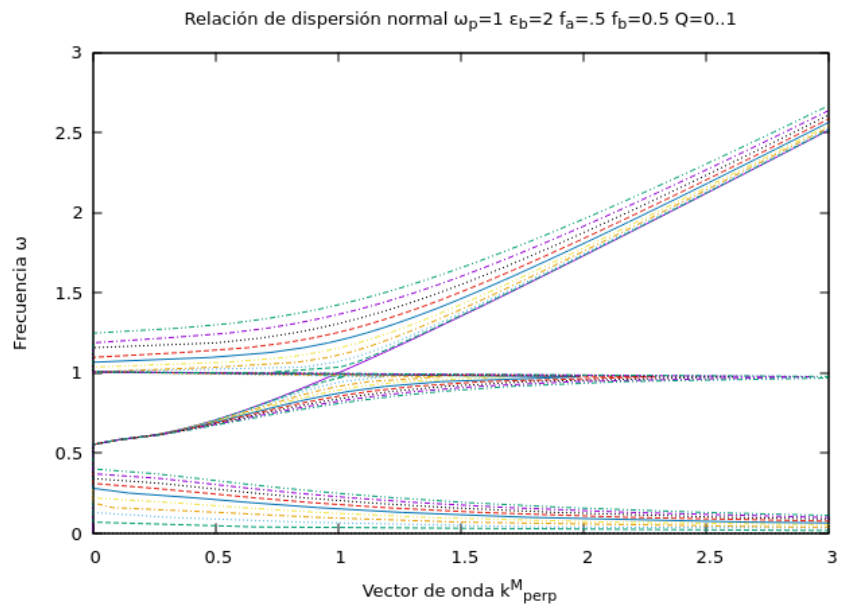


Figura 16: Relación de dispersión  $k_{\perp}$  vs.  $\omega$  para diversos valores del vector de onda paralelo  $Q = 0.,1$ .

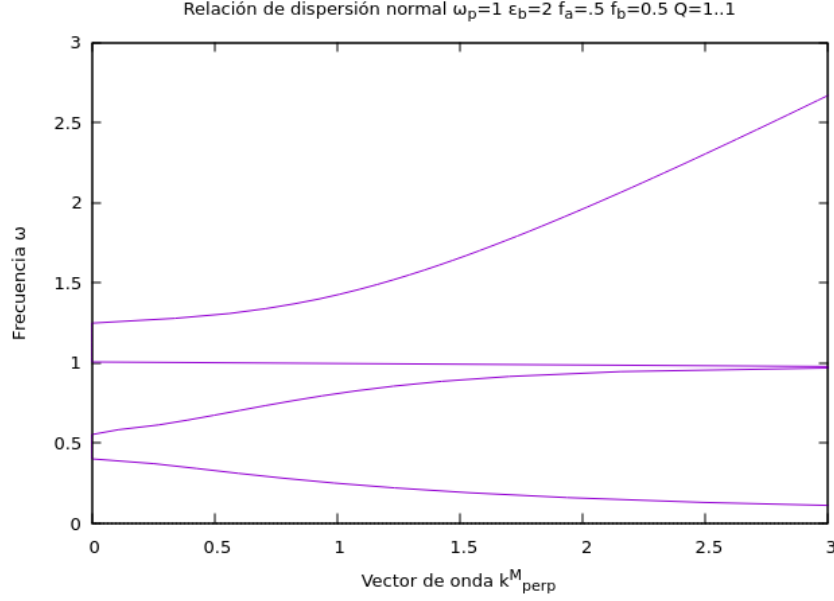


Figura 17: Relación de dispersión  $k_{\perp}$  vs.  $\omega$  para un solo valor de  $Q = 1$ .

soluciones abajo de  $\omega_p$ . Arriba de  $\omega_p$  ambas funciones respuesta son positivas y el material se comporta como un medio uniaxial transparente usual.

En la fig. 18 mostramos la relación de dispersión de los modos de bulto para el caso  $f_a = 0,25$ . El resultado es similar al de la fig. 16 aunque ahora  $\omega_{L\parallel}$  no coincide con  $\omega_{0\perp}$  y entre ambas aparece otra región en que ambas funciones respuesta son positivas. En este caso, la frecuencia de las tres ramas incrementan su frecuencia el límite  $k_{\perp} \rightarrow 0$  al incrementar  $Q$ , y la rama de enmedio no toma un valor fijo como la de la fig. 16. Sin embargo, en  $\omega_{0\perp}$  hay un polo de  $\epsilon_{\perp}^M$ , por lo que todas las curvas se degeneran en esta frecuencia. Arriba de  $\omega_{0\perp}$ ,  $\epsilon_{\perp}^M < 0 < \epsilon_{\parallel}^M$  y  $k_{\perp}$  diverge conforme nos acercamos a  $\omega_{L\perp} = \omega_p$ . Finalmente, arriba de esta frecuencia ambas funciones respuesta son positivas y la dispersión se vuelve similar a la de la figura 16. Notamos que la banda inferior para  $Q$ 's grandes se traslapa con la banda intermedia para  $Q$ 's pequeñas.

En la fig. 19 mostramos la relación de dispersión de los modos de bulto para el caso  $f_a = 0,75$ .

