



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas

Estudio de propiedades ópticas en estructuras periódicas
construidas a base de grafeno

Tesis presentada al

**Posgrado en Ciencias
(Física Aplicada)**

como requisito parcial para la obtención del grado de

**Doctor en Ciencias
(Física Aplicada)**

por

José Alejandro Hernández López

asesorado por

Dra. Martha A. Palomino Ovando

Dr. Felipe Ramos Mendieta

Puebla Pue.
Agosto 2016



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas

Estudio de propiedades ópticas en estructuras periódicas
construidas a base de grafeno

Tesis presentada al

**Posgrado en Ciencias
(Física Aplicada)**

como requisito parcial para la obtención del grado de

**Doctor en Ciencias
(Física Aplicada)**

por

José Alejandro Hernández López

asesorado por

Dra. Martha A. Palomino Ovando

Dr. Felipe Ramos Mendieta

Puebla Pue.
Agosto 2016

Título: Estudio de propiedades ópticas en estructuras periódicas
construidas a base de grafeno

Estudiante: JOSÉ ALEJANDRO HERNÁNDEZ LÓPEZ

COMITÉ

Dr. Rosendo Lozada Morales
Presidente

Dr. Benito Flores Desirena
Secretario

Dr. Severino Muñoz Aguirre
Vocal

Dr. Raúl Esquivel Sirvent
Vocal Externo

Dr. Gregorio Hernández Cocolletzi
Vocal Externo

Dr. Carlos Ignacio Robledo Sánchez
Suplente

Índice general

Introducción	XI
1. Consideraciones generales sobre el grafeno	1
1.1. El grafeno	1
2. La fórmula de Kubo y el transporte electrónico	7
2.1. El formalismo de Kubo	7
2.2. Conductividad superficial de carga en el grafeno	9
3. Método de la matriz de transferencia	13
3.1. Grafeno como recubrimiento (espesor nulo)	13
3.2. Grafeno en la proximación de espesor efectivo	20
4. Propiedades ópticas en estructuras periódicas construidas a base de grafeno	23
4.1. Incidencia normal	23
4.2. Incidencia oblicua	25
4.2.1. Modos de superficie (Plasmones) TM	26
4.2.2. Modos de superficie (Plasmones) TE	32
4.2.3. Bicapa de grafeno	36
4.3. Estructuras de bandas	41
4.3.1. Bandas K	43
4.3.2. Bandas proyectadas	47
4.4. Campos internos	57
4.4.1. Cristal fotónico construido a base de grafeno sin defecto	59
5. Conclusiones	63

Índice de figuras

1.1. Relación entre una lámina de grafeno y la estructura del grafito. El espesor del grafeno (0.345 nm) es del orden de un átomo de carbono.	1
1.2. Comparación de la densidad de estados para los metales, los semiconductores y el grafeno. Se puede observar en el grafeno un comportamiento de semiconductor pero, al igual que los metales, posee una banda prohibida nula.	2
1.3. Representación gráfica del cono de Dirac para la estructura electrónica de bandas del grafeno.	3
1.4. Dispersión lineal de la estructura electrónica de bandas para el grafeno a bajas energías. Como consecuencia, los portadores de carga que se desplazan sobre el grafeno son prácticamente fermiones de masa nula	3
1.5. El grafeno es el material más resistente conocido hasta la fecha superando a varios materiales entre ellos al diamante.	4
1.6. El grafeno permite la propagación de modos de superficie tanto para la polarización TM como para la polarización TE. Ésto último es totalmente nuevo respecto a los metales nobles.	5
2.1. Gráfica de la parte real e imaginaria de la conductividad total ($\sigma_{intra} + \sigma_{inter}$), en el límite $\mu_c \gg k_B T$, en función de la frecuencia en THz , en unidades de $\sigma' = e^2/4\hbar$, para tres valores particulares del potencial químico, μ_c . La gráfica de la parte imaginaria propicia información referente al rango de frecuencia en donde se encuentran los plamones TM y los modos TE	10
3.1. Figura de los distintos tipos de cristales fotónico según la dirección de periodicidad.	14
3.2. Cristal fotónico unidimensional con recubrimiento de grafeno. La onda incidente posee polarización TM.	15
3.3. Monocapa de grafeno entre dos medios dieléctricos.	16
3.4. Bicapa de grafeno.	17
3.5. Cristal fotónico unidimensional con grafeno considerando a éste último en la proximación de espesor efectivo.	20
4.1. Espectro de reflexión y transmisión a incidencia normal para una capa de grafeno suspendida en aire con absorción y sin ésta, para $T = 300\text{ K}$, $\mu_c = 1\text{ eV}$	24

4.2. Espectro de transmisión a incidencia normal para una bicapa de grafeno, para $T = 300 K$, $\mu_c = 1 eV$ y $\tau = 0.5 ps$	25
4.3. Espectro de transmisión a incidencia normal para cuatro y ocho capas de grafeno, para $T = 300 K$, $\mu_c = 1 eV$ y $\tau = 0.5 ps$	26
4.4. Configuración empleada en el estudio de la excitación de los modos superficiales en el grafeno. Nótese que la configuración de Otto se obtiene haciendo $l = 0$ y para la excitación de plasmones en ambas polarizaciones se toma $n_t = 1$	27
4.5. Relación de dispersión de una monocapa de grafeno inmersa en aire para distintos valores del potencial químico. Se puede observar que conforme varía el potencial químico, se incrementa la región de existencia de los plasmones TM. El tiempo de relajación para los tres casos es $\tau = 1ps$	29
4.6. Gráfica de la reflectividad para distintos valores del tiempo de relajación τ . Como era de esperarse, conforme el tiempo de relajación aumenta, el ancho del mínimo se hace más angosto sin embargo la posición de éste permanece fijo lo cual es otro indicio de la naturaleza plasmónica del mínimo.	30
4.7. Gráfica de la reflectividad para distintos valores del ancho de la capa de aire. El primer mínimo de reflexión ($d = 15 \mu m$) es totalmente de naturaleza plasmónica. Los otros dos mínimos están relacionados con efectos de interferencia así como a efectos de absorción del grafeno	31
4.8. Relación de dispersión de una monocapa de grafeno inmersa en aire para distintos valores del potencial químico. Se puede observar que la relación de dispersión prácticamente coincide con la línea de luz del aire lo cual refleja que los "plasmones" TE están muy suprimidos. El tiempo de relajación para los tres casos es $\tau = 1ps$	33
4.9. Gráfica de la reflectividad para distintos valores del tiempo de relajación τ . Como era de esperarse, conforme el tiempo de relajación aumenta, el ancho del mínimo se hace más angosto sin embargo la posición de éste permanece fijo lo cual es otro indicio de la naturaleza plasmónica del mínimo. Por otro lado, nótese que el valor del ángulo del mínimo refleja lo predicho por la relación de dispersión, posee un orden de magnitud de la cienmilésima parte lo cual muestra lo suprimido que pueden estar los "plasmones" TE respecto a los plasmones TM.	34
4.10. Gráfica de la reflectividad para distintos valores del ancho de la capa de aire.	35
4.11. Gráfica de la reflectividad del sistema aire-grafeno1-dieléctrico-grafeno2 en la configura de Otto en función del ángulo para la polarización TM. Se observa un efecto de absorción perfecta bien definido con una posible contribución de naturaleza plasmónica para $\theta_i = 22.74$. Los parametros estructurales son $d_1 = 10 \mu m$, $d_2 = 0.5 \mu m$, $\tau = 1 ps$ y $f = 5 THz$	37
4.12. Gráfica de la reflectividad del sistema aire-grafeno1-dieléctrico-grafeno2 en la configura de Otto en función de la frecuencia. Se observa una frecuencia óptima de $5 THz$	38

4.13. Gráfica de la reflectividad del sistema aire-grafeno1-dieléctrico-grafeno2 en la configura de Otto en función de las distancias de separación d_1 y d_2 . Se observa dos distancias óptimas $d_1 = 10 \mu m$ y $d_2 = 0.5 \mu m$ 39

4.14. Gráfica de la reflectividad del sistema aire-grafeno1-dieléctrico-grafeno2 en la configura de Otto en función del ángulo para dos valores comunes del potencial químico en las capas de grafeno. 39

4.15. Gráfica de la reflectividad del sistema aire-grafeno1-dieléctrico-grafeno2 en la configura de Otto en función del ángulo para tres valores comunes del potencial químico en las capas de grafeno. Se puede observar una transferencia total de la energía a través del dieléctrico para $\mu = 0.4 \text{ eV}$. 40

4.16. Cristal fotónico unidimensional con grafeno considerando a éste último en la aproximación de espesor efectivo. El sistema está orientado de tal suerte que la dirección de crecimiento del cristal fotónico inicia en $z = 0$. 41

4.17. (Varias). Gráficas de la banda K y los espectros de reflexión y transmisión. Los parámetros estructurales son $\mu = 0.8 \text{ eV}$ y 10 ps, 1 ps, 0.1 ps, respectivamente. Se puede observar que los gaps fotónicos dependen estrictamente de la distancia de separación d . De igual forma, la presencia de absorción modifica las soluciones reales y complejas del vector de Bloch. 45

4.18. (Varias). Gráficas de la banda K y los espectros de reflexión y transmisión. Los parámetros estructurales son $\mu = 0.2 \text{ eV}$ y 10 ps, 1 ps, 0.1 ps, respectivamente. Se puede observar que la parte imaginaria del vector de Bloch es exageradamente pequeña respecto a la parte real de tal manera que para la región de frecuencias mostrada prácticamente existen sólo bandas permitidas 47

4.19. Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ considerando poca absorción en el grafeno (banda proyectada sin pérdidas). Los parámetros estructurales son: $d = 18 \mu m$, $\tau = 100 \text{ ps}$, $\mu = 0.2 \text{ eV}$. La línea roja representa la línea de luz del vacío, la línea negra representa la relación de dispersión asociada a la celda unitaria, la línea verde (azul) representa la parte imaginaria (real) del vector de Bloch. Como es de esperarse las bandas permitidas y prohibidas se separan claramente como consecuencia de la baja absorción, sin embargo la forma de la banda TM implica la existencia de modos oscilatorios propagándose pero de manera evanescente (modos de superficie), la parte gris después de la línea roja representa justamente los modos de superficie asociados al sistema que como se puede observar sólo existen para bajas frecuencias, siendo esto consistente con las propiedades de la parte imaginaria de la conductividad. 48

4.20. Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ variando el espesor del dieléctrico d . Los parámetros estructurales son: $\tau = 1 \text{ ps}$, $\mu = 0.2 \text{ eV}$. El espesor del dieléctrico de izquierda a derecha es: $1 \mu m$, $10 \mu m$, $50 \mu m$. La línea roja representa la línea de luz del vacío, la línea negra representa la relación de dispersión asociada a la celda unitaria para $\mu = 0.2 \text{ eV}$. Se puede observar que los modos de superficie se confinan conforme la distancia d aumenta. 49

- 4.21. Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ variando el tiempo de colisión τ . Los parámetros estructurales son: $d = 5 \mu m$, $\mu = 0.2 \text{ eV}$. El valor de τ de izquierda a derecha es: 0.2 ps, 1 ps, 10 ps. La línea roja representa la línea de luz del vacío, la línea negra representa la relación de dispersión asociada a la celda unitaria para $\mu = 0.2 \text{ eV}$. Se puede observar que al aumentar el valor de τ (lo cual significa poca absorción) la banda asociada a los modos de superficie coincide con la relación de dispersión. De igual manera se puede observar que la presencia de absorción modifica las soluciones de la parte real (línea azul) e imaginaria (línea verde) del vector de Bloch. 49
- 4.22. Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ variando el espesor del dieléctrico d . Los parámetros estructurales son: $\tau = 1 \text{ ps}$, $\mu = 0.2 \text{ eV}$. El espesor del dieléctrico de izquierda a derecha es: $1 \mu m$, $0.1 \mu m$, $0.01 \mu m$. La línea roja representa la línea de luz del vacío y prácticamente sobre ella se encuentra la relación de dispersión asociada a la celda unitaria para $\mu = 0.2 \text{ eV}$. La línea verde (azul) representa la parte imaginaria (real) del vector de Bloch. Se puede observar que los modos de superficie se definen mucho mejor en la medida que la distancia d se reduce. 51
- 4.23. Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ variando el tiempo de colisión τ . Los parámetros estructurales son: $d = 0.05 \mu m$, $\mu = 0.2 \text{ eV}$. El valor de τ de izquierda a derecha es: 0.2 ps, 1 ps, 10 ps. La línea roja representa la línea de luz del vacío y prácticamente sobre ella se encuentra la relación de dispersión asociada a la celda unitaria para $\mu = 0.2 \text{ eV}$ 51
- 4.24. Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ variando el espesor de las capas de aire d_1 y d_2 . Los parámetros estructurales son: $\tau = 1 \text{ ps}$, $\mu_1 = 0.2 \text{ eV}$ y $\mu_2 = 1.2 \text{ eV}$. Los espesores de las dos capas de aire, respectivamente, de izquierda a derecha son: $10 \mu m$ y $15 \mu m$, $5 \mu m$ y $20 \mu m$, $30 \mu m$ y $60 \mu m$. Una vez más, la línea roja representa la línea de luz del vacío y las dos líneas negras están asociadas a la relación de dispersión para $\mu_1 = 0.2 \text{ eV}$ y $\mu_2 = 1.2 \text{ eV}$, respectivamente. Se puede observar que la banda tiende a la relación de dispersión del sistema en donde el grafeno posee mayor potencial químico. 52
- 4.25. Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ variando el espesor de las capas de aire d_1 y d_2 . Los parámetros estructurales son: $\tau = 1 \text{ ps}$, $\mu_1 = \mu_2 = 0.2 \text{ eV}$. Los espesores de las dos capas de aire, respectivamente, de izquierda a derecha son: $1 \mu m$ y $0.1 \mu m$, $0.1 \mu m$ y $0.01 \mu m$, $1 \mu m$ y $0.01 \mu m$. Una vez más, la línea roja representa la línea de luz del vacío y prácticamente sobre ella se encuentra la relación de dispersión para $\mu = 0.2 \text{ eV}$ 53

4.26. Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ considerando absorción en el grafeno (banda proyectada con compleja). Los parámetros estructurales son: $d = 18 \mu m$, $\tau = 0.1 ps$, $\mu = 0.2 eV$. Como consecuencia de la presencia de absorción, la componente real (línea azul) e imaginaria (línea verde) del vector de Bloch ya no se separan completamente y por ende poseen valores finitos en toda la región de frecuencias.	54
4.27. Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ para valores de $K_i < \alpha$ en donde $\alpha \in (0, 1)$. Los parámetros estructurales son: $\tau = 1 ps$, $d = 10 \mu m$, $\mu = 1.2 eV$ (izquierda) y $\mu = 0.2 eV$ (derecha). Se puede observar una deformación en la banda de los modos superficiales conforme cambia el valor de la cota α lo cual está relacionado con la distancia de penetración de los modos. Adicionalmente se observa que las bandas tienden a las relaciones de dispersión relacionadas con los dos valores del potencial químico anteriormente mencionados	56
4.28. Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ para valores de $K_i < \alpha$ en donde $\alpha \in (0, 1)$. En este caso, los parámetros estructurales son: $\tau = 1 ps$, $\mu_1 = 0.2 eV$, $\mu_2 = 1.2 eV$, $d_1 = 10 \mu m$ y $d_2 = 15 \mu m$ (izquierda), $d_1 = 30 \mu m$ y $d_2 = 60 \mu m$ (derecha). Se puede observar un desdoblamiento de la banda la cual converge hacia las relaciones de dispersión asociadas al valor del potencial químico μ_1 y μ_2	56
4.29. Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ para valores de $K_i < \alpha$ en donde $\alpha \in (0, 1)$. Los parámetros estructurales son: $\tau = 1 ps$, $\mu_1 = \mu_2 = 0.2 eV$, $d_1 = 0.1 \mu m$ y $d_2 = 0.05 \mu m$ (izquierda) y $d_1 = 1 \mu m$ y $d_2 = 0.1 \mu m$ (derecha). En este caso se puede observar un desdoblamiento de la banda el cual origina un gap omnidireccional.	57
4.30. Estructura del cristal fotónico sin defecto $(AG_1BG_2)^{15}$. Se considera al grafeno como un recubrimiento de espesor nulo.	58
4.31. Espectro de reflexión del cristal fotónico sin defecto del sistema $(AB)^{15}$ (izquierda) y $(AG_1BG_2)^{15}$ (derecha). Se puede observar claramente que la presencia del grafeno induce un gap a bajas frecuencias totalmente diferente al gap de Bragg usual que surge de manera natural. Los parámetros estructurales son: $\varepsilon_A = 2.56$ y $\varepsilon_B = 1.00$, $d_A = d_B = 10 \mu m$, $\mu_1 = \mu_2 = 0.2 eV$ y $\tau = 10 ps$	59
4.32. Perfil de los campos para la estructura sin grafeno $(AB)^{15}$ tomando como referencia las frecuencias particulares: a) $2.43 THz$, b) $5.73 THz$ y c) $6.85 THz$. Los parámetros estructurales son los mismos que se emplearon en la figura (4.31).	60
4.33. Perfil de los campos para la estructura con grafeno $(AG_1BG_2)^{15}$ tomando como referencia las frecuencias particulares: a) $0.95 THz$, b) $2.05 THz$, c) $6.04 THz$ y d) $7.20 THz$. Una vez más los parámetros estructurales son los mismos que se emplearon en la figura (4.31).	60

Resumen

Por las amplias propiedades que manifiestan los plasmones en espacios reducidos, han resultado ser candidatos ideales para ser aplicados en dispositivos optoelectrónicos, a la fecha existen muchos reportes en la literatura acerca de su interacción en los metales debido a la respuesta dispersiva de éstos. Con el desarrollo de la tecnología de materiales, nuevos compuestos han despertado el interés por la presencia de plasmones pero con una gama más amplia de propiedades, tal es el caso del grafeno, este material ha resultado de mucho interés por las dimensiones de su estructura, que se ubica como una capa, y que por tanto se espera pueda reducir los dispositivos optoelectrónicos. En esta tesis se pretenden estudiar los plasmones asociados al grafeno, construir estructuras periódicas en donde se intercalan capas de grafeno y dieléctrico, y de ahí determinar su respuesta óptica como la estructura de bandas, los campos internos, la reflexión, la transmisión y el efecto de los plasmones sobre estas estructuras.

Introducción

En las últimas décadas la Física de Materiales ha sido un pilar fundamental en el desarrollo científico y tecnológico de la sociedad. El mundo ha visto a la luz el descubrimiento de materiales que en siglos pasados eran inimaginables, al igual que un sin fin de aplicaciones tecnológicas dentro de la vida práctica, todo esto como consecuencia del incremento de las técnicas de caracterización y obtención de dichos materiales. Es decir, cada vez surgen nuevos materiales que mejoran y sustituyen a otros que en su momento eran importantes. Tal es el caso del grafeno quien con certeza se perfila como sustituto del silicio en la fabricación de los componentes optoelectrónicos, siendo ésta una de tantas aplicaciones que este material posee. Debido a las propiedades eléctricas, térmicas, mecánicas y ópticas el grafeno ha resultado ser un material extraordinario no sólo por las aplicaciones potenciales que éste pueda tener sino también porque ha permitido la comprobación de muchos fenómenos de naturaleza cuántica a partir de experimentos de bajo costo y sin duda es el precursor en la búsqueda de materiales bidimensionales (2D) abriendo una nueva ventana de investigación dentro de la Física de Materiales. En lo que respecta a este trabajo de tesis, limitaremos nuestro estudio sobre las propiedades ópticas que este material exhibe al formar parte de una estructura cristalina de material dieléctrico, es decir, se estudia la respuesta óptica de estructuras multicapa conformadas de grafeno y dieléctrico, la estructura de bandas asociadas a dichas estructuras, los perfiles de los campos internos, entre otras. De manera particular, destaca una propiedad de sumo interés debido a la propuesta de aplicación inmediata y a escalas nanométricas. Esta propiedad óptica hace referencia a los plasmones de superficie. Como es bien sabido, los plasmones de superficie son ondas colectivas que surgen del acoplamiento entre la luz que viaja a lo largo de la superficie de ciertos materiales y los electrones libres que éstos poseen. Para el caso de los metales, existe demasiada literatura que hace referencia al comportamiento de los plasmones sobre la superficie de éstos. Para el caso del grafeno, sucede algo por demás interesante. Debido a las propiedades eléctricas que este material posee, existe la posibilidad de que la luz se pueda acoplar con los electrones de su superficie mediante cualquier tipo de polarización que le sea incidida a ésta, es decir que a diferencia del caso típico presente en los metales, el grafeno posee adicionalmente ondas colectivas de superficie asociadas a la polarización TE. Ya un comportamiento similar se estudia para el caso de los metamateriales [1], sin embargo a diferencia del grafeno, los metamateriales aún están en vía de construcción. Este hecho es algo totalmente novedoso, tan novedoso que la misma palabra plasmón de superficie TE, ya no tiene un sentido real dado que no existe una densidad de carga magnética libre. Esto sin duda alguna, exigirá nuevas interpretaciones a los efectos plasmónicos que se puedan observar no sólo en el grafeno y los metamateriales, sino en cualquier otro material que surja en el futuro. Otra característica particular que sucede con

el grafeno, es la posibilidad de modificar de manera deliberada la densidad de portadores de carga a partir de la sintonización del voltaje [2]. Recordemos que los portadores de carga son lo responsables de incrementar o disminuir la absorción en la superficie del material, logrando con esto distintas formas de acoplar la luz según la frecuencia que ésta posea, de ahí la relevancia de esta característica, pues uno puede llevar las regiones de existencia de plasmones a regiones de frecuencia deseada a partir de modificar la cantidad de portadores de carga. Todas estas características que han sido mencionadas, las cuales exhiben propiedades eléctricas y ópticas novedosas, pueden ser modeladas a partir de una conductividad óptica que es descrita a partir de distintos modelos teóricos (en nuestro caso nos limitaremos a la formulación de Kubo la cual se basa en la teoría de respuesta lineal). Para el caso óptico, el comportamiento de dicha conductividad nos describe una restricción entorno a las propiedades ópticas que posee el grafeno. Es decir, todas estas propiedades surgen en el rango de los Terahertz (Infrarojo lejano) de tal suerte que por ejemplo para la luz visible, el grafeno luce prácticamente transparente debido a su alta transmitancia por lo que la búsqueda de plasmones en dicha región sería totalmente nula. Por otro lado, en el caso de los plasmones se puede observar de manera evidente que la parte imaginaria de dicha conductividad dicta las regiones de existencia y los rangos de frecuencia de los plasmones TM y los modos de superficie TE, encontrándose que los primeros, existen en la región de baja frecuencia, mientras que los segundos en regiones de altas frecuencias, todo esto en el rango de los Terahertz. En otras palabras el análisis inicial del comportamiento de esta conductividad óptica es la premisa para el desarrollo de este trabajo de tesis. Para ambos tipos de polarización se propone la técnica ATR como medio o forma de excitación de los modos superficiales considerando al grafeno inmerso en aire. Se observa que para el caso de la polarización TE, los modos superficiales están suficientemente suprimidos de tal forma que son excitados prácticamente con ángulos cercanos al ángulo crítico, es decir, el orden de variación respecto a este último es aproximadamente de $\Delta\theta_i \approx 10^{-4}$, siendo todo esto consistente con su relación de dispersión electromagnética, la cual se encuentra exageradamente cerca de la línea de luz del vacío.

La tesis ha sido organizada de la siguiente manera. En el capítulo 1 se muestran algunas propiedades del grafeno. En el capítulo 2 se presenta una breve descripción del formalismo de Kubo a partir del cual surge la conductividad óptica asociada al grafeno, se discuten sus propiedades básicas y se analizan los rangos de frecuencia en donde existen los modos de superficie sobre el grafeno para ambas polarizaciones. En el capítulo 3 se describe la forma de la matriz de transferencia tomando en consideración ambas aproximaciones del grafeno. En el capítulo 4 se muestra la contribución de esta tesis. Primeramente se analiza la respuesta óptica a incidencia normal de los sistemas conformados por una monocapa de grafeno, dos capas de grafenos, cuatro capas de grafenos y ocho capas de grafeno, todos ellos alternados por dieléctricos. Posteriormente se estudia el caso a incidencia oblicua el cual permite obtener información referente a los modos de superficie para ambas polarizaciones de los sistemas monocapa y bicapa de grafeno incrustados en dieléctricos únicamente, se deducen sus relaciones de dispersión electromagnética y mediante la técnica de ATR se demuestra la existencia de modos superficiales sobre el grafeno para determinadas frecuencias características (todas ellas en el rango de los Terahertz). Posteriormente se realiza un estudio sobre las estructuras de banda a incidencia normal y de propagación oblicua para ambas polarizaciones. Finalmente se realiza un estudio sobre los perfiles de los campos para ambas polarizaciones para estructuras multicapas de grafeno sin defecto.

En el capítulo 5 se presentan las conclusiones sobre este trabajo.

Capítulo 1

Consideraciones generales sobre el grafeno

El grafeno ha resultado ser un material generoso dada la diversidad de sus propiedades físicas en general. Es por ello que las aplicaciones que se perfilan con el grafeno son variadas no sólo en lo que concierne a la tecnología sino también dentro de la ciencia misma. En este capítulo se presentan algunos aspectos generales sobre el grafeno al igual que algunas propuestas de aplicación, enfatizando principalmente en las aplicaciones ópticas.

1.1. El grafeno

El grafeno es una lámina monoatómica plana de átomos de carbono unidos mediante enlaces covalentes sp^2 (monocapa de grafito). Ha sido empleado durante las últimas décadas como modelo teórico de estudio de diversos materiales gráfiticos, permitiendo explicar muchas de sus propiedades.

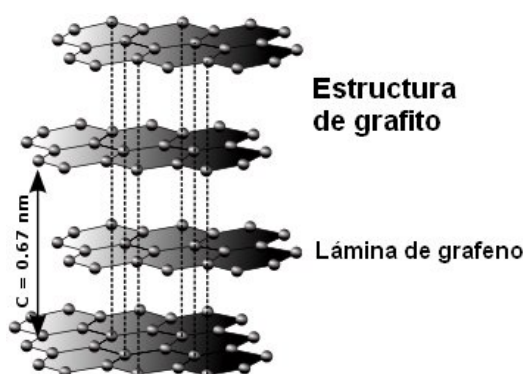


Figura 1.1: Relación entre una lámina de grafeno y la estructura del grafito. El espesor del grafeno (0.345 nm) es del orden de un átomo de carbono.

A pesar de esto, hasta el año 2004 no se creía posible su existencia como entidad aislada, ya que se suponía que los cristales estrictamente bidimensionales eran termodinámicamente

CAPÍTULO 1. CONSIDERACIONES GENERALES SOBRE EL GRAFENO

1.1. EL GRAFENO

inestables. Esta inestabilidad se pensaba que era consecuencia de una contribución divergente de las fluctuaciones térmicas en redes cristalinas de baja dimensionalidad que teóricamente producen desplazamientos atómicos comparables a las distancias interatómicas a cualquier temperatura finita [3], dando lugar a la desintegración del cristal. Numerosas pruebas experimentales apoyaban esta hipótesis, entre ellas el hallazgo de que la temperatura de fusión de láminas delgadas decrece rápidamente al disminuir su espesor, lo que provoca que el filme se vuelva inestable para grosores correspondientes a aproximadamente una docena de monocapas [4, 5]. Esto fuerza en general a los cristales bidimensionales a tomar una variedad de estructuras tridimensionales que les proporcionen estabilidad a costa de la pérdida de la bidimensionalidad. De esta manera, se suponía que el grafeno únicamente podía existir como constituyente básico de otros materiales grafiticos, aunque sin poseer una entidad real como objeto aislado. Sin embargo, en el año 2004 un grupo de científicos encabezados por A.K. Geim y K.S. Novoselov fueron capaces de obtener e identificar por vez primera láminas individuales de grafeno junto con otros cristales bidimensionales [6, 7]. Debido a las insólitas propiedades físicas que ostenta, se considera al grafeno como un material excepcional tanto desde el punto de vista de la investigación en física fundamental, como desde el punto de vista de sus aplicaciones prácticas. Atendiendo a su estructura electrónica, el grafeno es un caso especial de semimetal: posee un gap cero como los metales, con la peculiaridad de que la densidad de estados (DOS) en el nivel de Fermi es nula, como ocurre en los semiconductores [8, 9]. Es por esto por lo que también se le puede considerar como un semiconductor de banda prohibida (gap) nula.

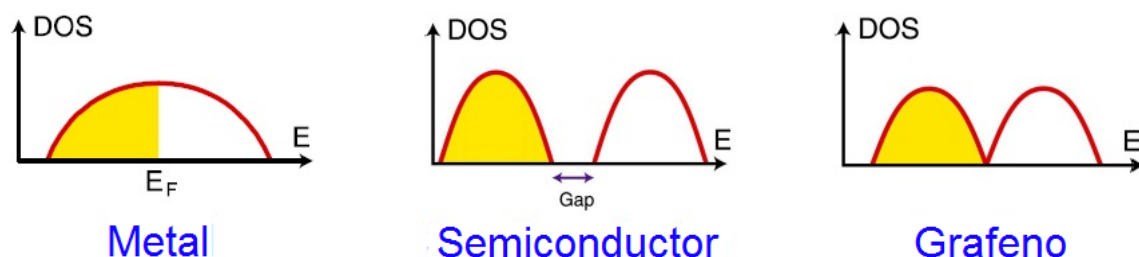


Figura 1.2: Comparación de la densidad de estados para los metales, los semiconductores y el grafeno. Se puede observar en el grafeno un comportamiento de semiconductor pero, al igual que los metales, posee una banda prohibida nula.

Además, su estructura electrónica de bandas presenta una dispersión lineal respecto al momento para bajas energías, semejante a la que proporciona la ecuación de Dirac para fermiones de masa nula. Esto convierte al grafeno monocapa en un sistema bidimensional de fermiones de Dirac de masa nula, algo de una importancia crucial a la hora de comprender sus inusuales propiedades electrónicas, como el efecto Hall cuántico (QHE) anómalo. Los electrones, en su movimiento a través del potencial periódico de la red cristalina del grafeno, pierden por completo su masa efectiva como consecuencia de la simetría hexagonal del cristal. De esta manera, los portadores de carga en el grafeno son cuasi partículas sin masa que se mueven a una velocidad constante de 10^6 m/s (es decir, unas 300 veces menor que la velocidad de la luz en el vacío), y cuyo comportamiento está regido por la ecuación relativista de Dirac y no por la de Schrödinger. Se tiende así un inesperado puente entre dos disciplinas en principio alejadas, la física de la materia condensada y la teoría cuántica

CAPÍTULO 1. CONSIDERACIONES GENERALES SOBRE EL GRAFENO

1.1. EL GRAFENO

de campos (QFT, Quantum Field Theory), permitiendo comprobar la validez de diferentes efectos cuánticos predichos por esta última (paradoja de Klein, efecto Hall cuántico, etc.) mediante experimentos relativamente sencillos y de bajo coste concernientes a la medida de las propiedades electrónicas del grafeno.

