Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Estudio de propiedades ópticas en estructuras periódicas construidas con materiales bidimensionales

---

Esta tesis es presentada al ***Colegio de Física*** *como requisito parcial para la obtención del grado de*

Doctora en Ciencias (Física Aplicada)

Autor:
Laura A. Tepanecatl

Asesores:
Dra. Martha A. Palomino
Dr. Gregorio Hernández

29 de septiembre de 2021

Agradecimientos

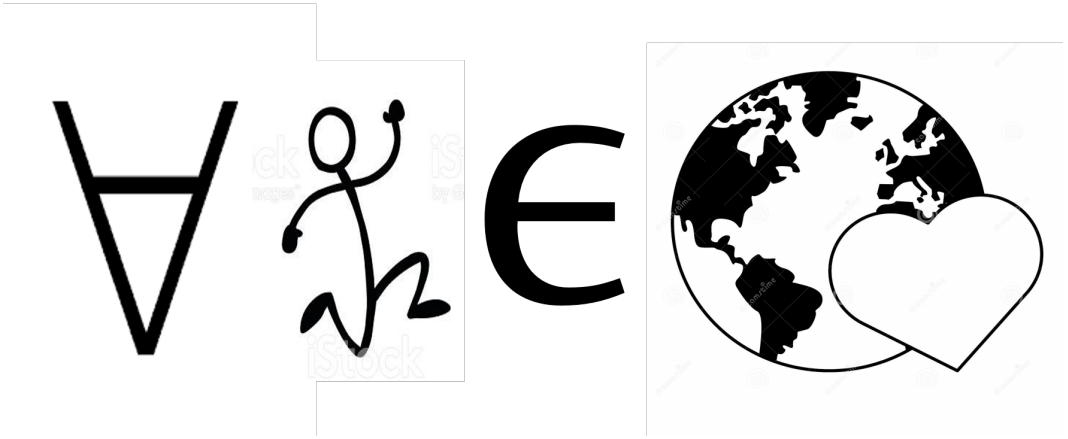


Figura 1

Índice general

Agradecimientos II

Lista de Figuras V

1. Materiales Bidimensionales 1
- 1.1. Aspectos Generales del Grafeno . . . 2
  - 1.1.1. Estructura cristalina . . . 2
  - 1.1.2. Propiedades electrónicas . . . 2
  - 1.1.3. Propiedades ópticas . . . 3
- 1.2. Aspectos Generales del Fosforeno Negro . . . 3
  - 1.2.1. Estructura cristalina . . . 3
  - 1.2.2. Propiedades electrónicas . . . 4
  - 1.2.3. Propiedades ópticas . . . 5

2. Conductividad 7
- 2.1. Función de respuesta . . . 8
- 2.2. Conductividad eléctrica: Fórmula de Kubo . . . 11
- 2.3. Conductividad eléctrica: Fórmula de Drude . . . 12
- 2.4. Conductividad eléctrica en el grafeno . . . 12
- 2.5. Conductividad eléctrica en el fosforeno . . . 14

3. Método de Matriz de Transferencia 15
- 3.1. Material 2D como recubrimiento . . . 15
- 3.2. Material 2D en la aproximación efectivo . . . 21

4. Propiedades ópticas de estructuras periódicas construidas con materiales 2D 23
  - 4.0.1. Espectros de Reflexión y Estructura de Bandas K . . . 23
  - 4.0.2. Frecuencia de corte . . . 28
- 4.1. Modos de superficie (Plasmones) S . . . 33
- 4.2. Bandas Proyectadas . . . 37
- 4.3. Campos Internos . . . 39

5. Conclusiones 43

Bibliografía 45

Índice de figuras

1. II

1.1. La figura de la izquierda muestra la vista lateral del BP y en ella se puede apreciar la distancia interplanar, por otro lado la figura del lado derecho es una vista superior del BP en la que se indican los ángulos de enlace. Esta figura ha sido tomada de [1] 4

3.1. Monocapa de un medio 2D entre dos medios dielectricos 16
3.2. Bicapa de un medio 2D 18
3.3. Cristal fotónico unidemensional con un medio 2D considerando a este último en la aproximación de espesor efectivo 22

4.1. Cristal fotónico unidemensional con material 2D. La dirección de crecimiento del cristal inicia en $z = 0$. 24
4.2. Reflexión, absorción y bandas fotónicas para un cristal fotónico a base de grafeno (negro) y fosforeno (rojo y azul para las direcciones de armchair (AC) y zig-zag (ZZ) respectivamente), la distancia entre láminas es de $d = 5\mu m$ y el medio envolvente es caractirizado por una constante dieléctrica $\varepsilon_d = 1$. (a) Reflexión (línea sólida) y absorción (línea punteado) para una muestra de 10 capas de grafeno (fosforeno) / dieléctrico; (b) Vector de onda de Bloch real (sólido) e imaginario (punteado) para la estructura infinita correspondiente. 27
4.3. En el panel (a), se muestra el esquema de un cristal fotónico con celda unitaria conformada de un dieléctrico y un medio 2D. En el panel (b), el medio efectivo. 29
4.4. Mapa de contorno que muestra (a) los regímenes de frecuencia donde se encuentra la frecuencia de corte para una cristal fotonico basada en grafeno, (b) la desviación entre las frecuencias de corte calculadas por el enfoque del medio efectivo y de las bandas fotónicas de la estructura periódica y (c) la variación de la frecuencia de corte en función de la distancia entre las laminas de grafeno. Las densidades de portadores y las distancias entre capas se encuentran en el rango $7 \times 10^{15}\mathrm{m}^{-2} < n < 7 \times 10^{17}\ \mathrm{m}^{-2}$ 31
4.5. Mapa de contorno que muestra los regímenes de frecuencia de la frecuencia de corte de un cristal fotónico a base de fosforeno con el campo eléctrico que se encuentra en la dirección (a) zig-zag y (b) armchair. Los niveles de dopaje y la distancia entre capas se encuentran en el rango $7 \times 10^{15}\mathrm{m}^{-2} < n < 7 \times 10^{17}\mathrm{m}^{-2}$ y $0.5\mu\mathrm{m} < d < 5\mu\mathrm{m}$ respectivamente.(c) Variación de la frecuencia de corte a medida que la distancia entre capas se cambia para las dos rutas que se muestran en el panel (a y b). 32

4.6. Frecuencia de corte en función de los parámetros del material. Los parámetros estructurales se fijan (d =2.0μm) y se varían las densidades de portadores en (a) grafeno y (b) fosforeno. (c) La densidad del portador se fija y el espesor óptico se varía para tres materiales dieléctricos diferentes que llenan el espacio entre capas. Para los tres paneles, las líneas continuas se calculan usando EMA. En los paneles (b) y (c) AC (ZZ) significa campo eléctrico alineado en la dirección del armchair (zig-zag) y G para grafeno. 34

4.7. Relación de dispersión de plasmones se superficie bajo polarización S, el cálculo ha sido realizado para pocas capas de grafeno con $\mu = 0.2$ eV y $\mu = 0.3$ eV. (a) Relaciones de dispersión para monocapa (azul) y bicapa (cian) para el nivel de dopaje $\mu = 0{,}2$ eV (abajo) y $\mu = 0.3$ eV (arriba) con $\tau \to \infty$. (b) acercamiento de la relación de dispersión correspondiente a la parte superior de la figura (a) alrededor de $f = 145.08$ THz y (c) acercamiento de la relación de dispersión correspondiente a la parte superior de la figura (a) alrededor de $f = 96.72$ THz. 36

4.8. Mapas de vectores de ondas imaginarios correspondientes a un cristal fotónico a base de grafeno con una distancia entre capas de $d = 0.1$ μm; aparecen bandas plasmónicas alrededor de las frecuencias de transición de la absorción entre bandas en el grafeno. Se considera el dopaje homogéneo con (a) $\mu = 0.2$ eV y (b) $\mu = 0.3$ eV; (c) Se muestran los componentes reales (línea continua) e imaginaria (línea punteada) de la conductividad óptica del grafeno para $\mu = 0.2$ eV (negro) y $\mu = 0.3$ eV (rojo) ($\sigma_0 = \pi e^2/\hbar$). La absoción considera para los tres paneles es $\tau \to \infty$. 37

4.9. Mapas de vectores de ondas imaginarios correspondientes a un cristal fotónico con celda unitaria dieléctrico A/grafeno/dieléctrico B con una distancia entre láminas de $d = 0.1$ μm , $\mu_A = 0.2$ eV y $\mu_B = 0.3$ eV para (a) polarización P y (b) polarización S. Se ha considerado la absorción $\tau \to \infty$ 38

4.10. Perfiles de campo eléctrico para modos plasmónicos mostrados en la figura 4.11a (modo A) y 4.11b (modo B). (a) el modo A corresponde a un cristal fotonico primario con $\mu = 0.2$ eV y (b) el modo B corresponde a un cristal fotonico secundario con $\mu_A = 0.2$ eV y $\mu_B = 0.3$ eV. También hemos considerado dos valores diferentes para τ' : $\tau = \infty$ (línea continua) y $\tau = 10$ ps (línea de puntos). En estas figuras el campo eléctrico resultante es normalizado con respecto al campo eléctrico inicial. 40

4.11. Estructura de bandas para (a) un cristal fotónico a base de grafeno con $\mu = 0.2$ eV (b) con $\mu_A = 0.2$ eV y $\mu_B = 0.3$ eV. (c) Espectros de reflexión correspondientes a ATR en configuración Otto para una muestra de cristal fotónco primario (roja) y secundaria (negra) con dos distancias prisma-multicapa diferentes: $d = 0.5$ μm (punteado) y $d = 1.0$ μm (sólido). . . . 41

Introducción

Las propiedades ópticas de los materiales son aquellas que se ponen de manifiesto cuando la luz incide sobre ellos y resultan de gran importancia para el posible desarrollo de nuevas aplicaciones, en especial con el surgimiento de nuevos materiales. En este sentido tras el descubrimiento del grafeno en 2004 [2] se ha logrado un gran avance en las técnicas de exfoliación que facilitan la síntesis de estructuras de pocas capas a partir de cualquier material estratificado 3D [3], generándose así nuevos materiales 2D que presentan una amplia gama de composiciones que incluyen casi todos los elementos de la tabla periódica y por lo tanto ofrecen una gran variedad de características físicas novedosas.