El resultado es de nuevo similar al de la fig. 16. Ahora  $\omega_{L\parallel} > \omega_{0\perp}$  y entre ambas hay una región donde ambas respuestas son negativas y no

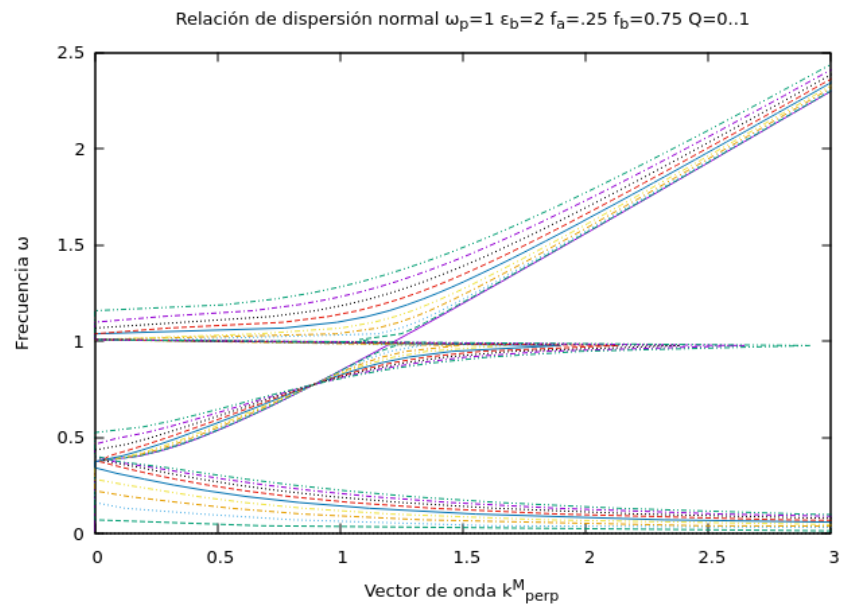


Figura 18: Relación de dispersión  $k_{\perp}$  vs.  $\omega$  como en la fig. 16 pero para una fracción de llenado  $f_a = 0,25$ .



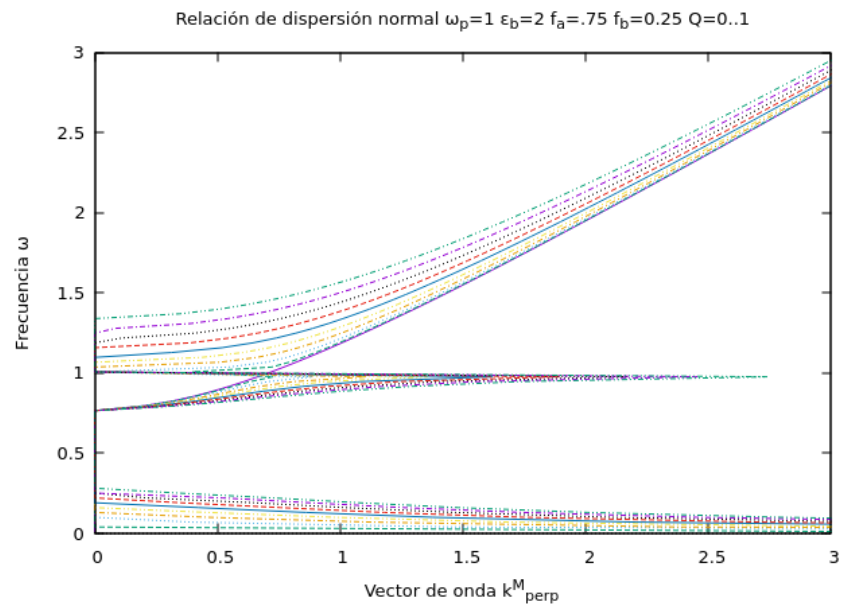


Figura 19: Relación de dispersión  $k_{\perp}$  vs.  $\omega$  como en la fig. 16 pero para una fracción de llenado  $f_a = 0,75$ .

puede haber propagación. Por ello, en este caso no se tocan y menos aún se traslapan las dos bandas inferiores. Como en la fig. 16, el límite de  $\omega$  cuando  $k_{\perp} \rightarrow 0$  en la banda de enmedio no depende de  $Q$ .

### 3.5. Código: Curvas de nivel

El comportamiento de las relaciones de dispersión mostrado en la sección anterior puede entenderse a partir del estudio de sus curvas de nivel, i.e., las líneas en el espacio  $k_{\parallel}, k_{\perp}$  en las que  $\omega$  es constante. Para graficarlas hacemos el siguiente código. Tomamos prestada el código la figura 1. Mostramos en la figura el código para declarar e inicializar variables es.

```

my $wp; # frecuencia de plasma medio a
my $epsb; # función dieléctrica del medio b
my $fa; # fracción de llenado del metal
my ($wmin, $wmax, $Nw); # frecuencias mínima, máxima y número
my ($kmax, $Nk); # vector de onda máximo, número de k's
my $options=q(
    'wp=f'=>\$wp, # frecuencia de plasma medio a
    'epsb=f'=>\$epsb, # función dieléctrica del medio b
    'fa=f'=>\$fa, # fracción de llenado del metal
    'wmin=f'=>\$wmin, 'wmax=f'=>\$wmax, 'Nw=i'=>\$Nw, # frecuencias mínima, máxima y
    'kmax=f'=>\$kmax, 'Nk=i'=>\$Nk, # vector de onda máximo, número de k's
);
my %options=(eval $options);
die "Error en definición de opciones; @$@" if @$@;
GetOptions(%options) or usage($options, "Opciones erróneas");
usage($options, "Faltan parámetros")
    unless List::Util::all {defined $_} ($wp, $epsb, $fa, $wmin, $wmax, $Nw, $kmax,
usage($options, "La fracción de llenado debe estar entre 0 y 1") unless 0<=$fa<=1;
my $fb=1-$fa; # fraccion de llenado del aislante.
my $w=$Nw>=2?zeroes($Nw)->xlinvals($wmin,$wmax) # Arreglo de frecuencias
    :pdl([$wmin]);
my $Q=zeroes($Nk)->xlinvals(-$kmax,$kmax); # Arreglo de Q's
my $c=1;
my $q=$w/$c; # números de onda en el vacío. Supongo c=1
my $epsa=1-$wp**2/$w**2; # Drude