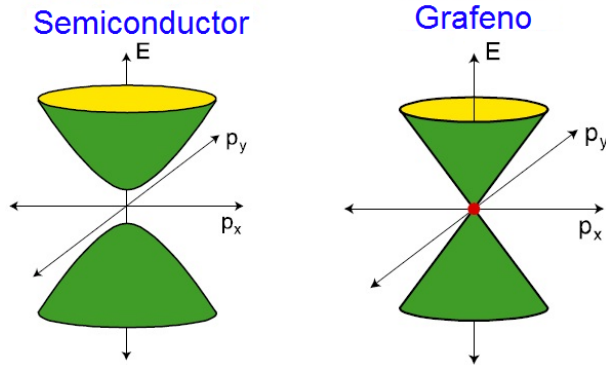


Figura 1.3: Representación gráfica del cono de Dirac para la estructura electrónica de bandas del grafeno.

Los portadores de carga del grafeno poseen una gran movilidad intrínseca (puede llegar hasta los $2 \times 10^5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ a temperatura ambiente [10, 11]) y se encuentran en una concentración muy elevada (10^{12} cm^{-2}). Esto implica que la resistividad intrínseca a temperatura ambiente es de tan solo 10^{-8} m , valor que es incluso menor que el de la plata, el material conocido con una menor resistividad. La movilidad tan elevada que presentan los portadores de carga del grafeno, superando la de los actuales transistores de Si, asegura el transporte balístico a distancias submicrométricas incluso a temperatura ambiente.

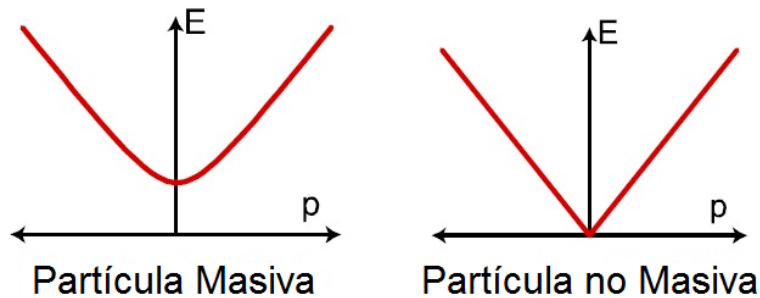


Figura 1.4: Dispersión lineal de la estructura electrónica de bandas para el grafeno a bajas energías. Como consecuencia, los portadores de carga que se desplazan sobre el grafeno son prácticamente fermiones de masa nula

Debido a estas excepcionales propiedades electrónicas, se está trabajando en la implementación del grafeno en transistores de efecto de campo (FET) [6] con una velocidad de conmutación muy elevada (algunos prototipos ya han alcanzado los 100 GHz [12]), así como de transistores en los que el flujo de electrones es muy pequeño y está totalmente controlado (single electron transistor, SET) [13]. Por esto se postula al grafeno como un

CAPÍTULO 1. CONSIDERACIONES GENERALES SOBRE EL GRAFENO

1.1. EL GRAFENO

sustituto ideal del Si en la fabricación de circuitos integrados de altas prestaciones. Sin embargo, el hecho de que posea un gap nulo impide su aplicación de manera directa, por lo que resulta necesario procesar el grafeno de modo que se abra un gap. Entre otras tentativas, una ruta que puede proporcionar buenos resultados consiste en trabajar con estrechas cintas de grafeno (graphene nanoribbons, GNR), estructuras que se pueden considerar unidimensionales. Debido al confinamiento cuántico de los electrones que se produce en estas estructuras unidimensionales, los GNR presentan un gap que es lo suficientemente grande ($0.5 eV$) como para permitir su aplicación en transistores que trabajen a temperatura ambiente [14]. Se sabe que la absorción de moléculas sobre la superficie del grafeno da lugar a un dopaje del mismo, bien con electrones o huecos en función de la naturaleza del material absorbido, y por tanto a pequeños cambios en su resistividad. Esto, unido a su elevada área superficial específica ($2600 m^2 g^{-1}$ [15]), convierte al grafeno en un potencial candidato para la elaboración de sensores de gran sensibilidad (de gases [16], biosensores [17], etc.), pudiendo llegarse a niveles de detección de moléculas o átomos individuales [16]. La gran área superficial del grafeno y su gran conductividad lo postulan como posible sucesor del grafito en la fabricación de ánodos de baterías de ión litio [18]. La conductividad térmica a temperatura ambiente del grafeno es mayor que la de cualquier material conocido ($5000 W m^{-1} K^{-1}$ [19]), lo que lo convierte en un candidato ideal para la fabricación de disipadores térmicos y de materiales compuestos de gran conductividad térmica. Sus excepcionales propiedades mecánicas convierten al grafeno en el material más resistente conocido, con una resistencia a la tracción de $130 GPa$ y un elevado módulo de Young ($1,0 TPa$ [20]). Aprovechando esto, se está intentando la elaboración de materiales compuestos de gran resistencia además de conductores de la electricidad gracias a la inclusión de grafeno [15].

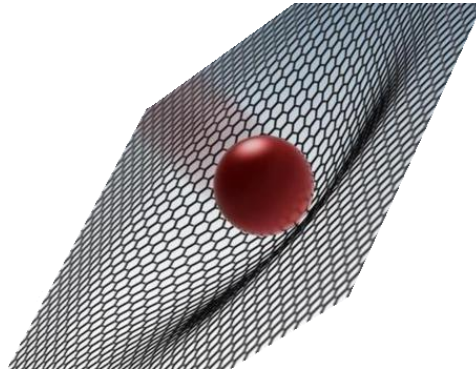


Figura 1.5: El grafeno es el material más resistente conocido hasta la fecha superando a varios materiales entre ellos al diamante.

En lo que concierne a las propiedades ópticas del grafeno también le auguran un esperanzador futuro en un gran número de aplicaciones. Su transmitancia óptica T es muy elevada $97,7\%$ e independiente de la longitud de onda en el rango visible [21, 22], pudiendo ser expresada empleando únicamente la constante de estructura fina sin que aparezca ningún parámetro característico del material:

$$T = \left(1 + \frac{\pi\alpha}{2}\right)^{-2} \approx 1 - \pi\alpha \approx 0,977 \quad (1.1)$$

CAPÍTULO 1. CONSIDERACIONES GENERALES SOBRE EL GRAFENO

1.1. EL GRAFENO

Esta elevada transmitancia óptica impide la observación visual directa mediante microscopía óptica de láminas de grafeno, por lo que para su identificación se necesita hacer uso de un efecto de interferencia cuando se encuentran soportadas sobre substratos de Si/SiO_2 del grosor adecuado. Sin embargo, gracias a ella y a su buena conductividad eléctrica, el grafeno se presenta como un candidato ideal para la fabricación de electrodos conductores transparentes, empleados por ejemplo en pantallas táctiles [23] y de cristal líquido [24, 25], células fotovoltaicas orgánicas [26] y LEDs orgánicos [27]. A este respecto, el grafeno supera en términos de estabilidad química, flexibilidad y transparencia a los óxidos metálicos que se emplean en la actualidad (p.ej. ITO) [25]. Por otro lado, en el terreno de la plasmónica, el grafeno exhibe propiedades totalmente diferentes a las presentes en los metales nobles tales como el oro y la plata, lo cual es sumamente importante para la tecnología a desarrollar a escalas nanométricas. Algunas de estas aplicaciones se encuentran ya en vías de implementación a nivel práctico [23], en lo que podría ser uno de los primeros usos a nivel industrial de este material. El grafeno presenta además una gran transparencia a los haces de electrones, debido a su insignificante sección eficaz de dispersión electrónica. Esto los convierte en soportes ideales en TEM, dado que resultan prácticamente transparentes para esta técnica. De esta manera resulta posible observar átomos individuales absorbidos [28].

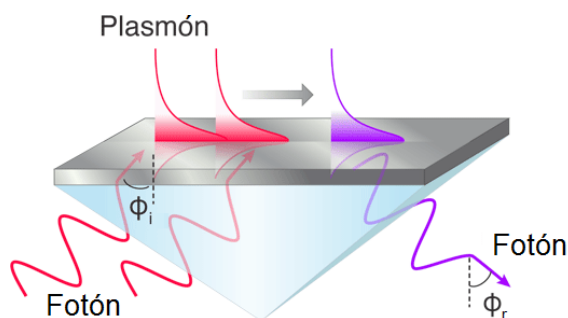


Figura 1.6: El grafeno permite la propagación de modos de superficie tanto para la polarización TM como para la polarización TE. Ésto último es totalmente nuevo respecto a los metales nobles.

En términos generales, el grafeno ha resultado ser un material extraordinario por las diversas características y aplicaciones potenciales que se esperan de él, como ya fue mencionado con anterioridad. Sin duda alguna, es el precursor en el estudio y aplicación de los materiales $2-D$, surgiendo con ello nuevas líneas de investigación entorno a la obtención e implementación de este tipo de materiales [29, 30] los cuales revolucionarán la manera de hacer y aplicar tecnología. Por otro lado, su estudio ha permitido tender puentes con otros campos de estudio de la Física y de esa forma no sólo contribuye en el aspecto tecnológico, sino también en la comprensión de la Física de frontera.

Capítulo 2

La fórmula de Kubo y el transporte electrónico

El grafeno es modelado como una superficie local e isotrópica, infinitesimalmente delgada caracterizada por una conductividad superficial de carga σ . A su vez, esta conductividad de carga es descrita a partir de distintos modelos teóricos (Formalismo de Kubo, random-phase approximation, self-consistent-field approach, etc). En este capítulo se analiza el formalismo de Kubo a partir del cual se obtiene la expresión de la conductividad que será utilizada a lo largo de esta tesis.

2.1. El formalismo de Kubo

La fórmula de Kubo se basa en la teoría de respuesta lineal [31], representa el primer formalismo mecánico - cuántico sobre el transporte (térmico, eléctrico, etc). Conecta los procesos irreversibles en no-equilibrio con las fluctuaciones térmicas en equilibrio (Teorema de Disipación). De ahí que el estudio del transporte se limita a estados en no-equilibrio cercanos al equilibrio. Por ejemplo, experimentalmente se ha demostrado, que si una fuerza \vec{F} es aplicada a un sistema, su respuesta es una corriente, \vec{j} , (que es cero cuando la fuerza es nula) de tal forma que para \vec{F} pequeñas se cumple que

$$\vec{j} = L \cdot \vec{F} + O(\vec{F}^2),$$

en donde L es una matriz de coeficientes de transporte. Como ejemplos de lo mencionado previamente se tienen los siguientes

- Ley de Fourier: Un gradiente de temperatura produce una corriente de calor

$$\vec{j} = -\lambda \vec{\nabla} T.$$

- Ley de Ohm: Un gradiente de potencial (campo eléctrico) produce una corriente eléctrica

$$\vec{j} = -\sigma \vec{\nabla} V.$$

- Ley de Fick: Un gradiente de densidad produce un flujo de materia

$$\vec{j} = -\kappa \vec{\nabla} \rho.$$

CAPÍTULO 2. LA FÓRMULA DE KUBO Y EL TRANSPORTE ELECTRÓNICO

2.1. EL FORMALISMO DE KUBO

En nuestro caso se describe la respuesta lineal de un electrón ante un campo eléctrico a partir de la conductividad, σ . Considérese un sistema sometido a una diferencia de potencial. Como es bien sabido, la presencia de un campo eléctrico, \vec{E} , induce una corriente, \vec{j} . La respuesta lineal de \vec{j} en presencia de \vec{E} se define como la conductividad que en su forma tensorial y no-local se define como

$$\langle \hat{j}_\alpha(\vec{r}, t) \rangle = \int d\vec{r}' \sigma_{\alpha\beta}(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) E_\beta(\vec{r}') e^{-i\omega t}.$$

En lo que sigue, se omiten los subíndices tensoriales puesto que por lo general uno está interesado en la conductividad homogénea (tal es el caso del grafeno, en donde ésta es considerada un escalar). El operador de densidad de corriente es

$$\hat{j}_{tot}(r) = \hat{j}(r) + \hat{j}_{dia}(r),$$

en donde

$$\begin{aligned} \hat{j}(r) &= -\frac{e}{2m} \sum_i [p_i \delta(r - r_i) + \delta(r - r_i) p_i] \\ \hat{j}_{dia}(r) &= -\frac{e^2}{mc} \sum_i \delta(r - r_i) \vec{A}(r). \end{aligned}$$

Cuando se aplica un campo electromagnético transversal, el término perturbativo de primer orden del hamiltoniano es

$$H' = -\frac{1}{c} \int d\vec{r} \hat{j}(r) \cdot \vec{A}(r) e^{-i\omega t}.$$

Usando la relación $\vec{E} = -(1/c)\partial\vec{A}/\partial t$, el potencial vectorial puede ser reemplazado por $cE/i\omega$ y la ecuación anterior puede ser escrita como

$$H' = \int d\vec{r} \int_{-\infty}^t dt \hat{j}(r) \cdot \vec{E}(r, t) = \frac{i}{\omega} \int d\vec{r} \hat{j}(r) \cdot \vec{E}(r) e^{-i\omega t}.$$

Finalmente, debido a que la densidad $-i\hat{j}(r)/\omega$ se acopla con E , la conductividad puede ser escrita como

$$\sigma(r, r'; \omega) = \frac{in(r)e^2}{m\omega} \delta(r - r') + \frac{1}{\hbar\omega} \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \langle [\hat{j}(r, t), \hat{j}(r', 0)] \rangle.$$

En el caso uniforme, se tiene que

$$\sigma(\omega) = \frac{ine^2}{m\omega} + \frac{1}{\hbar\omega V} \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \langle [\hat{J}(t), \hat{J}(0)] \rangle,$$

en donde $n = N/V$ es la densidad promedio de electrones. Esta última expresión puede ser escrita como

$$\begin{aligned} \sigma(\omega + is) &= \left(\frac{ne^2}{m} - \frac{e^2}{m^2 V} \sum_{\alpha\beta} |\langle \alpha | p_x | \beta \rangle|^2 \frac{f_\alpha - f_\beta}{\hbar\omega_{\alpha\beta}} \right) \frac{i}{\omega + is} \\ &\quad - \frac{ie^2}{m^2 V} \sum_{\alpha\beta} |\langle \alpha | p_x | \beta \rangle|^2 \frac{f_\alpha - f_\beta}{\hbar\omega_{\alpha\beta}} \frac{1}{\omega_{\alpha\beta} - \omega - is}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Finalmente de esta ecuación surge la expresión para la conductividad superficial de carga del grafeno.

CAPÍTULO 2. LA FÓRMULA DE KUBO Y EL TRANSPORTE ELECTRÓNICO

2.2. CONDUCTIVIDAD SUPERFICIAL DE CARGA EN EL GRAFENO

2.2. Conductividad superficial de carga en el grafeno

Como fue mencionado en el primer capítulo, una de las principales propiedades electrónicas del grafeno es su estructura de bandas, pues ésta presenta una dispersión lineal respecto al momento para bajas energías, semejante a la que proporciona la ecuación de Dirac para fermiones de masa nula. Debido a esto, se sabe muy bien que cerca del nivel de energía de Fermi, sobre el cono que une la banda de valencia y la banda de conducción, las propiedades electrónicas del grafeno se describen a partir de la teoría de Dirac y el fenómeno de los electrones no masivos resulta relevante. Esta propiedad interesante da origen a una conductividad óptica particular para el grafeno dada por $\sigma(\omega) = \sigma_{real} + i\sigma_{imag}$ con contribuciones intrabanda y contribuciones interbanda. Entonces, en el límite local, en donde los efectos de dispersión espacial son despreciable, es decir, $\omega \gg \tau^{-1}$ y $\omega \gtrsim q_x v_F$, expresiones analíticas de la conductividad óptica del grafeno se pueden obtener a partir del formalismo de Kubo para temperaturas finitas T . A este respecto, de la ecuación (2.1) la expresión para la conductividad, σ , está dada por [32]

$$\begin{aligned} \sigma(\omega, \mu_c, \tau, T) = & \frac{e^2 (\omega + i\tau^{-1})}{i\pi\hbar^2} \left[\frac{1}{(\omega + i\tau^{-1})^2} \int_0^\infty \varepsilon \left(\frac{\partial F(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} - \frac{\partial F(-\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon \right. \\ & \left. - \int_0^\infty \frac{F(-\varepsilon) - F(\varepsilon)}{(\omega + i\tau^{-1})^2 - 4(\varepsilon/\hbar)^2} d\varepsilon \right] \end{aligned} \quad (2.2)$$

en donde ω es la frecuencia radial, μ_c es el potencial químico, τ es el tiempo de relajación fenomenológico del electrón, T es la temperatura, ε es la energía, e es la carga del electrón, $F(\varepsilon) = (e^{(\varepsilon - \mu_c)/k_B T} + 1)^{-1}$ es la distribución de Fermi-Dirac y k_B es la constante de Boltzmann. El primer término de la ecuación (2.2) corresponde a las contribuciones intrabanda (dispersión electrón-fotón) y el segundo término es debido a las contribuciones interbanda (transiciones directas de interbanda del electrón). La primera integral se puede realizar de manera analítica de donde se obtiene,

$$\sigma_{intra} = \frac{2ie^2 k_B T}{\pi\hbar^2 (\omega + i\tau^{-1})} \left(\frac{\mu_c}{k_B T} + 2 \ln \left(e^{-\mu_c/k_B T} + 1 \right) \right),$$

que en el límite $\mu_c \gg k_B T$ se reduce a una expresión tipo Drude

$$\sigma_{intra} = \frac{ie^2 \mu_c}{\pi\hbar^2 (\omega + i\tau^{-1})}. \quad (2.3)$$

La segunda integral sólo se puede aproximar de manera analítica en el límite $\mu_c \gg k_B T$ como

$$\sigma_{inter} = \frac{e^2}{4\hbar} \left[1 + \frac{i}{\pi} \ln \frac{\hbar(\omega + i\tau^{-1}) - 2\mu_c}{\hbar(\omega + i\tau^{-1}) + 2\mu_c} \right]. \quad (2.4)$$

En general, es fácil demostrar que para valores pequeños del potencial químico, las propiedades ópticas del grafeno no son sensibles ante cambios moderados de la temperatura. De esta manera, las expresiones (2.3) y (2.4) son de mayor importancia y la conductividad queda expresada como

$$\sigma(\omega) = \frac{ie^2}{\pi\hbar} \left[\frac{\mu_c}{\hbar(\omega + i\tau^{-1})} - \frac{1}{4} \ln \left(\frac{2\mu_c + \hbar(\omega + i\tau^{-1})}{2\mu_c - \hbar(\omega + i\tau^{-1})} \right) \right]. \quad (2.5)$$

CAPÍTULO 2. LA FÓRMULA DE KUBO Y EL TRANSPORTE ELECTRÓNICO

2.2. CONDUCTIVIDAD SUPERFICIAL DE CARGA EN EL GRAFENO

En lo que sigue, todos los resultados presentados en esta tesis hacen uso de la conductividad dada por (2.5).

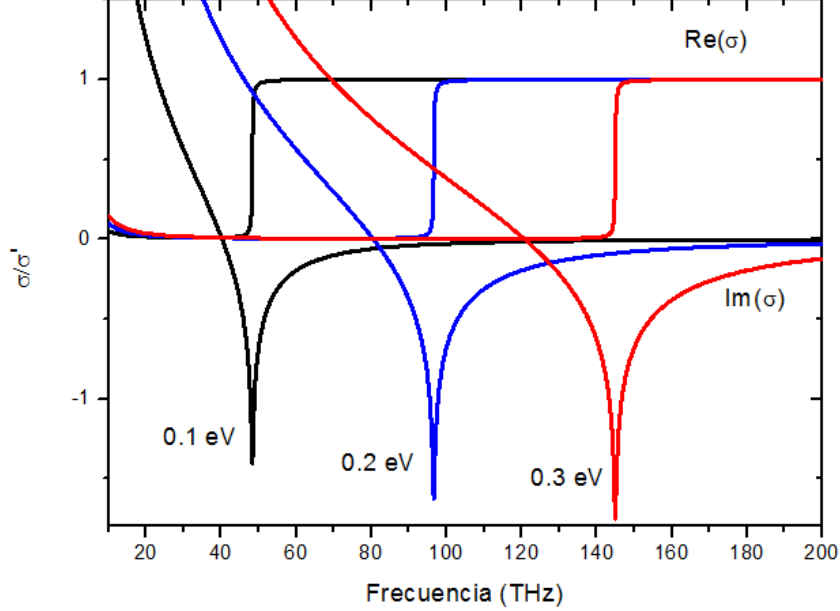


Figura 2.1: Gráfica de la parte real e imaginaria de la conductividad total ($\sigma_{intra} + \sigma_{inter}$), en el límite $\mu_c \gg k_B T$, en función de la frecuencia en THz, en unidades de $\sigma' = e^2/4\hbar$, para tres valores particulares del potencial químico, μ_c . La gráfica de la parte imaginaria propicia información referente al rango de frecuencia en donde se encuentran los plasmones *TM* y los modos *TE*.

De la ecuación (2.3) se puede observar que σ_{intra} es directamente proporcional a μ_c , esto implica que dependiendo del valor del potencial químico, la parte imaginaria de la conductividad tomará valores en regiones específicas de la frecuencia, como se puede apreciar en la figura (2.1), lo cual es de suma importancia al momento de analizar los efectos plasmónicos que el grafeno posee. Por otro lado, en la ecuación (2.4) se puede observar que σ_{inter} diverge logarítmicamente para $\hbar\omega \approx 2\mu_c$, esto último también es de suma importancia ya que los plasmones de superficie existen sólo en la región en donde $\hbar\omega < 2\mu_c$, es decir a la izquierda del punto de divergencia. Además, también se puede probar que para frecuencias muy altas ($\omega \gg \mu_c, k_B T$), σ se aproxima a una constante $\sigma_0 \approx \frac{e^2}{4\hbar}$, como se muestra en la figura (2.1), la cual se encuentra cerca del valor medido para el mínimo de la conductividad, $\frac{e^2}{2\pi\hbar}$ [33, 34]. Por otro lado, en el límite de bajas energías, la relación entre el potencial químico (μ_c) y la densidad de los portadores de carga (n_c) para una capa de grafeno, está dada por la siguiente expresión

$$\mu_c \approx (\hbar^2 \pi v_F^2 n_c)^{1/2} .$$

Así, para los valores experimentales de n_c [35, 36] (mínimo 10^{12} cm^{-2} , máximo 10^{14} cm^{-2}) fácilmente se puede demostrar que el valor del potencial químico está acotado para el intervalo $0.12 \text{ eV} < \mu_c < 1.2 \text{ eV}$, de tal suerte que a partir de la modulación de éste, se

CAPÍTULO 2. LA FÓRMULA DE KUBO Y EL TRANSPORTE ELECTRÓNICO

2.2. CONDUCTIVIDAD SUPERFICIAL DE CARGA EN EL GRAFENO

puede elegir la región de frecuencia adecuada para la excitación de los modos de superficie en el grafeno según la polarización empleada (TM o TE). A este respecto, al analizar analíticamente los modos de superficie en una monocapa de grafeno, se encuentra un resultado teórico de suma importancia que involucra la parte imaginaria de la conductividad, σ_i . Dicho resultado establece la existencia de un nuevo tipo de modo de superficie en el grafeno asociado a la polarización TE, siendo este hecho algo novedoso respecto a lo que ocurre con los metales nobles. Adicionalmente, se puede probar que estos modos de superficie no pueden coexistir en la misma región de frecuencias puesto que el confinamiento de los campos asociados a la vibración de la carga requieren que la parte imaginaria de la conductividad sea positiva (negativa) para la polarización TM (TE) como se verá más adelante.

Capítulo 3

Método de la matriz de transferencia

El método de la matriz de transferencia es una herramienta práctica y efectiva para el estudio de las propiedades ópticas de los cristales fotónicos. Permite conocer de manera cuantitativa y exacta la forma de propagarse la luz dentro de una red fotónica. En este capítulo se deriva la matriz de transferencia para una red fotónica que incluye grafeno para ambas polarizaciones. Para este fin, se hará uso de dos aproximaciones válidas debido al rango de frecuencias empleado, esto es, se considerará al grafeno como un recubrimiento de espesor nulo y, por otro lado, como un medio con espesor y constante dieléctrica distinta de cero. Cabe mencionar que la forma de deducir la matriz de transferencia para ambas aproximaciones en este capítulo es distinta respecto a aquella que por lo general en la literatura se presenta [37]. Sin embargo, se puede demostrar que ambas formas son equivalentes y por lo tanto el método desarrollado aquí es totalmente válido al igual que los resultados que en el próximo capítulo se presentarán.

3.1. Grafeno como recubrimiento (espesor nulo)

Como es bien conocido, un cristal fotónico es un arreglo regular (intercalado) de materiales con diferente índice de refracción. Éstos se clasifican principalmente en tres categorías según la dirección en la que se van intercalando los materiales: unidimensionales (1D), bidimensionales (2D) y tridimensionales (3D) tal como se muestra en la figura (3.1). En este trabajo de tesis como fue mencionado anteriormente nos restringimos al estudio de las propiedades ópticas de un cristal fotónico unidimensional que incluye grafeno. En general, una onda electromagnética plana propagándose a lo largo de cierta dirección se expresa como

$$\vec{E} = E_j e^{i(\vec{k}_j \cdot \vec{r} - \omega t)} \hat{u},$$

$$\vec{H} = H_j e^{i(\vec{k}_j \cdot \vec{r} - \omega t)} \hat{u}.$$

Por otra parte, cuando estas ondas se propagan entre medios diferentes se cumple que

CAPÍTULO 3. MÉTODO DE LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA
3.1. GRAFENO COMO RECUBRIMIENTO (ESPESOR NULO)

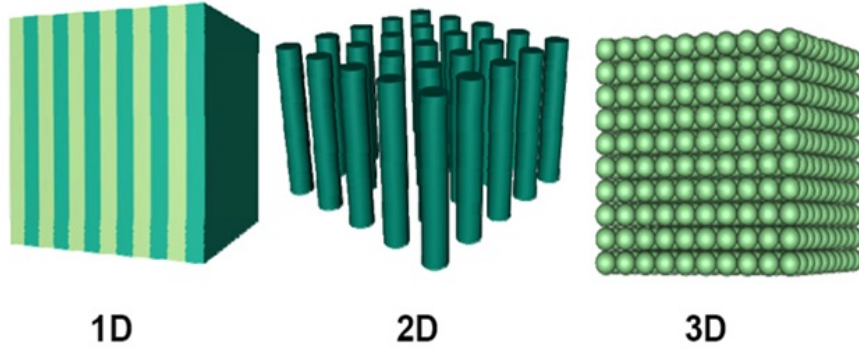


Figura 3.1: Figura de los distintos tipos de cristales fotónico según la dirección de periodicidad.

$$E^i e^{i(\vec{k}_i \cdot \vec{r} - \omega t)} \longrightarrow \text{onda incidente ,}$$

$$E^r e^{i(\vec{k}_r \cdot \vec{r} - \omega t)} \longrightarrow \text{onda reflejada ,}$$

$$E^t e^{i(\vec{k}_t \cdot \vec{r} - \omega t)} \longrightarrow \text{onda transmitida ,}$$

en donde E^i (E^r) representa la amplitud de la onda propagada en el medio inicial hacia la derecha -onda incidente- (izquierda -onda reflejada-) y E^t representa la amplitud de la onda propagada en el siguiente medio hacia la derecha -onda transmitida-. La esencia de la matriz de transferencia consiste en relacionar los campos presentes en ambos lados de una interface por medio de una matriz específica la cual se obtiene al aplicar las condiciones de frontera de los campos electromagnéticos (en donde las componentes tangenciales del campo eléctrico y las componentes normales del campo magnético se conservan) según el numero de interfaces existentes en el cristal fotónico. A partir de la matriz de transferencia se puede saber con precisión cómo se transmite o cómo se refleja la onda electromagnética en dicho cristal, además de conocer las regiones permitidas de propagación (las estructuras de bandas), la forma de los campos en cada medio, al igual que la existencia de plasmones de superficie. Para el caso particular en donde al grafeno se le considera como una superficie infinitesimalmente delgada (espesor nulo) e isotrópica, caracterizada por una densidad superficial de carga, σ , las condiciones de frontera estarán dictadas por las siguientes relaciones [38]

$$\begin{aligned} E_{2,\alpha} - E_{1,\alpha} &= 0, \quad \alpha = x, y \\ H_{2,x} - H_{1,x} &= \sigma E_y, \quad \text{Polarización TE} \\ H_{2,y} - H_{1,y} &= -\sigma E_x, \quad \text{Polarización TM} \end{aligned} \tag{3.1}$$

CAPÍTULO 3. MÉTODO DE LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA

3.1. GRAFENO COMO RECUBRIMIENTO (ESPESOR NULO)

Es decir, a partir de las condiciones de frontera referentes a las componentes tangenciales de los campos se obtiene la matriz de transferencia que se emplea para la descripción de las propiedades ópticas de los cristales fotónicos. Cabe mencionar que el formalismo de la matriz de transferencia es el mismo independientemente de la polarización de la onda electromagnética empleada, la única diferencia estriba en la expresión de la impedancia, Y , que relaciona al campo magnético con el campo eléctrico como se ve más adelante. Entonces, a partir de esto último, para el desarrollo de dicha matriz se hará uso de una onda incidente con polarización TM solamente, obteniéndose un resultado similar si se emplea una onda incidente con polarización TE. Por otro lado, en todos los resultados presentes en este trabajo de tesis las unidades empleadas son las dictadas por el Sistema Internacional. De acuerdo a la figura (3.2), los campos presentes en cada medio son de la