Entre la galería de materiales de pocas capas, el grafeno y el fósforo negro (BP) se han estudiado extensamente [4–6], el primero corresponde a un semiconductor con gap cero con una estructura a base de átomos de carbono dispuestos en una red de panal de abeja [7], mientras que en el fosforeno los átomos de fósforo forman una estructura ondulada o hexagonal en zigzag, las cuales le proporcionan a dicho material características anisotrópicas, así como una banda prohibida directa de 2.0 eV [8]. En ambos casos los niveles de dopaje se pueden ajustar con la aplicación de un campo eléctrico externo [9, 10], lo que los hace prometedores para la tecnología optoelectrónica. En este sentido, se ha propuesto incorporar grafeno y fosforeno en dispositivos ópticos como reflectores multicapas [11], guías de ondas [12], switches [6, 13] y fototransistores [8].

A este respecto, se han reportado trabajos que exploraron las analogías entre multicapas grafeno-dieléctrico y estructuras metálica en términos de propiedades de transmitancia, reflectancia y absorbancia óptica[14], este última caracteristica es la más compleja de estudiar dado que en escala macroscópica, la absorción de la luz es responsable del color del medio en cuestión; por otro lado en una escala microscópica, es decir, en la escala de los fotones la absorción es indicador de que la energía de un fotón es transmitida a otras partículas (núcleos, átomos o moléculas) provocando transiciones entre sus niveles de energía. Dicha energía electrónica absorbida se puede transformar, a través de distintos procesos, en re–emisión de otros fotones, calor, plasmón, entre otros. El plasmón es la cuantización de las oscilaciones del plasma, un caso particular de este fenómeno es el que ocurre en una interfaz formada por una estructura metal-dieléctrico y es conocido como plasmón polaritón de superficie (PSS). Tomando en cuenta que un polaritón es el resultado de acoplar un fotón con una onda de polarización eléctrica (la cual también es llamada TE o S) o magnética (TM ó P), los PSS son oscilaciones de la densidad de carga de electrones superficiales que pueden existir en una interfaz metal/dieléctrico y son provocadas por acoplamiento de luz, a una cierta frecuencia. Asociado a ellos,

hay un campo electromagnético que se propaga a lo largo de dicha interfaz y que decae perpendicular y exponencialmete a la misma. En este sentido estructuras a base grafeno-dieléctrico y fosforeno-dieléctrico han demostrado ser capaz de soportar PSs (que da lugar a bandas plasmónicas)[15] así como de modos Tamm [16] de superficie que pueden ser modulados por el nivel de Fermi en capas de grafeno (fosforeno) haciendo posible tener un reflector sintonizable [17].

El interés en esta tesis es la de hacer un estudio sistemático de las propiedades ópticas de cristales fotónicos a base de grafeno (fosforeno), empleando la aproximación de medio efectivo (EMA por sus siglas en inglés) para establecer la frecuencia de plasma efectiva de la estructura así como la frecuencia de corte en la región de THz, de esto se desprende el análisis de las minibandas plasmónicas bajo polarización S en estructuras de grafeno, finalmente mostramos que los modos plasmonicos superficiales en muestras finitas pueden excitarse con la técnica de Reflexión Total Atenuada (ATR) en configuración Otto[1].

Así esta tesis se ha organizado de la siguiente manera, en le capítulo 1 se muestran algunas propiedades del grafeno y fosforeno, en el capítulo 2 se presenta una breve descripción del formalismo de aproximación de fase aleatoria para derivar la conductividad del grafeno y fosforeno por medio de el formalismo de Kubo y Drude respectivamente. En el capítulo 3 se presenta el método de matriz de transferencia para la polarización S, el cual es la base para la obtención de los resultados presentados en esta tesis, y que se exponen en el capítulo 4, en este comenzamos con la respuesta óptica a incidencia normal de los sistemas conformados por monocapas de grafeno y fosforeno alternados con dieléctricos, dicho resultados será comparado con la estructura de bandas a incidencia normal, permitiéndonos definir si la frecuencia de corte y la frecuencia de plasma obtenida por medio de EMA son correctas. Posteriormente se deducen las relaciones de dispersión electromagnética y las bandas a incidencia oblicua para establecer la región de frecuencia para la cual es posible que existan plasmones de superficie bajo polarización S en estructuras de grafeno, finalmente en el capitulo 5 se presentan las conclusiones más importantes de este trabajo.

[1] Esta conficuración consta de un prima cristalino, un medio dielectrico y un medio metalico, posicionados justo en ese orden

Capítulo 1

Materiales Bidimensionales

Desde la primera exfoliación del grafeno [2, 18] en 2004 éste ha sido objeto de numerosas investigaciones debido a que su bajo espesor lo hace prometedor para la miniaturización de dispositivos electrónicos [12, 19], adicionalmente el hecho de que los portadores se encuentren confinados al plano le proporciona propiedades físicas únicas y extraordinarias, entre las que destacan la alta movilidad de portadores, su alta conductividad eléctrica y térmica, su alta trasparencia, entre otras [20, 21]. Dichas propiedades generaron altas expectativas alrededor de este material a tal magnitud que se consideró como el sustituto ideal del silicio, sin embargo, su falta de banda prohibida lo hace ineficiente para aplicaciones electrónicas y optoelectrónicas, no obstante este suceso impulsó la fabricación de nuevos materiales bidimensionales (2D) de tal forma que actualmente estos abarcan un gran número de los elementos de la tabla periódica, lo que provee una amplia variedad de características electrónicas que incluyen metales, semimetales, aislantes y semiconductores con banda prohibida directa e indirecta.

Actualmente el número de investigaciones relacionadas con materiales 2D está en crecimiento debido a las propiedades intrínsecas que presentan y la facilidad para el ajuste de las mismas, ya que esto puede lograrse a través de diversos enfoques como el número de láminas, dopamiento, ajuste de campo externo y la fabricación de heteroestructuras[22, 23]. Esta forma de modulación de los materiales 2D ofrecen una amplia gama de propiedades con excelentes rendimientos lo que hace que esta familia sea de alto potencial en el área de nanoelectrónica, optoelectrónica así como un gran número de aplicaciones tecnológicas [12, 19].

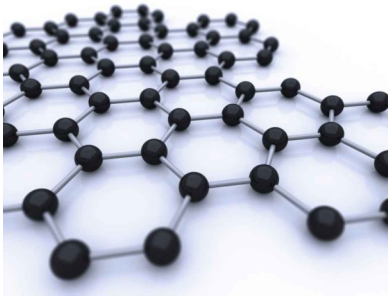
A continuación discutiremos algunas de las características más importantes del grafeno y fosforeno negro.

1.1. Aspectos Generales del Grafeno

La existencia del grafeno se remonta a los años treinta cuando Philip Russell calculó su estructura electrónica de bandas [24], sin embargo han tenido que pasar varias décadas para que su estudio fuera retomado, esto debido a que no se había logrado su síntesis, pero en el año 2004 los científicos Andréy Geim y Konstantín Novosiólov consiguieron aislar el grafeno a temperatura ambiente por el método de la cinta adhesiva [2], lo que les valió el premio Nobel de Física en 2010 y abrió las puertas a este nuevo material y desde entonces el interés por el grafeno no ha hecho más que crecer debido a sus interesantes y novedosas características intrínsecas.

1.1.1. Estructura cristalina

El grafeno está formado por una sola capa de átomos de carbono, que forman una red cristalina bidimensional de tipo hexagonal, que consta de un átomo de carbono en cada vértice de la red, en consecuencia cada átomo tiene tres vecinos cercanos que se une entre sí mediante enlaces covalentes razón por la cual el grafeno presenta una gran resistencia a la ruptura.



El átomo de carbono tiene cuatro electrones en su capa de valencia, y en el caso del grafeno tres de ellos tienen una hibridación sp^2 y se encuentran formando enlaces covalentes tipo σ en el plano con un ángulo de 120°, el cuarto electrón se ubica en un orbital perpendicular tipo p y es el responsable de la gran movilidad electrónica que presenta el grafeno [25, 26].