```

Figura 20: inicializa3

Calcula la respuesta macroscópica reciclando el código de la fig. 4, y empléala para despejar  $k_{\perp}$  a partir de la relación de dispersión del bulto usando las ec. (17).

```
my $k_perp=sqrt($eM_par*($q**2-$Q->dummy(0)**2/$eM_perp))->mv(1,0); # [Q,w]
```

Figura 21: kperp

Grafica el resultado.

```
my $gw=gpwin();
my $k_perp_full=append(-$k_perp(-1:0),$k_perp);
my $Q_full=append($Q(-1:0),$Q);
my $S="{/Symbol %s}";
$gw->plot({title=>sprintf(
    "Curvas de nivel rel. de dispersión normal ${S}_p=%s ${S}_b=%s f_a=%s f_b=%s
. "${S}_{min}=%s ${S}_{max}=%s",
    'w', $wp, 'e', $epsb, $fa, $fb, 'w', $wmin, 'w', $wmax),
xlabel=>'Vector de onda k_{par}',
ylabel=>'Vector de onda k_{perp}',
xrange=>[-$kmax,$kmax],
yrange=>[-$kmax,$kmax],
justify=>1},
with=>'lines', $Q_full, $k_perp_full);
prompt -single, -void, "Listo?";
```

Figura 22: grafica3

Finalmente, coloca todo junto.

```
#Calcula la respuesta macroscópica de una superred metal aislante.
<<paquetes>>
<<inicializa3>>
<<calcula>>
<<kperp>>
<<grafica3>>
<<uso>>
```

Figura 23: todo3

### 3.6. Resultados: Cuvas de nivel

Corrimos el código como en la fig. 24

```

./nivel.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.5 -wmin=.1 -wmax=.55 -Nw=10 -kmax=4 -Nk=1000
./nivel.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.5 -wmin=.6 -wmax=.999 -Nw=11 -kmax=4 -Nk=1000
./nivel.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.5 -wmin=1.01 -wmax=3 -Nw=10 -kmax=4 -Nk=1000
./nivel.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.25 -wmin=.1 -wmax=.35 -Nw=10 -kmax=4 -Nk=1000
./nivel.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.25 -wmin=.4 -wmax=.76 -Nw=10 -kmax=4 -Nk=1000
./nivel.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.25 -wmin=.8 -wmax=.999 -Nw=10 -kmax=4 -Nk=1000
./nivel.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.25 -wmin=1.1 -wmax=3 -Nw=10 -kmax=4 -Nk=1000
./nivel.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.75 -wmin=.78 -wmax=.999 -Nw=10 -kmax=4 -Nk=1000
./nivel.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.75 -wmin=1.1 -wmax=3 -Nw=10 -kmax=4 -Nk=1000

```

Figura 24: corrida3

En la figura 25 mostramos algunas curvas de nivel  $\mathbf{k}(\omega)$  correspondientes a frecuencias bajas  $\omega < \omega_{L\parallel} = \omega_{0\perp}$ . Notamos que las curvas son hipérbolas que se abren a derecha e izquierda. Esto se debe a que en esta región

Curvas de nivel rel. de dispersión normal  $\omega_p=1$   $\epsilon_b=2$   $f_a=.5$   $f_b=0.5$   $\omega_{\min}=.1$   $\omega_{\max}=.55$

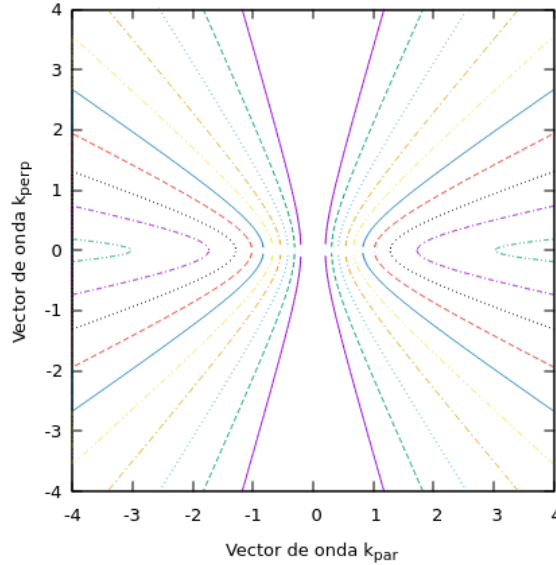


Figura 25: Curvas de nivel  $\mathbf{k}(\omega)$  para algunas frecuencias bajas  $\omega < \omega_{L\parallel} = \omega_{0\perp}$  para el mismo sistema que en la figura 8,  $\omega_p = 1$ ,  $\epsilon_b = 2$ ,  $f_a = f_b = 0,5$ .

$\epsilon_{\parallel} < 0$  mientras que  $\epsilon_{\perp} > 0$ . Conforme la frecuencia disminuye, las curvas tienen asíntotas más verticales, y por tanto  $k_{\perp}$  toma valores mayores, como muestra la parte inferior de la figura 16.