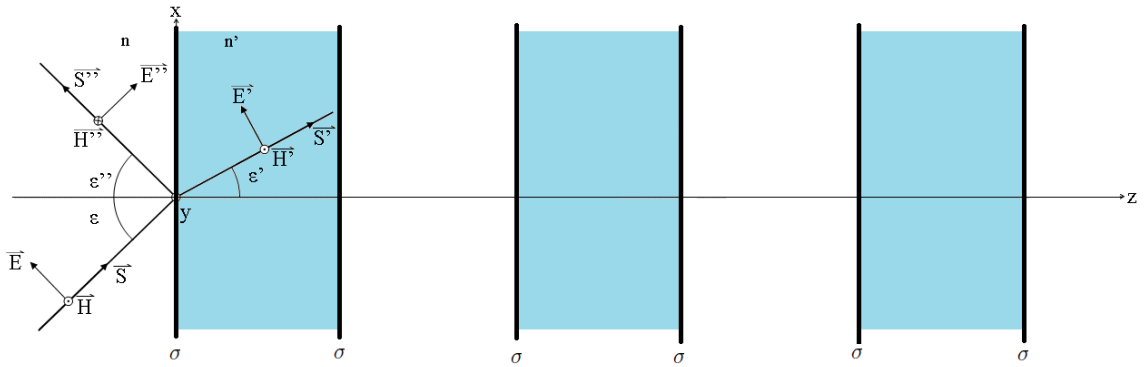


Figura 3.2: Cristal fotónico unidimensional con recubrimiento de grafeno. La onda incidente posee polarización TM.

siguiente forma

$$\begin{cases} \left(E_{xj}^i \hat{i} + E_{zj}^i \hat{k} \right) e^{i(\vec{k}_j \cdot \vec{r} - \omega t)} + \left(E_{xj}^r \hat{i} + E_{zj}^r \hat{k} \right) e^{-i(\vec{k}_j \cdot \vec{r} + \omega t)} \\ H_{yj}^i \hat{j} e^{i(\vec{k}_j \cdot \vec{r} - \omega t)} + H_{yj}^r \hat{j} e^{-i(\vec{k}_j \cdot \vec{r} + \omega t)}. \end{cases}$$

La relación de las componentes tangenciales de los campos electromagnéticos, para la polarización TM, surge de la siguiente ecuación de Maxwell

$$\nabla \times \vec{H} = -i\varepsilon\omega\vec{E}.$$

Vale la pena mencionar que para el caso de la polarización TE, la ecuación de Maxwell de donde surge la relación entre las componentes tangenciales de los campos es la siguiente

$$\nabla \times \vec{E} = i\mu\omega\vec{H}.$$

Después de realizar el álgebra correspondiente a partir de las dos ecuaciones anteriores se obtiene justamente la relación entre las componentes tangenciales de los campos en términos de las impedancias según la polarización empleada

$$\begin{aligned} H_{yj}^{i/t} &= Y_j^p E_{xj}^{i/t}, & H_{yj}^r &= -Y_j^p E_{xj}^r, \\ H_{xj}^{i/t} &= -Y_j^s E_{yj}^{i/t}, & H_{xj}^r &= Y_j^s E_{yj}^r, \end{aligned} \tag{3.2}$$

CAPÍTULO 3. MÉTODO DE LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA

3.1. GRAFENO COMO RECUBRIMIENTO (ESPESOR NULO)

en donde los subíndices i, t, r hacen referencia a una onda incidente, transmitida y reflejada, respectivamente. De igual forma, Y_j^p y Y_j^s definen a las impedancias asociadas a la polarización TM y TE, respectivamente, cuyas expresiones se muestran a continuación

$$Y_j^p = \frac{\omega \epsilon_j}{k_{jz}} = \frac{n_j^2}{\eta_0 \sqrt{n_j^2 - (n_i \sin \theta_i)^2}}, \quad (3.3)$$

$$Y_j^s = \frac{k_{jz}}{\omega \mu_j} = \frac{\sqrt{n_j^2 - (n_i \sin \theta_i)^2}}{\eta_0},$$

en donde, $k_{jz} = \frac{\omega}{c} \sqrt{n_j^2 - (n_i \sin \theta_i)^2}$, n_i es el índice de refracción del medio incidente, θ_i es el ángulo de incidencia, n_j es el índice de refracción del j -ésimo medio y $\eta_0 = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0}$ es la impedancia del vacío cuyo valor exacto es $120\pi \Omega$. Para conseguir una expresión analítica de la matriz de transferencia tomando al grafeno como un recubrimiento, se comenzará con el caso más sencillo de una monocapa de éste para posteriormente ir aumentando el número de recubrimientos de tal manera que se logre observar un comportamiento bien definido a partir del cual se podrá obtener finalmente la matriz de transferencia en dicha aproximación. Consideremos una interface de grafeno tal y como se ilustra en la figura (3.3). Para $z < 0$ las componentes tangenciales de los campos están dados por

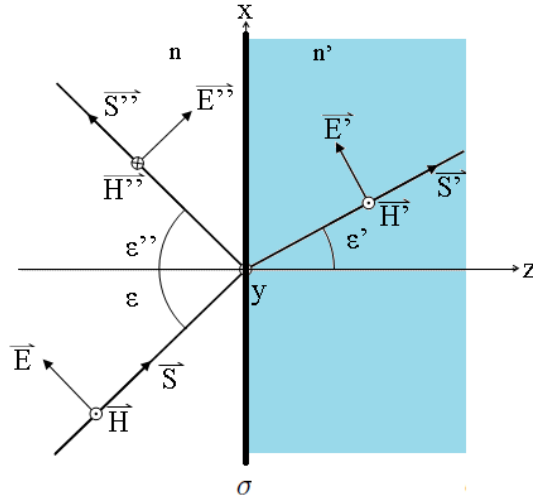


Figura 3.3: Monocapa de grafeno entre dos medios dieléctricos.

$$\begin{cases} E_{x1}^i e^{ik_{1z} \cdot z} + E_{x1}^r e^{-ik_{1z} \cdot z}, \\ H_{y1}^i e^{ik_{1z} \cdot z} + H_{y1}^r e^{-ik_{1z} \cdot z}. \end{cases}$$

Mientras que para $z > 0$ los campos están dados por

$$\begin{cases} E_{x2}^t e^{ik_{2z} \cdot z}, \\ H_{y2}^t e^{ik_{2z} \cdot z}. \end{cases}$$

CAPÍTULO 3. MÉTODO DE LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA
3.1. GRAFENO COMO RECUBRIMIENTO (ESPESOR NULO)

Antes de continuar, es importante mencionar que la parte armónica de los campos se omite sólo por convención ya que al aplicar las condiciones de frontera dicho factor se cancela, de ahí que es indistinto expresarla o no hacerlo. En los desarrollos posteriores se sigue el mismo criterio y la parte armónica no se escribirá. Aplicando las condiciones de frontera (3.1) en $z = 0$ se tiene lo siguiente

$$\begin{aligned} E_{x2}^t - (E_{x1}^i + E_{x1}^r) &= 0, \\ H_{y2}^t - (H_{y1}^i + H_{y1}^r) &= -\sigma E_{x2}^t. \end{aligned}$$

Haciendo uso de la ecuación (3.2) y realizando un poco de álgebra se obtiene

$$\begin{aligned} E_{x1}^i + E_{x1}^r &= E_{x2}^t, \\ Y_1 (E_{x1}^i - E_{x1}^r) &= (Y_2 + \sigma) E_{x2}^t. \end{aligned}$$

Esto último se puede expresar de manera matricial como sigue

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} E_{x1}^i \\ E_{x1}^r \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_1 & -Y_1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_2 + \sigma & -Y_2 + \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{x2}^t \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \mathbb{Y}_1^{-1} \sigma_2 \begin{pmatrix} E_{x2}^t \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\begin{pmatrix} E_{x1}^i \\ E_{x1}^r \end{pmatrix} = \mathbb{Y}_1^{-1} \sigma_2 \begin{pmatrix} E_{x2}^t \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Consideremos ahora dos interfaces de grafeno tal y como se ilustra en la figura (3.4). Para

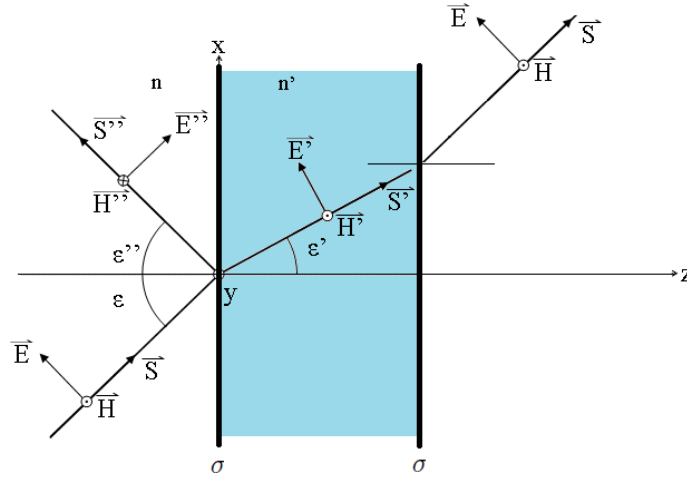


Figura 3.4: Bicapa de grafeno.

$z < 0$ los campos están dados por

$$\begin{cases} E_{x1}^i e^{ik_{1z} \cdot z} + E_{x1}^r e^{-ik_{1z} \cdot z}, \\ H_{y1}^i e^{ik_{1z} \cdot z} + H_{y1}^r e^{-ik_{1z} \cdot z}. \end{cases}$$

CAPÍTULO 3. MÉTODO DE LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA
3.1. GRAFENO COMO RECUBRIMIENTO (ESPESOR NULO)

Para $0 < z < d$ los campos están dados por

$$\begin{cases} E_{x2}^i e^{ik_{2z} \cdot z} + E_{x2}^r e^{-ik_{2z} \cdot z}, \\ H_{y2}^i e^{ik_{2z} \cdot z} + H_{y2}^r e^{-ik_{2z} \cdot z}. \end{cases}$$

Mientras que para $z > d$ los campos están dados por

$$\begin{cases} E_{x3}^t e^{ik_{3z} \cdot (z-d)}, \\ H_{y3}^t e^{ik_{3z} \cdot (z-d)}. \end{cases}$$

Aplicando las condiciones de frontera (3.1) en $z = 0$ se tiene lo siguiente

$$\begin{aligned} (E_{x2}^i + E_{x2}^r) - (E_{x1}^i + E_{x1}^r) &= 0, \\ (H_{y2}^i + H_{y2}^r) - (H_{y1}^i + H_{y1}^r) &= -\sigma (E_{x2}^i + E_{x2}^r). \end{aligned}$$

Haciendo uso una vez más de la ecuación (3.2) y realizando un poco de álgebra se obtiene

$$\begin{aligned} E_{x1}^i + E_{x1}^r &= E_{x2}^i + E_{x2}^r, \\ Y_1 (E_{x1}^i - E_{x1}^r) &= (Y_2 + \sigma) E_{x2}^i + (-Y_2 + \sigma) E_{x2}^r. \end{aligned}$$

Expresando esto último de manera matricial se tiene que

$$\begin{pmatrix} E_{x1}^i \\ E_{x1}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_1 & -Y_1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_2 + \sigma & -Y_2 + \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{x2}^i \\ E_{x2}^r \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Aplicando una vez más las condiciones de frontera (3.1) en $z = d$ se tiene lo siguiente

$$\begin{aligned} E_{x3}^t - (E_{x2}^i e^{ik_{2z} \cdot d} + E_{x2}^r e^{-ik_{2z} \cdot d}) &= 0, \\ H_{y3}^t - (H_{y2}^i e^{ik_{2z} \cdot d} + H_{y2}^r e^{-ik_{2z} \cdot d}) &= -\sigma E_{x3}^t. \end{aligned}$$

Haciendo uso de nuevo de la ecuación (3.2) y un poco de álgebra se tiene que

$$\begin{aligned} E_{x2}^i e^{ik_{2z} \cdot d} + E_{x2}^r e^{-ik_{2z} \cdot d} &= E_{x3}^t, \\ Y_2 (E_{x2}^i e^{ik_{2z} \cdot d} - E_{x2}^r e^{-ik_{2z} \cdot d}) &= (Y_3 + \sigma) E_{x3}^t. \end{aligned}$$

Al igual que antes, expresando lo anterior en forma matricial se obtiene

$$\begin{pmatrix} E_{x2}^i \\ E_{x2}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_{2z} \cdot d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{2z} \cdot d} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_2 & -Y_2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_3 + \sigma & -Y_3 + \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{x3}^t \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Finalmente, sustituyendo (3.5) en (3.4) se tiene que

$$\begin{pmatrix} E_{x1}^i \\ E_{x1}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_1 & -Y_1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_2 + \sigma & -Y_2 + \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{2z} \cdot d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{2z} \cdot d} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_3 + \sigma & -Y_3 + \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{x3}^t \\ 0 \end{pmatrix}.$$

CAPÍTULO 3. MÉTODO DE LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA
3.1. GRAFENO COMO RECUBRIMIENTO (ESPESOR NULO)

Por lo tanto

$$\begin{pmatrix} E_{x1}^i \\ E_{x1}^r \end{pmatrix} = \mathbb{Y}_1^{-1} \sigma_2 \mathbb{D}_2^{-1} \mathbb{Y}_2^{-1} \sigma_3 \begin{pmatrix} E_{x3}^t \\ 0 \end{pmatrix}.$$

En general, para n interfaces de grafeno se tiene que

$$\begin{pmatrix} E_{x1}^i \\ E_{x1}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{x(n+1)}^t \\ 0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} E_{x(n+1)}^t \\ 0 \end{pmatrix},$$

en donde M es la matriz de transferencia asociada a nuestra estructura fotónica, dada por la siguiente ecuación

$$M = \prod_{j=1}^n \mathbb{D}_j^{-1} \mathbb{Y}_j^{-1} \sigma_{j+1}, \quad (3.6)$$

con

$$\begin{aligned} \mathbb{D}_1^{-1} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \mathbb{D}_j^{-1} &= \begin{pmatrix} e^{-ik_{z_j} \cdot d} & 0 \\ 0 & e^{ik_{z_j} \cdot d} \end{pmatrix} \quad \text{para } j \in \mathbb{N} \mid j \geq 2 \\ \mathbb{Y}_j^{-1} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{Y_j} \\ 1 & -\frac{1}{Y_j} \end{pmatrix} \\ \sigma_{j+1} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_{j+1} + \sigma & -Y_{j+1} + \sigma \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Un desarrollo similar tomando en cuenta ahora la polarización TE nos llevará a una expresión equivalente. La única diferencia entre ambas polarizaciones como fue mencionado anteriormente estriba en la definición de la impedancia Y_j . El conocer la expresión de la matriz M es la parte medular para el análisis de las propiedades ópticas de un cristal fotónico. Por ejemplo, la respuesta óptica del cristal fotónico medida a partir de los coeficientes de transmisión y reflexión se puede calcular a partir de dicha matriz como se observa en la siguiente ecuación

$$\begin{aligned} r &= \frac{E_{x1}^r}{E_{x1}^i} = \frac{m_{21}}{m_{11}} \\ t &= \frac{E_{x(n+1)}^t}{E_{x1}^i} = \frac{1}{m_{11}}. \end{aligned}$$

Nótese que a partir de las expresiones (3.3) se puede apreciar que para el caso particular de incidencia normal ($\theta_i = 0$) se cumple que $Y_j^p = Y_j^s$ y de ahí es fácil demostrar que la respuesta óptica es la misma independientemente de la polarización empleada. Este resultado es común dentro de la literatura y para el caso de una estructura fotónica que incluye grafeno se puede demostrar que también se cumple. De igual forma, las estructuras de bandas se calculan a partir de la matriz M y de aplicar el teorema de Bloch a la red fotónica. En el siguiente capítulo se profundizará más sobre las estructuras de bandas de estructuras fotónicas que incluyen grafeno. En resumen, para analizar las propiedades ópticas de estructuras periódicas construidas a base de grafeno considerando a éste como un recubrimiento de espesor nulo, se hará uso de la expresión (3.6).

3.2. Grafeno en la aproximación de espesor efectivo

Otra de las aproximaciones que será utilizada a lo largo de este trabajo de tesis consiste en considerar al grafeno como un medio con un espesor efectivo del orden de $t_g \sim 0.5 \text{ nm}$ y cuya constante dieléctrica está dictada por la siguiente relacion [39]

$$\varepsilon_g = 1 + i \frac{c\eta_0\sigma}{\omega t_g}.$$

Para obtener una expresión de la matriz de transferencia a partir de esta aproximación consideremos un sistema multicapa unidimensional como el que se muestra en la figura (3.5). Para este caso, las condiciones de frontera que relacionan las componentes tangenciales de los campos electromagnéticos aplicadas entre los medios están dadas por las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} E_{2,\alpha} - E_{1,\alpha} &= 0, \quad \alpha = x, y \\ H_{2,\beta} - H_{1,\beta} &= 0, \quad \beta = y, x. \end{aligned} \tag{3.7}$$

Al igual que antes, la expresión de la matriz de transferencia es la misma para ambas

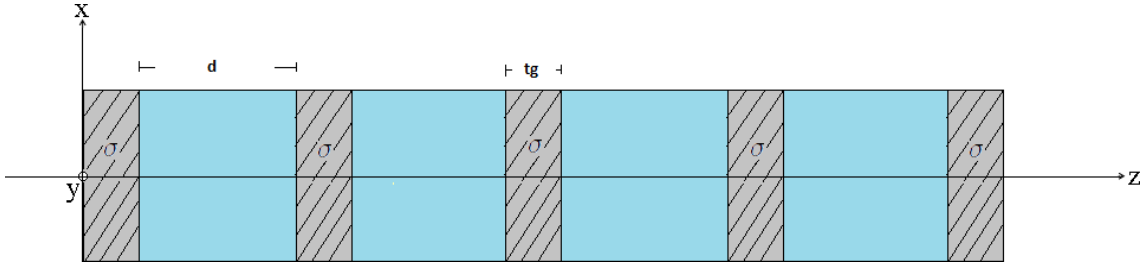


Figura 3.5: Cristal fotónico unidimensional con grafeno considerando a éste último en la aproximación de espesor efectivo.

polarizaciones, la única diferencia se encuentra en las impedencias. Entonces, tomando en cuenta la polarización TM, después de realizar un poco de álgebra similar al caso anterior aplicando ahora las condiciones de frontera (3.7) entre cada medio, se concluye que para una estructura fotónica de n medios en la aproximación de espesor efectivo, la relación entre el medio incidente y el transmitido está dada por la siguiente expresión

$$\begin{pmatrix} E_{x1}^i \\ E_{x1}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/(2Y_1) \\ 1/2 & -1/(2Y_1) \end{pmatrix} m_j \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_n & -Y_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{xn}^t \\ 0 \end{pmatrix},$$

en donde para $n = 2$

$$m_j = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

mientras que para $n \geq 3$, m_j está dada por el siguiente producto de matrices

$$m_j = \prod_{j=2}^{n-1} Y_j D_j Y_j^{-1},$$

CAPÍTULO 3. MÉTODO DE LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA
3.2. GRAFENO EN LA PROXIMACIÓN DE ESPESOR EFECTIVO

con

$$\mathbb{Y}_j = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_j & -Y_j \end{pmatrix}, \quad \mathbb{D}_j = \begin{pmatrix} e^{-ik_{jz}z'_j} & 0 \\ 0 & e^{ik_{jz}z'_j} \end{pmatrix},$$

siendo $z'_j = d$ o $z'_j = t_g$ según el medio considerado. Por lo tanto, en la aproximación de espesor efectivo la matriz de transferencia está dada por

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/(2Y_1) \\ 1/2 & -1/(2Y_1) \end{pmatrix} m_j \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_n & -Y_n \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Es importante mencionar que esta última aproximación del grafeno es únicamente válida para el rango de los terahertz mientras que la otra es válida para un rango de frecuencias mayor (naturalmente, como fue mencionado en la introducción los fenómenos asociados a los modos superficiales en el grafeno se perfilan precisamente en el rango de los terahertz). Por lo tanto, para el rango de los terahertz, dependiendo del sistema a analizar se puede utilizar una u otra aproximación de manera indistinta obteniendo los mismo resultados como se mostrará más adelante. Finalmente, es muy fácil observar que la diferencia entre una aproximación respecto de la otra, además de la validez en el rango de frecuencias, radica en el planteamiento de las condiciones de frontera impuesta en las interfaces de los medios que conforman el cristal fotónico de tal manera que el uso de una o de otra aproximación puede ser más fácil dependiendo de la configuración a analizar.

Capítulo 4

Propiedades ópticas en estructuras periódicas construidas a base de grafeno

En este capítulo se presenta la contribución de esta tesis. Se comienza por analizar la respuesta óptica del caso más sencillo (incidencia normal). Se discuten los rangos de existencia de plasmones TM y de los modos de superficie TE de manera analítica al igual que gráfica. Se analizan las estructuras de banda para ambas polarizaciones y su repercusión en la existencia de plasmones y finalmente se presentan los perfiles de los campos para una estructura periódica construida a base de grafeno sin defectos.

4.1. Incidencia normal

El caso más sencillo e inmediato por analizar es la propagación de la luz sobre un medio cuya incidencia es normal a la interface, pues como fue mencionado en el capítulo anterior para ambas polarizaciones la respuesta óptica es la misma. Consideremos una monocapa de grafeno inmersa en dos medios dieléctricos, esto es, la estructura dieléctrico - grafeno - dieléctrico. Para este caso, empleando las condiciones de frontera (3.1), es fácil demostrar que los coeficientes r y t se pueden escribir a partir de una expresión tipo Fresnel. Esto es

$$r = \frac{\eta_2 - \eta_1 - \eta_1 \eta_2 \eta_0 \sigma}{\eta_2 + \eta_1 + \eta_1 \eta_2 \eta_0 \sigma},$$
$$t = \frac{2\eta_2}{\eta_2 + \eta_1 + \eta_1 \eta_2 \eta_0 \sigma},$$

en donde $\eta_j = \sqrt{\frac{\mu_j}{\varepsilon_j}}$ y $\eta_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} = 120\pi \Omega$. La figura (4.1) muestra como caso particular el espectro de transmisión y reflexión de una monocapa de grafeno suspendida en aire con absorción y sin ésta. Como ha sido estudiado ampliamente en la literatura, para el caso de los metales, la presencia de absorción garantiza la existencia de radiación electromagnética que se propaga a lo largo de la interface metal - dieléctrico. En cuanto al grafeno, y por ser un semimetal, es de esperarse que suceda lo mismo de ahí que la presencia de absorción en el grafeno es de suma importancia al momento de excitar modos de superficie en ambas

**CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS
PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO**
4.1. INCIDENCIA NORMAL

polarizaciones. Ahora, consideremos el sistema aire - grafeno - dieléctrico - grafeno - aire.

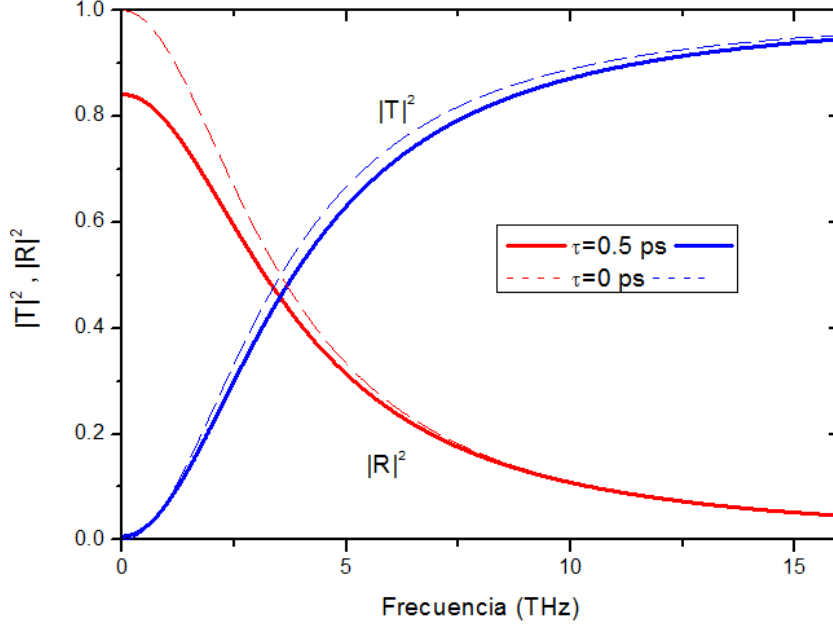


Figura 4.1: Espectro de reflexión y transmisión a incidencia normal para una capa de grafeno suspendida en aire con absorción y sin ésta, para $T = 300 K$, $\mu_c = 1 eV$

Al igual que en el caso anterior, los coeficientes r y t se pueden escribir a partir de una expresión tipo fresnel

$$r = \frac{r_{12} + \left[\frac{\eta_1}{\eta_2} + \left(1 + \frac{\eta_1}{\eta_2} \right) r_{12} \right] r_{23} e^{2ik_{2z}d}}{1 + [\eta_1 \eta_0 \sigma + (1 + \eta_1 \eta_0 \sigma) r_{12}] r_{23} e^{2ik_{2z}d}},$$

$$t = \frac{t_{12} t_{23} e^{ik_{2z}d}}{1 + [\eta_1 \eta_0 \sigma + (1 + \eta_1 \eta_0 \sigma) r_{12}] r_{23} e^{2ik_{2z}d}},$$

en donde

$$r_{12} = \frac{\eta_2 - \eta_1 - \eta_1 \eta_2 \eta_0 \sigma}{\eta_2 + \eta_1 + \eta_1 \eta_2 \eta_0 \sigma},$$

$$r_{23} = \frac{\eta_3 - \eta_2 - \eta_2 \eta_3 \eta_0 \sigma}{\eta_3 + \eta_2 + \eta_2 \eta_3 \eta_0 \sigma},$$

$$t_{12} = \frac{2\eta_2}{\eta_2 + \eta_1 + \eta_1 \eta_2 \eta_0 \sigma},$$

$$t_{23} = \frac{2\eta_3}{\eta_3 + \eta_2 + \eta_2 \eta_3 \eta_0 \sigma},$$

$$k_{2z} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_2^r \mu_2^r}.$$

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.2. INCIDENCIA OBLICUA

La figura (4.2) muestra el espectro de transmisión del sistema mencionado previamente para un sustrato de vidrio ($\epsilon_r = 2.56$) de distintos espesores con recubrimiento de grafeno en ambas caras. Se puede observar que conforme la distancia de separación d del sustrato

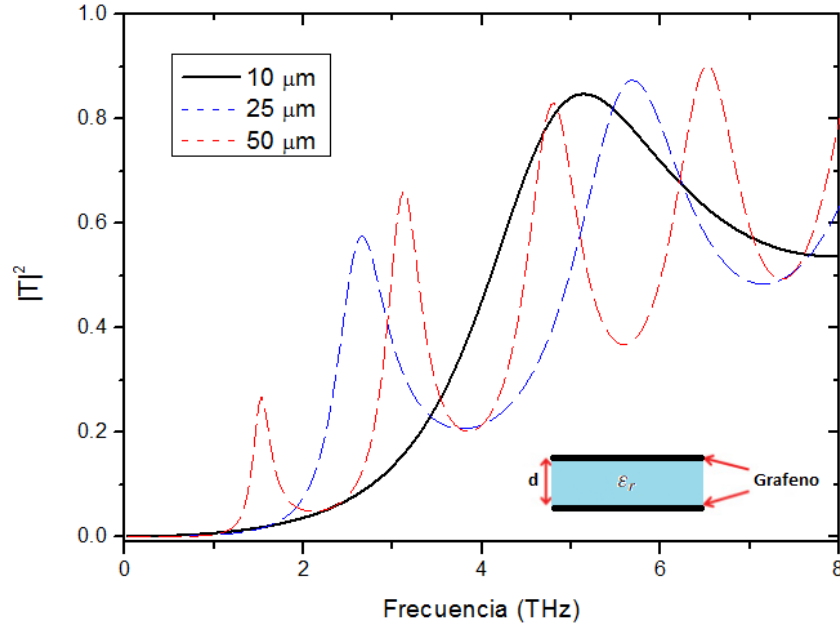


Figura 4.2: Espectro de transmisión a incidencia normal para una bicapa de grafeno, para $T = 300\text{ K}$, $\mu_c = 1\text{ eV}$ y $\tau = 0.5\text{ ps}$

aumenta, existe resonancia dentro de éste. Cabe mencionar que cuando la onda incidente y por ende la resonancia dentro del dieléctrico es evanescente, la distancia de separación d es importante al momento de excitar modos de superficie sobre el grafeno, o para lograr efectos de absorción perfecta, entre otros efectos, tal y como se verá más adelante. Ahora consideremos cuatro capas y ocho capas de grafeno alternadas por el sustrato, como es evidente para este caso ya no es posible obtener una expresión analítica para los coeficientes de transmisión y reflexión así que se hace uso del método de la matriz de transferencia desarrollado en el capítulo anterior. La figura (4.3) muestra el espectro de transmisión de dicho sistema. En esta figura se puede observar la existencia de un gap fotónico el cual no cambia de posición sustancialmente al incrementar el número de capas de grafeno. Este gap, aunque no está bien definido, está asociado a la estructura de bandas del sistema multicapa dieléctrico-grafeno como más adelante será analizado. A este respecto, para el caso particular del grafeno, se puede demostrar que cuando el número de recubrimientos de éste es del orden de 10 capas, la estructura de bandas se observa en los espectros de reflexión y transmisión debido a que los gaps quedan bien definidos.