1.1.2. Propiedades electrónicas

El grafeno ha demostrado ser el mejor conductor eléctrico que ha existido, esto debido a que no tiene banda prohibida y a que el nivel de Fermi se ubica justo en el punto donde la banda de valencia y conducción se unen (ambas tienen forma cónica y se tocan en un solo punto que corresponde al máximo de la banda valencia y al mínimo de la banda de conducción), esto implica que los electrones son libres de pasar de una banda a otra con muy poca energía, por lo cual el grafeno se puede clasificar como un material semimetálico. Esta característica es una de las principales causas por las que se pensó que el grafeno sería el sustituto ideal del silicio sin embargo al no poseer una banda prohibida, la promesa del grafeno para la electrónica y la fotónica no se puede realizar, pero se trabaja en ellos ya que se han planteado diversas técnicas para generar una banda

prohibida en dicho medio, una de ellas es el dopaje del grafeno con Aluminio(Al), pues se ha demostrado que la adición de este puede modificar significativamente las propiedades electrónicas del grafeno, de tal manera que se induce una banda prohibida de 0.40 eV a 0.82 eV dependiendo de la disposición del Al [27], otra manera de inducir un gap es por medio de la aplicación de un campo eléctrico perpendicular a una o varias capas de grafeno y puede ser ajustado por medio del voltaje o del número de capas [28].

1.1.3. Propiedades ópticas

El grafeno es un material que se puede considerar prácticamente transparente en todo el rango de longitudes de onda de la zona visible y ultravioleta, ya que absorbe casi el 2.3 % de la intensidad de la luz blanca que llega a su superficie (transmitancia aproximada del 97.7 %), lo cual tiene su explicación en la ausencia de banda prohibida, ya que esto permite las transiciones ópticas interbanda e intrabanda [29], por lo tanto, al igual que la banda prohibida la absorción puede ser modulada por medio de la aplicación de un campo externo y del número de láminas [30].

1.2. Aspectos Generales del Fosforeno Negro

El fósforo negro (BP) es uno de los alótropos cristalino del fósforo, sintetizado por primera vez por P. W. Bridgman al tratar el fósforo blanco a elevadas presiones (13 000 kg/cm^3) y temperaturas (200^{o}C)[31], sin embargo fue hasta el año 2014 que este retomó importancia al incluirse a la familia de estructuras 2D [1]. A diferencia del grafeno el fosforeno negro es un semiconductor, que puede ser inducido a conducir la electricidad o bloquear su flujo, esta capacidad que tiene el fosforeno de actuar como interruptor es la característica que define a los transistores, y que hace posible activar la lógica binaria que opera en el núcleo de un chip de computadora, adicionalmente las propiedades intrínsecamente anisotrópicas electrónicas, de transporte, optoelectrónicas, termoeléctricas y mecánicas del fosforeno que resultan de su estructura arrugada en conjunto con su fácil fabricación han inspirado el diseño de nuevos nanodispositivos [8].

1.2.1. Estructura cristalina

El fosforeno negro (BP) es un material cristalino conformado por dos láminas de átomos de fósforo (P) (con una hibridación sp^3) unidos por enlace covalente en el plano e interacciones de Van der Wals entre capas, bajo condiciones normales el BP tiene una configuración ortorrómbica que resulta en una forma de panal de abejas arrugada con

dos direcciones desiguales dentro del plano basal: la dirección x (o borde armchair) y la dirección y (borde en zig-zag) cuyo origen radica en las diferentes longitudes y ángulos de enlace; para los átomos más cercanos en el mismo plano la longitud de enlace es de 0.222 nm con un ángulo de 96.34° por triada mientras que la longitud de enlace de los átomos entre monocapas es de 0.2227 nm con un ángulo de 103.69° [1], como se aprecia en la figura 1.1.

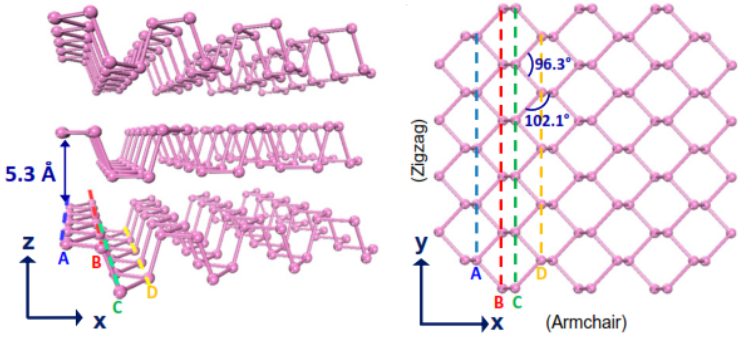


FIGURA 1.1: La figura de la izquierda muestra la vista lateral del BP y en ella se puede apreciar la distancia interplanar, por otro lado la figura del lado derecho es una vista superior del BP en la que se indican los ángulos de enlace. Esta figura ha sido tomada de [1]

Esta estructura tan única, es el origen de la anisotrópia en diferentes efectos físico (estructura de banda electrónica, transporte eléctrico, termoeléctrico y mecánico) que dan lugar a el diseño de nanodispositivos que explotan esta selectividad direccional [4].

1.2.2. Propiedades electrónicas

La monocapa de fosforeno negro (BP) es un semiconductor de gap directo con valor de 2.0 eV, sin embargo, esto puede ser fácilmente modificado con la variación de algunos parámetros. Se ha demostrado que a medida que el número de láminas aumenta el espacio entre las bandas disminuye hasta llegar a 0.3 eV (la disminución en el valor de la banda prohibida puede atribuirse al efecto de confinamiento cuántico), comportamiento que está descrito por A/N + B con N el número de láminas, A y B representan las energía de enlace del fósforo negro ontenidas por aproximaciones computacionales [32]. A diferencia de otros materiales 2D la topología de la banda sigue siendo la misma con el cambio de grosor de láminas, sin embargo, no se puede decir lo mismo con la aplicación de tensión pues esta provoca que la banda sufra una transición directa-indirecta-directa, el 2 % de compresión es suficiente para que la transición directa a indirecta tenga lugar en la dirección de zigzag [33] y una expansión del 11.3 % ajusta la banda de indirecta a directa nuevamente [5].

La banda prohibida del BP puede variar de 0.3-2.0 eV, más que cualquier otro material 2D, de tal forma que cubre el intervalo de energía que existe entre el grafeno (0.0–0.2 eV) y los dicalcogenuros de metales de transición (TMD´s de sus siglas en inglés) (1.0–2.0 eV). Dicha característica le proporciona la BP su importancia dado que le permite tener su propio sector de aplicaciones diferentes a las del grafeno y los TMD pero igual de novedosas [34].

1.2.3. Propiedades ópticas

Debido a la estructura cristalina del BP este presenta una fuerte anisotropia óptica al absorber la luz polarizada en la dirección armchair pero es transparente a la luz polarizada en la dirección zigzag para regiones infrarrojas y una fracción de la luz visible del espectro [35], sin embargo esto puede ser fácilmente modificado dado que la banda prohibida es un factor fundamental para determinar el apantallamiento electrónico y las correspondientes interacciones electrónicas en el material, los espectros ópticos y los efectos excitónicos del fosforeno de pocas capas también se controlarán mediante los métodos empleados para la modulación del gap [33].

Capítulo 2

Conductividad

Existen innumerables situaciones en física en las que es necesario calcular la respuesta de un sistema a una pequeña perturbación dependiente del tiempo, dicho comportamiento es posible de conocer por medio de la función de respuesta la cual se deduce a continuación en forma general además se muestra como de ella se desprende la conductividad tipo Kubo y Drude, conjuntamente se deducen las conductividades para el Grafeno y Fosforeno Negro que se utilizaran en este trabajo para la caracterización de dichos medios y que se han tomado de [9, 36].

Comenzaremos por dedudir la relación entre el campo eléctrico aplicado y el campo interno en un cristal dieléctrico, para ellos es necesario conocer la relación entre la polarización dieléctrica $\vec{P}$[1] y el campo eléctrico macroscopico $\vec{E}$ (que figuran en las ecuaciones de Maxwell) dentro del medio.

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{4\pi}{c}\vec{j} + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{D} \tag{2.1}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \tag{2.2}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi\rho \tag{2.3}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \tag{2.4}$$

Aquí c es la velocidad de la luz, $\vec{H}$ el campo magnético, el cual se relaciona con la inducción magnética $\vec{B}$ por medios de $\vec{B} = \mu\vec{H}$ con μ la permeabilidad magnética. Por otro lado la relación entre el campo eléctrico y la densidad de flujo eléctrico esta dictada por $\vec{D} = \varepsilon\vec{E}$ con ε la permitividad.

[1] La polarización $\vec{P}$ se define como el momento dipolar por unidad de volumen considerando el promedio sobre todo el volumen de una celda cristalina

Consideremos un cristal dieléctrico uniforme isotrópico, el cual es sometido a un campo eléctrico externo $\vec{E_0}$ provocando que el cristal se polarice, con lo cual surgirá un campo eléctrico de las cargas polarizadas $\vec{E_{pol}}$; Así el campo resultante es $\vec{E} = \vec{E_0} - \vec{E_{pol}}$. Para caracterizar el dieléctrico hacemos uso del vector de polarización y el campo resultante, las cuales se relacionan por $\vec{P} = \chi\vec{E}$ donde χ es la función respuesta, la cual es adimensional y nos indica la forma en como se comporta el medio al ser expuesto a un campo eléctrico externo y su valor es típico para cada medio.