Las hipérbolas se convierten en líneas horizontales conforme nos acercamos a  $\omega_{L\parallel} = \omega_{0\perp} \approx 0,578$ , donde ambas funciones cambian de signo y las curvas de nivel cambian a hipérbolas que abren hacia arriba y abajo, como ilustra la figura 26. Las de frecuencia más baja son horizontales, y por eso la frecuencia correspondiente a  $k_{\perp} \approx 0$  no depende del valor de  $|k_{\parallel}|$ , como muestra la parte intermedia de la fig. 16. Conforme aumenta la frecuencia

Curvas de nivel rel. de dispersión normal  $\omega_p=1 \ \epsilon_b=2 \ f_a=.5 \ f_b=0.5 \ \omega_{\min}=.6 \ \omega_{\max}=.999$

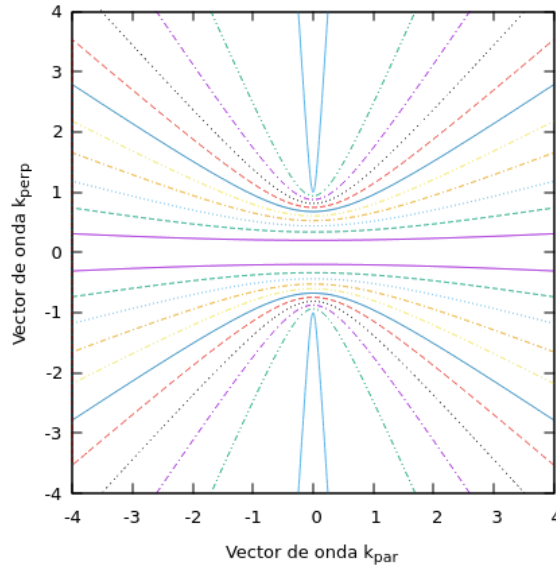


Figura 26: Curvas de nivel como en la figura 25 pero para frecuencias  $\omega_{L\parallel} = \omega_{0\perp} < \omega < \omega_p = \omega_{L\perp}$ .

la relación de dispersión converge a dos líneas verticales en  $\omega = \omega_p$ , por lo que  $k_{\perp}$  diverge. Pasando dicha frecuencia,  $\epsilon_{\perp}$  se vuelve positiva y las curvas de nivel se convierten en elipses, como muestra la fig. 27, correspondiente la parte alta de la figura 16. La figura 28 es análoga a la fig. 25 pero para una fracción de llenado metálica menor,  $f_a = 0,25$ . Esta figura es cualitativamente similar a la fig. 25, con hipérbolas que abren a derecha e izquierda que se degeneran en una línea recta vertical a bajas frecuencias y en dos líneas rectas horizontales alrededor de  $\omega_{L\parallel}$ . Estas curvas corresponden a la parte baja de la figura 18. Para frecuencias arriba de  $\omega_{L\parallel}$  ambas respuestas se vuelven positivas y las curvas de nivel se convierten en elipses, como en la fig. 29, correspondiente a la parte intermedia de la fig. 18. Conforme nos

Curvas de nivel rel. de dispersión normal  $\omega_p=1$   $\epsilon_b=2$   $f_a=.5$   $f_b=0.5$   $\omega_{\min}=1.01$   $\omega_{\max}=3$

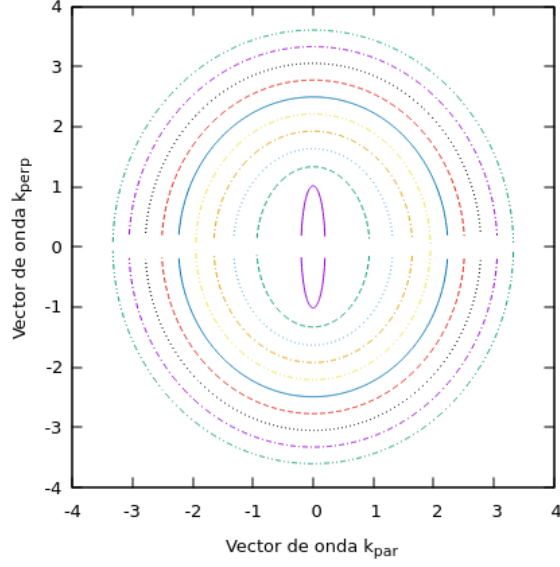


Figura 27: Curvas de nivel como en la figura 25 pero frecuencias  $\omega > \omega_p$ .

acercamos al polo  $\omega_{0\perp}$  de  $\epsilon_{\perp}^M$  estas elipses degeneran en dos líneas horizontales, que corresponden al punto donde se cruzan todas las curvas en la fig. 18. En la región  $\omega_{0\perp} < \omega < \omega_p = \omega_{L\perp}$ ,  $\epsilon_{\perp} < 0 < \epsilon_{\parallel}^M$ , las curvas de nivel son hipérbolas como en la figura 26 y la relación de dispersión en la fig. 18 es similar a la región intermedia de la figura 16.