4.2. Incidencia oblicua

Después de analizar el comportamiento del grafeno a incidencia normal, el siguiente paso es analizar ahora su comportamiento a incidencia oblicua. Como primera propiedad

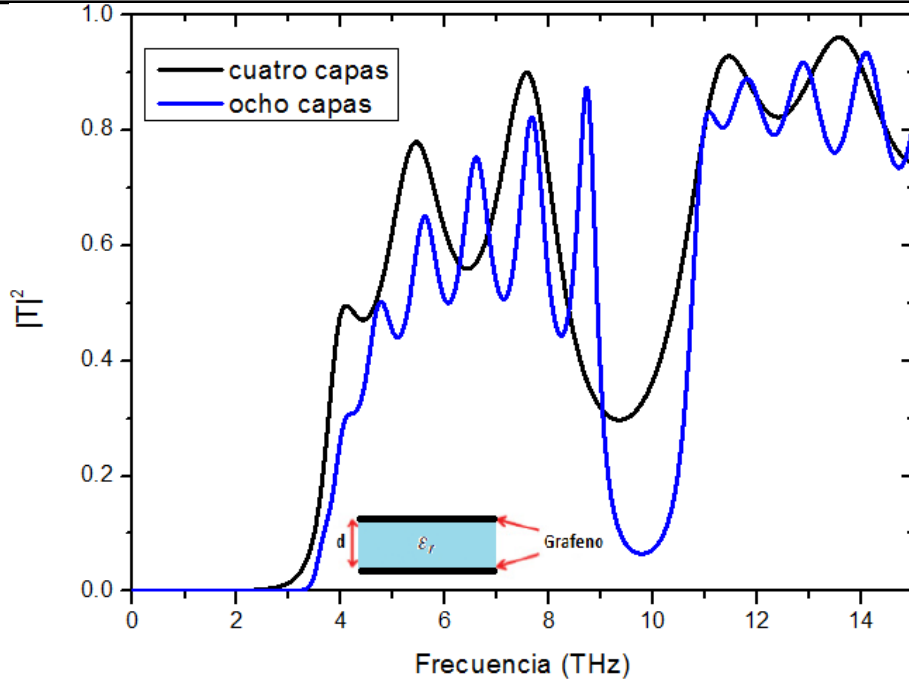


Figura 4.3: Espectro de transmisión a incidencia normal para cuatro y ocho capas de grafeno, para $T = 300 K$, $\mu_c = 1 eV$ y $\tau = 0.5 ps$

que surge, entre otras, al hacer incidir luz con un ángulo distinto de cero es la posibilidad de encontrar y excitar modos de superficie sobre el grafeno. A este respecto, como fue mencionado en la capítulo 2, debido a las propiedades eléctricas del grafeno (conductividad superficial de carga) surgen rangos de frecuencia específicos en donde existen estos modos de superficie. Estos rangos de frecuencia están asociados al tipo de polarización de la luz incidente y se demuestra que los modos de superficie asociados a la polarización TE están suprimidos respecto a los modos TM, repercutiendo en la forma de excitarlos mediante la técnica ATR. Se analiza de manera inicial el sistema más simple que consiste de una monocapa de grafeno inmersa en aire, se obtienen las relaciones de dispersión electromagnética para ambas polarizaciones y su respuesta óptica a partir de la configuración de Otto tal y como se muestra en la figura (4.4). Finalmente se analiza el sistema conformado por dos capas de grafeno al igual que su respuesta óptica mediante la misma configuración.

4.2.1. Modos de superficie (Plasmones) TM

Consideremos una onda evanescente en la dirección de propagación. Entre otras cosas, se debe cumplir que la componente del vector de onda tangente a la interface, q_x , debe ser complejo, es decir, $q_x^r + iq_x^i$. Para obtener la relación de dispersión electromagnética de una capa de grafeno inmersa en dos medios dieléctricos distintos, situando al grafeno en $z = 0$, se hace un procedimiento similar al que se realizó en el capítulo 3 en lo referente a la obtención de la expresión de la matriz de transferencia (se aplican las condiciones de frontera (3.1) y se realiza el cálculo sólo para la polarización TM, un desarrollo análogo

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.2. INCIDENCIA OBLICUA

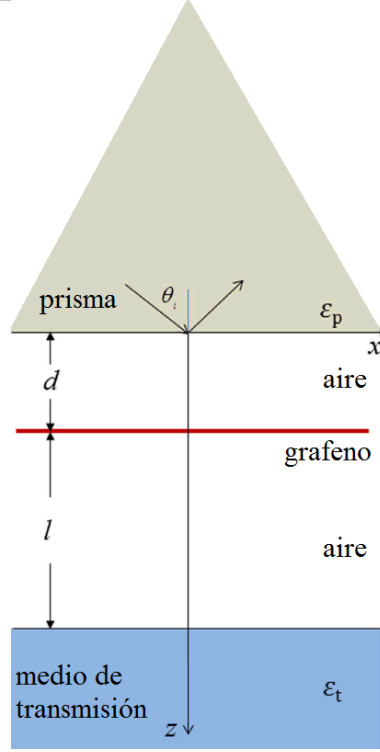


Figura 4.4: Configuración empleada en el estudio de la excitación de los modos superficiales en el grafeno. Nótese que la configuración de Otto se obtiene haciendo $l = 0$ y para la excitación de plasmones en ambas polarizaciones se toma $n_t = 1$.

sucede para la polarización TE), sin embargo, en este caso, las componentes tangenciales de los campos electromagnéticos para $z < 0$ están dados por

$$\begin{cases} E_{x1}^i e^{iq_x \cdot x} e^{-q_{1z}^i \cdot z} + E_{x1}^r e^{-iq_x \cdot x} e^{q_{1z}^r \cdot z}, \\ H_{y1}^i e^{iq_x \cdot x} e^{-q_{1z}^i \cdot z} + H_{y1}^r e^{-iq_x \cdot x} e^{q_{1z}^r \cdot z}. \end{cases}$$

Mientras que para $z > 0$ los campos están dados por

$$\begin{cases} E_{x2}^t e^{iq_x \cdot x} e^{-q_{2z}^t \cdot z}, \\ H_{y2}^t e^{iq_x \cdot x} e^{-q_{2z}^t \cdot z}, \end{cases}$$

en donde se ocupa de nuevo la convención de los superíndices i, r, t y la parte armónica también se omite por la razones anteriormente mencionadas. Una vez más de la ecuación de Maxwell

$$\nabla \times \vec{H} = -i\varepsilon\omega\vec{E},$$

se obtiene la relación entre las componentes tangenciales de los campos electromagnéticos evanescentes

$$H_y^i = \frac{\varepsilon_1 \omega}{iq_{1z}^i} E_x^i, \quad H_y^r = -\frac{\varepsilon_1 \omega}{iq_{1z}^r} E_x^r, \quad H_y^t = \frac{\varepsilon_2 \omega}{iq_{2z}^t} E_x^t.$$

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.2. INCIDENCIA OBLICUA

Aplicando las condiciones de frontera (3.1) en $z = 0$ y haciendo uso de las relaciones anteriores se llega al siguiente par de ecuaciones

$$E_x^i + E_x^r = E_x^t,$$

$$\frac{\varepsilon_1}{q_{1z}^i} E_x^i - \frac{\varepsilon_1}{q_{1z}^r} E_x^r = \left(\frac{\varepsilon_2}{q_{2z}^t} + \frac{i\sigma}{\omega} \right) E_x^t.$$

Dividiendo la segunda ecuación con la primera y realizando un poco de álgebra, se llega a la siguiente expresión

$$r = \frac{E_x^r}{E_x^i} = \frac{\frac{\varepsilon_1}{q_{1z}^i} - \frac{\varepsilon_2}{q_{2z}^t} - \frac{i\sigma}{\omega}}{\frac{\varepsilon_1}{q_{1z}^r} + \frac{\varepsilon_2}{q_{2z}^t} + \frac{i\sigma}{\omega}},$$

Luego, para que exista propagación sobre la interface, necesariamente se debe cumplir que

$$\frac{\varepsilon_1}{q_{1z}^r} + \frac{\varepsilon_2}{q_{2z}^t} + \frac{i\sigma}{\omega} = 0.$$

Finalmente, recordando que $\varepsilon_j = \varepsilon_0 \varepsilon_j^r$, $c\varepsilon_0 = 1/\eta_0$ y reacomodando términos, se llega a la relación de dispersión electromagnética más general de una capa de grafeno inmersa en dos medios dieléctricos distintos para la polarización TM

$$\frac{\varepsilon_1^r}{q_{1z}} + \frac{\varepsilon_2^r}{q_{2z}} + \frac{ic\eta_0\sigma}{\omega} = 0, \quad (4.1)$$

en donde c es la velocidad de luz en el vacío, $q_{jz}^2 = q_x^2 - q_j^2$, $q_j = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_j^r \mu_j^r}$ y $\eta_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} = 120\pi \Omega$. Como se mencionó anteriormente, en esta ocasión se estudia el sistema más sencillo que consiste en una monocapa inmersa en aire. Se puede observar de manera clara que para este caso $\varepsilon_1^r = \varepsilon_2^r = \mu_1^r = \mu_2^r = 1$, $q_{1z}^2 = q_{2z}^2 = q_z^2$ y $q_j = \frac{\omega}{c}$, lo cual reduce significativamente la ecuación (4.1) a [40]

$$1 - \frac{2i\omega}{c\eta_0\sigma q_z} = 0. \quad (4.2)$$

A partir de esta última ecuación, recordando que la componente tangencial del vector de propagación de la onda incidente, q_x , al igual que la conductividad son complejas, mediante un poco de álgebra elemental, se llega a la siguiente expresión

$$q_x^{r2} - q_x^{i2} + 2iq_x^r q_x^i = \frac{\omega^2}{c^2} \left[1 - \frac{4}{\eta_0^2 |\sigma|^4} (\sigma_r^2 - \sigma_i^2 - 2i\sigma_r \sigma_i) \right].$$

Luego, al comparar la parte imaginaria de ambos lados de la expresión anterior, se puede observar lo siguiente

$$q_x^r q_x^i = \left(\frac{2\omega}{\eta_0 c |\sigma|^2} \right)^2 \sigma_r \sigma_i.$$

Por último, si se considera que el vector de propagación q_x está asociado a una onda evanescente propagándose a lo largo del eje x positivo, se debe cumplir que $q_x^r, q_x^i > 0$. De igual forma, de la figura (2.1) se puede observar que $\sigma_r \geq 0$, entonces en esta última expresión se debe cumplir necesariamente que $\sigma_i > 0$. Por lo tanto, los modos de superficie

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.2. INCIDENCIA OBLICUA

TM existen en la región donde $\sigma_i > 0$ (ver gráfica (2.1)). Posteriormente, retomando la ecuación (4.2), después de manipularla, se llega a la siguiente expresión

$$q_x^{TM} = \sqrt{1 - \left(\frac{2}{\eta_0\sigma}\right)^2}.$$

A partir de esta ecuación se obtiene la gráfica de la relación de dispersión electromagnética para la polarización TM. En la figura (4.5) se puede observar un rango de frecuencias amplio en donde existen los plasmones TM. Por otro lado, también se observa que la presencia de dopamiento químico permite aumentar este rango de frecuencia de tal forma que se puede sintonizar a voluntad la existencia de plasmones para frecuencias específicas a partir de la variación del potencial químico siendo esto consistente con lo analizado en el capítulo 2. Como fue mencionado anteriormente, mediante la técnica de ATR se estudia

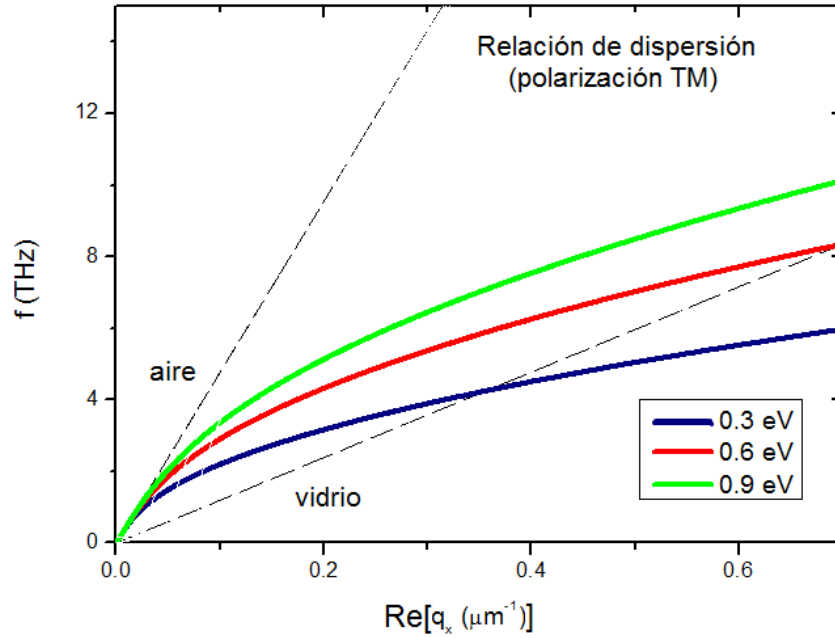


Figura 4.5: Relación de dispersión de una monocapa de grafeno inmersa en aire para distintos valores del potencial químico. Se puede observar que conforme varía el potencial químico, se incrementa la región de existencia de los plasmones TM. El tiempo de relajación para los tres casos es $\tau = 1ps$.

la respuesta óptica de una monocapa de grafeno inmersa en aire [41]. Para esto se hace uso de la configuración mostrada en la figura (4.4) la cual consiste en una monocapa de grafeno inmersa en dos capas de aire de espesores d y l . Éstas a su vez, se encuentran introducidas entre dos medios dieléctricos homogéneos caracterizados por sus respectivos índices de refracción, n_p (prisma) y n_t (medio de transmisión), respectivamente. Cabe resaltar que la configuración de Otto asociada a una capa de grafeno que yace sobre un medio dieléctrico (n_t) se obtiene cuando $l = 0$. En nuestro caso, para la excitación de los

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.2. INCIDENCIA OBLICUA

plasmones de superficie para ambas polarizaciones, el valor del medio de transmisión es $n_t = 1$ (aire) mientras que el valor del prisma es $n_p = 4$ (germanio). Como es bien sabido, el ángulo crítico está dado por la siguiente expresión

$$\theta_c = \arcsin\left(\frac{n_t}{n_p}\right).$$

De acuerdo a los valores de los índices de refracción, el valor del ángulo crítico es $\theta_c \approx 14.477512^\circ$ de tal manera que después de este valor se garantizaría la Reflección Total Interna (Atenuada) y todo mínimo de reflectividad observado posee naturaleza plasmónica. Vale la pena mencionar que el arreglo de la figura (4.4) también permite estudiar la pérdida de energía a través del prisma bajo la condición de $n_p = n_t$ y al seleccionar los valores apropiados de d y l . De la relación de dispersión electromagnética mostrada en la figura (4.5) se puede observar que para la curva caracterizada por un potencial químico de 0.8 eV, tomando los valores pertenecientes a dicha curva: $f = 5$ THz y $Re[q_x] = 0.2131 \mu m^{-1}$ se tiene un ángulo de 30.5° . Esto es fácil de calcular ya que como es bien sabido la componente del vector de onda paralela a la interface se conserva y está dada por $q_x = \frac{\omega}{c} n_p \sin(\theta)$, siendo $\omega = 2\pi f$. A partir de esto, en la gráfica (4.6) se muestra el espectro de reflexión

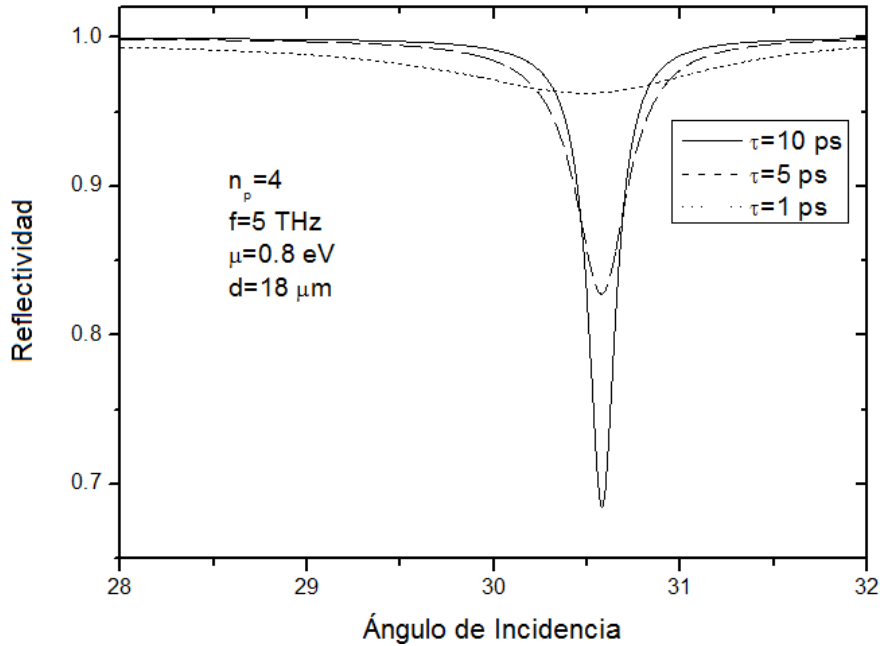


Figura 4.6: Gráfica de la reflectividad para distintos valores del tiempo de relajación τ . Como era de esperarse, conforme el tiempo de relajación aumenta, el ancho del mínimo se hace más angosto sin embargo la posición de éste permanece fijo lo cual es otro indicio de la naturaleza plasmónica del mínimo.

para la configuración de Otto previamente mencionada considerando el potencial químico de $\mu = 0.8$ eV y una distancia de separación entre el prisma y la monocapa de grafeno de $d = 18 \mu m$. La posición del mínimo coincide justamente con el ángulo previamente calculado (30.5°), de tal manera que este mínimo está asociado a un plasmón de superficie. Adicionalmente, cuando la separación prisma-grafeno cambia de $15 \mu m$ a $25 \mu m$, la

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.2. INCIDENCIA OBLICUA

variación angular no cambia, es decir, se logra observar una estabilidad del mínimo en (30.5°) para una cambio en la separación de $10 \mu m$. En otras palabras, una vez excitado el plasmón, éste permanece estable para un rango de separación de $10 \mu m$ en donde se puede observar que entre más corta es la distancia de separación más prolongado es el mínimo de reflexión [41]. Adicionalmente, también en la figura (4.6) se puede observar que conforme el tiempo de relajación cambia en un orden de magnitud, la posición del mínimo de reflexión cambia en menos de un grado, de tal manera que prácticamente permanece fijo sin alguna variación angular considerable. Esto es otro indicio de la naturaleza plasmónica de dicho mínimo. Por otro lado, en la figura (4.7) se muestra el espectro de

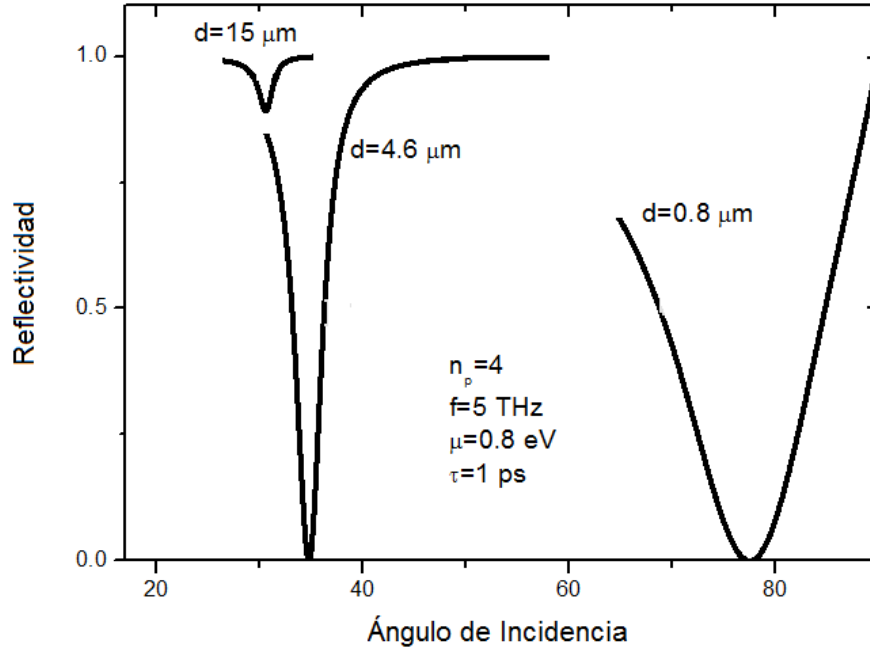


Figura 4.7: Gráfica de la reflectividad para distintos valores del ancho de la capa de aire. El primer mínimo de reflexión ($d = 15 \mu m$) es totalmente de naturaleza plasmónica. Los otros dos mínimos están relacionados con efectos de interferencia así como a efectos de absorción del grafeno

reflexión para tres espesores particulares de la capa de aire, para $\mu = 0.8 \text{ eV}$ y $f = 5 \text{ THz}$. El primer mínimo ($d = 15 \mu m$) está asociado al plasmón de superficie. Los otros dos mínimos ($d = 4.6 \mu m$ y $d = 0.8 \mu m$) están relacionados con efectos de interferencia así como a pérdidas del grafeno. Esto se puede observar en lo siguiente, la posición angular (asociada a la frecuencia empleada) del primer mínimo es predicha por la respectiva relación de dispersión electromagnética, además de que se encuentra después del ángulo crítico. De ahí que dicho mínimo sea completamente de naturaleza plasmónica. Los otros dos mínimos no son predichos por la relación de dispersión y su posición angular también se encuentran después del ángulo crítico, sin embargo del coeficiente de reflexión calculado para la configuración de Otto,

$$r = -\frac{r_{12} + r_{23}e^{2ik_z d}}{1 + r_{12}r_{23}e^{2ik_z d}}, \quad (4.3)$$

**CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS
PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO**
4.2. INCIDENCIA OBLICUA

en donde

$$r_{12} = \frac{q_{z2}\varepsilon_p^r - q_{zp}}{q_{z2}\varepsilon_p^r + q_{zp}},$$

$$r_{23} = \frac{q_{zt} - q_{z2}\varepsilon_t^r - \frac{q_{z2}q_{zt}c\eta_0\sigma}{\omega}}{q_{zt} + q_{z2}\varepsilon_t^r + \frac{q_{z2}q_{zt}c\eta_0\sigma}{\omega}},$$

existen dos ángulos de incidencia para los cuales la condición de reflexión total no se cumple y el numerador de (4.3) cumple estrictamente que $r_{num} = 0$. De este último hecho se puede obtener fácilmente la distancia de separación entre el prisma y el grafeno en donde se observará un mínimo de reflexión perfecto sin ser netamente de naturaleza plasmónica la cual está dada por

$$d = \frac{1}{2iq_{z2}} \ln \left(-\frac{r_{12}}{r_{23}} \right). \quad (4.4)$$

Estos dos ángulos de incidencia están dados por 34.8° y 78° como se puede observar en la figura (4.7).

4.2.2. Modos de superficie (Plasmones) TE

Para este caso, se sigue un procedimiento similar al expuesto para la polarización TM, es decir, se considera una onda evanescente en la dirección de propagación de tal manera que la componente del vector de onda tangente a la interface, q_x , debe ser complejo. Naturalmente, para esta polarización las componentes tangenciales de los campos electromagnéticos para $z < 0$ están dados por

$$\begin{cases} E_{y1}^i e^{iq_x \cdot x} e^{-q_{1z}^i \cdot z} + E_{y1}^r e^{-iq_x \cdot x} e^{q_{1z}^r \cdot z}, \\ H_{x1}^i e^{iq_x \cdot x} e^{-q_{1z}^i \cdot z} + H_{x1}^r e^{-iq_x \cdot x} e^{q_{1z}^r \cdot z}. \end{cases}$$

Mientras que para $z > 0$ los campos están dados por

$$\begin{cases} E_{y2}^t e^{iq_x \cdot x} e^{-q_{2z}^t \cdot z}, \\ H_{x2}^t e^{iq_x \cdot x} e^{-q_{2z}^t \cdot z}, \end{cases}$$

en donde se ocupa de nuevo la convención de los superíndices i, r, t . Ahora, de la ecuación de Maxwell

$$\nabla \times \vec{E} = i\mu\omega \vec{H},$$

se obtiene la relación entre las componentes tangenciales de los campos electromagnéticos evanescentes

$$H_x^i = \frac{q_{1z}^i}{i\mu_1\omega} E_y^i, \quad H_x^r = -\frac{q_{1z}^r}{i\mu_1\omega} E_y^r, \quad H_x^t = \frac{q_{2z}^t}{i\mu_2\omega} E_y^t.$$

Aplicando las condiciones de frontera (3.1) en $z = 0$, haciendo uso de las relaciones anteriores y realizando el álgebra correspondiente se llega a la relación de dispersión para el

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.2. INCIDENCIA OBLICUA

caso más general de una capa de grafeno inmersa en dos medios dieléctricos distintos para la polarización TE

$$\frac{q_{1z}}{\mu_1^r} + \frac{q_{2z}}{\mu_2^r} + \frac{\omega\eta_0\sigma}{ic} = 0. \quad (4.5)$$

Debido a que se considera el sistema más sencillo (monocapa de grafeno inmerso en aire), la ecuación (4.5) se reduce significativamente a [40]

$$1 + \frac{2icq_z}{\omega\eta_0\sigma} = 0. \quad (4.6)$$

Una vez más, recordando que la componente tangencial del vector de propagación de la onda incidente, q_x , al igual que la conductividad son complejas, mediante un poco de álgebra elemental, se llega a la siguiente expresión

$$q_x^{r2} - q_x^{i2} + 2iq_x^r q_x^i = \frac{\omega^2}{c^2} \left[1 - \frac{\eta_0^2}{4} (\sigma_r^2 - \sigma_i^2 + 2i\sigma_r\sigma_i) \right].$$

Luego, al comparar la parte imaginaria de ambos lados de la expresión anterior, se puede

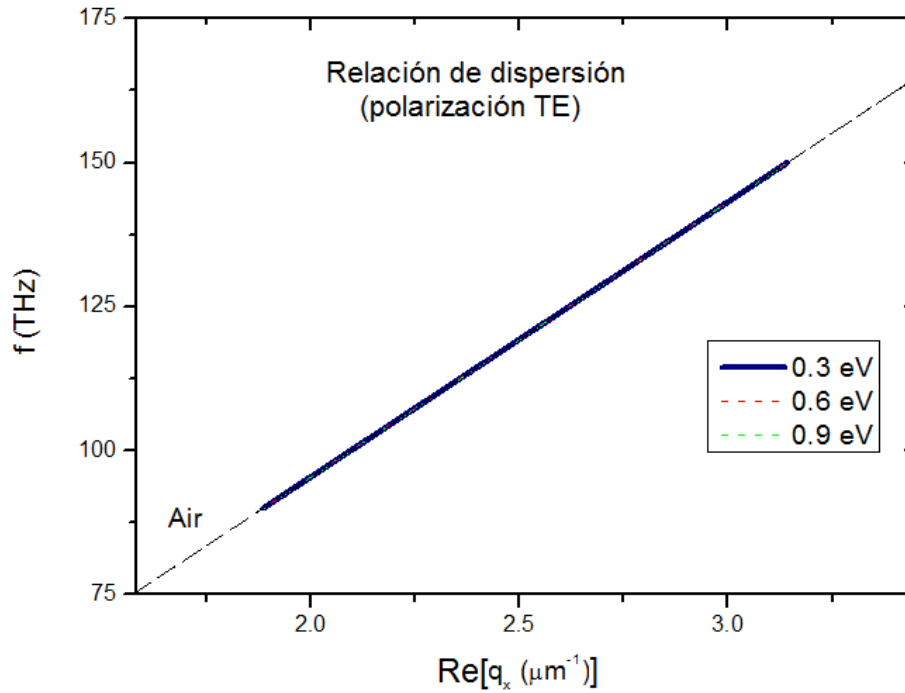


Figura 4.8: Relación de dispersión de una monocapa de grafeno inmersa en aire para distintos valores del potencial químico. Se puede observar que la relación de dispersión prácticamente coincide con la línea de luz del aire lo cual refleja que los "plasmones" TE están muy suprimidos. El tiempo de relajación para los tres casos es $\tau = 1ps$.

observar lo siguiente

$$q_x^r q_x^i = - \left(\frac{\omega\eta_0}{2c} \right)^2 \sigma_r \sigma_i.$$

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.2. INCIDENCIA OBLICUA

Por último, si se considera que el vector de propagación q_x está asociado a una onda evanescente propagándose a lo largo del eje x positivo, se debe cumplir que $q_x^r, q_x^i > 0$. De igual forma, de la figura (2.1) se puede observar que $\sigma_r \geq 0$, entonces en esta última expresión se debe cumplir necesariamente que $\sigma_i < 0$. Por lo tanto, los modos de superficie TE existen en la región donde $\sigma_i < 0$ (ver gráfica (2.1)). Posteriormente, retomando la ecuación (4.6), después de manipularla, se llega a la siguiente expresión

$$q_x^{TE} = \sqrt{1 - \left(\frac{\eta_0 \sigma}{2}\right)^2},$$

a partir de esta ecuación se obtiene la gráfica de la relación de dispersión para la polarización TE. En la figura (4.8) se puede observar que tan suprimidos están los modos de

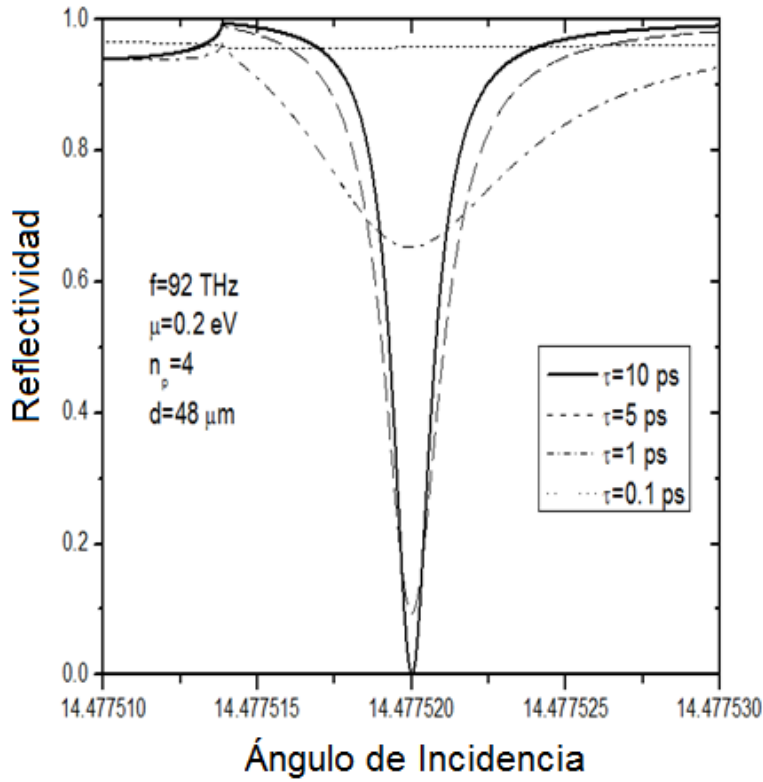


Figura 4.9: Gráfica de la reflectividad para distintos valores del tiempo de relajación τ . Como era de esperarse, conforme el tiempo de relajación aumenta, el ancho del mínimo se hace más angosto sin embargo la posición de éste permanece fijo lo cual es otro indicio de la naturaleza plasmónica del mínimo. Por otro lado, nótese que el valor del ángulo del mínimo refleja lo predicho por la relación de dispersión, posee un orden de magnitud de la cienmilésima parte lo cual muestra lo suprimido que pueden estar los "plasmones" TE respecto a los plasmones TM.