2.1. Función de respuesta

En esta sección hacemos el cálculo de la respuesta de un mar uniforme de electrones sometido a un potencial vectorial $\vec{A}(\vec{r}, t)$ dependiente de la posición $\vec{r}$ y el tiempo t

Es bien sabido por la electrodinámica clásica que un campo electromagnético se puede representar en términos de un potencial escalar ϕ y un potencial vectorial $\vec{A}$ según las fórmulas

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= -\vec{\nabla}\phi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}, t) \end{aligned} \tag{2.5}$$

Aquí c es la velocidad de la luz, $\vec{E}$ y $\vec{B}$ son los campos eléctricos y magnéticos respectivamente, los cuales son invariantes bajo la siguiente transformación

$$\begin{aligned} \phi(\vec{r}, t) &\to \phi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c}\frac{\partial \Lambda(\vec{r}, t)}{\partial t} \\ \vec{A}(\vec{r}, t) &\to \vec{A}(\vec{r}, t) + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{r}, t) \end{aligned} \tag{2.6}$$

Donde $\Lambda(\vec{r}, t)$ es una función escalar diferenciable, pero por lo demás arbitraria, de $\vec{r}$ y t. A menudo, se puede aprovechar la libertad en la elección de Λ para asignar el problema dado a otro equivalente que sea más fácil de resolver o que ofrezca diferentes conocimientos. Por ejemplo, la energía potencial $V(\vec{r}, t) = -e\phi(\vec{r}, t)$ (e la carga del electrón) siempre puede eliminarse mediante una elección adecuada de $\Lambda(\vec{r}, t)$, así dicha transformación da como resultado la aparición de un potencial vectorial.

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{c}{e}\int_0^t \vec{\nabla}V(\vec{r}, t')dt' \tag{2.7}$$

Por lo tanto, el problema de calcular la respuesta del sistema a un potencial escalar se transforma en el problema de calcular la respuesta del mismo sistema a un tipo especial de potencial vectorial, es decir, uno que pueda escribirse como el gradiente de una función escalar. Tal campo vectorial se llama longitudinal porque su transformada de Fourier, $\vec{A}(\vec{q})$($\vec{q}$ es el vector de onda), es paralela a $\vec{q}$ para cada $\vec{q}$. También hay potenciales vectoriales transversales (como los que se utilizan para describir un campo magnético estático), cuya transformada de Fourier es perpendicular a $\vec{q}$ para cada $\vec{q}$. El campo vectorial más general no es longitudinal ni transversal, pero puede escribirse como una superposición de los dos tipos. A continuación estudiamos la respuesta que presenta un mar de electrones a un campo general.

El Hamiltoniano perturbado es [37]

$$\hat{H}_{\vec{A}}(t) = \frac{1}{2m}\sum_i \left(\hat{p}_i + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r}_i, t)\right)^2 + U(\vec{r}_i, ...\vec{r}_N) \tag{2.8}$$

Donde U es la función de energía potencial total, $\hat{p}$ es el operador de momento, m la masa del electrón e i hace referencia al i-ésimo electrón. Desarrollando la Ec. (2) y considerando solo terminos lineales en $\vec{A}$, el hamiltoniano toma la forma estándar

$$\hat{H}_{\vec{A}}(t) = \hat{H} + \frac{e}{c}\int \hat{j}_p(\vec{r}) \cdot \vec{A}(\vec{r}, t)d\vec{r} \tag{2.9}$$

Donde

$$\hat{j}_p(\vec{r}) = \frac{1}{2m}\sum_i [\hat{p}_i\delta(\vec{r} - \vec{r}_i) + \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)\hat{p}_i] \tag{2.10}$$

La ventaja crucial de $\vec{j}_p$ es que no depende de $\vec{A}$, y por lo tanto es la cantidad "intrínseca" natural acoplada a $\vec{A}$ y por esta razón es que definimos la función de respuesta lineal $\chi_{j_{p\alpha}j_{p\beta}}(\vec{q}, \omega)$ (ω representa la frecuencia de oscilación) como la función de respuesta lineal de la densidad de corriente paramagnética al potencial del vector externo, es decir

$$\langle\hat{j}_{p\alpha}\rangle(\vec{q}, \omega) = \frac{e}{c}\sum_\beta \sum_{\vec{q}'} \chi_{j_{p\alpha}j_{p\beta}}(\vec{q}, \vec{p}', \omega)A_\beta(\vec{q}', \omega) \tag{2.11}$$

Donde α y β son etiquetas para los componentes cartesianos de $\vec{j}_p$ y $\vec{A}$. Aquí $\chi_{j_{p\alpha}j_{p\beta}}(\vec{q}, \vec{q}', \omega)$ es la transformada de Fourier de la función respuesta, finalmente la respuesta de la corriente física se obtiene sumando a la ecuación anterior el valor esperado de la corriente

diamagnética que obviamente ya es lineal en la perturbación (para más detalle de esta álgebra se puede recurrir a [37]):

$$\chi^J_{\alpha\beta}(\vec{q},\vec{q}',\omega) = \frac{n}{m}\delta_{\alpha\beta} + \chi_{j_{p\alpha}j_{p\beta}}(\vec{q},\vec{q}',\omega) \tag{2.12}$$

Aquí n es la densidad de electrones. Por otro lado recordamos la relación general de la función de respuesta [37]:

$$\chi_{j_{p\alpha}j_{p\beta}}(\vec{q},\vec{q}',\omega) = \frac{1}{L^d}\chi_{j_{p\vec{q}\alpha}j_{\overrightarrow{p-q}\beta}}(\omega) \tag{2.13}$$

$L = 2\pi$ y d es la dimensión. De particular relevancia es el caso de los sistemas translacionalmente invariantes (homogéneos), o incluso desordenados, pero de "autopromediación". En tales casos, la función de respuesta de corriente paramagnética-corriente, así como la función completa, se convierte en una función de un solo vector de onda, es decir, tenemos

$$\chi_{j_{p\alpha}j_{p\beta}}(\vec{q},\vec{q}',\omega) = \chi_{j_{p\alpha}j_{p\beta}}(\vec{q},\omega)\delta_{\vec{q},\vec{q}'} \tag{2.14}$$

y

$$\chi^J_{j_{p\alpha}j_{p\beta}}(\vec{q},\omega) = \frac{n}{m}\delta_{\alpha,\beta}\chi_{j_{p\alpha}j_{p\beta}}(\vec{q},\omega) \tag{2.15}$$

Algunas propiedades interesantes de la función de respuesta de un mar de electrones son inmediatamente evidentes a partir de consideraciones de simetría. En primer lugar, la homogeneidad y la isotropía del sistema aseguran que el tensor $\chi^J_{j_{p\alpha}j_{p\beta}}(\vec{q},\omega)$ pueda descomponerse en componentes longitudinales y transversales, en relación con la dirección de $\vec{q}$, dependiendo cada una solo de la magnitud de $\vec{q}$. En otras palabras, la corriente inducida por un potencial vectorial puramente longitudinal es puramente longitudinal, y el inducido por un potencial vectorial puramente transversal es puramente transversal. Más formalmente, uno puede escribir

$$\chi^J_{j_{p\alpha}j_{p\beta}}(\vec{q},\omega) = \chi_L(q,\omega)\frac{q_\alpha q_\beta}{q^2} + \chi_(q,\omega)\left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{q_\alpha q_\beta}{q^2}\right) \tag{2.16}$$

Donde χ_L y χ_T son las funciones de respuesta corriente-corriente en los canales longitudinales y transversales respectivamente, es decir

$$\vec{j}_{L(T)}(q,\omega) = \frac{e}{c}\chi_{L(T)}(q,\omega)\vec{A}_{L(T)}(q,\omega) \tag{2.17}$$

$\vec{j}_{L(T)}$ y $\vec{A}_{L(T)}$ son los componentes longitudinales (transversales) de la densidad de corriente y el potencial vectorial.

Debería ser evidente a partir de la discusión anterior que el problema de calcular la respuesta actual a un potencial vectorial es un poco complicado en comparación con el caso especial de calcular la respuesta de densidad a un potencial escalar. Sin embargo, la formulación del potencial vectorial es mucho más general, ya que también incluye el cálculo de la respuesta a ondas electromagnéticas transversales y, en el límite estático, la respuesta de magnetización orbital a un campo magnético.