Curvas de nivel rel. de dispersión normal  $\omega_p=1$   $\epsilon_b=2$   $f_a=.25$   $f_b=0.75\omega_{\min}=.1$   $\omega_{\max}=.35$

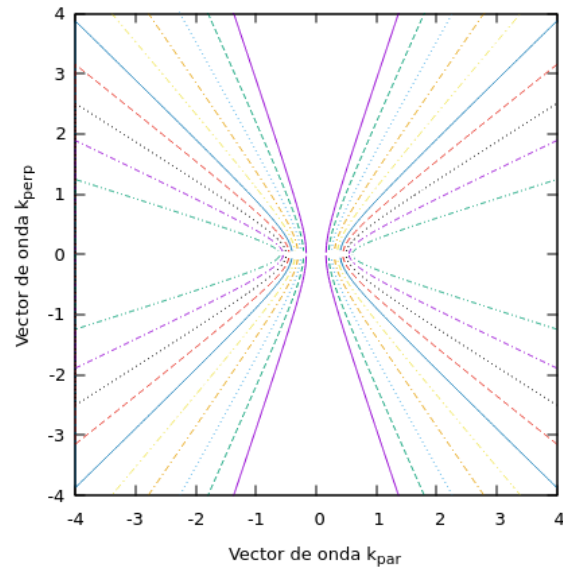


Figura 28: Curvas de nivel, como en la fig. 25, pero para una fracción de llenado  $f_a = 0,25$  y para frecuencias  $\omega < \omega_{L\parallel}$ .

Curvas de nivel rel. de dispersión normal  $\omega_p=1$   $\epsilon_0=2$   $f_a=.25$   $f_b=0.75$   $\omega_{\min}=.4$   $\omega_{\max}=.76$

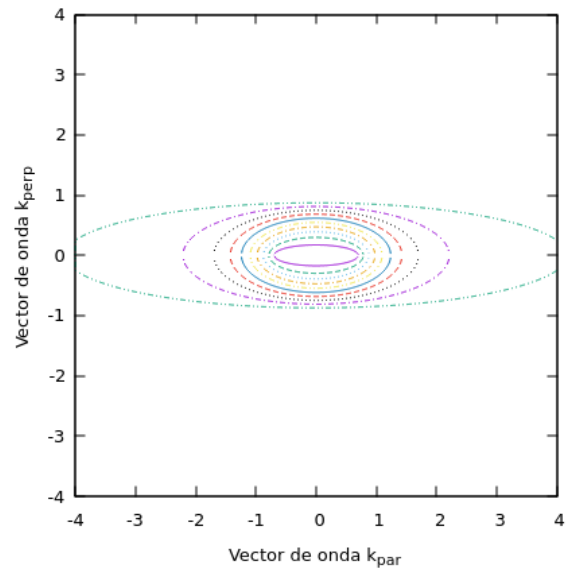
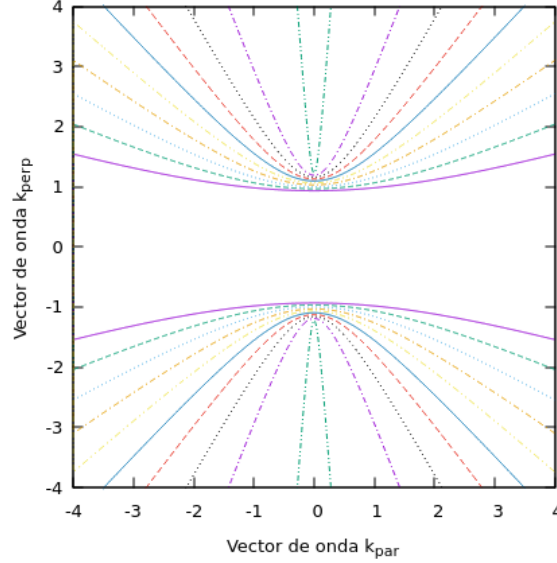


Figura 29: Curvas de nivel como en la fig. 28 pero a frecuencias  $\omega_{L\parallel} < \omega < \omega_{0\perp}$ .



Curvas de nivel rel. de dispersión normal  $\omega_p=1$   $\epsilon_b=2$   $f_a=.25$   $f_b=0.75$   $\omega_{\min}=.8$   $\omega_{\max}=.999$



Finalmente, para  $\omega > \omega_p = \omega_{L\perp}$  ambas respuestas son positivas, las curvas de nivel son elipses, como muestra la fig. 30 y la relación de dispersión en la parte superior de la fig. 18 es cualitativamente similar a la correspondiente de la fig. 16.

Por último, en las figuras 31, 32, y 33 mostramos las curvas de nivel para una fracción de llenado metálica relativamente alta  $f_a = 0,75$ . Estas curvas corresponden a las regiones  $\omega < \omega_{0\perp}$ ,  $\omega_{L\parallel} < \omega < \omega_{L\perp} = \omega_p$  y  $\omega_{L\perp} = \omega_p < \omega$  y las curvas de nivel son similares a las de las figuras 25, 26 y 27. Sin embargo, en la región  $\omega_{0\perp} < \omega < \omega_{L\parallel}$  ambas funciones dieléctricas son negativas y aparece una brecha prohibida, como podemos apreciar en la fig. 19, y que no aparece en los casos anteriores.

### 3.7. Código: Modos de superficie

A continuación elaboraremos un programa para graficar la relación de dispersión de los plasmones polaritones de superficie de una superred metal-aislante.