superficie TE al momento de excitarlos mediante la técnica de ATR. A este respecto, una vez más se hace uso de la configuración mostrada en la figura (4.4) en donde, como fue mencionado anteriormente, el medio de transmisión es aire ($n_t = 1$) y el valor del ángulo crítico es $\theta_c \approx 14.477512^\circ$. Estos modos superficiales son más difíciles de analizar a partir

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.2. INCIDENCIA OBLICUA

de su relación de dispersión y su estudio se complementa con el análisis de las bandas proyectadas asociadas a esta polarización. Sin embargo, en la figura (4.9) se muestra el espectro de reflexión para $f = 42$ THz, $d = 48 \mu\text{m}$ y $\mu = 0.2$ eV variando el tiempo de colisión, τ [42]. Se puede observar un mínimo de naturaleza plasmónica para una posición angular de 14.477520° apenas ocho cienmilésimas después del ángulo crítico, lo cual es muy sensible y diferente respecto a los plasmones TM. Adicionalmente, vale la pena comparar los parámetros estructurales entre ambas polarizaciones y notar que la frecuencia empleada es consistente con lo que se predice en la gráfica de la parte compleja de la conductividad. Por otro lado, de la distancia de separación se puede observar que los modos de superficie TE son modos extremadamente extendidos [42]. Finalmente, la figura (4.10) muestra el espectro de reflexión variando el ancho de la capa de aire. La posición angular de los mínimos de reflexión se encuentran dentro de un rango de las diezmilésimas. En resumen, se pueden

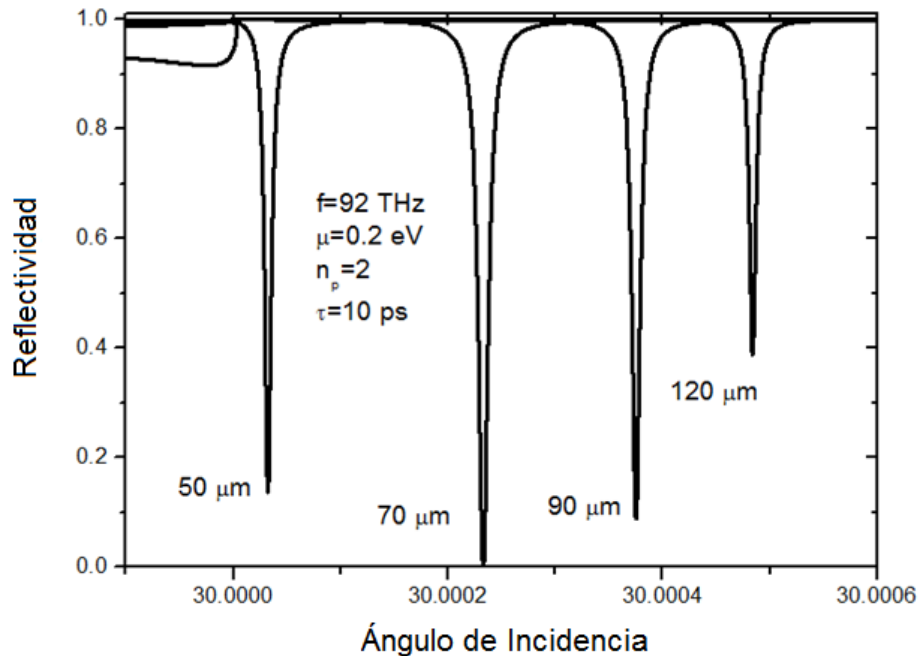


Figura 4.10: Gráfica de la reflectividad para distintos valores del ancho de la capa de aire.

resaltar tres aspectos relevantes en estos resultados. En primer lugar, del análisis teórico de la conductividad, σ , se demuestra la existencia de modos de superficie que se pueden propagar a través de la superficie del grafeno para los dos tipos de polarización TM y TE, siendo éste último un resultado de suma importancia y totalmente novedoso respecto a lo existente en la literatura para los metales. En segundo lugar, la técnica ATR es viable al momento de excitar estos modos de superficie. Para la polarización TM se observa un plasmón de superficie y dos mínimos de absorción perfecta para una frecuencia de 5 THz. El primero es consistente con la respectiva relación de dispersión electromagnética y se mantiene estable para un rango en la distancia de separación prisma-grafeno de $15 \mu\text{m}$ a $25 \mu\text{m}$ observando que entre más corta es la distancia de separación más prolongado es el mínimo de reflexión. Los otros dos no son predichos por la relación de dispersión y son

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.2. INCIDENCIA OBLICUA

resultado de efectos de interferencia y pérdidas en el grafeno los cuales dependen también de la distancia de separación prisma-grafeno y la cual se puede calcular a partir de la expresión (4.4). Para el caso de la polarización TE, se observa que la posición del mínimo en el espectro de reflexión tiene una variación angular del orden de la cienmilésima parte respecto al valor del ángulo crítico (θ_c) lo cual hace que el experimento a realizar sea minucioso y sensible. Finalmente, se puede apreciar que los plasmones de superficie TM existen en una región de bajas frecuencias ($\sigma_i > 0$) mientras que los modos de superficie TE existen en una región de altas frecuencias ($\sigma_i < 0$) evidenciando que estos modos de superficie no pueden coexistir en la misma región de frecuencias puesto que el confinamiento de los campos asociados a la vibración de la carga requieren que la parte imaginaria de la conductividad sea positiva (negativa) para la polarización TM (TE). Esto último es consistente con lo observado en la gráfica de la conductividad (2.1).

4.2.3. Bicapa de grafeno

Después de analizar el sistema más sencillo que consistió en una monocapa de grafeno, consideramos ahora el sistema conformado por dos capas de grafeno (cada grafeno puede ser caracterizado por poseer su propio potencial químico). Al igual que en el caso anterior, a partir de las ecuaciones de frontera (3.1) y de las mismas consideraciones impuestas sobre la onda evanescente que se propaga a lo largo de la dirección z, se deduce de manera analítica la relación de dispersión electromagnética asociada a la bicapa de grafeno para el caso más simple que consiste en el sistema aire-grafeno1-aire-grafeno2 para ambas polarizaciones. De igual forma, se propone la configuración de Otto para la excitación de los modos superficiales de ambas polarizaciones presentes ahora en el sistema bicapa de grafeno tomando de manera conveniente el dieléctrico introducido entre las dos capas de grafeno. La metodología a seguir en la deducción de la relación de dispersión electromagnética es similar a lo realizado en el caso de la monocapa. Así, después de emplear las condiciones de frontera impuestas a las componentes tangenciales de los campos electromagnéticos, hacer uso de la relación que surge entre dichas componentes a partir de las ecuaciones de Maxwell ya anteriormente empleadas y de realizar el álgebra correspondiente, como es de esperarse, la relación de dispersión más general para el caso de la bicapa de grafeno ya no es tan simple como se puede observar en la siguiente ecuación

$$e^{-2q_{2z}d} = \frac{\left(\frac{\varepsilon_1^r}{q_{1z}} - \frac{\varepsilon_2^r}{q_{2z}} + \frac{ic\eta_0\sigma}{\omega}\right) \left(-\frac{\varepsilon_2^r}{q_{2z}} + \frac{\varepsilon_3^r}{q_{3z}} + \frac{ic\eta_0\sigma}{\omega}\right)}{\left(\frac{\varepsilon_1^r}{q_{1z}} + \frac{\varepsilon_2^r}{q_{2z}} + \frac{ic\eta_0\sigma}{\omega}\right) \left(\frac{\varepsilon_2^r}{q_{2z}} + \frac{\varepsilon_3^r}{q_{3z}} + \frac{ic\eta_0\sigma}{\omega}\right)}. \quad (4.7)$$

La expresión (4.7) es la ecuación de dispersión más general para la polarización TM de una bicapa de grafeno inmersa en medios dieléctricos diferentes. Luego, para el caso más simple de la bicapa de grafeno inmersa en aire se cumple claramente que $\varepsilon_1^r = \varepsilon_2^r = \varepsilon_3^r = \mu_1^r = \mu_2^r = \mu_3^r = 1$ y $q_{1z}^2 = q_{2z}^2 = q_{3z}^2 = q_z^2$. Entonces, de lo anterior, la ecuación (4.7) se reduce significativamente a la siguiente expresión

$$e^{q_z d} = 1 - \frac{2i\omega}{c\eta_0\sigma q_z}. \quad (4.8)$$

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.2. INCIDENCIA OBLICUA

Por otro lado, la expresión (4.9) es la ecuación de dispersión más general para la polarización TE de una bicapa de grafeno inmersa en medios dieléctricos diferentes.

$$e^{-2q_{2z}d} = \frac{\left(\frac{q_{1z}}{\mu_1^r} - \frac{q_{2z}}{\mu_2^r} + \frac{\omega\eta_0\sigma}{ic}\right) \left(-\frac{q_{2z}}{\mu_2^r} + \frac{q_{3z}}{\mu_3^r} + \frac{\omega\eta_0\sigma}{ic}\right)}{\left(\frac{q_{1z}}{\mu_1^r} + \frac{q_{2z}}{\mu_2^r} + \frac{\omega\eta_0\sigma}{ic}\right) \left(\frac{q_{2z}}{\mu_2^r} + \frac{q_{3z}}{\mu_3^r} + \frac{\omega\eta_0\sigma}{ic}\right)}. \quad (4.9)$$

En esta ocasión, para el caso más simple de la bicapa de grafeno inmersa en aire, la ecuación (4.9) se reduce significativamente a la siguiente expresión

$$e^{q_z d} = 1 + \frac{2icq_z}{\omega\eta_0\sigma}. \quad (4.10)$$

A pesar de considerar el caso más sencillo para ambas polarizaciones, aún se puede observar que no es nada fácil despejar la variable q_z de tal suerte que las ecuaciones de dispersión se podrán resolver solamente de manera numérica. Antes de continuar, vale la pena comparar las ecuaciones (4.2) y (4.6) con (4.8) y (4.10), respectivamente. Se observa como única diferencia el factor $e^{q_z d}$ que involucra el espesor del dielectrico introducido entre cada grafeno. Por otra parte, la importancia de considerar una bicapa de grafeno se refleja en la

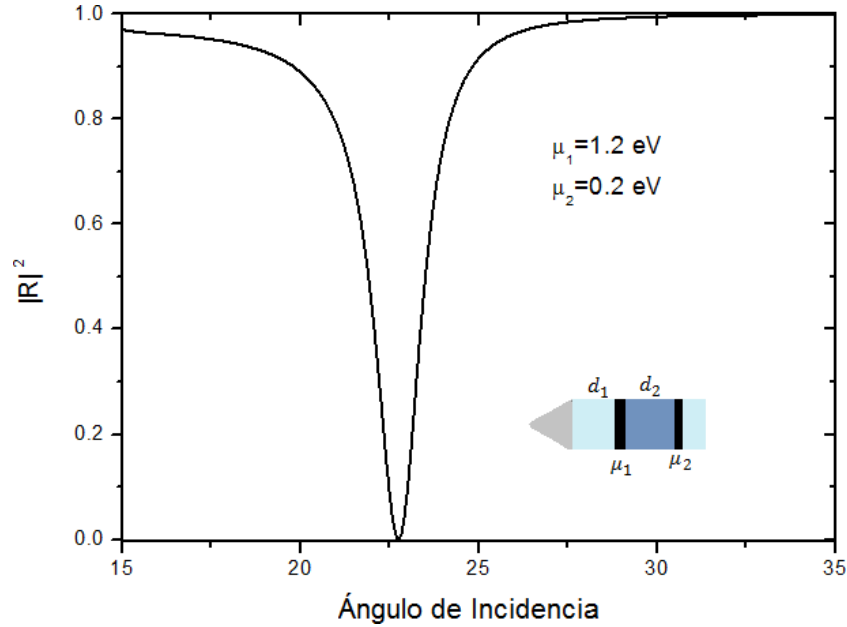


Figura 4.11: Gráfica de la reflectividad del sistema aire-grafeno1-dieléctrico-grafeno2 en la configura de Otto en función del ángulo para la polarización TM. Se observa un efecto de absorción perfecta bien definido con una posible contribución de naturaleza plasmónica para $\theta_i = 22.74$. Los parametros estructurales son $d_1 = 10 \mu m$, $d_2 = 0.5 \mu m$, $\tau = 1 ps$ y $f = 5 THz$.

posibilidad de emplear dicha configuración en guías de onda, entre otras posibles aplicaciones. En las figuras que se muestran a continuación se considera la configuración de Otto dada por la siguiente estructura: prisma-aire-grafeno1-dieléctrico($n_{guia} = 1.6$)-grafeno2-aire, siendo el dieléctrico el medio introducido entre las capas de grafeno propuesto para

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.2. INCIDENCIA OBLICUA

ser empleado como una guía de onda. Se pueden apreciar algunas diferencias sustanciales según la polarización empleada, como por ejemplo la frecuencia característica, así como los anchos de las capas de aire. Cabe mencionar, que en todas las figuras el prisma se considera de Germanio ($n_p \approx 4$) y por ende el ángulo crítico para esta configuración de Otto es $\theta_c \approx 14.477512$, de ahí que todo mínimo de reflexión después de dicho ángulo será de naturaleza plasmónica. Comenzando con la polarización TM, la figura (4.11)

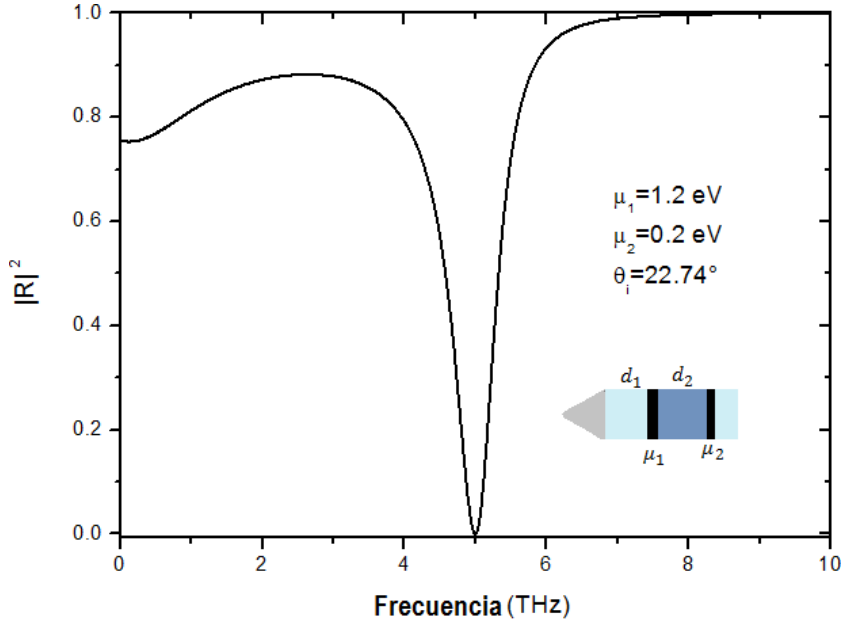


Figura 4.12: Gráfica de la reflectividad del sistema aire-grafeno1-dieléctrico-grafeno2 en la configura de Otto en función de la frecuencia. Se observa una frecuencia óptima de 5 THz.

muestra el espectro de reflexión para la configuración de Otto anteriormente mencionada en función del ángulo para $d_1 = 10 \mu m$ (capa de aire que se encuentra entre el prisma y el primer grafeno) y $d_2 = 0.5 \mu m$ (dieléctrico introducido entre los grafenos). La frecuencia y el tiempo de colisión son 5 THz y 1 ps, respectivamente. En esta figura cada grafeno posee un potencial químico diferente, $\mu_1 = 1.2 \text{ eV}$ y $\mu_2 = 0.2 \text{ eV}$. Se observa un efecto de absorción perfecta bien definido con una posible contribución de naturaleza plasmónica para $\theta_i = 22.74$. Para esta figura, está claro que el mínimo se encuentra después del ángulo crítico (de ahí su naturaleza plasmónica) y podría estar asociado a un acoplamiento de los modos superficiales que cada grafeno experimenta los cuales se encuentran a diferente potencial químico. Sin embargo la falta de la relación de dispersión electromagnética para la bicapa limita su descripción estando también este mínimo asociado a una posible transferencia total de la energía hacia el medio dieléctrico introducido entre los grafenos (una guía de onda) lo cual no es menos interesante ya que la presencia de grafeno es lo que permitiría que la radiación se confine en dicho dieléctrico y por ello se observe una reflexión cero. Por otra parte, las figuras (4.12) y (4.13) muestran el espectro de reflexión para la configuración de Otto en función de la frecuencia y las distancias de separación de los dieléctricos para un ángulo incidente $\theta_i = 22.74$, potenciales químicos $\mu_1 = 1.2 \text{ eV}$ y

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.2. INCIDENCIA OBLICUA

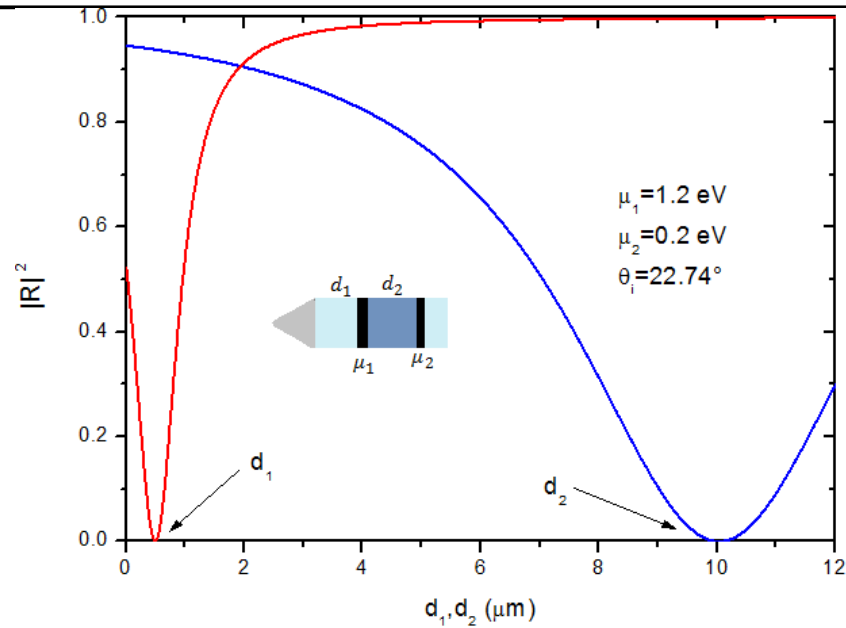


Figura 4.13: Gráfica de la reflectividad del sistema aire-grafeno1-dieléctrico-grafeno2 en la configura de Otto en función de las distancias de separación d_1 y d_2 . Se observa dos distancias óptimas $d_1 = 10 \mu m$ y $d_2 = 0.5 \mu m$.

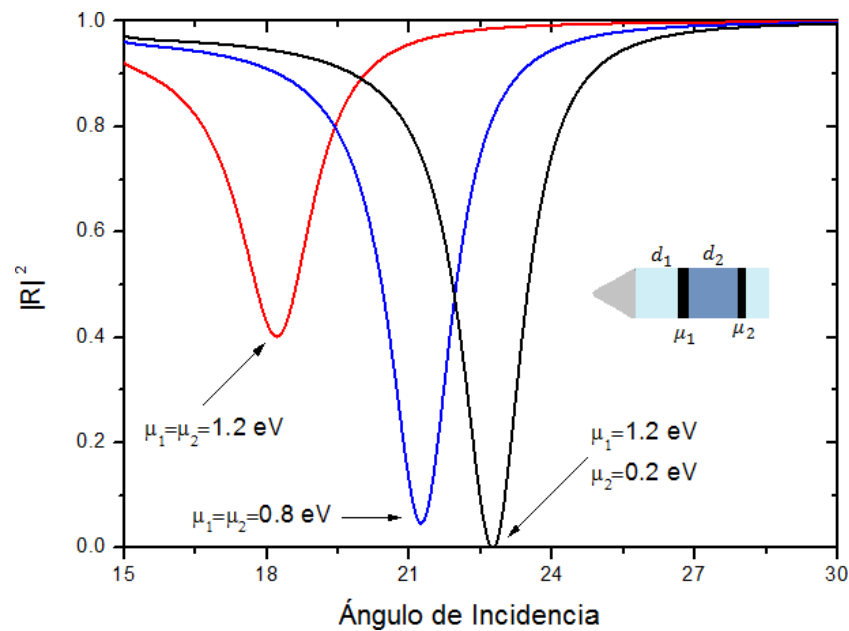


Figura 4.14: Gráfica de la reflectividad del sistema aire-grafeno1-dieléctrico-grafeno2 en la configura de Otto en función del ángulo para dos valores comunes del potencial químico en las capas de grafeno.

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.2. INCIDENCIA OBLICUA

$\mu_2 = 0.2$ eV y tiempo de colisión 1 ps. Se puede observar una frecuencia óptima de 5 THz y también dos anchos óptimos de los dieléctricos $d_1 = 10 \mu m$ y $d_2 = 0.5 \mu m$. Cabe destacar que estos valores son justamente los empleados en la figura (4.11) los cuales dieron como resultado un mínimo de reflexión cero (óptimo). Así, siguiendo una metodología similar se pueden conocer los parámetros estructurales óptimos que permitan encontrar mínimos de reflexión cero. Por último, en la figura (4.14), se muestra el comportamiento del mínimo de reflexión en función del ángulo de incidencia para dos valores altos y comunes del potencial químico ($\mu_1 = \mu_2 = 1.2$ eV y $\mu_1 = \mu_2 = 0.8$ eV), esto con el fin de observar un mayor acoplamiento entre los portadores de carga y la onda evanescente. Sin embargo, se puede observar que a pesar de que los grafenos poseen la misma cantidad de portadores de carga, la radiación no experimenta un acoplamiento mayor. De hecho, para $\mu_1 = \mu_2 = 1.2$ eV (límite superior de la cantidad de portadores de carga posible), se observa un menor acoplamiento, respecto a $\mu_1 = \mu_2 = 0.8$ eV. En contraste y de manera interesante, para $\mu_1 = 1.2$ eV y $\mu_2 = 0.2$ eV, como se puede observar en la figura (4.11), el acoplamiento es máximo. En lo que respecta a la polarización TE, en la figura (4.15) se muestra la

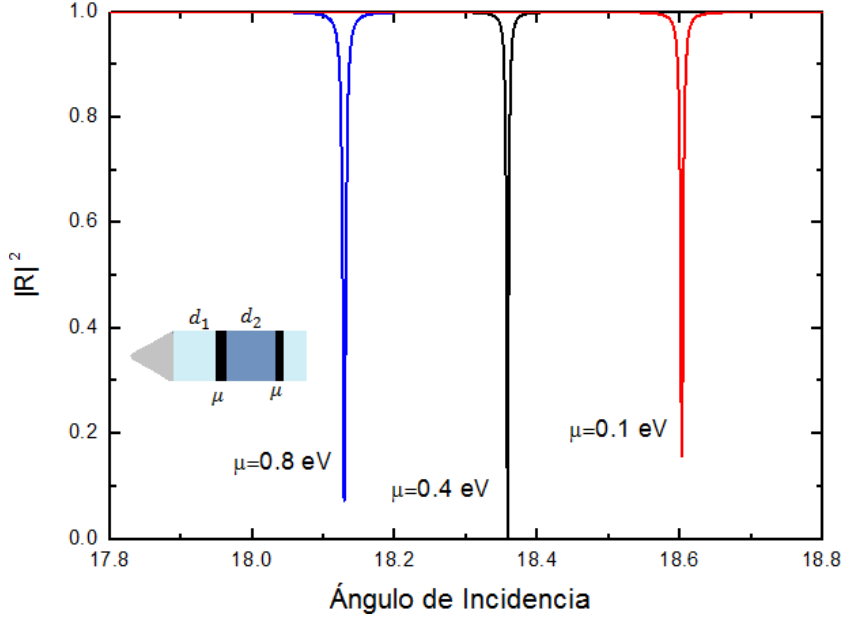


Figura 4.15: Gráfica de la reflectividad del sistema aire-grafeno1-dieléctrico-grafeno2 en la configura de Otto en función del ángulo para tres valores comunes del potencial químico en las capas de grafeno. Se puede observar una transferencia total de la energía a través del dieléctrico para $\mu = 0.4$ eV

gráfica del espectro de reflexión para la misma configuración de Otto para tres valores comunes del potencial químico ($\mu_1 = \mu_2 = 0.8$ eV, $\mu_1 = \mu_2 = 0.4$ eV y $\mu_1 = \mu_2 = 0.1$), en este caso, los anchos de los dieléctricos y la frecuencia son $d_1 = 5 \mu m$, $d_2 = 1.5 \mu m$ y 45 THz, respectivamente. Al igual que antes, el tiempo de colisión, τ , es de 1 ps. Se puede observar un efecto de absorción perfecta, para $\mu = 0.4$ eV lo cual podría estar asociado a una transferencia total de energía hacia el medio dieléctrico introducido entre los grafenos, tal como sucede para la polarización TM.

4.3. Estructuras de bandas

La propagación de radiación electromagnética en estructuras periódicas construidas con cristales fotónicos ha sido objeto de intenso estudio en las últimas décadas debido a las aplicaciones que poseen como consecuencia de sus propiedades ópticas peculiares. Uno de los conceptos empleados en dicho estudio es el de estructura de bandas. Como es bien sabido el modelo de Kronig-Penney usado en la teoría de bandas de los sólidos cristalinos es matemáticamente idéntica al que se usa en el estudio de la radiación electromagnética presente en las estructuras periódicas fotónicas, esto es, la propagación de las ondas electromagnéticas a través de estos medios fotónicos es muy similar al movimiento de los electrones en los sólidos cristalinos. De ahí que algunos conceptos usados en la Física del Estado Sólido tales como vector de Bloch, zonas de Brillouin, bandas prohibidas, etc, se usan para el caso de los cristales fotónicos. En nuestro caso, se estudia el comportamiento óptico de estructuras fotónicas multicapa construidas a base de grafeno en ambas aproximaciones. En lo que sigue se considera al grafeno en la aproximación de espesor efectivo a reserva de que se diga lo contrario. La estructura periódica en dicha aproximación se observa en la figura (4.16), para este caso la celda unitaria está conformada por el sistema dieléctrico(n_1)-grafeno(n_2) únicamente. A partir de la matriz de transferencia desarrollada

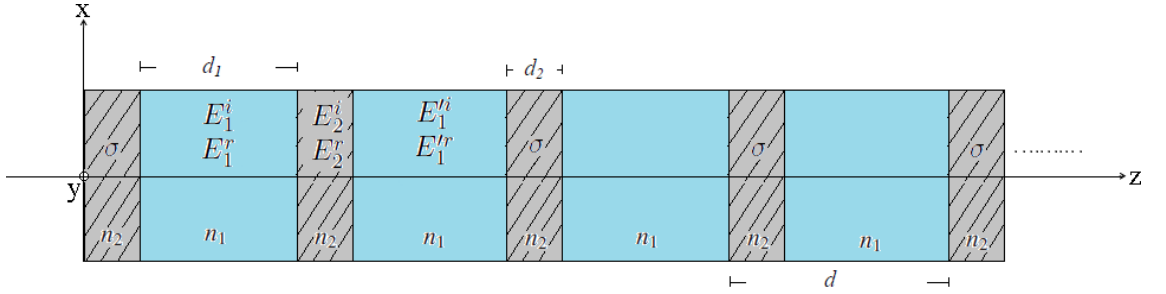


Figura 4.16: Cristal fotónico unidimensional con grafeno considerando a éste último en la aproximación de espesor efectivo. El sistema está orientado de tal suerte que la dirección de crecimiento del cristal fotónico inicia en $z = 0$.

en el capítulo anterior y de la figura (4.16) se obtiene la siguiente relación

$$\begin{pmatrix} E_1^i \\ E_1^r \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} E_1^i \\ E_1^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1^i \\ E_1^r \end{pmatrix}, \quad (4.11)$$

en donde los elementos de la matriz de transferencia A , B , C , D se expresan como sigue

$$\begin{aligned} A &= e^{-ik_{1z}d_1} \left\{ \cos(k_{2z}d_2) - \frac{i}{2} \left[\frac{Y_1}{Y_2} + \frac{Y_2}{Y_1} \right] \sin(k_{2z}d_2) \right\} \\ B &= e^{-ik_{1z}d_1} \left\{ \frac{i}{2} \left[\frac{Y_1}{Y_2} - \frac{Y_2}{Y_1} \right] \sin(k_{2z}d_2) \right\} \\ C &= e^{ik_{1z}d_1} \left\{ -\frac{i}{2} \left[\frac{Y_1}{Y_2} - \frac{Y_2}{Y_1} \right] \sin(k_{2z}d_2) \right\} \\ D &= e^{ik_{1z}d_1} \left\{ \cos(k_{2z}d_2) + \frac{i}{2} \left[\frac{Y_1}{Y_2} + \frac{Y_2}{Y_1} \right] \sin(k_{2z}d_2) \right\}. \end{aligned}$$

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.3. ESTRUCTURAS DE BANDAS

Estos elementos de matriz están asociados a la celda unitaria por lo tanto su forma depende de las consideraciones impuestas a la celda unitaria de la estructura fotónica. De estas expresiones, es fácil demostrar que $AB - CD = 1$, es decir, la matriz M es unimodular como consecuencia de la periodicidad de la celda unitaria. De igual forma, en la figura (4.16) se observa de manera evidente que dada una posición z del cristal fotónico, el índice de refracción (medio) será el mismo después de sumarle el ancho de la celda unitaria, d , es decir, se cumple lo siguiente

$$n(z) = n(z + d).$$

Luego, por el teorema de Bloch, el vector del campo eléctrico es de la forma $E(z) = E_K(z)e^{i(Kz - \omega t)}$, en donde $E_K(z)$ es una función periódica con periodo d , esto es,

$$E_K(z) = E_K(z + d)$$

El subíndice K indica que la función $E_K(z)$ depende del valor de K , siendo K el número de onda de Bloch. Esto último aplicado a nuestra celda unitaria cumple que

$$\begin{pmatrix} E_1^i \\ E_1^r \end{pmatrix} = I e^{iKd} \begin{pmatrix} E_1^i \\ E_1^r \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Entonces, comparando (4.11) y (4.12) se obtiene lo siguiente