2.2. Conductividad eléctrica: Fórmula de Kubo

Consideremos ahora la respuesta de un sistema electrónico a un campo eléctrico uniforme, $\vec{E}(t)$, que se puede representar como la derivada en el tiempo de un potencial vectorial uniforme $\vec{A}(t) = -c\int_0^t \vec{E}(t')dt'$. La transformada de Fourier de $\vec{A}(t)$ es $\vec{A}(\omega) = -i\frac{c}{\omega}\vec{E}(\omega)$. De acuerdo a la Ec. (2.17) y (2.15) la componente $q = 0$ de la corriente de carga inducida viene dada por

$$-ej_\alpha(0,\omega) = \frac{ie^2}{\omega}\sum_\beta \chi^J_{\alpha\beta}(0,0,\omega)E_\beta(\omega) \tag{2.18}$$

Aquí la notación refleja el hecho de que, como ya se señaló, en un sistema genérico no homogéneo $\chi^J_{\alpha\beta}$ y $\chi_{j_{p\alpha}j_{p\beta}}$ son funciones de dos vectores de onda y una frecuencia. El factor que multiplica $E_\beta(\omega)$ en las ecuaciones anteriores es la conductividad eléctrica macroscópica (para más detalle de la deducción de ésta consultar [37])

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{ie^2}{\omega}\chi^J_{\alpha\beta}(0,0,\omega) = \frac{ie^2}{\omega}\left[\frac{n}{m}\delta_{\alpha\beta} + \chi_{j_{p\alpha}j_{p\beta}}(0,0,\omega)\right] \tag{2.19}$$

Esta relación generalmente se conoce como la fórmula de Kubo para la conductividad eléctrica. La función de respuesta corriente-corriente, es decir la Ec.(2.13), en el límite de longitud de onda larga es:

$$\chi_{j_{p\alpha}j_{p\beta}}(0,0,\omega) = \frac{1}{m^2L^d}\chi_{P_\alpha P_\beta}(\omega) \tag{2.20}$$

Donde $\hat{P}_\alpha$ es uno de los componentes del impulso total. En consecuencia, la fórmula de Kubo se puede reescribir como:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{ine^2}{m\omega}\left[\delta_{\alpha\beta} + \frac{\chi_{P_\alpha P_\beta}(\omega)}{nmL^d}\right] \tag{2.21}$$

2.3. Conductividad eléctrica: Fórmula de Drude

La fórmula clásica para la conductividad de Drude $\sigma = ne^2\tau/m$ [38] (τ es el tiempo de decaimiento del electrón) se deriva de la función de respuesta corriente-corriente, es decir, de la Ec.(2.21), el resultado da una expresión microscópica explícita para $1/\tau$ a segundo orden en la interacción electrón-impureza. Empezamos presentando el modelo hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{1}{L^d}\sum_{\vec{k}} U(\vec{k}) n_{\vec{k}}^{(i)} \hat{n}_{-\vec{k}} \tag{2.22}$$

Donde $U(\vec{k})$ es la transformada de Fourier del potencial de impurezas electrónicas y $n_{\vec{k}}^{(i)} = \sum_i e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_i}$ es la transformada de Fourier de la densidad de impurezas, $\vec{R}_i$ denota las posiciones de las impurezas. Asumiendo que hay N_i impurezas distribuidas al azar tenemos $|n_{\vec{k}}^{(i)}|^2 = N_i$ para cada $\vec{k}$.

En ausencia de impurezas, $\hat{P}_x$ es una constante de movimiento, entonces $\chi_{P_xP_x} = 0$ y $\sigma(\omega)$ se reduce al valor de electrones libres $\frac{ie^2n}{m\omega}$. Para continuar, observe que podemos, sin pérdida de generalidad, representar la conductividad en la forma

$$\sigma(\omega) = \frac{\frac{ie^2n}{m\omega}}{\omega + \frac{i}{\tau(\omega)}} \tag{2.23}$$

Donde $\frac{1}{\tau(\omega)}$ es una función compleja que depende de la frecuencia y describe el efecto de las impurezas, esta función se obtiene por medio de

$$\frac{1}{\tau(\omega)} = \frac{i\omega}{nmL^d}\chi_{P_xP_x}(\omega) \tag{2.24}$$

2.4. Conductividad eléctrica en el grafeno

El grafeno es modelado como una superficie local e isotrópica, infinitesimalmente delgada caracterizada por una conductividad superficial de carga σ. Esta conductividad ha

sido calculada por diferentes métodos como el aproximación de fase aleatoria [39], la aproximación del campo autoconsistente [40] y el formalismo de Kubo [36], siendo este ultimo el utilizado para este trabajo.

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, dicha afirmación implica que cerca del nivel de la energía de Fermi, las propiedades electrónicas del grafeno se describen a partir de la teoría de Dirac y el fenómeno de los electrones no masivos resulta relevante. Todo esto da como resultado una conductividad óptica con contribuciones intrabanda e interbanda. En el límite local, en donde los efectos de dispersión son despreciables, es decir, $\omega >> \tau^{-1}$ y $\omega \geq q_x v_F$, es posible obtener una expresión analíticas de la conductividad óptica a partir del formalismo de Kubo para temperaturas finitas (T), la cual puede expresarse como:

$$\sigma(\omega,\mu_c,\tau,T) = e^2\frac{\omega+i\tau^{-1}}{i\pi\hbar^2}\left[\frac{1}{(\omega+i\tau^2)^2}\int_0^\infty \varepsilon\left(\frac{\partial F(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}-\frac{\partial F(-\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right)d\varepsilon - \int_0^\infty \frac{F(-\varepsilon)-F(\varepsilon)}{(\omega+i\tau^{-1})^2-4(\varepsilon/\hbar)^2}d\varepsilon\right] \tag{2.25}$$

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, $F(\varepsilon)$ es la distribución de Fermi-Dirac y k_B es la contante de Boltzmann. El primer término de la Ec.(2.25) corresponde a las contribuciones intrabanda y el segundo a las interbanda. La primera integral se resolvió de manera analítica y se obtiene,

$$\sigma_{intra} = \frac{2ie^2k_BT}{\pi\hbar^2(\omega+i\tau^{-1})}\left(\frac{\mu_c}{k_BT}+2Ln(e^{-\mu/k_BT}+1)\right) \tag{2.26}$$

Que en el límite $\mu_c >> k_BT$ se reduce a una expresión tipo Drude

$$\sigma_{intra} = \frac{ie^2\mu_c}{\pi\hbar^2(\omega+i\tau^{-1})} \tag{2.27}$$

Por otro lado, la segunda integral solo se puede aproximar de manera analítica en el límite $\mu_c >> k_BT$ como

$$\sigma_{inter} = \frac{e^2}{4\hbar}\left[1+\frac{i}{\pi}Ln\left(\frac{\hbar(\omega+i\tau^{-1})-2\mu_c}{\hbar(\omega+i\tau^{-1})+2\mu_c}\right)\right] \tag{2.28}$$

Así la conductividad total será la suma de la expresión (2.27) y (2.28)

2.5. Conductividad eléctrica en el fosforeno

Las propiedades fotónicas de una monocapa de fosforeno negro pueden describirse empleando un modelo Drude semiclásico simple [9]:

$$\sigma_{jj}(\omega) = \frac{iD_j}{\pi(\omega + i\frac{\eta}{\hbar})} \quad \text{con} \quad D_j = \pi\frac{e^2 n}{m_j} \tag{2.29}$$

j denota la dirección en cuestión (armchair o zig zag), D_j es el peso de Drude, $\hbar$ es la constante de Planck, η es la tasa de relajación y n el dopaje electrónico. La masa del electrón a lo largo de la dirección x y dirección y es determinada por:

$$m_{cx} = \frac{\hbar}{\frac{2\gamma^2}{\Delta} + \eta_c} \quad \text{y} \quad m_{cy} = \frac{\hbar}{2\nu_c} \tag{2.30}$$

Para una monocapa de fosforeno negro los parámetros son $\gamma = 4a/\pi$ eVm, Δ =2.0 eV, $\eta_c = \hbar/0.4\mathrm{m}_0$ y $\nu_c = \hbar/1.4\mathrm{m}_0$, a es la longitud de escala del BP y π/a es el ancho de la zona de Brillouin.

Capítulo 3

Método de Matriz de Transferencia

El método de la matriz de transferencia es una herramienta poderosa en el análisis de la propagación de la luz a través de medios dieléctricos en capas. La idea central radica en el hecho de que los campos eléctricos o magnéticos en una posición pueden relacionarse con los de otras posiciones a través de una matriz. Dentro de este marco, hay dos tipos de matrices: una es la matriz de transmisión que conecta los campos a través de una interfaz y la otra es la matriz de propagación que conecta los campos que se propagan a una distancia dentro de un medio homogéneo, y al hacer el producto de estas, se obtendrá una matriz que contenga la información de todo el sistema.

3.1. Material 2D como recubrimiento

Consideramos la propagación de la luz a través de una interfaz formada por una capa de material 2D que separa dos dieléctricos con constantes dieléctricas ε_1 y ε_2, como se muestra esquemáticamente en la figura 3.1 la capa del medio 2D tiene una conductividad óptica σ y se encuentra ubicada en $z = 0$. Suponemos una ona incidente con polarización TE (S) y que se propaga en la dirección z.