De nuevo, tomamos los encabezados y paquetes prestados de la fig. 1. Luego declaramos e inicializamos los parámetros.

```
my $wp; # frecuencia de plasma medio a
my $epsb; # función dieléctrica del medio b
```

Curvas de nivel rel. de dispersión normal  $\omega_p=1$   $\epsilon_b=2$   $f_a=.25$   $f_b=0.75$   $\omega_{\min}=1.1$   $\omega_{\max}=3$

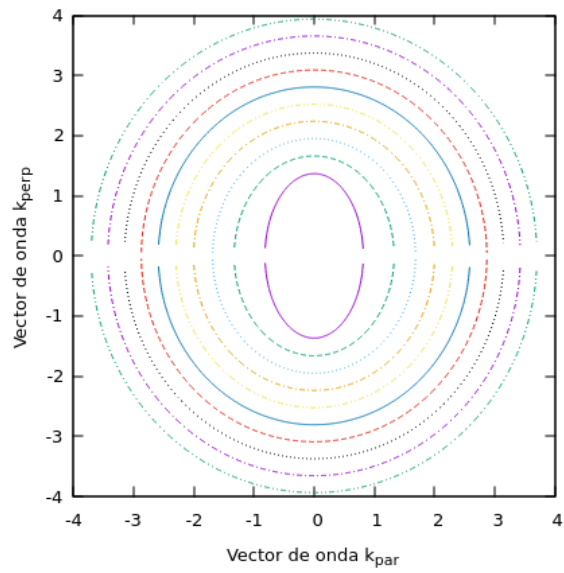


Figura 30: Curvas de nivel como en la fig. 28 pero a frecuencias  $\omega_p = \omega_{L\perp} < \omega$ .

Curvas de nivel rel. de dispersión normal  $\omega_p=1$   $\epsilon_b=2$   $f_a=.75$   $f_b=0.25$   $\omega_{\min}=.1$   $\omega_{\max}=.35$

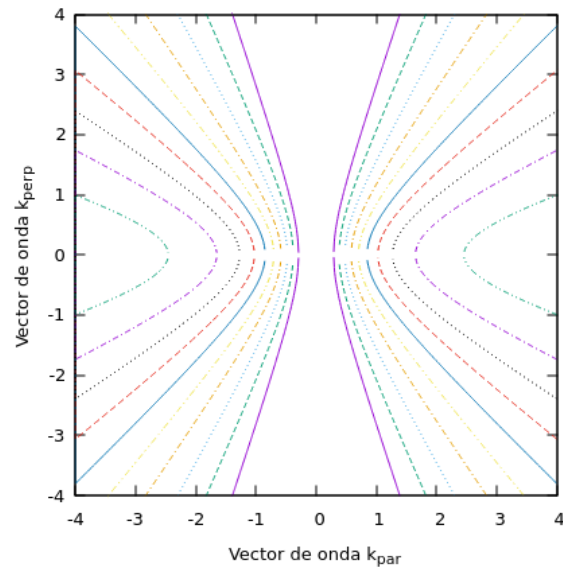


Figura 31: Curvas de nivel, como en la fig. 25, pero para una fracción de llenado  $f_a = 0,75$  y para frecuencias  $\omega < \omega_{0\perp}$ .

Curvas de nivel rel. de dispersión normal  $\omega_p=1$   $\epsilon_b=2$   $f_a=.75$   $f_b=0.25$   $\omega_{\min}=.78$   $\omega_{\max}=.999$

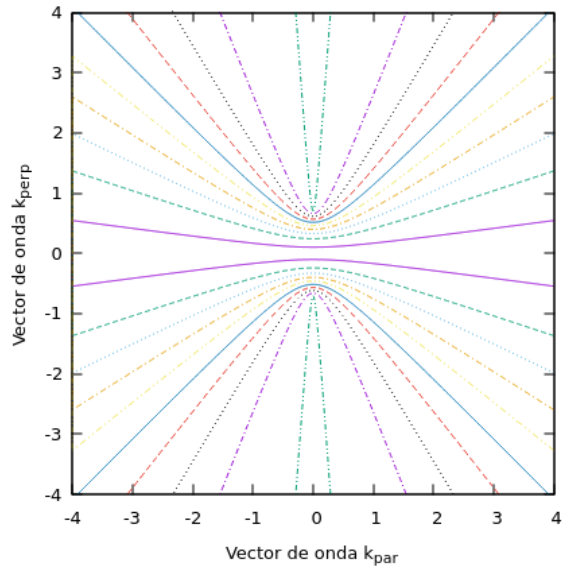


Figura 32: Curvas de nivel como en la fig. 31 pero a frecuencias  $\omega_{L\parallel} < \omega < \omega_{L\perp} = \omega_p$ .

Curvas de nivel rel. de dispersión normal  $\omega_p=1$   $\epsilon_b=2$   $f_a=.75$   $f_b=0.25$   $\omega_{\min}=1.1$   $\omega_{\max}=3$