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1^i \\ E_1^r \end{pmatrix} = I e^{iKd} \begin{pmatrix} E_1^i \\ E_1^r \end{pmatrix}.$$

Realizando un poco de álgebra se llega finalmente a

$$\begin{pmatrix} A - e^{iKd} & B \\ C & D - e^{iKd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1^i \\ E_1^r \end{pmatrix} = 0.$$

Como es bien sabido, para que esta ecuación matricial tenga soluciones distintas a la trivial es necesario que se cumpla lo siguiente

$$\text{Det} \left| \begin{pmatrix} A - e^{iKd} & B \\ C & D - e^{iKd} \end{pmatrix} \right| = 0.$$

Desarrollando el determinante y recordando que $AD - BC = 1$ se obtiene lo siguiente

$$e^{2iKd} - (A + D)e^{iKd} + 1 = 0, \quad (4.13)$$

De esta ecuación es fácil obtener la relación de dispersión entre K , ω y q_x , la cual está dada por la siguiente expresión

$$\begin{aligned} e^{iKd} &= \frac{1}{2}(A + D) \pm \left\{ \left[\frac{1}{2}(A + D) \right]^2 - 1 \right\}^{1/2} \\ &= \frac{1}{2} \text{tr} M \pm \left[\left(\frac{1}{2} \text{tr} M \right)^2 - 1 \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.3. ESTRUCTURAS DE BANDAS

Esta relación de dispersión nos dará toda la información sobre las estructuras de bandas de nuestra red fotónica. Por otro lado, multiplicando la ecuación (4.13) en ambos lados por el factor e^{-iKd} y utilizando el hecho de que $2\cos(z) = e^{iz} + e^{-iz}$ se tiene que

$$\cos(Kd) = \frac{1}{2}(A + D) = \frac{1}{2}trM,$$

de donde resulta finalmente

$$K(q_x, \omega) = \frac{1}{d}\cos^{-1}\left[\frac{1}{2}trM\right] \quad (4.15)$$

De esta expresión se observa claramente que los valores en donde se cumple $|\frac{1}{2}(A + D)| < 1$ corresponden a K reales y por lo tanto a ondas de Bloch propagándose (bandas permitidas), mientras que los valores en donde se cumple $|\frac{1}{2}(A + D)| > 1$ corresponden a $K = \frac{m\pi}{d} + K_i$ la cual ya posee una parte imaginaria K_i y por lo tanto la onda de Bloch es evanescente (bandas prohibidas). El borde de las bandas corresponde a valores en donde se cumple que $|\frac{1}{2}(A + D)| = 1$. Las ecuaciones (4.14) y (4.15) expresan la relación de dispersión de K , ω y q_x , la diferencia estriba en el hecho de que la ecuación (4.15) da una idea precisa de los valores permitidos y prohibidos (gaps) de propagación de la luz, respectivamente. Por otra parte, la ecuación (4.14) nos da una expresión explícita, la cual es consistente con (4.15), de dicha relación de dispersión, ésta se expresa como sigue

$$K(q_x, \omega) = -i\frac{1}{d}\log\left\{\frac{1}{2}trM \pm i\left[1 - \left(\frac{1}{2}trM\right)^2\right]^{1/2}\right\} \quad (4.16)$$

A partir de esta relación de dispersión se obtienen los dos tipos de estructuras de bandas fotónicas: las bandas K (relación de dispersión de K en función de ω a incidencia normal $q_x = 0$) y las bandas proyectadas (ω en función de q_x)

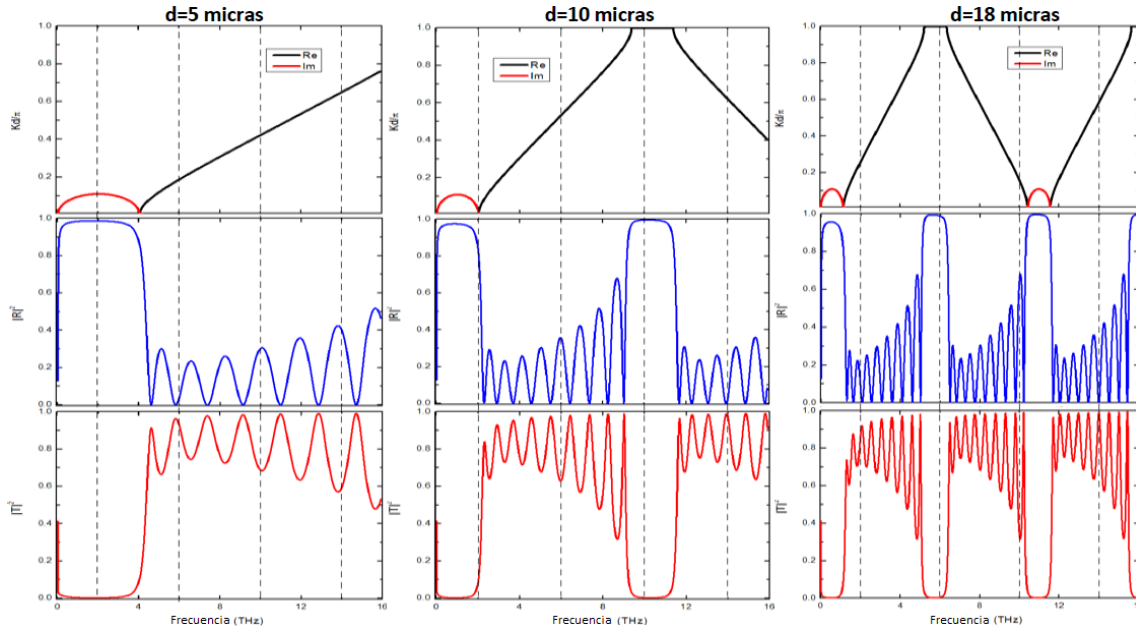
4.3.1. Bandas K

Como se mencionó previamente, la estructura de bandas muestra los valores de la frecuencia para los cuales es posible transmitir ondas electromagnéticas. Dentro de la literatura, es bien conocido que cuando todas las componentes del sistema son materiales dieléctricos, el vector de Bloch es un número real en las bandas permitidas dentro de la respectiva zona de Brillouin, mientras que en los gaps el vector de Bloch sólo tiene parte imaginaria. Por otro lado, si una de las componentes del sistema fotónico es metálica la fuerte absorción modifica las soluciones a la ecuación de onda. En este caso, las soluciones a la ecuación de onda puedan representar ondas evanescentes que decaen mientras penetran en el sistema (vector de onda complejo $K = K_r + K_i$ y frecuencia real ω). En este trabajo de tesis, en lugar de placas metálicas se consideran inscripciones de grafeno el cual es un caso especial de un semimetal y por ende posee absorción. Vale la pena recordar que el grafeno está caracterizado por una densidad superficial de carga compleja σ y en este trabajo de tesis se hace uso de la ecuación (2.5) para dicha conductividad. En lo que sigue, se presentan algunos resultados sobre las estructuras de bandas K en función de ω , $K(0, \omega)$, para ambas polarizaciones (TM y TE) para el sistema multicapas mostrado en la figura (4.16). Cabe mencionar que para el caso de la polarización TM la celda unitaria se

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.3. ESTRUCTURAS DE BANDAS

tomó como vidrio ($n = 1.6$)–grafeno, mientras que para la polarización TE la celda unitaria se tomó como aire ($n = 1$)–grafeno. En todas las figuras presentadas únicamente se varía el espesor del dieléctrico ya que el grafeno tiene un grosor bien definido en la aproximación de espesor efectivo (0.5 nm). Además todas éstas se obtienen a incidencia normal pues el emplear un ángulo distinto de cero sólo desplazaría los gaps hacia regiones de mayor frecuencia. De manera adicional, se presentan los perfiles de reflexión y transmisión para diez capas de grafeno los cuales refuerzan el resultado obtenido para las bandas K ya que cuando el número de capas de grafeno es grande (por ejemplo diez capas), los gaps fotónicos asociados a la estructura de banda se pueden observar claramente en estos perfiles. Para los espectros de reflexión y transmisión el medio incidente y transmitido es aire. Entonces, comenzando con la polarización TM, las figuras (4.17) muestran las bandas K así como los espectros de reflexión y transmisión considerando un potencial químico de $\mu = 0.8 \text{ eV}$ y para tres anchos específicos del dieléctrico: $5 \mu\text{m}$, $10 \mu\text{m}$ y $18 \mu\text{m}$. En la primera gráfica se empleó un tiempo de colisión, τ , de 10 ps . En la segunda gráfica el tiempo de colisión fue de 1 ps . Finalmente, en la tercera gráfica se tomó un tiempo de colisión de 0.1 ps . Claramente se observa que a mayor tiempo de colisión (menor absorción) la parte real e imaginaria del vector de Bloch se separan (primera figura), tal como fue mencionado anteriormente. De manera similar, se puede observar que a menor tiempo de colisión (mayor absorción) las bandas se deforman y aparentemente la absorción abre una ventana de bajas frecuencias para la transmisión (última figura). Por otro lado, se observa que la presencia de los gaps fotónicos dependen estrictamente de la distancia de separación d . Para el caso de



la polarización TE, las figuras (4.18) muestran las bandas K así como los espectros de reflexión y transmisión considerando un potencial químico de $\mu = 0.2 \text{ eV}$ y para tres anchos específicos del dieléctrico: $48 \mu\text{m}$, $70 \mu\text{m}$ y $120 \mu\text{m}$. El tiempo de colisión, τ , toma los mismos valores que en el caso TM, es decir 10 ps , 1 ps y 0.1 ps , respectivamente. Para los espectros de reflexión y transmisión el medio incidente y transmitido es aire también.

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.3. ESTRUCTURAS DE BANDAS

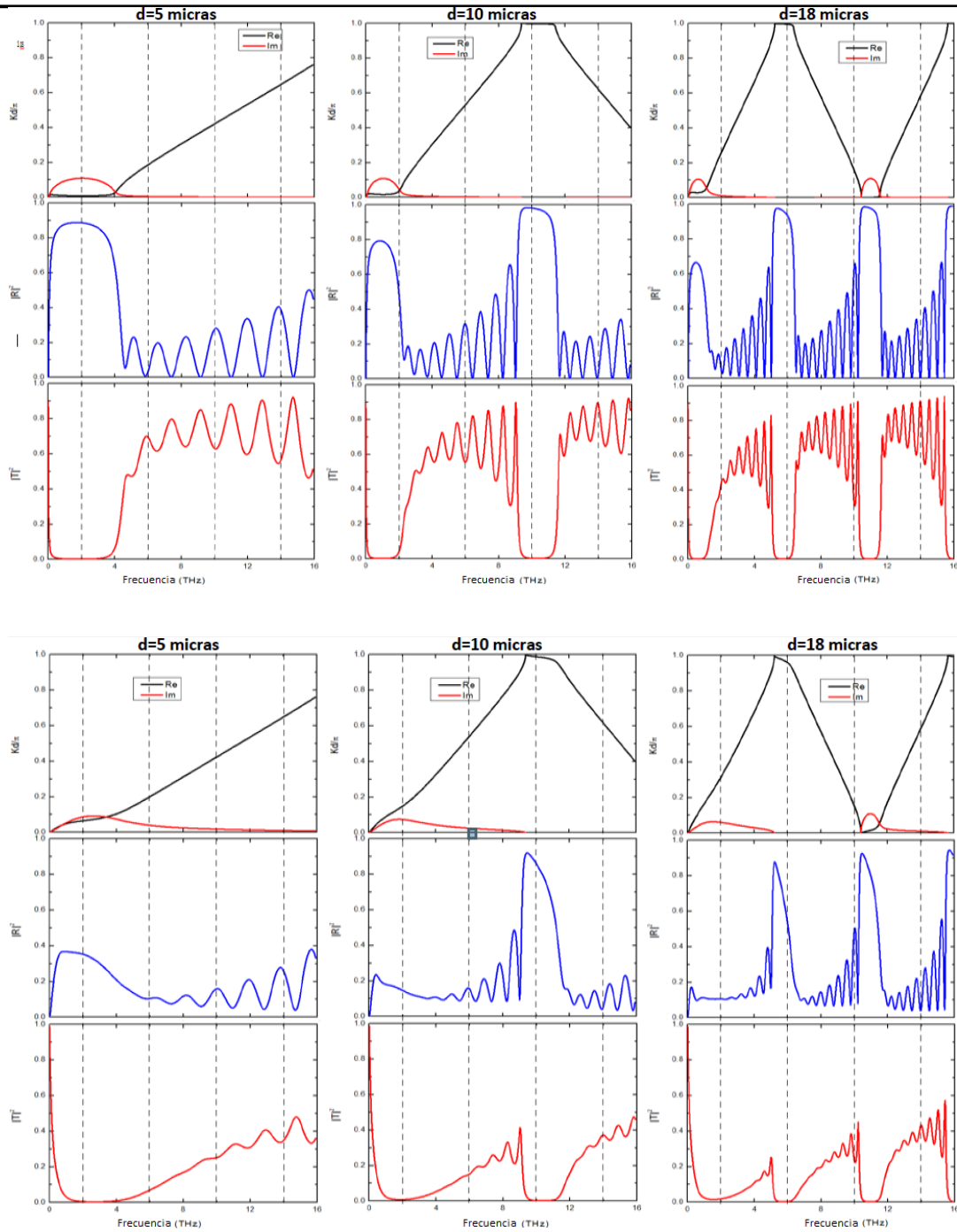
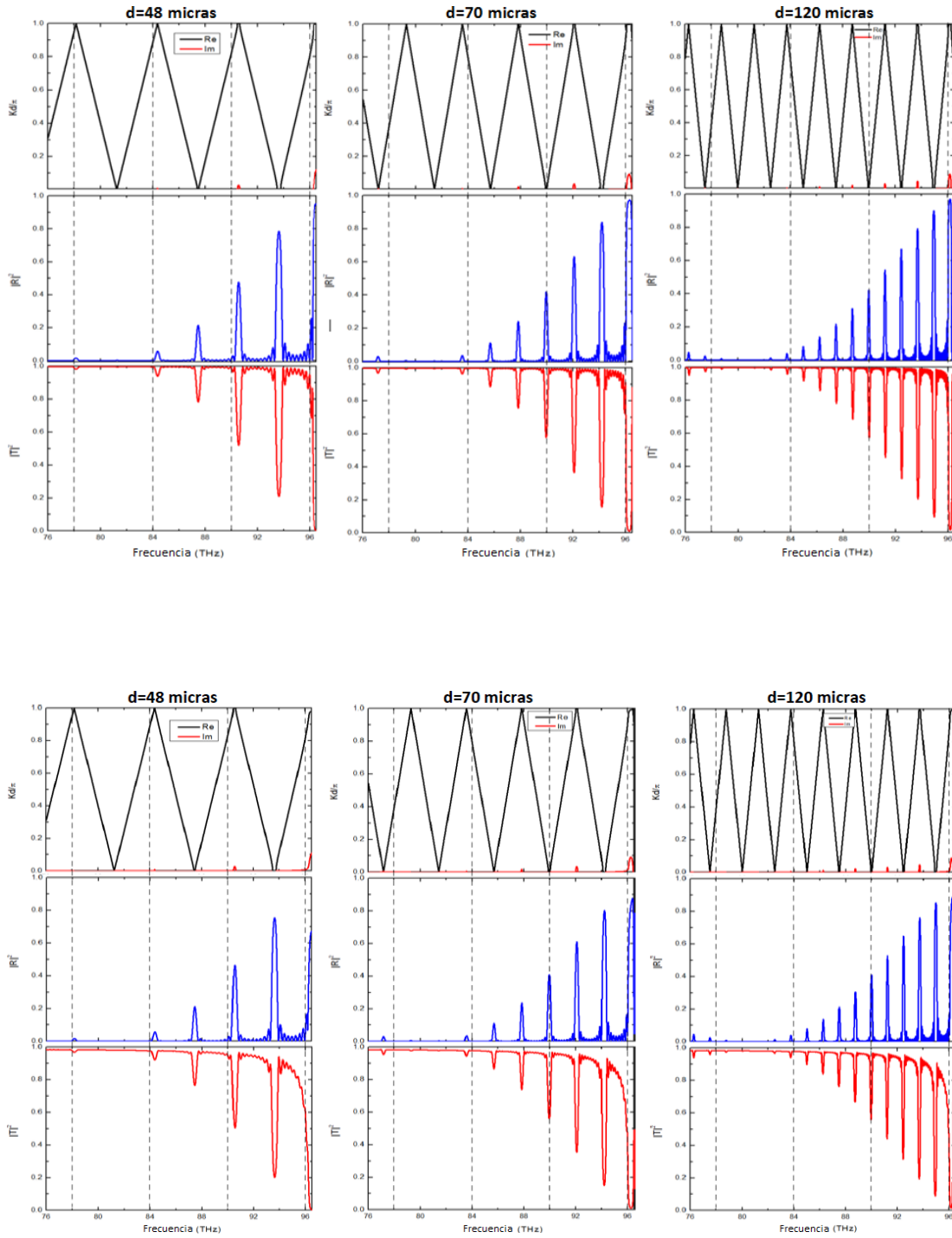


Figura 4.17: (Varias). Gráficas de la banda K y los espectros de reflexión y transmisión. Los parámetros estructurales son $\mu = 0.8$ eV y 10 ps, 1 ps, 0.1 ps, respectivamente. Se puede observar que los gaps fotónicos dependen estrictamente de la distancia de separación d . De igual forma, la presencia de absorción modifica las soluciones reales y complejas del vector de Bloch.

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.3. ESTRUCTURAS DE BANDAS

En este caso se puede observar que para frecuencia mayores, la parte imaginaria del vector de Bloch es exageradamente pequeña respecto a la parte real de tal suerte que para dicha región de frecuencias prácticamente existen sólo bandas permitidas.



CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.3. ESTRUCTURAS DE BANDAS

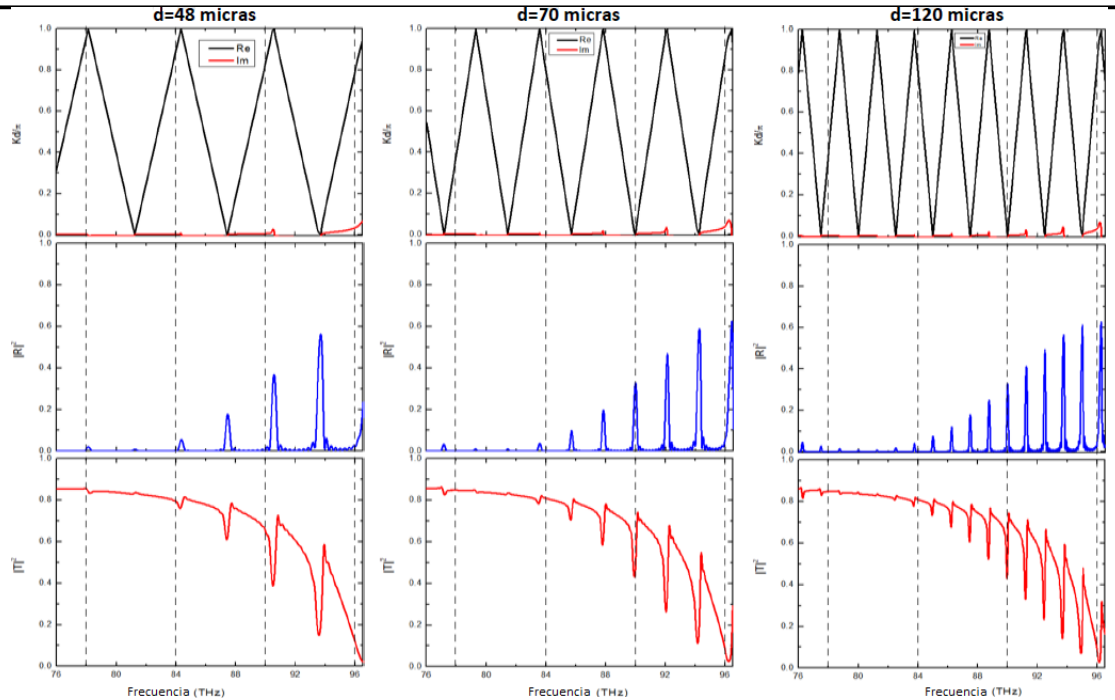


Figura 4.18: (Varias). Gráficas de la banda K y los espectros de reflexión y transmisión. Los parámetros estructurales son $\mu = 0.2$ eV y 10 ps, 1 ps, 0.1 ps, respectivamente. Se puede observar que la parte imaginaria del vector de Bloch es exageradamente pequeña respecto a la parte real de tal manera que para la región de frecuencias mostrada prácticamente existen sólo bandas permitidas

4.3.2. Bandas proyectadas

Las bandas proyectadas son bandas de frecuencia de propagación oblicua, es decir, muestra la relación de la componente paralela a las interfaces, q_x , en función de la frecuencia. De igual manera, a diferencia de las bandas K , las bandas proyectadas muestran la naturaleza de "bulk" de la estructura periódica, de ahí que se debe considerar al sistema periódico como infinito. Esta descripción es de gran utilidad al momento de aplicar las propiedades del sistema, es decir, la importancia de dichas bandas se centra en el hecho de que a partir de ellas se pueden observar con claridad los distintos modos electromagnéticos presentes sobre determinada estructura fotónica, por ejemplo, modos de tunelamiento, modos oscilatorios [43], modos de superficie, etc. En nuestro caso, estamos interesados en observar los modos de superficie ya que éstos están asociados a los plasmones de superficie (SPs). En lo que sigue, se presentan algunos resultados sobre bandas proyectadas considerando la presencia de absorción en el grafeno para ambas polarizaciones (TM y TE) y tomando casos especiales de celdas unitarias.

Monocapa de grafeno (sistema aire-grafeno)

Como primer caso, tomaremos la celda unitaria conformada por el sistema aire-grafeno únicamente tal como se muestra en la figura (4.16). En la figura (4.19) se puede observar

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.3. ESTRUCTURAS DE BANDAS

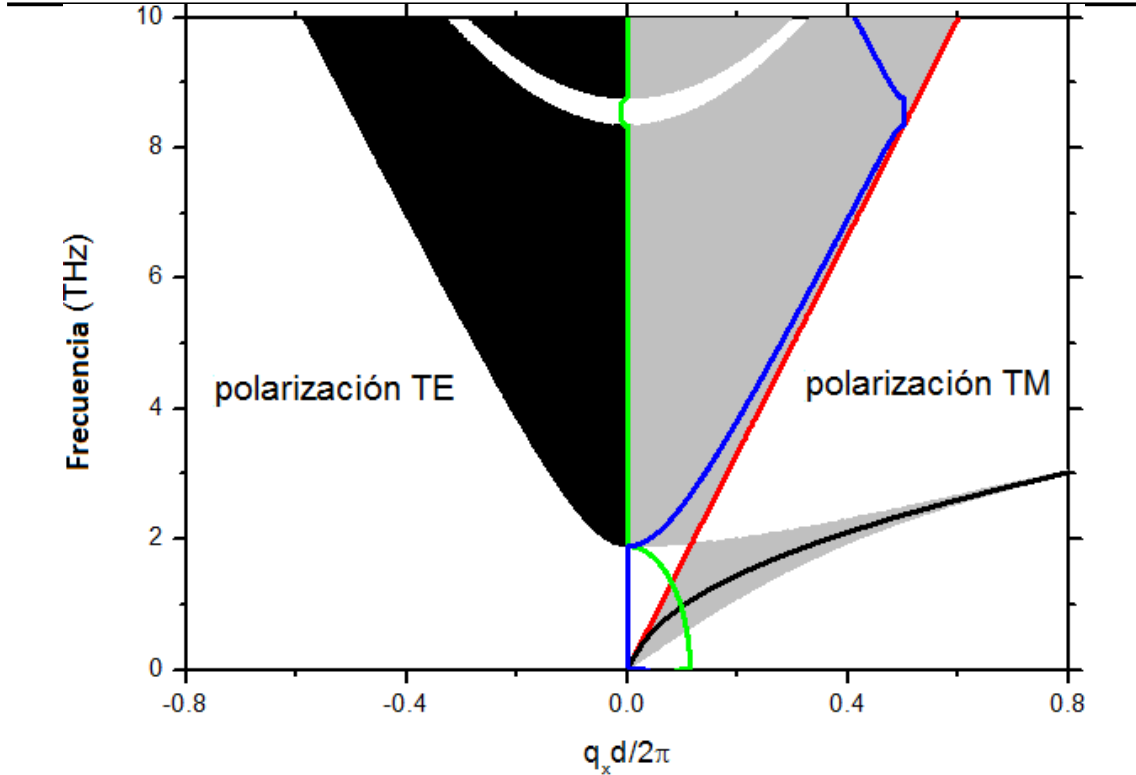


Figura 4.19: Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ considerando poca absorción en el grafeno (banda proyectada sin pérdidas). Los parámetros estructurales son: $d = 18 \mu m$, $\tau = 100 ps$, $\mu = 0.2 eV$. La línea roja representa la línea de luz del vacío, la línea negra representa la relación de dispersión asociada a la celda unitaria, la línea verde (azul) representa la parte imaginaria (real) del vector de Bloch. Como es de esperarse las bandas permitidas y prohibidas se separan claramente como consecuencia de la baja absorción, sin embargo la forma de la banda TM implica la existencia de modos oscilatorios propagándose pero de manera evanescente (modos de superficie), la parte gris después de la línea roja representa justamente los modos de superficie asociados al sistema que como se puede observar sólo existen para bajas frecuencias, siendo esto consistente con las propiedades de la parte imaginaria de la conductividad.

que para bajas frecuencias sólo existen modos de superficie asociados a la polarización TM siendo esto consistente con las propiedades de la parte imaginaria de la conductividad estudiadas previamente. La parte gris corresponde a $|\frac{1}{2}trM| < 1$ (bandas permitidas), mientras que la parte en blanco corresponde a $|\frac{1}{2}trM| > 1$ (bandas prohibidas). Adicionalmente, la línea roja representa la línea de luz del vacío mientras que la línea negra representa la relación de dispersión asociada a la celda unitaria. Por otro lado, la línea verde (azul) representa la parte imaginaria (real) del vector de Bloch. En esta figura se empleó un tiempo de colisión, τ , de $100 ps$ (poca absorción) para observar como las bandas permitidas y prohibidas se separan claramente como consecuencia de la baja absorción. La figura (4.20) muestra el comportamiento de los modos de superficie para la polarización TM para tres valores particulares del espesor del dieléctrico (aire), d : $1 \mu m$ (izquierda),

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.3. ESTRUCTURAS DE BANDAS

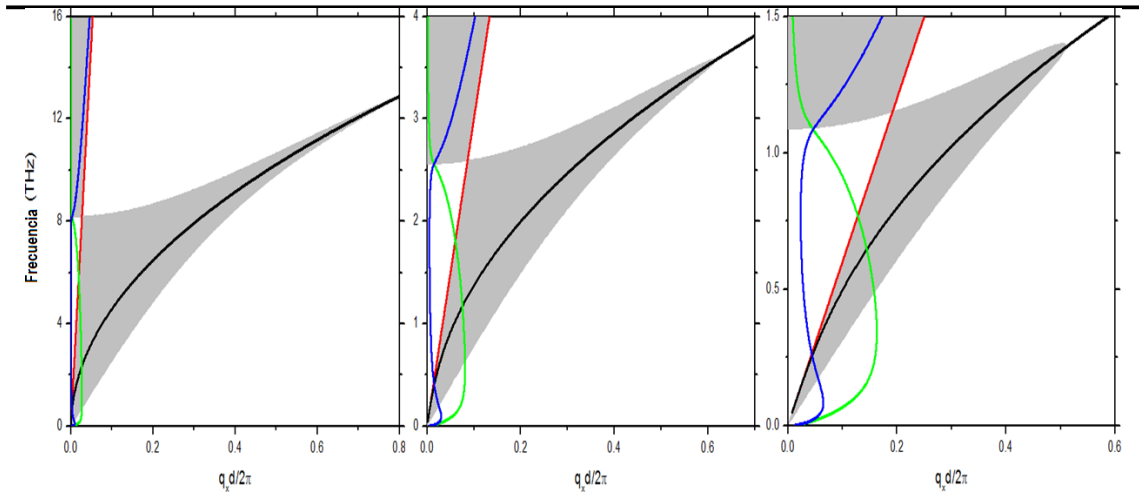


Figura 4.20: Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ variando el espesor del dieléctrico d . Los parámetros estructurales son: $\tau = 1$ ps, $\mu = 0.2$ eV. El espesor del dieléctrico de izquierda a derecha es: $1 \mu m$, $10 \mu m$, $50 \mu m$. La línea roja representa la línea de luz del vacío, la línea negra representa la relación de dispersión asociada a la celda unitaria para $\mu = 0.2$ eV. Se puede observar que los modos de superficie se confinan conforme la distancia d aumenta.

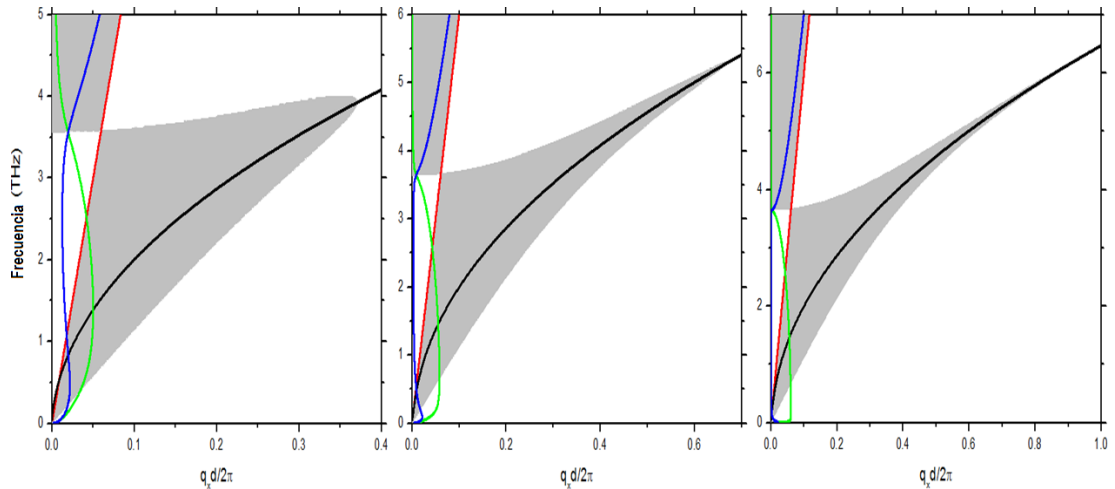


Figura 4.21: Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ variando el tiempo de colisión τ . Los parámetros estructurales son: $d = 5 \mu m$, $\mu = 0.2$ eV. El valor de τ de izquierda a derecha es: 0.2 ps, 1 ps, 10 ps. La línea roja representa la línea de luz del vacío, la línea negra representa la relación de dispersión asociada a la celda unitaria para $\mu = 0.2$ eV. Se puede observar que al aumentar el valor de τ (lo cual significa poca absorción) la banda asociada a los modos de superficie coincide con la relación de dispersión. De igual manera se puede observar que la presencia de absorción modifica las soluciones de la parte real (línea azul) e imaginaria (línea verde) del vector de Bloch.