Como punto de partida tomamos una onda plana propagándose a lo largo del cristal fotónico.

$$\vec{E} = E_j e^{i(\vec{k}_j \cdot \vec{r} - \omega t)} \hat{u} \quad \text{y} \quad \vec{H} = H_j e^{i(\vec{k}_j \cdot \vec{r} - \omega t)} \hat{u} \tag{3.1}$$

Cuando estas ondas se propagan a través de medios con diferentes constates dieléctricas se tienen expresiones para las ondas incidentes, reflejadas y transmitidas, como se muestra a continuación

$$E^i e^{i(\vec{k}_j\cdot\vec{r}-\omega t)} \quad , \quad E^r e^{i(\vec{k}_j\cdot\vec{r}-\omega t)} \quad \text{y} \quad E^t e^{i(\vec{k}_j\cdot\vec{r}-\omega t)} \tag{3.2}$$

Aquí $E^i(E^r)$ representa la amplitud de la onda propagándose por el medio inicial hacia la derecha (hacia la izquierda) mientras que E^t hace referencia a la amplitud de la onda que se propaga hacia la derecha en el medio adyacente. Para este caso en particular las polarizaciones S y P pueden desacoplarse y como resultado pueden tratarse por separado. En este trabajo solo estamos interesados en el caso de polarización S, para el cual las condiciones de frontera están dictadas por las siguientes expresiones

$$E_{2y} - E_{1y} = 0 \quad \text{y} \quad H_{2x} - H_{1x} = \sigma E_y \tag{3.3}$$

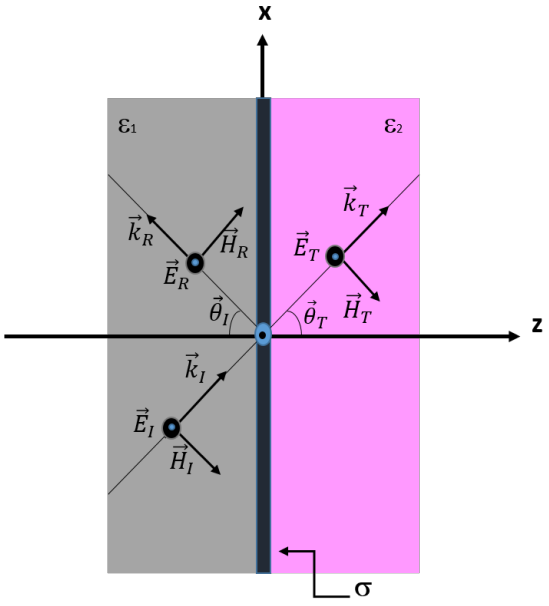


FIGURA 3.1: Monocapa de un medio 2D entre dos medios dielectricos

De acuerdo con el arreglo empleado, ver figura 3.1, los campos presentes en el medio con constante dieléctrica ε_1 (color gris) son de la forma

$$E^i_{yj}\hat{j}e^{i(\vec{k}_j\cdot\vec{r}-\omega t)} + E^r_{yj}\hat{j}e^{-i(\vec{k}_j\cdot\vec{r}-\omega t)}$$
$$(H^i_{xj}\hat{i} + H^i_{zj}\hat{k})e^{i(\vec{k}_j\cdot\vec{r}-\omega t)} + (H^r_{xj}\hat{i} + H^r_{zj}\hat{i})e^{-i(\vec{k}_j\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

Mientras tanto para el medio con constante dieléctrica ε_2 (color magenta), los campos son

$$E^t_{y(j+1)}\hat{j}e^{i(\vec{k}_{j+1}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$
$$(H^t_{x(j+1)}\hat{i}+H^t_{z(j+1)}\hat{k})e^{i(\vec{k}_{j+1}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

La relación de las componentes tangenciales de los campos electromagnéticos, surgen de la ecuación de Maxwell $\nabla\times\vec{E}=i\mu\omega\vec{H}$, y son las siguientes.

$$H^{i/t}_{xj}=-Y_jE^{i/t}_{yj} \quad \text{y} \quad H^r_{xj}=Y_jE^r_{yj} \tag{3.4}$$

$Y_j=\omega\varepsilon_j/k_{jz}$, $k_{zj}=\frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon_j\mu_j-(\varepsilon_0\mu_0 sin\theta_i)^2}$, ε_j y μ_j son la permitividad eléctrica y la permeabilidad magnética del j-ésimo medio, θ_i es el ángulo de incidencia. Primero obtendremos una expresión analítica de la matriz de transferencia de una estructura dieléctrico 1/medio 2D/dieléctrico 2 como se muestra en la Fig. 3.2 y posteriormente aumentaremos el número de láminas de tal manera que se logre observar un comportamiento bien definido del cual se obtendrá finalmente la matriz de transferencia para un sistema de j- celdas. Entonces en este caso, para $z<0$ las componentes de los campos están dados por

$$E^i_{y1}e^{ik_{1z}\cdot z}+E^r_{y1}e^{-ik_{1z}\cdot z}$$
$$H^i_{x1}e^{ik_{1z}\cdot z}+H^r_{x1}e^{-ik_{1z}\cdot z}$$

Para la región $z>0$, tenemos

$$E^t_{y2}e^{ik_{2z}\cdot z} \quad \text{y} \quad H^t_{x2}e^{ik_{2z}\cdot z} \tag{3.5}$$

En los cálculos siguientes la parte armónica de los campos se omite solo por convención, ya que al aplicar las condiciones de frontera dicho factor se cancela, entonces, aplicando las condiciones de frontera descritas anteriormente tenemos

$$E^t_{y2} - (E^i_{y1} + E^r_{y1}) = 0$$
$$H^t_{x2} - (H^i_{x1} + H^r_{x1}) = \sigma E^t_{y2}$$

Haciendo uso de la relación entre los campos llegamos a

$$E^i_{y1} + E^r_{y1} = E^t_{y2}$$
$$Y_1(E^i_{y1} - E^r_{y1}) = (\sigma + Y_2)E^t_{y2}$$

Esto puede ser expresado en forma matricial, como se muestra a continuación

$$\begin{bmatrix} E^i_{y1} \\ E^r_{y1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ Y_1 & -Y_1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \sigma + Y_2 & \sigma - Y_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E^t_{y2} \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.6}$$

Continuemos con el caso de dos láminas de material 2D como se muestra en 3.2

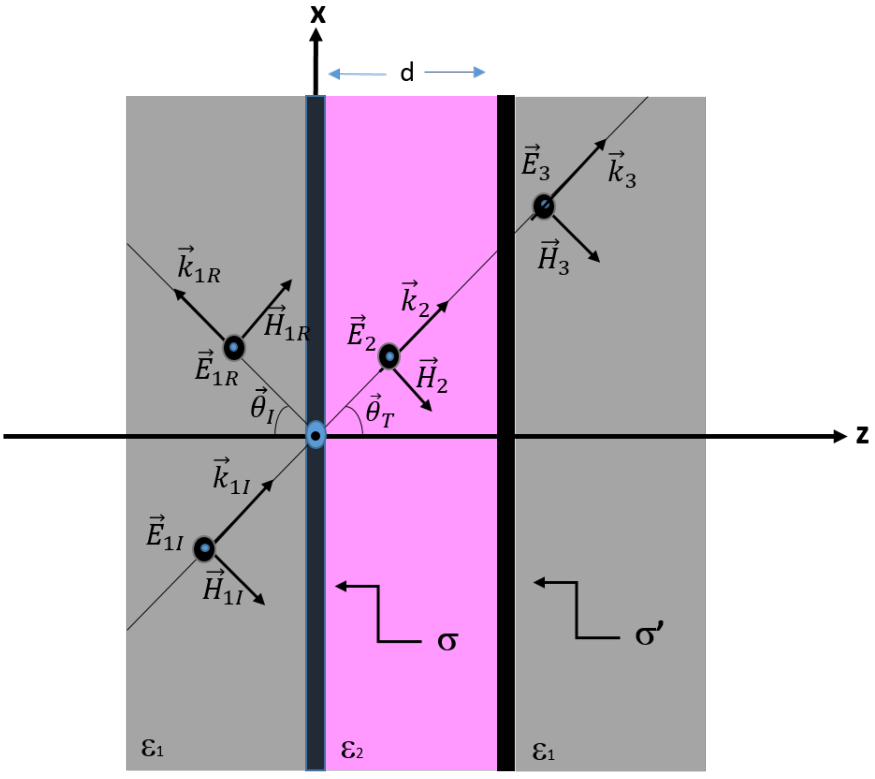


FIGURA 3.2: Bicapa de un medio 2D

En este caso para $z < 0$ los campos son

$$E^i_{y1}e^{ik_{1z}\cdot z} + E^r_{y1}e^{-ik_{1z}\cdot z}$$
$$H^i_{x1}e^{ik_{1z}\cdot z} + H^r_{x1}e^{-ik_{1z}\cdot z}$$

Para $0 < z < d$ los campos se puede expresar como:

$$E^i_{y2}e^{ik_{2z}\cdot z} + E^r_{y2}e^{-ik_{2z}\cdot z}$$
$$H^i_{x2}e^{ik_{2z}\cdot z} + H^r_{x2}e^{-ik_{2z}\cdot z}$$

Mientras para $z > d$ los campos son

$$E^t_{y3}e^{ik_{3z}\cdot(z-d)}$$
$$H^t_{x3}e^{ik_{3z}\cdot(z-d)}$$

Aplicando las condiciones de frontera en $z = 0$, obtenemos

$$(E^i_{y2} + E^r_{y2}) - (E^i_{y1} + E^r_{y1}) = 0$$
$$(H^i_{x2} + H^r_{x2}) - (H^i_{x1} + H^r_{x1}) = \sigma(E^i_{y2} + E^r_{y2})$$

Haciendo uso una vez más de la relación entre los campo obtenemos

$$(E^i_{y2} + E^r_{y2}) = (E^i_{y1} + E^r_{y1})$$
$$Y_1(E^i_{y1} - E^r_{y1}) = (\sigma + Y_2)E^i_{y2} + (\sigma - Y_2)E^r_{y2}$$