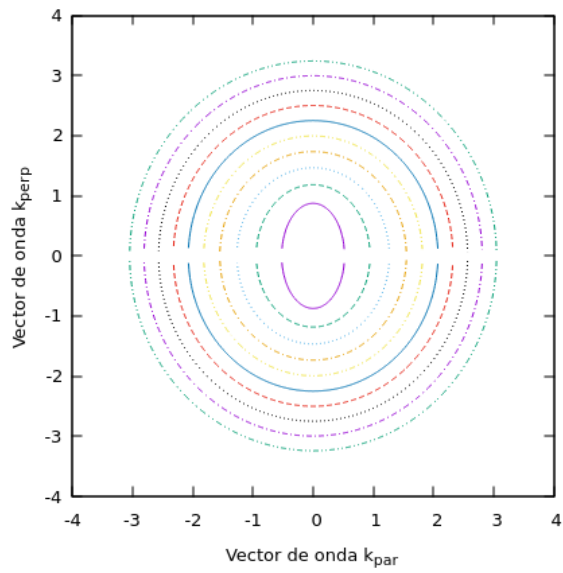


Figura 33: Curvas de nivel como en la fig. 31 pero a frecuencias  $\omega_p = \omega_{L\perp} < \omega$ .

```

my $fa; # fracción de llenado del metal
my ($wmin, $wmax, $Nw); # frecuencias mínima, máxima y número
my $Q1; #máximo vector de onda
my $options=q(
    'wp=f'=>\$wp, # frecuencia de plasma medio a
    'epsb=f'=>\$epsb, # función dieléctrica del medio b
    'fa=f'=>\$fa, # fracción de llenado del metal
    'wmin=f'=>\$wmin, 'wmax=f'=>\$wmax, 'Nw=i'=>\$Nw, # frecuencias mínima, máxima y
    'Q1=f'=>\$Q1, # máximo vector de onda
);
my %options=(eval $options);
die "Error en definición de opciones; $@" if $@;
GetOptions(%options) or usage($options, "Opciones erróneas");
usage($options, "Faltan parámetros")
    unless List::Util::all {defined $_} ($wp, $epsb, $fa, $wmin, $wmax, $Nw);
usage($options, "La fracción de llenado debe estar entre 0 y 1") unless 0<=$fa<=1;
my $fb=1-$fa; # fraccion de llenado del aislante.
my $w=zeros($Nw)->xlinvals($wmin,$wmax); # Arreglo de frecuencias
my $c=1;
my $q=$w/$c; # números de onda en el vacío. Supongo c=1
my $epsa=1-$wp**2/$w**2; # Drude

```

Figura 34: inicializa2

Calcula la respuesta macroscópica reciclando el código de la fig. 4, y empléala para obtener la relación de dispersión de superficie usando las ec. (20).

```

my $Q=sqrt(($eM_par-1)*$eM_perp/($eM_par*$eM_perp-1))*$q;

```

Figura 35: relspp

Grafica el resultado.

```

my $gw=gpwin();
my $S="{/Symbol %s}";
$gw->plot({title=>sprintf("Relación de dispersión SPP ${S}_p=%s ${S}_b=%s f_a=%s f_b=%s",
    'w', $wp, 'e', $epsb, $fa, $fb),
    xlabel=>'Vector de onda Q', ylabel=>'Frecuencia {/Symbol w}',
    xrange=>[undef,$Q1],
    },
    with=>'lines', $Q, $w,);
prompt -single, -void, "Listo?";

```

Figura 36: graficas

Finalmente, coloca todo junto.

```
#Calcula la respuesta macroscópica de una superred metal aislante.
<<paquetes>>
<<inicializa2>>
<<calcula>>
<<relspp>>
<<grafica2>>
<<uso>>
```

Figura 37: todo

### 3.8. Resultados: Modos de superficie

Podemos correr el programa como en la fig. 15.

```
./relspp.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.5 -wmin=.01 -wmax=1 -Nw 1000 -Q1 3
./relspp.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.25 -wmin=.01 -wmax=1 -Nw 1000 -Q1 3
./relspp.pl -wp=1 -epsb=2 -fa=.75 -wmin=.01 -wmax=1 -Nw 1000 -Q1 3
```

Figura 38: corrida1

La fig. 39 muestra los resultados para el sistema correspondiente a la fig. 8, con  $\omega_p = 1$ ,  $\epsilon_b = 2$  y  $f_a = f_b = 0,5$ . Los resultados se ven similares a la relación del plasmón de superficie en un metal homogéneo, excepto que el valor asintótico de la frecuencia en el límite no retardado es menor, correspondiente a un metal menos denso.

La fig. 40 muestra los mismos resultados pero para una menor fracción de llenado  $f_a = 0,25$ . La rama inferior muestra una frecuencia asintótica todavía menor. Curiosamente, aparece una nueva rama con un comportamiento peculiar. Sin embargo, ésta se encuentra a la izquierda de la línea de luz y por tanto no corresponde a modos de superficie, sino, como se discutió después de la ec. (20), a la condición de Brewster.

Finalmente, en la fig. 41 se muestran los resultados correspondientes a una fracción de llenado mayor  $f_a = 0,75$ . De nueva cuenta, se obtiene una relación de dispersión similar a la del metal homogéneo, pero con otra frecuencia asintótica.

De acuerdo a la ec. (21) los valores asintóticos del plasmón de superficie son  $\omega_{spp} = 0,577\omega_p$ ,  $0,418\omega_p$ , y  $0,662\omega_p$  para  $f_a = 0,5$ ,  $0,25$  y  $0,75$  respectivamente, en buen acuerdo con las figuras 39, 40 41.

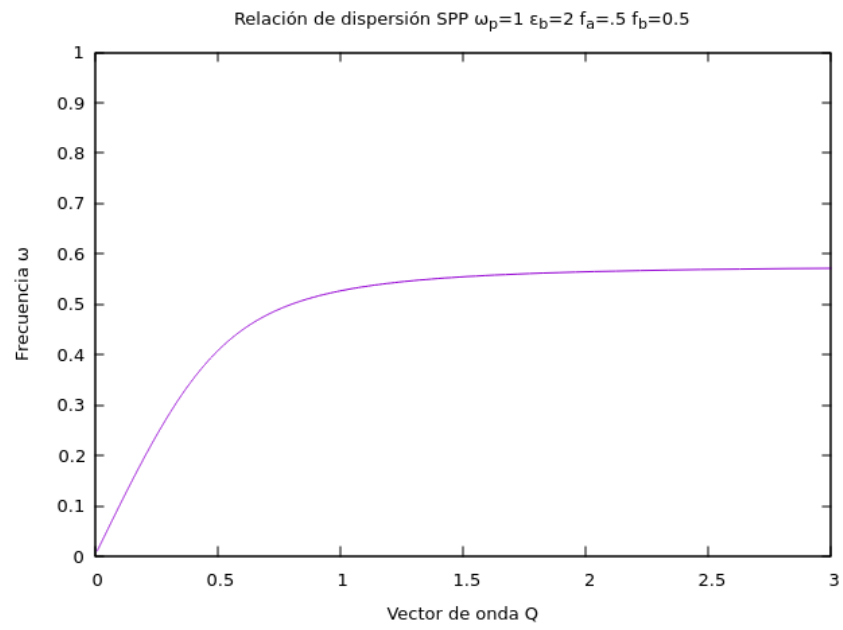


Figura 39: Relación de dispersión del plasmón de superficie para el mismo sistema que en la fig. 8.