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.3. ESTRUCTURAS DE BANDAS

$10 \mu m$ (medio) y $50 \mu m$ (derecha), potencial químico, $\mu = 0.2 eV$ y tiempo de colisión, $\tau = 1 ps$. La línea roja representa la línea de luz del vacío, la línea negra representa la relación de dispersión asociada a la celda unitaria para $\mu = 0.2 eV$. Se puede observar que conforme este grosor aumenta, los modos de superficie se confinan lo cual significa que la onda evanescente no es lo suficientemente extendida para acoplarse con la densidad de carga entre cada grafeno, es decir la interacción entre la onda evanescente y la densidad de carga prácticamente es nula. Adicionalmente, también se puede observar que estos modos poseen un acoplamiento sólo para frecuencias cada vez menores en el rango de los Terahertz (figura de la izquierda). Por otro lado, en la figura (4.21) se muestra el comportamiento de los modos de superficie para la polarización TM también, para una celda unitaria de grosor $d = 5 \mu m$ y potencial químico, $\mu = 0.2 eV$. En este caso, se consideran tres valores del tiempo de colisión, τ : $0.2 ps$ (izquierda), $1 ps$ (medio) y $10 ps$ (derecha). Se puede observar una deformación de la banda conforme el tiempo de colisión (absorción) varía. De manera particular, conforme el tiempo de colisión aumenta, la banda coincide justamente con la relación de dispersión asociada a la celda unitaria considerada. Cabe resaltar que esto sólo es útil para observar un comportamiento fiable, pues en realidad la presencia de absorción es lo que permite al grafeno poseer modos de superficie, así que en la mayoría de los resultados presentados en este trabajo se toma en cuenta el valor de $\tau = 1 ps$. En lo que respecta a las bandas proyectadas asociadas a la polarización TE, la figura (4.22) muestra el comportamiento de los modos de superficie de dicha polarización para tres valores particulares del espesor del dieléctrico (aire), d : $1 \mu m$ (izquierda), $0.1 \mu m$ (medio) y $0.01 \mu m$ (derecha), potencial químico, $\mu = 0.2 eV$ y tiempo de colisión, $\tau = 1 ps$. En este caso se puede observar que la relación de dispersión electromagnética asociada a la celda unitaria para $\mu = 0.2 eV$ (línea negra) y la línea del luz del vacío (línea roja) prácticamente coinciden lo cual muestra que los modos TE son modos pobremente localizados. A este respecto, se puede observar que a menor grosor del dieléctrico, el modo de superficie se define más (figura de la derecha) de tal suerte que entre más cerca esté el grafeno uno del otro, el campo evanescente excitará estos modos superficiales. Cabe destacar que el ancho asociado al grafeno en la aproximación de espesor efectivo es del orden de $0.5 nm$ ($0.0005 \mu m$) apenas dos ordenes de magnitud menor respecto al ancho en donde los modos TE se definen mucho mejor ($d = 0.01 \mu m$). Esto nos podría dar una idea intuitiva de que tan confinados se encuentran estos modos de superficie al momento de excitarlos. Finalmente, la figura (4.23) muestra el comportamiento de los modos de superficie para la polarización TE, para una celda unitaria de grosor $d = 0.05 \mu m$ y potencial químico, $\mu = 0.2 eV$. Al igual que en el caso TM, se consideran tres valores del tiempo de colisión, τ : $0.2 ps$ (izquierda), $1 ps$ (medio) y $10 ps$ (derecha). Como es de esperarse, se observa una deformación de la banda conforme el tiempo de colisión (absorción) varía. Además, se observa que a mayor tiempo de colisión (menor absorción) la banda tiende a un valor constante de la frecuencia (figura de la derecha). Sin embargo, como se mencionó anteriormente, la presencia de absorción es lo que permite al grafeno poseer modos de superficie de tal manera que esta última figura sólo es útil para observar un comportamiento fiable.

Bicapa de grafeno (sistema aire-grafeno1-aire-grafeno2)

El siguiente caso por estudiar es el de una celda unitaria conformada por el sistema aire-grafeno1-aire-grafeno2, es decir cada grafeno puede estar caracterizado por su propio

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.3. ESTRUCTURAS DE BANDAS

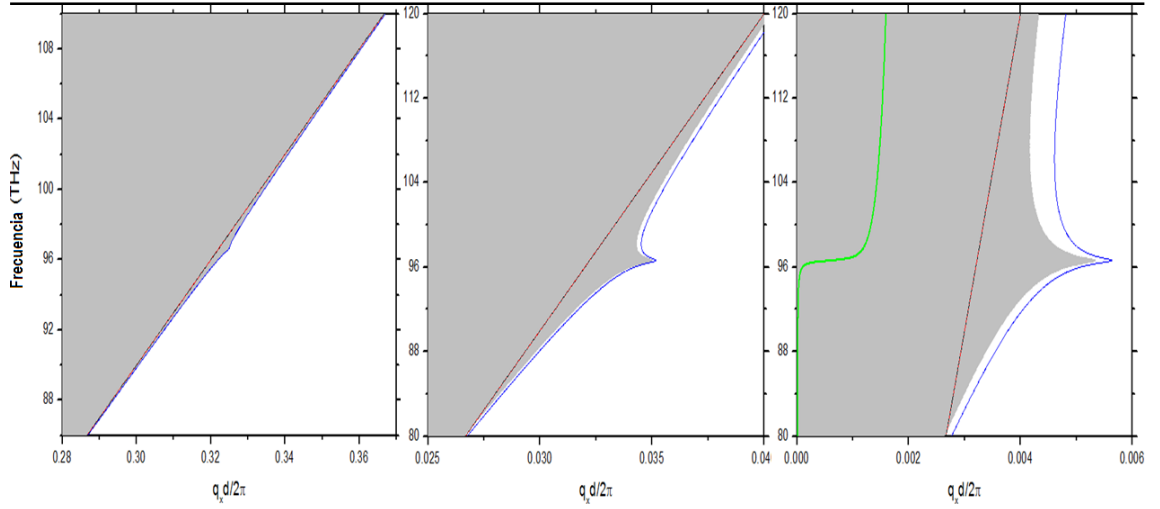


Figura 4.22: Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ variando el espesor del dieléctrico d . Los parámetros estructurales son: $\tau = 1$ ps, $\mu = 0.2$ eV. El espesor del dieléctrico de izquierda a derecha es: $1 \mu m$, $0.1 \mu m$, $0.01 \mu m$. La línea roja representa la línea de luz del vacío y prácticamente sobre ella se encuentra la relación de dispersión asociada a la celda unitaria para $\mu = 0.2$ eV. La línea verde (azul) representa la parte imaginaria (real) del vector de Bloch. Se puede observar que los modos de superficie se definen mucho mejor en la medida que la distancia d se reduce.

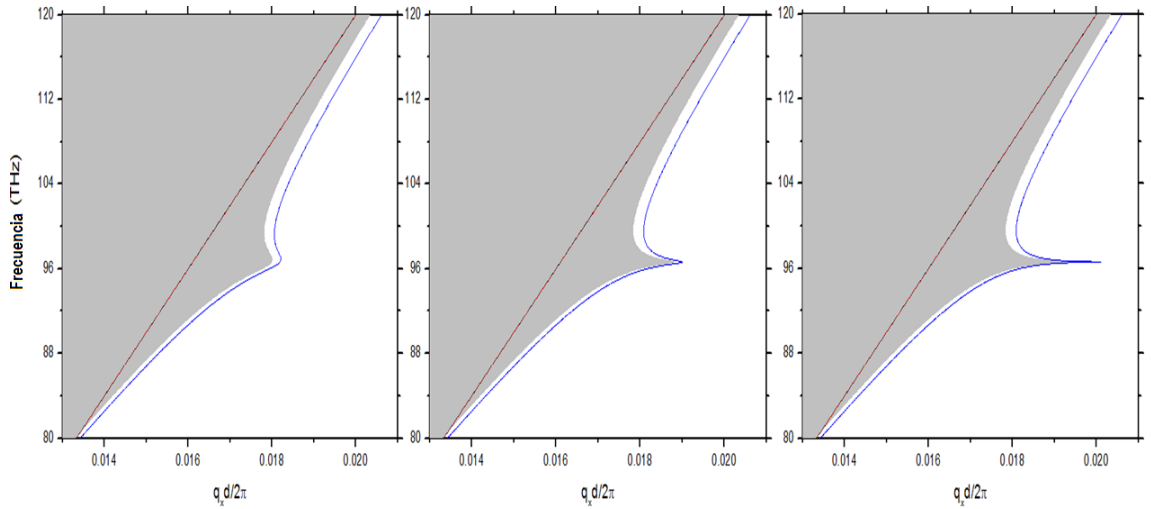


Figura 4.23: Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ variando el tiempo de colisión τ . Los parámetros estructurales son: $d = 0.05 \mu m$, $\mu = 0.2$ eV. El valor de τ de izquierda a derecha es: 0.2 ps, 1 ps, 10 ps. La línea roja representa la línea de luz del vacío y prácticamente sobre ella se encuentra la relación de dispersión asociada a la celda unitaria para $\mu = 0.2$ eV.

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.3. ESTRUCTURAS DE BANDAS

potencial químico, lo cual permite diferencias en la cantidad de portadores de carga en la superficie del grafeno logrando con esto un acoplamiento posiblemente más efectivo entre la onda electromagnética y estos portadores de carga. A este respecto, la figura (4.24)

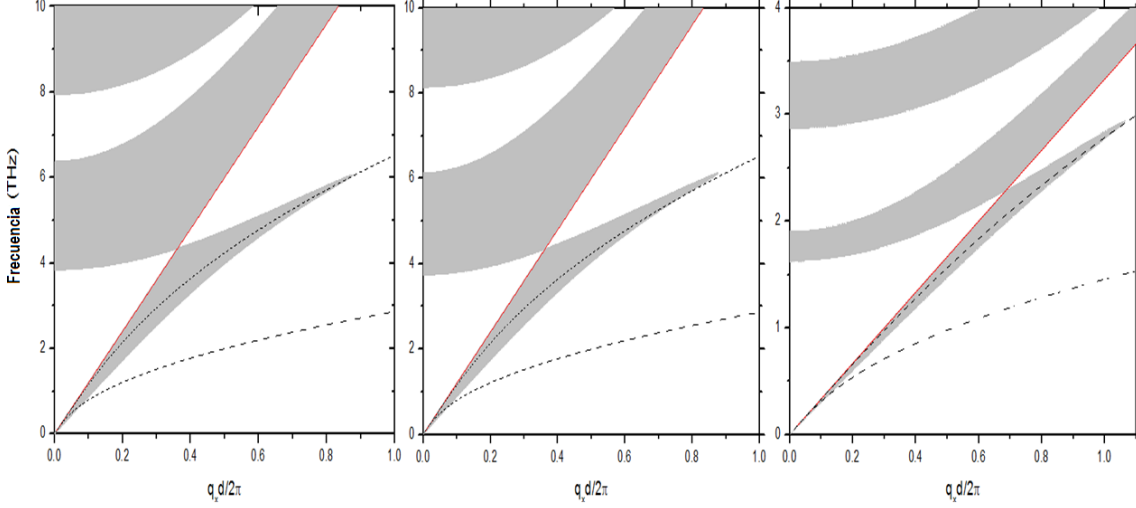


Figura 4.24: Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d / 2\pi$ variando el espesor de las capas de aire d_1 y d_2 . Los parámetros estructurales son: $\tau = 1 ps$, $\mu_1 = 0.2 eV$ y $\mu_2 = 1.2 eV$. Los espesores de las dos capas de aire, respectivamente, de izquierda a derecha son: $10 \mu m$ y $15 \mu m$, $5 \mu m$ y $20 \mu m$, $30 \mu m$ y $60 \mu m$. Una vez más, la línea roja representa la línea de luz del vacío y las dos líneas negras están asociadas a la relación de dispersión para $\mu_1 = 0.2 eV$ y $\mu_2 = 1.2 eV$, respectivamente. Se puede observar que la banda tiende a la relación de dispersión del sistema en donde el grafeno posee mayor potencial químico.

muestra el comportamiento de los modos de superficie para la polarización TM tomando tres valores específicos de los espesores del aire, d_1 y d_2 : $10 \mu m$ y $15 \mu m$ (izquierda), $5 \mu m$ y $20 \mu m$ (medio), $30 \mu m$ y $60 \mu m$ (derecha). Cada grafeno posee un potencial químico distinto: $\mu_1 = 0.2 eV$ y $\mu_2 = 1.2 eV$. Al igual que en el sistema anterior (aire-grafeno), se puede observar que al aumentar el ancho de una de las capas de aire o las dos (figura de la derecha), los modos de superficie se confinan lo cual significa que la onda evanescente no es lo suficientemente extendida para acoplarse con la densidad de carga entre cada grafeno, es decir la interacción entre la onda evanescente y dicha densidad prácticamente es nula a pesar de que uno de los grafenos posee mayor cantidad de portadores. Por otro lado, se puede observar que la banda tiende a la relación de dispersión del sistema en donde el grafeno posee mayor potencial químico ($\mu_2 = 1.2 eV$), esto se debe a la mayor cantidad de portadores de carga que induce dicho potencial químico sobre el grafeno respecto al otro potencial químico ($\mu_1 = 0.2 eV$) lo cual permite un mayor acoplamiento entre la onda evanescente y estos portadores. Por último, la figura (4.25) muestra el comportamiento de los modos de superficie ahora para la polarización TE tomando tres valores específicos de los espesores del aire, d_1 y d_2 : $1 \mu m$ y $0.1 \mu m$ (izquierda), $0.1 \mu m$ y $0.01 \mu m$ (medio), $1 \mu m$ y $0.01 \mu m$ (derecha). Para esta polarización, ambos grafenos poseen el mismo potencial químico: $\mu_1 = \mu_2 = 0.2 eV$. Sucede prácticamente lo mismo que para el caso anterior, es decir, a menor grosor de las capas de aire (figura de en medio), el modo de superficie

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.3. ESTRUCTURAS DE BANDAS

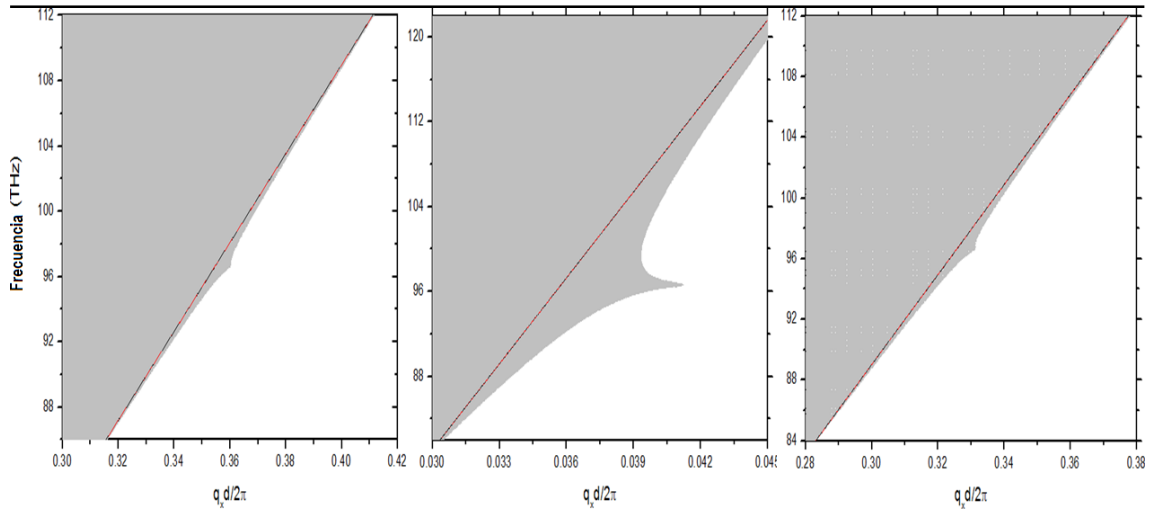


Figura 4.25: Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d / 2\pi$ variando el espesor de las capas de aire d_1 y d_2 . Los parámetros estructurales son: $\tau = 1 ps$, $\mu_1 = \mu_2 = 0.2 eV$. Los espesores de las dos capas de aire, respectivamente, de izquierda a derecha son: $1 \mu m$ y $0.1 \mu m$, $0.1 \mu m$ y $0.01 \mu m$, $1 \mu m$ y $0.01 \mu m$. Una vez más, la línea roja representa la línea de luz del vacío y prácticamente sobre ella se encuentra la relación de dispersión para $\mu = 0.2 eV$.

se define mejor. Nótese que para este caso el potencial químico es el mismo, además de tener un valor bajo ($0.2 eV$), la razón de dicho valor es porque para potenciales químicos mayores, los modos de superficie desaparecen y no se observa nada después de la línea de luz del vacío.

Bandas proyectadas complejas

Como se mencionó anteriormente, si en una estructura fotónica una de las componentes del sistema posee fuerte absorción las soluciones a la ecuación de onda se modifican de tal suerte que la parte derecha de la ecuación (4.15) puede separarse en una parte real y una parte compleja

$$K = f^r + i f^i,$$

en donde f^r y f^i son funciones reales. De esta manera, soluciones con K compleja pueden ser numéricamente obtenidas. En otras palabras, en un sistemas sin pérdidas, las bandas permitidas y prohibidas se separan claramente. En las bandas permitidas el vector de Bloch imaginario es cero y la parte real del vector de Bloch barre la zona de Brillouin. Por otro lado, en las bandas prohibidas el vector de Bloch real es cero y la parte imaginaria alcanza su valor máximo alrededor del centro del gap tal y como se muestra en la figura (4.19). De manera contraria, en la figura (4.26) se observa que la presencia de absorción rompe con esta condición, ahora la componentes real e imaginaria del vector de Bloch tienen valores finitos en toda la región de frecuencias. Sin embargo, se pueden graficar las bandas proyectadas delimitando el rango para los valores de las componentes real o imaginaria del vector de Bloch debido a que la absorción remueve el concepto de bandas prohibidas y

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS
PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.3. ESTRUCTURAS DE BANDAS

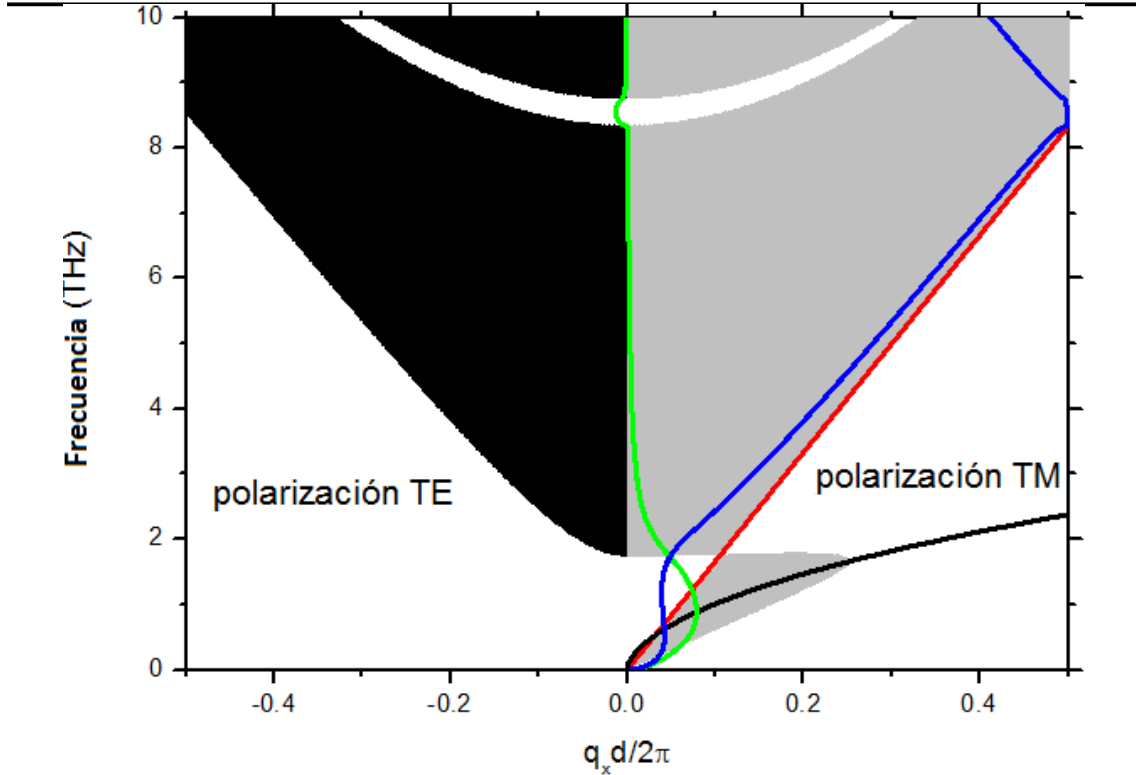


Figura 4.26: Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ considerando absorción en el grafeno (banda proyectada con compleja). Los parámetros estructurales son: $d = 18 \mu m$, $\tau = 0.1 \text{ ps}$, $\mu = 0.2 \text{ eV}$. Como consecuencia de la presencia de absorción, la componente real (línea azul) e imaginaria (línea verde) del vector de Bloch ya no se separan completamente y por ende poseen valores finitos en toda la región de frecuencias.

permitidas puras. Para tal efecto, es conveniente seleccionar una cota arbitraria máxima (que la denotaremos por α) y graficar las soluciones que satisfacen la condición $K_i < \alpha$. Cabe destacar que la distancia de penetración de los modos evanescentes es inversamente proporcional a la parte imaginaria del vector de Bloch, es decir, entre más grande es la parte imaginaria, más corta es la distancia de penetración. De esta manera, las bandas para $K_i < \alpha$ contienen los modos que penetran más allá del rango $z = \frac{1}{\alpha}$. En este caso el grafeno es el componente que dota de absorción a la estructura fotónica. A continuación se muestran algunas figuras tomando en cuenta la parte imaginaria del vector de Bloch para los dos sistemas previamente estudiados, es decir, para la celda unitaria aire-grafeno y aire-grafeno1-aire-grafeno2 para ambas polarizaciones. A este respecto, la figura (4.27) muestra el comportamiento de la banda proyectada de la celda unitaria aire-grafeno para la polarización TM para dos valores del potencial químico del grafeno: $\mu = 1.2 \text{ eV}$ (izquierda) y $\mu = 0.2 \text{ eV}$ (derecha), siendo el ancho de la celda unitaria $d = 10 \mu m$ y considerando tres límites de la parte imaginaria del vector de Bloch. Las soluciones que satisfacen la condición $0.5 < K_i < 0.9$ describen modos superficiales (color azul) que pueden penetrar más de $0.17 d$. Por otro lado, los modos asociados a las soluciones que satisfacen la condición $0.1 <$

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.3. ESTRUCTURAS DE BANDAS

$K_i < 0.5$ (color cyan) pueden penetrar más de $0.31 d$. Finalmente, los modos asociados a las soluciones que satisfacen la condición $K_i < 0.1$ pueden penetrar más de $1.59 d$. La región en gris representa los modos superficiales permitidos, es decir los valores en donde se cumple que $|\frac{1}{2}Tr(M)| < 1$. Por otro lado, la figura (4.28) muestra el comportamiento de la banda proyectada de la celda unitaria aire-grafeno1-aire-grafeno2 para la polarización TM considerando cinco límites de la parte imaginaria del vector de Bloch y dos pares de distancias particulares, $d_1 = 10 \mu m$, $d_2 = 15 \mu m$ (izquierda) y $d_1 = 30 \mu m$, $d_2 = 20 \mu m$ (derecha), siendo el ancho de la celda unitaria la suma de estas dos distancias, $d = d_1 + d_2$. Para este caso, el potencial químico de cada una de las capas de grafeno es distinto: $\mu_1 = 0.2 eV$ y $\mu_2 = 1.2 eV$. Al igual que antes, se pueden calcular las distancias de penetración de la onda evanescente según el valor de la cota α . Por ejemplo, las soluciones que satisfacen la condición $0.9 < K_i < 1.1$ describen modos superficiales (color azul) que pueden penetrar más de $0.14 d$, según el valor de d . Las soluciones que satisfacen la condición $0.5 < K_i < 0.7$ describen modos superficiales (color morado) que pueden penetrar más de $0.22 d$. De igual forma, los modos asociados a las soluciones que satisfacen la condición $0.1 < K_i < 0.3$ (color amarillo) pueden penetrar más de $0.53 d$. Claramente se observa que a mayor ancho de la celda unitaria mayor es la penetración de estos modos. Además, de manera interesante se puede observar que al acotar la parte imaginaria del vector de Bloch, la banda sufre un desdoblamiento el cual converge a la relación de dispersión de cada grafeno. Es decir, a pesar de que la región en donde los modos superficiales son permitidos (valores en donde se cumple que $|\frac{1}{2}Tr(M)| < 1$) tiende solamente a la relación de dispersión de mayor potencial químico ($1.2 eV$), cuando se impone la cota, se pueden observar modos superficiales evanescentes propagantes que tienden hacia la relación de dispersión de menor potencial químico ($0.2 eV$). En otras palabras sí se inducen modos superficiales debido a la presencia de cada grafeno, pero aquellos que están relacionados con la de menor potencial poseen distancia de penetración muy bajo, de ahí que prácticamente son nulos. Por último, para el caso de la polarización TE sólo se tomó la celda unitaria conformada por la bicapa de grafeno, es decir, el sistema aire - grafeno1 - aire - grafeno2. La figura (4.29) muestra el comportamiento de la banda proyectada considerando cuatro límites de la parte imaginaria del vector de Bloch y dos pares de distancias particulares, $d_1 = 0.1 \mu m$, $d_2 = 0.05 \mu m$ (izquierda) y $d_1 = 1 \mu m$, $d_2 = 0.1 \mu m$ (derecha), siendo el ancho de la celda unitaria la suma de estas dos distancias, $d = d_1 + d_2$. Para esta polarización, el potencial químico de cada una de las capas de grafeno es el mismo: $\mu_1 = \mu_2 = 0.2 eV$. Al igual que para la polarización TM, se pueden calcular las distancias de penetración de la onda evanescente según el valor de la cota α . Así, las soluciones que satisfacen la condición $0.005 < K_i < 0.01$ describen modos superficiales (color azul) que pueden penetrar más de $15.91 d$, una vez más según el valor de d . Los modos asociados a las soluciones que satisfacen la condición $0.001 < K_i < 0.005$ (color cyan) pueden penetrar más de $31.83 d$. Las soluciones que satisfacen la condición $0.0005 < K_i < 0.001$ describen modos superficiales (color amarillo) que pueden penetrar más de $159.15 d$. Finalmente, los modos asociados a las soluciones que satisfacen la condición $0. K_i < 0.0005$ (color rosa) pueden penetrar más de $318.3 d$. Una vez más, la región en gris representa los modos superficiales permitidos, es decir los valores en donde se cumple que $|\frac{1}{2}Tr(M)| < 1$. Vale la pena notar que el ancho de la celda unitaria para esta polarización es de dos a tres órdenes de magnitud menor que la celda unitaria empleada en la polarización TM. Por otro lado, también se observa, a partir de las distancias de penetración, que los modos TE son modos extremadamente extendidos [42].