Expresando las últimas ecuaciones en forma matricial obtenemos

$$\begin{bmatrix} E^i_{y1} \\ E^r_{y1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ Y_1 & -Y_1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \sigma + Y_2 & \sigma - Y_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E^t_{y2} \\ E^r_{y2} \end{bmatrix} \tag{3.7}$$

Aplicando condiciones de frontera en $z = d$, llegamos a

$$E^t_{y3} - (E^i_{y2}e^{ik_{2z}\cdot d} + E^r_{y2}e^{-ik_{2z}\cdot d}) = 0$$
$$H^t_{x3} - (H^i_{x2}e^{ik_{2z}\cdot d} + H^r_{x2}e^{-ik_{2z}\cdot d}) = \sigma E^t_{y3}$$

Expresando estas últimas ecuaciones en términos de la impedancia y el campo eléctrico, tenemos

$$E^i_{y2}e^{ik_{2z}\cdot d} + E^r_{y2}e^{-ik_{2z}\cdot d} = E^t_{y3}$$
$$Y_2(E^i_{y2}e^{ik_{2z}\cdot d} + E^r_{y2}e^{ik_{2z}\cdot d}) = (\sigma + Y_3)E^t_{y3}$$

Esto también se expresa en forma matricial para obtener así

$$\begin{bmatrix} E^i_{y2} \\ E^r_{y2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik_{2z}\cdot d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{2z}\cdot d} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ Y_2 & -Y_2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \sigma + Y_3 & \sigma - Y_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E^t_{y3} \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.8}$$

Finalmente multiplicando todas las matrices obtenemos

$$\begin{bmatrix} E^i_{y1} \\ E^r_{y1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ Y_1 & -Y_1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \sigma + Y_2 & \sigma - Y_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{ik_{2z}\cdot d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{2z}\cdot d} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ Y_2 & -Y_2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \sigma + Y_3 & \sigma - Y_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E^t_{y3} \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.9}$$

Renombrando las matrices, podemos escribir la ecuación de la siguiente manera

$$\begin{bmatrix} E^i_{y1} \\ E^r_{y1} \end{bmatrix} = \mathbb{Y}_1^{-1}\sigma_2\mathbb{D}_2\mathbb{Y}_2^{-1}\sigma_2 \begin{bmatrix} E^t_{y3} \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.10}$$

Generalizando esta expresión para un sistema de n-interfaces se tiene que

$$\begin{bmatrix} E^i_{y1} \\ E^r_{y1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E^t_{y(n+1)} \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbb{M} \begin{bmatrix} E^t_{y(n+1)} \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.11}$$

Donde $\mathbb{M}$ es la matriz de transferencia asociada a nuestra estructura fotónica, dada por la siguiente expresión

$$\mathbb{M} = \prod_{j=1}^{N} \mathbb{D}_j \mathbb{Y}_j^{-1} \sigma_{j+1} \tag{3.12}$$

El conocer las expresiones de la matriz $\mathbb{M}$ es fundamental para el análisis de las propiedades ópticas de un cristal fotónico, pues de esta es posible desprender la reflexión(R), transmisión(T) y la estructura de bandas. Por ejemplo, la respuesta óptica del cristal fotónico medida a partir de los coeficientes de transmisión y reflexión se calcula por medio de las expresiones

$$R = \frac{E_{y1}^r}{E_{y1}^i} = \frac{m_{21}}{m_{11}} \quad \text{y} \quad T = \frac{E_{y(n+1)}^t}{E_{y1}^i} = \frac{1}{m_{11}} \tag{3.13}$$

3.2. Material 2D en la aproximación efectivo

Una alternativa para abordar el estudio de la estructura mostrada en la Fig.3.2 consiste en considerar al medio 2D como un material con espesor efectivo d_{2D} de alrededor de décimas de nanómetros. Para obtener una expresión de la matriz de transferencia a partir de esta aproximación consideremos ahora un sistema multicapa, como el de la Fig 3.3. Bajo estas circunstancias las condiciones de frontera que relacionan las componentes tangenciales de los campos electromagnéticos entre los diferentes medios, están dadas por $E_{2,\alpha} - E_{1,\alpha} = 0$ con $\alpha = x, y$ y $H_{2,\beta} - H_{1,\beta} = 0$ con $\beta = y, x$, realizando un procedimiento similar al de la sección anterior, se concluye que para un cristal fotónico de n celdas, la relación entre el medio incidente y transmitido está determinado por la siguiente expresión.

$$\begin{bmatrix} E_{y1}^i \\ E_{y1}^r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2}Y_1 \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}Y_1 \end{bmatrix} m_j \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ Y_n & -Y_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{yn}^t \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.14}$$

Si $n = 2$, m es la matriz identidad de dimensión $2 \times H_{xj}^{i/t} = -Y_j E_{yj}^{i/t}$ y $H_{xj}^r = Y_j E_{yj}^r$

2.*Peroparaelcasodonde*n ≥ 3, m_j está determinada por:

$$m_j = \prod_{j=2}^{n-1} \mathbb{Y}_j \mathbb{D}_j \mathbb{Y}_j^{-1} \tag{3.15}$$

$$\mathbb{Y}_j = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ Y_j & -Y_j \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbb{D}_j = \begin{bmatrix} e^{-ik_{jz}z'_j} & 0 \\ 0 & e^{ik_{jz}z'_j} \end{bmatrix} \tag{3.16}$$

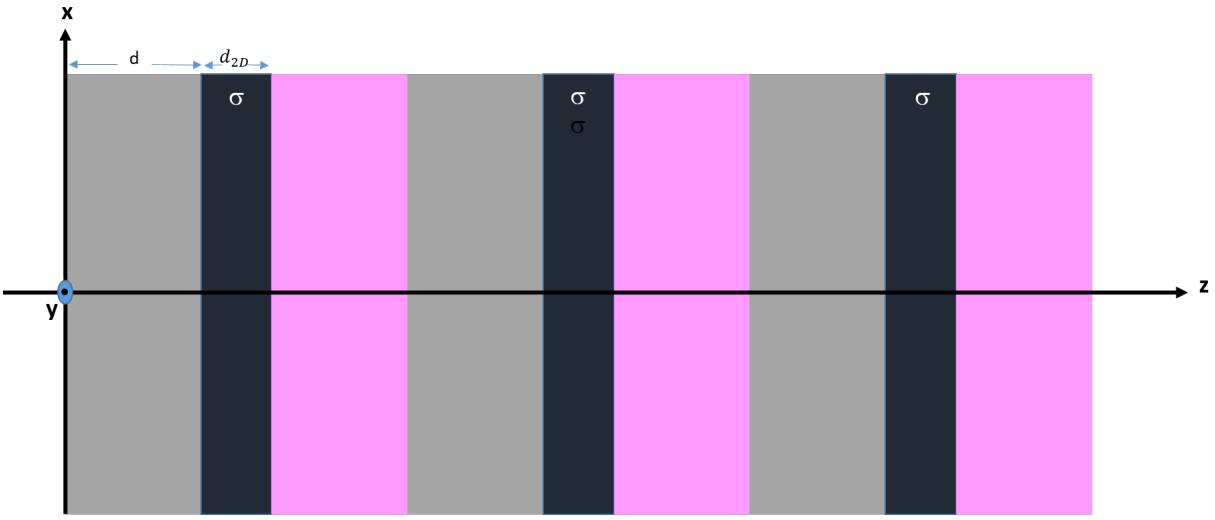


FIGURA 3.3: Cristal fotónico unidemensional con un medio 2D considerando a este último en la aproximación de espesor efectivo

$z'_j = d$ o $z'_j = d_{2D}$ según el medio considerado. Existen estudios de grafeno con esta aproximación [41] en los cuales se concluyó que el uso de esta solo es válida en el rango de terahertz, mientras que el método de la sección 3.1 tiene validez en todo el espectro electromagnético, por esta razón se recomienda tener especial cuidado con el uso de la aproximación de espesor efectivo.

Capítulo 4

Propiedades ópticas de estructuras periódicas construidas con materiales 2D

En este capítulo se presenta la contribución de este trabajo, comenzamos analizando la respuesta óptica de estructuras multicapa a base de grafeno (fosforeno) a incidencia normal, continuamos con el cálculo de la frecuencia de corte a base de un enfoque de medio eficaz (EMA de sus siglas en inglés), posteriormente abordamos el análisis de las bandas plasmónicas para el grafeno y finalmente mostramos que los plasmones pueden excitarse bajo la técnica de reflexión total atenuada en la configuración de Otto. Es crucial mencionar que en todo momento estaremos considerando una polarización S, también es importante señalar que para el fosforeno los cálculos mostrados en este trabajo solo son válidos bajo la configuración mostrada en el capítulo 1, puesto que bajo estas condiciones la conductividad en la dirección zigzag y armchair pueden ser tratadas de forma independiente.

4.0.1. Espectros de Reflexión y Estructura de Bandas K

Las propiedades ópticas de un cristal fotónico puede ser fácilmente descritas por los espectros de reflexión (R), absorción(A) y las estructuras de bandas, pues de estos se determinan los valores de la frecuencia para los cuales es posible transmitir ondas electromagnéticas. R y A se calcularon por medio del método de matriz de transferencia y la ecuación que describe las bandas K se deduce a continuación.