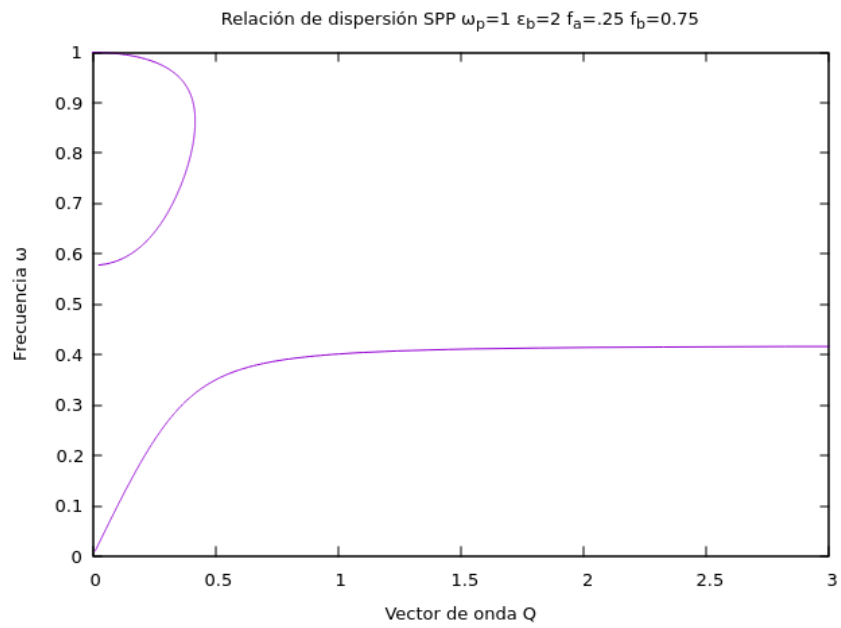


Figura 40: Relación de dispersión del plasmón de superficie como en la fig. 39, pero para  $f_a = 0,25$ .

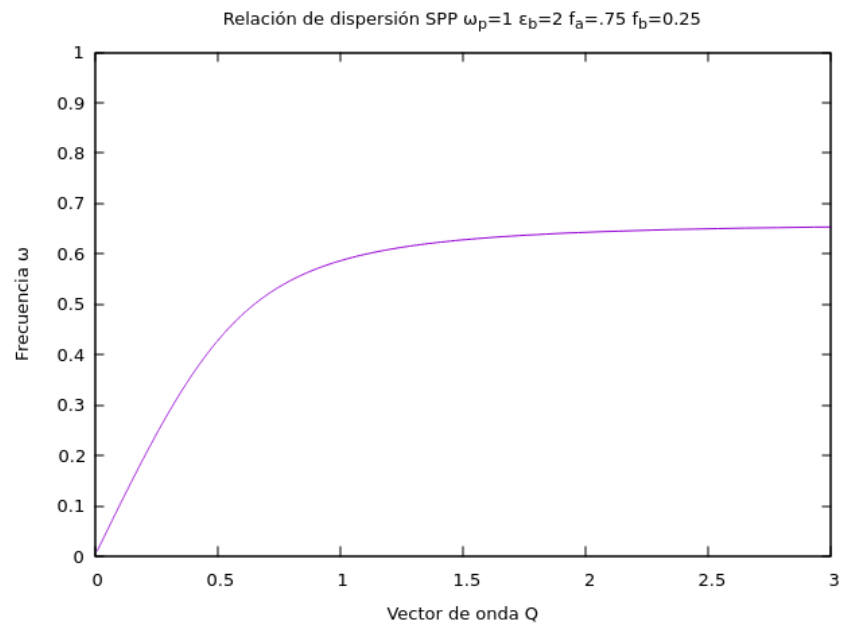


Figura 41: Relación de dispersión del plasmón de superficie como en la fig. 39, pero para  $f_a = 0,75$ .

## 4. Conclusiones

Obtuvimos la relación de dispersión de bulto y de superficie para los modos electromagnéticos de una superred metal-dieléctrico en el límite de películas muy delgadas. El sistema es equivalente a un medio homogéneo anisotrópico. Obtuvimos la respuesta macroscópica, que tiene carácter metálico a lo largo de las interfaces y dieléctrico con una resonancia en la dirección perpendicular. Obtuvimos las frecuencias características que describen dichas respuestas. La relación de dispersión del bulto tiene varias ramas, correspondientes a las distintas combinaciones de signo entre las componentes principales de la respuesta dieléctrica. Sin embargo, los plasmones polaritones de superficie tienen una rama que cualitativamente se ve similar a la de un metal homogéneo con una densidad electrónica efectiva menor que la de la fase metálica. Esto sugiere que se pueden entonar los plasmones-polaritones de superficie variando la fracción de llenado de las componentes de una superred, modulando así su velocidad de fase y grupo.