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.3. ESTRUCTURAS DE BANDAS

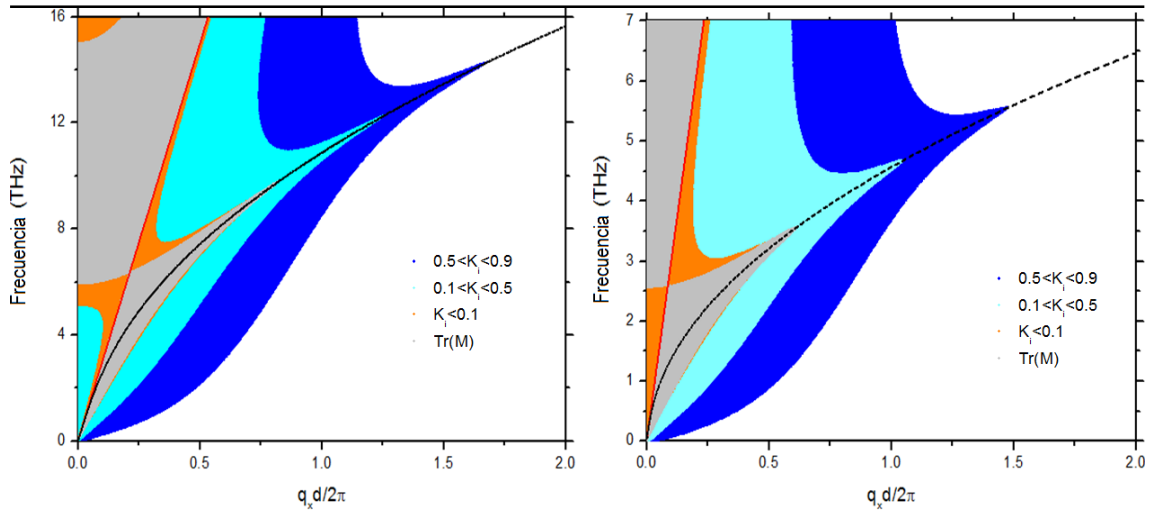


Figura 4.27: Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ para valores de $K_i < \alpha$ en donde $\alpha \in (0, 1)$. Los parámetros estructurales son: $\tau = 1 ps$, $d = 10 \mu m$, $\mu = 1.2 eV$ (izquierda) y $\mu = 0.2 eV$ (derecha). Se puede observar una deformación en la banda de los modos superficiales conforme cambia el valor de la cota α lo cual está relacionado con la distancia de penetración de los modos. Adicionalmente se observa que las bandas tienden a las relaciones de dispersión relacionadas con los dos valores del potencial químico anteriormente mencionados

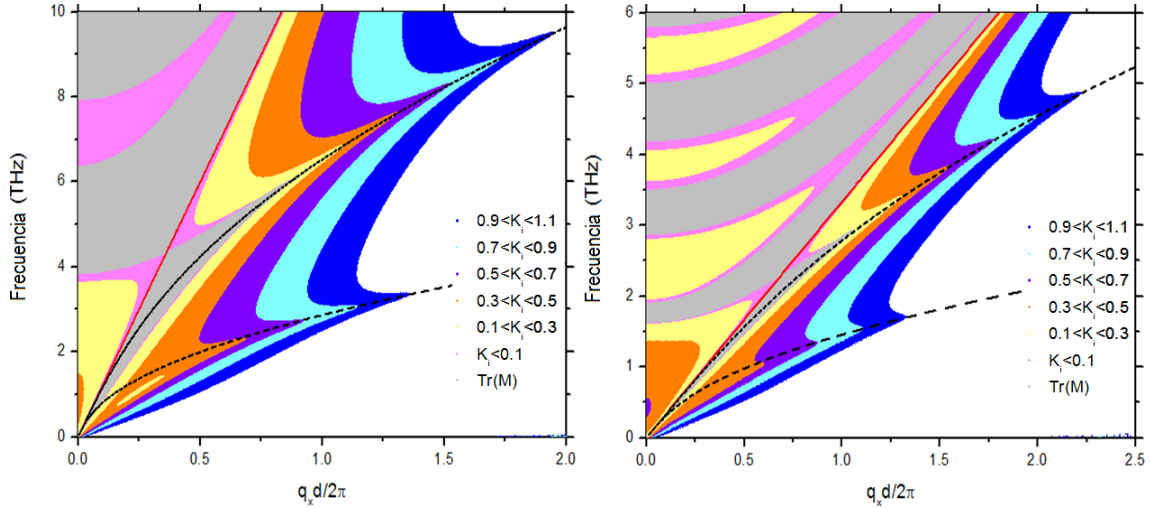


Figura 4.28: Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ para valores de $K_i < \alpha$ en donde $\alpha \in (0, 1)$. En este caso, los parámetros estructurales son: $\tau = 1 ps$, $\mu_1 = 0.2 eV$, $\mu_2 = 1.2 eV$, $d_1 = 10 \mu m$ y $d_2 = 15 \mu m$ (izquierda), $d_1 = 30 \mu m$ y $d_2 = 60 \mu m$ (derecha). Se puede observar un desdoblamiento de la banda la cual converge hacia las relaciones de dispersión asociadas al valor del potencial químico μ_1 y μ_2 .

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.4. CAMPOS INTERNOS

Adicionalmente, para esta polarización también se puede observar una deformación de la banda de acuerdo al valor de la cota α tal y como sucede para el caso TM, sin embargo a diferencia de éste, sucede algo muy peculiar e interesante. Para valores muy pequeños de α la solución de la ecuación de onda induce la presencia de un gap omnidireccional que como es bien sabido éstos son completamente diferentes a los gaps de Bragg.

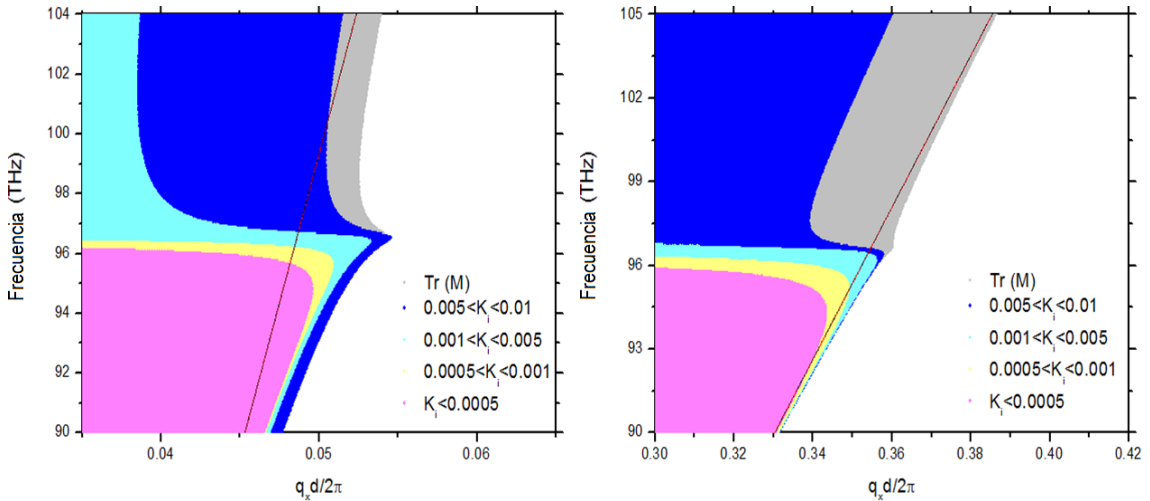


Figura 4.29: Gráfica de la banda proyectada en función del vector normalizado $q_x d/2\pi$ para valores de $K_i < \alpha$ en donde $\alpha \in (0, 1)$. Los parámetros estructurales son: $\tau = 1 ps$, $\mu_1 = \mu_2 = 0.2 eV$, $d_1 = 0.1 \mu m$ y $d_2 = 0.05 \mu m$ (izquierda) y $d_1 = 1 \mu m$ y $d_2 = 0.1 \mu m$ (derecha). En este caso se puede observar un desdoblamiento de la banda el cual origina una gap omnidireccional.

4.4. Campos internos

Para complementar y profundizar el estudio de un cristal fotónico, el análisis respecto al comportamiento de la radiación electromagnética dentro de la estructura es fundamental, ya que a partir de dicho comportamiento uno puede observar y justificar el efecto que la forma de esta radiación induce en el cristal fotónico, permitiendo explicar por ejemplo fenómenos de resonancia, de superficie, de bulk, etc. A continuación se muestran algunos resultados de las amplitudes de los campos en el interior del cristal todo esto a incidencia normal. Se retoma únicamente la estructura (celda unitaria) dieléctrico1-grafeno1-dieléctrico2-grafeno2 sin defecto el cual se ilustra en la figura (4.30). Cabe mencionar que en los cálculos realizados para esta sección se consideró al grafeno como un recubrimiento de espesor nulo. Antes de mostrar los resultados vale la pena hacer el desarrollo teórico para el cálculo de los campos internos para cualquier ángulo incidente (incidencia oblicua) y para ambas polarizaciones. Una vez más se demostrará que a incidencia normal la respuesta óptica debe ser la misma. Como fue mencionado anteriormente, el campo presente en cada medio, según la polarización empleada, es el resultado de la superposición de la radiación incidente y reflejada presente en dicho medio, el cual se ilustra en la siguiente

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.4. CAMPOS INTERNOS

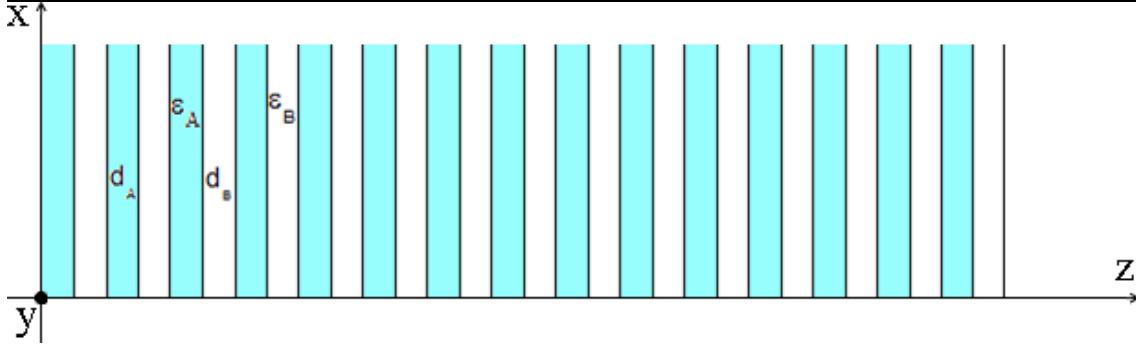


Figura 4.30: Estructura del cristal fotónico sin defecto $(AG_1BG_2)^{15}$. Se considera al grafeno como un recubrimiento de espesor nulo.

ecuación

$$E_{x/y} = a_j e^{ik_j z} + b_j e^{-ik_j z}, \quad (4.17)$$

en donde, a_j y b_j representan los coeficientes (la amplitud) del campo en el j -ésimo medio. A partir de esto se ve claramente que para describir la evolución del campo dentro de la estructura basta conocer los valores de los coeficientes a y b en cada medio. De las condiciones de frontera y de la matriz de transferencia se obtiene la relación entre las amplitudes del campo incidente y del j -ésimo medio, como se puede observar en la siguiente ecuación

$$\begin{pmatrix} a_j e^{ik_j d_j} + b_j e^{-ik_j d_j} \\ Y_j (a_j e^{ik_j d_j} - b_j e^{-ik_j d_j}) \end{pmatrix} = m_j \begin{pmatrix} 1 + r_f \\ Y_i (1 - r_f) \end{pmatrix},$$

en donde r_f es el coeficiente de reflexión del cristal fotónico considerado. Al realizar un poco de álgebra y reordenar la ecuación matricial anterior, se obtiene lo siguiente

$$\begin{pmatrix} a_j \\ b_j \end{pmatrix} = M_j \begin{pmatrix} 1 \\ r_f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ r_f \end{pmatrix},$$

siendo M_j la matriz de transferencia que relaciona el j -ésimo medio con el medio incidente. Finalmente, de esto último resulta claro que los coeficientes a_j y b_j quedan expresados en términos del coeficiente de reflexión r_f como sigue

$$\begin{aligned} a_j &= m_{11} + r_f m_{12} \\ b_j &= m_{21} + r_f m_{22}. \end{aligned}$$

Al sustituir los coeficientes a_j y b_j en (4.17) se obtiene la expresión del campo presente en el cristal fotónico. Para la polarización TM, el campo eléctrico total tiene dos componentes, $\vec{E} = (E_x, 0, E_z)$, mientras que para el caso de la polarización TE, el campo eléctrico total sólo tiene una componente, $\vec{E} = (0, E_y, 0)$. A este respecto, al calcular la intensidad del campo eléctrico total para la polarización TM, después de realizar un poco de álgebra, se obtiene

$$|E| = |E_x| \frac{k_j}{k_{jz}},$$

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO
4.4. CAMPOS INTERNOS

con $k_j = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_j^r \mu_j^r}$, $k_{jz} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_j^r \mu_j^r - \varepsilon_i^r \mu_i^r \sin^2 \theta}$ y E_x mostrado en la ecuación (4.17). Por otro lado, la intensidad del campo eléctrico total para la polarización TE queda expresada simplemente como

$$|E| = |E_y|,$$

con E_y mostrado en la ecuación (4.17). Nótese que tal y como se esperaba, fácilmente se puede apreciar que a incidencia normal se cumple que $|E| = |E_x| = |E_y|$, es decir, la respuesta óptica es la misma.

4.4.1. Cristal fotónico construido a base de grafeno sin defecto

La figura (4.31) muestra el espectro de transmisión para un cristal fotónico construido a partir de la celda unitaria dieléctrico1-dieléctrico2 (sin grafeno) y un cristal fotónico construido a partir de la celda unitaria dieléctrico1-grafeno1-dieléctrico2-grafeno2 (con grafeno) ambas repetidas quince veces y sin considerar un defecto, es decir, las estructuras $(AB)^{15}$ y $(AG_1BG_2)^{15}$. El valor de los dieléctricos son $\varepsilon_A = 2.56$ y $\varepsilon_B = 1.00$ y en todos los casos el valor del ancho de los dieléctricos es $d_A = d_B = 10 \mu m$. El valor del potencial químico de cada grafeno se tomó como $\mu_1 = \mu_2 = 0.2 eV$ mientras que el valor del tiempo de colisión, τ , es $10 ps$. En la figura (4.31) se observa de manera clara que, adicional a

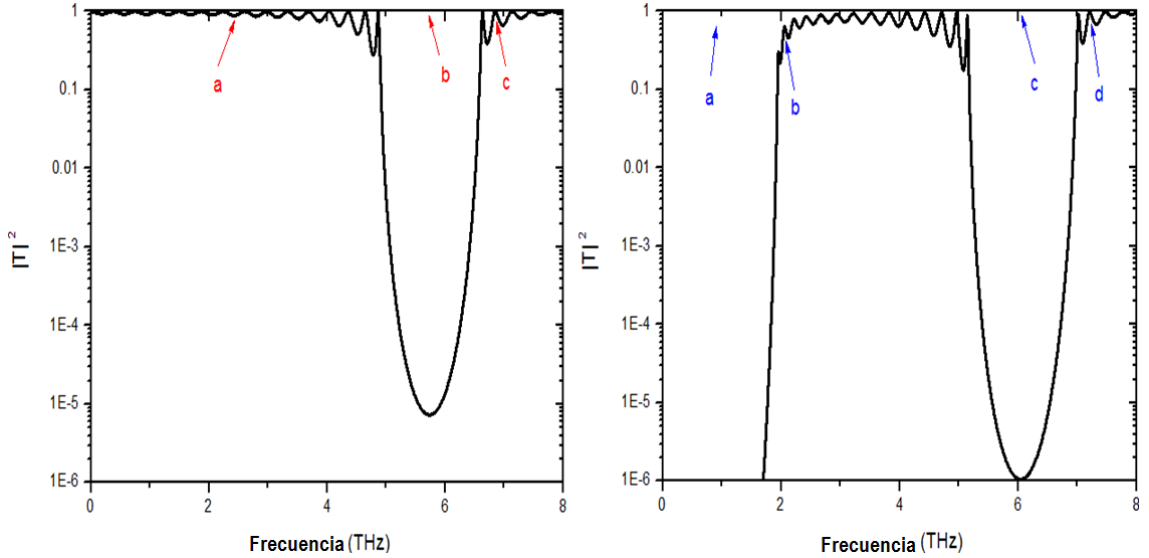


Figura 4.31: Espectro de reflexión del cristal fotónico sin defecto del sistema $(AB)^{15}$ (izquierda) y $(AG_1BG_2)^{15}$ (derecha). Se puede observar claramente que la presencia del grafeno induce un gap a bajas frecuencias totalmente diferente al gap de Bragg usual que surge de manera natural. Los parámetros estructurales son: $\varepsilon_A = 2.56$ y $\varepsilon_B = 1.00$, $d_A = d_B = 10 \mu m$, $\mu_1 = \mu_2 = 0.2 eV$ y $\tau = 10 ps$

la existencia de un gap de Bragg usual, la presencia de grafeno induce un gap para bajas frecuencias el cual podría estar asociado a un campo evanescente. Vale la pena mencionar que los campos evanescentes están asociados de manera particular a los modos superficiales que en este caso el grafeno posee como consecuencia de su conductividad. En las figuras

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.4. CAMPOS INTERNOS

se consideran tres (cuatro) frecuencias específicas que se emplean para el cálculo de los perfiles de campos. Así, la figura (4.32) muestra el comportamiento de los campos en

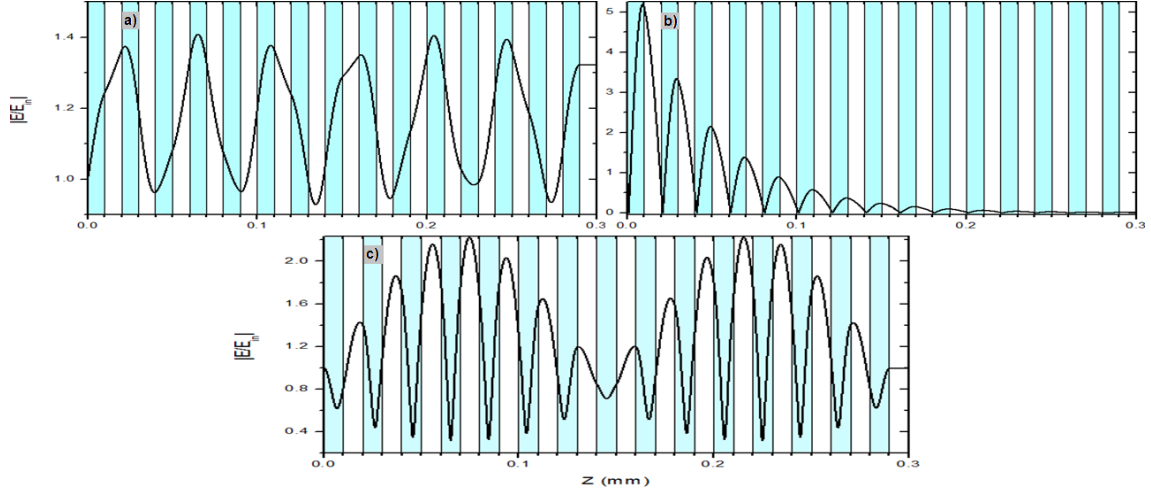


Figura 4.32: Perfil de los campos para la estructura sin grafeno (AB)¹⁵ tomando como referencia las frecuencias particulares: a) 2.43 THz , b) 5.73 THz y c) 6.85 THz . Los parámetros estructurales son los mismos que se emplearon en la figura (4.31).

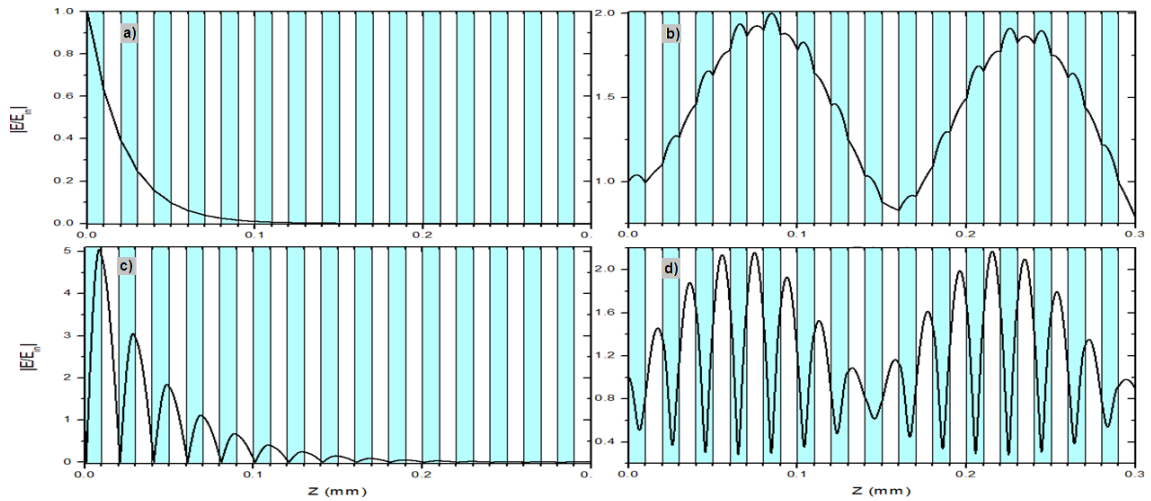


Figura 4.33: Perfil de los campos para la estructura con grafeno (AG_1BG_2)¹⁵ tomando como referencia las frecuencias particulares: a) 0.95 THz , b) 2.05 THz , c) 6.04 THz y d) 7.20 THz . Una vez más los parámetros estructurales son los mismos que se emplearon en la figura (4.31).

el interior del cristal fotónico sin grafeno para las frecuencias particulares mostradas en color rojo en la figura (4.31): a) 2.43 THz (punto medio entre el gap y el origen), b) 5.73 THz (a la mitad del gap) y c) 6.85 THz (después del gap). Se puede apreciar un comportamiento oscilatorio usual para el punto a) y c), de igual forma el comportamiento

CAPÍTULO 4. PROPIEDADES ÓPTICAS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS CONSTRUIDAS A BASE DE GRAFENO

4.4. CAMPOS INTERNOS

oscilatorio amortiguado es una característica peculiar en los gaps de Bragg, es decir los campos son consistentes con lo mostrado en el espectro de reflexión y con lo que sucede para el caso de cristales fotónicos sin algún medio que posea absorción. Por otro lado, la figura (4.33) muestra el comportamiento de los campos en el interior del cristal fotónico con grafeno para las frecuencias particulares mostradas en color azul en la figura (4.31): a) 0.95 THz (a la mitad del primer gap), b) 2.05 THz (después del primer gap), c) 6.04 THz (a la mitad del gap de Bragg) y d) 7.20 THz (después del gap de Bragg). Para la frecuencia marcada en c) y d) se observa justo un comportamiento asociado a un gap de Bragg, de hecho es similar a lo que sucede con la estructura sin grafeno, sólo que se puede apreciar una ligera diferencia en la magnitud como consecuencia de la presencia de absorción pero no en la forma del campo. Los campos interesantes están asociados a los puntos a) y b) que justamente están relacionados con el gap que el grafeno induce en el cristal fotónico. A diferencia del cristal sin grafeno, la presencia del primer gap induce un campo evanescente pero no oscilatorio como sucede en c). Además en b) se observa que los máximos de los campos se encuentran en la parte media de cada dieléctrico y los mínimos se posicionan en las interfaces de grafeno, siendo totalmente distinto a lo que se aprecia en d) en donde los máximos ocurren en la parte media del dieléctrico de menor permitividad y los mínimos en el dieléctrico de mayor permitividad. Todo lo expuesto hasta aquí es para un cristal fotónico unidimensional constituido de dos dieléctricos alternados por capas de grafeno en principio con libertad de potencial químico.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo de tesis se presentó un estudio sobre las propiedades ópticas de estructuras dieléctricas construidas con grafeno. De manera preliminar, se realizó un análisis de la conductividad superficial de carga asociada al grafeno a partir de la cual es posible el estudio de dichas propiedades ópticas. Se analizó la respuesta óptica de las estructuras mencionadas previamente considerando ambas polarizaciones a incidencia normal e incidencia oblicua tomando en cuenta capas de grafeno en orden creciente, por ejemplo, una monocapa (incrustación de un grafeno entre dos medios dieléctricos), una bicapa de grafeno, etc. Para el caso de los sistemas multicapas se analizaron sus estructuras de banda, al igual que los perfiles de los campos para un cristal fotónico construido a base de grafeno sin defecto. Las contribuciones más relevantes de este trabajo son las siguientes:

- A partir del estudio de la conductividad asociada al grafeno se puede determinar el rango de frecuencias en donde existen modos de superficie en el grafeno. Por otro lado, este rango de frecuencias se puede modificar a partir de la modulación del potencial químico (variación de los portadores de carga) cuyo valor experimental indica que éste puede tomar valores en el intervalo $[0.12 \text{ eV}, 1.2 \text{ eV}]$.
- Se demuestra la existencia de dos modos de superficie en el grafeno asociados a cada polarización, TM y TE, respectivamente. Estos modos no pueden coexistir en la misma región de frecuencias debido al confinamiento de los campos asociados a la vibración de la carga, es decir, este confinamiento requiere que la parte imaginaria de la conductividad sea positiva para la polarización TM y negativa para la polarización TE. Todo esto en la región de los THz's (infrarojo lejano).
- Mediante la técnica ATR, se pueden excitar estos modos de superficie dando origen a los plasmones de superficie usuales (polarización TM) y a otro tipo de propagación superficial ('plasmones') asociado a la polarización TE. Se demuestra que los primeros existen en regiones de baja frecuencia y los segundos en regiones de frecuencias mayores todo esto siendo consistente con el punto anterior. De manera adicional, para la polarización TM se observan otros dos mínimos de reflexión los cuales no son predichos por la respectiva relación de dispersión electromagnética, estando éstos asociados a efectos de interferencia y pérdidas del grafeno. Por otro lado, también se demuestra que los 'plasmones' TE se encuentran más confinados respecto a los

plasmones TM a partir de dos aspectos. El primero, su relación de dispersión electromagnética prácticamente coincide con la línea de luz del vacío. Segundo, al excitarlos mediante la técnica ATR, se observa que la posición del mínimo en el espectro de reflexión tiene una variación del orden de la cienmilésima parte respecto al valor del ángulo crítico (θ_c). Adicionalmente, existen diferencias sustanciales sobre la distancia de separación prisma-grafeno según la polarización empleada. Para el caso de la polarización TM se emplea una distancia máxima de $25 \mu m$ para 5 THz, mientras que para la polarización TE se emplea una distancia de $48 \mu m$ para 92 THz. Este último hecho es indicio de que los modos de superficie TE son modos extremadamente extendidos respecto a los plasmones TM los cuales poseen una distancia de decaimiento del orden de unas cuantas longitudes de onda.

- Para el caso de la bicapa de grafeno, su relación de dispersión ya no es soluble analíticamente. Se puede observar un efecto de transferencia total de energía (absorción perfecta) para distancias específicas de los medios dieléctricos empleados y frecuencias características según la polarización empleada.
- En el caso de las bandas proyectadas, se observa para la polarización TM la existencia de modos de superficie en regiones de baja frecuencia, mientras que para el caso de la polarización TE, para frecuencias mayores se puede apreciar la banda después de la línea de luz, lo cual indica la existencia de modos de superficie para tal polarización. Todo esto siendo consistente con lo dictado por la parte imaginaria de la conductividad. Es importante mencionar que para esta última polarización, es necesario emplear un potencial químico de 0.2 eV para observar la banda después de la línea de luz.
- En el caso de los perfiles de los campos, los resultados presentados se obtuvieron a incidencia normal. Para el cristal fotónico construido a base de grafeno sin defecto, se pudo observar un gap inducido por la presencia grafeno. Este gap adicional es totalmente distinto al convencional (gap de Bragg) y origina campos evanescentes para bajas frecuencias. Cerca del gap de Bragg los campos se comportan de manera similar con o sin grafeno notándose una ligera diferencia en magnitud pero no en forma como consecuencia de la presencia de absorción en el grafeno.

Bibliografía

- [1] F. Villa-Villa, J. A. Gaspar-Armenta and A. Mendoza-Suárez, *J. of Electromagn. Waves and Appl.*, Vol. 21, No. 4, 485-499 (2007).
- [2] F. García de Abajo, *Science* 339, 917-918 (2013).
- [3] Mermin N. D., *Phys. Rev.* 176, 250 - 254 (1968).
- [4] Venables J. A., Spiller G. D. T. and Hanbucken M., *Rep. Prog. Phys.* 47, 399 - 459 (1984).
- [5] Evans J. W., Thiel P. A. and Bartelt M. C., *Surf. Sci. Rep.* 61, 1 - 128 (2006).
- [6] Novoselov K. S. et al., *Science* 306, 666 - 669 (2004).
- [7] Novoselov K. S. et al., *Procl. Natl. Acad. Sci. USA* 102, 10451 - 10453 (2005).
- [8] Wallace P. R., *Phys. Rev.* 71, 622 - 634 (1947).
- [9] Neto A. H. C. et al., *Rev. Mod. Phys.* 81, 109 - 162 (2009).
- [10] Morozov S. V. et al., *Phys. Rev. Lett.* 100, 16602 (2008).
- [11] Chen J. H., Jang C., Xiao S., Ishigami M. and Fuhrer M.S., *Nat. Nanotechnol.* 3, 206 - 209 (2008).
- [12] Lin Y. M. et al., *Science* 327, 662 (2010).
- [13] Stampfer C. et al., *Nano Lett.* 8, 2378 - 2383 (2008).
- [14] Han M.Y., Ozyilmaz B., Zhang Y.B. and Kim P., *Phys. Rev. Lett.* 98, 206805 (2007).
- [15] Stankovich S. et al., *Nature* 442, 282 - 286 (2006).
- [16] Schedin F. et al., *Nat. Mater.* 6, 652 - 655 (2007).
- [17] Shan C. et al., *Anal. Chem.* 81, 2378 - 2382 (2009).
- [18] Yoo E. et al., *Nano Lett.* 8, 2277 - 2282 (2008).
- [19] Balandin A. A. et al., *Nano Lett.* 8, 902 - 907 (2008).
- [20] Lee C., Wei X., Kysar J. W. and Hone J., *Science* 321, 385 - 388 (2008).

- [21] Kuzmenko A. B., Van Heumen E., Carbone F. and Van der Marel D., *Phys. Rev. Lett.* 100, 117401 (2008).
- [22] Nair R. R. et al., *Science* 320, 1308 (2008).
- [23] Bae S. et al., *Nat. Nanotechnol.* 5, 574 - 578 (2010).
- [24] Schniepp H. C. et al., *J. Phys. Chem. B* 110, 8535 - 8539 (2006)
- [25] Blake P. et al., *Nano Lett.* 8, 1704 - 1708 (2008).
- [26] Wang X., Zhi L. and Mullen K., *Nano Lett.* 8, 323 - 327 (2007).
- [27] Matyba P. et al., *Nano Lett.* 4, 637 - 642 (2010).
- [28] Meyer J. C., Girit C. O., Crommie M. F. and Zettl A., *Nature* 454, 319 - 322 (2008).
- [29] Andrew J. Mannix et al., *Science* 350, 1513-1516, (2015).
- [30] Shengli Zhang et al., *Angew. Chem.* 127, 3155 - 3158 (2015).
- [31] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* 12, 570 (1957).
- [32] Choon How Gan, Hong Son Chu, and Er Ping Li, *Phys. Rev. B* 85, 125431 (2012).
- [33] S. Adam, E. H. Hwang, V. M. Galitski and S. Das Sarma, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 104, 18392 (2007).
- [34] K. S. Novoselov et al., *Nature (London)* 438, 197 (2005).
- [35] J. Ye et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 108, 13002 (2011).
- [36] D. K. Efetov and P. Kim, *Phys. Rev. Lett.* 105, 256805 (2010).
- [37] P. Yeh, *Öptical Waves in Layered Media;* (John Wiley and Sons, 2005).
- [38] G. W. Hanson, *J. Appl. Phys.* 103, 064302 (2008).
- [39] F. H. L. Koppens, D. E. Chang, and F. J. Garcia de Abajo, *Nano Lett.* 11, 3370 (2011).
- [40] S. A. Mikhailov and K. Ziegler, *Phys. Rev. Lett.* 99, 016803 (2007).
- [41] F. Ramos-Mendieta, J. A. Hernández-López, and M. Palomino-Ovando, *AIP Advances* 4, 067125 (2014).
- [42] F. Ramos-Mendieta, *J. Appl. Phys.* 117, 133101 (2015).
- [43] H. Kinto-Ramírez, M. A. Palomino-Ovando and F. Ramos-Mendieta, *Prog. Elect. Res. B*, Vol. 35, 133-149, (2011)