De acuerdo con el desarrollo del capítulo anterior para el cristal fotónico en la Fig.4.1 tenemos las siguientes relaciones

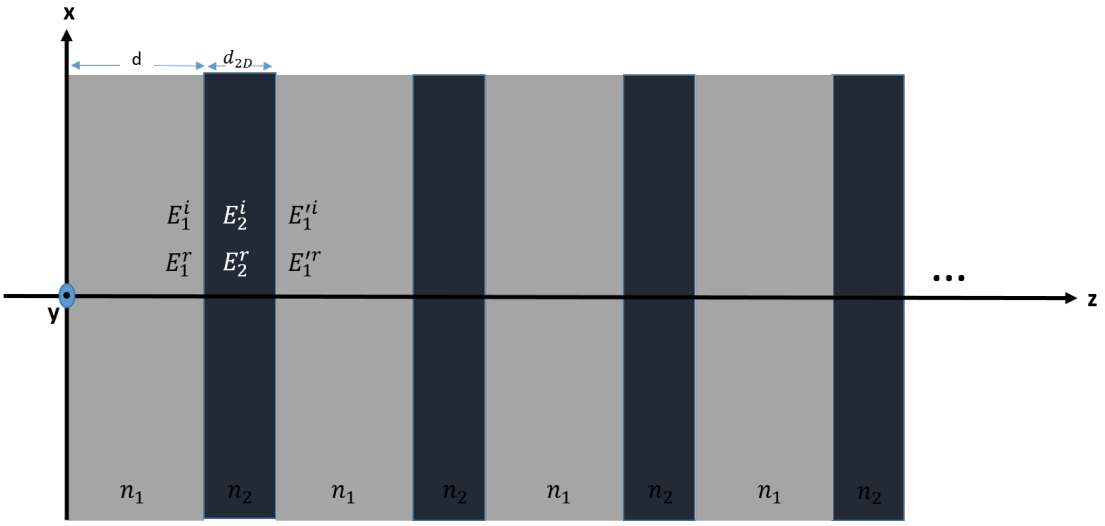


FIGURA 4.1: Cristal fotónico unidemensional con material 2D. La dirección de crecimiento del cristal inicia en $z = 0$.

$$\begin{bmatrix} E_1^i \\ E_1^r \end{bmatrix} = \mathbb{M} \begin{bmatrix} E_1'^i \\ E_1'^r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_1'^i \\ E_1'^r \end{bmatrix} \tag{4.1}$$

Donde los elementos de matriz de transferencia A,B,C y D son

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

De estas expresiones, es fácil demostrar que $AB - CD = 1$, es decir la matriz $\mathbb{M}$ es unimodular como consecuencia de la periodicidad de la celda unitaria. De igual forma de la Fig. 4.1 se observa de manera evidente que dada una posición z del cristal fotónico, el índice de refracción será el mismo después de incrementar el espesor de la celda unitaria, d, es decir $n(z) = n(z+d)$, así por el teorema de Bloch, el campo eléctrico es de la forma $E(z) = E_K(z)e^{i(Kz-\omega t)}$, 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 $E_K(z)$ depende de K, siendo K el número de onda de Bloch, aplicando esto a la celda unitaria tenemos

$$\begin{bmatrix} E_1^i \\ E_1^r \end{bmatrix} = \mathbb{I} e^{iKd} \begin{bmatrix} E_1'^i \\ E_1'^r \end{bmatrix} \tag{4.2}$$

Comparando esta última ecuación con la Ec. 4.1 se obtiene lo siguiente

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_1'^i \\ E_1'^r \end{bmatrix} = \mathbb{I} e^{iKd} \begin{bmatrix} E_1'^i \\ E_1'^r \end{bmatrix} \tag{4.3}$$

Realizando el álgebra correspondiente podemos llegar a

$$\begin{bmatrix} A - e^{iKd} & B \\ C & D - e^{iKd} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_1'^i \\ E_1'^r \end{bmatrix} = 0 \tag{4.4}$$

De álgebra lineal sabemos que para que esta ecuación tenga solución distinta a la trivial es necesario que se cumpla lo siguiente

$$Det \left| \begin{bmatrix} A - e^{iKd} & B \\ C & D - e^{iKd} \end{bmatrix} \right| = 0 \tag{4.5}$$

Desarrollando el determinante y recordando que $AD - BC = 1$ se llega a $e^{2iKd} - (A + D)e^{iKd} + 1 = 0$. De esta ecuación es fácil obtener la relación de dispersión entre K, ω y q_x, la cual se puede expresar como

$$\begin{aligned} e^{iKd} &= \frac{1}{2}(A + D) \pm \left[\frac{1}{4}(A + D)^2 - 1 \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{1}{2} trM \pm \left[\left(\frac{1}{2} trM \right)^2 - 1 \right]^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Por otro lado multiplicando la ecuación $e^{2iKd} - (A+D)e^{iKd} + 1 = 0$ en ambos lados por un factor e^{-iKd} y utilizando $2cos(z) = e^{iz} + e^{-iz}$, obtenemos $cos(Kd) = \frac{1}{2}(A + D) = \frac{1}{2} trM$ de donde resulta finalmente

$$K(q_x, \omega) = \frac{1}{d} cos^{-1} \left(\frac{1}{2} trM \right) \tag{4.6}$$

De aquí se observa 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 propagantes (bandas permitidas), mientras

que para valores $|\frac{1}{2}(A+D)| > 1$ corresponden $K = m\frac{\pi}{d} + K_i$ la cual posee una parte imaginaria K_i y por lo tanto la onda de Bloch es evanescente(banda prohibida). El borde de la banda corresponde a valores donde se cumple $|\frac{1}{2}(A+D)| = 1$. En esta sección estamos interesados en las bandas K, que es la relación de dispersión de K en función de ω a incidencia normal, esto es $q_x = 0$.

Del desarrollo anterior, en la figura. 4.2 se muestra la reflexión, absorción y las bandas K para un cristal fotónico con celda unitaria dieléctrico/grafeno(fosforeno), los cuales son caracterizados por ε_d para el dieléctrico y $\varepsilon(\omega)$ para el grafeno (fosforeno).

$$\varepsilon(\omega) = 1 + i\frac{\sigma}{\omega\varepsilon_0 d_{2D}} \tag{4.7}$$

Aquí ω es la frecuencia, ε_0 es la permitividad en el vacio, d_{2D} =0.5(0.8)nm es el espesor del grafeno (fosforeno) y la σ para grafeno y fosforeno son

$$\sigma = \frac{e^2\tau v_f}{\hbar}\sqrt{\frac{n}{\pi}} \quad \text{y} \quad \sigma = e^2\frac{n\tau}{m_j} \tag{4.8}$$

Debido a la anisotropia del fosforeno tenemos dos valores de masa para este m_{xx} =0.7m_0 y m_{yy} =0.15m_0 [9]

Usamos una densidades de portadores que se encuentran en el rango de $7 \times 10^{15}\text{m}^{-2} < n < 7 \times 10^{17}$ m^{-2} (establecemos las densidades de portadores anteriores tomando en cuenta los niveles de dopaje obtenibles experimentalmente en grafeno[42]), consideramos un espesor de celda unitaria de $d = 5\mu$. En la figura. 4.2b mostramos la estructura de bandas fotónica calculada para un cristal fotónico basado en grafeno o fosforeno, en ambos casos, se considera, n =1.84×10^{17} m^{-2} y baja perdida ($\tau \to 0$) para definir claramente la frecuencia de corte (como se muestra [43] las bandas fotónicas están distorsionadas y la primera banda de transmisión no tiene un límite bien definido, cuando se consideran los efectos de absorción). Dado que las bandas fotónicas se calculan mediante la ecuación 4.6 y la capa de grafeno (fosforeno) se han descrito mediante una ecuación similar a la de Drude 4.8, el vector de onda local debe ser imaginario para frecuencias por debajo de la frecuencia de corte, ω_{cut}, que indica huecos de aspecto metálico que se originaron a partir de los efectos de apantallamiento de los portadores de carga del medio 2D. El espacio metálico de baja frecuencia para grafeno multicapa (línea negra) tiene un ancho de aproximadamente 5.8 THz y para la estructura de fosforeno multicapa, es aproximadamente 3.2 y 2.0 THz para la dirección armchair (línea roja) y zig-zag (azul line) respectivamente, dado que la distancia entre capas y la constante dieléctrica son las mismas para los tres casos, y que las masas efectivas para el grafeno y el fosforeno (en

ambas direcciones principales) son diferentes, se puede implicar la fuerte dependencia de la anchura de la brecha de tipo metálico en la masa efectiva de portadores de carga. Por otro lado, como puede verse, se define una banda prohibida alrededor de 31 THz, que cumple la ley de Bragg, es decir, $kd = n\pi$. De acuerdo con la ley de Bragg, esta brecha se puede cambiar a otras frecuencias modificando los parámetros estructurales. La figura 4.2a muestra los perfiles de reflexión y absorción con pérdidas (τ =1.0ps) para una multicapa finita de 10 capas basada en grafeno (negro) o fosforeno (a lo largo de las dos direcciones principales: armchair(rojo) y zig-zag (azul)), como se ve, en ambos casos, la multicapa presenta características de un reflector óptico de baja absorción a frecuencias THz (por debajo de la frecuencia de corte) y también observamos que, como era de esperar, la absorción debida a pérdidas óhmicas alcanza su máximo en la frecuencia de corte, marcando el comienzo de la primera región de transmisión.

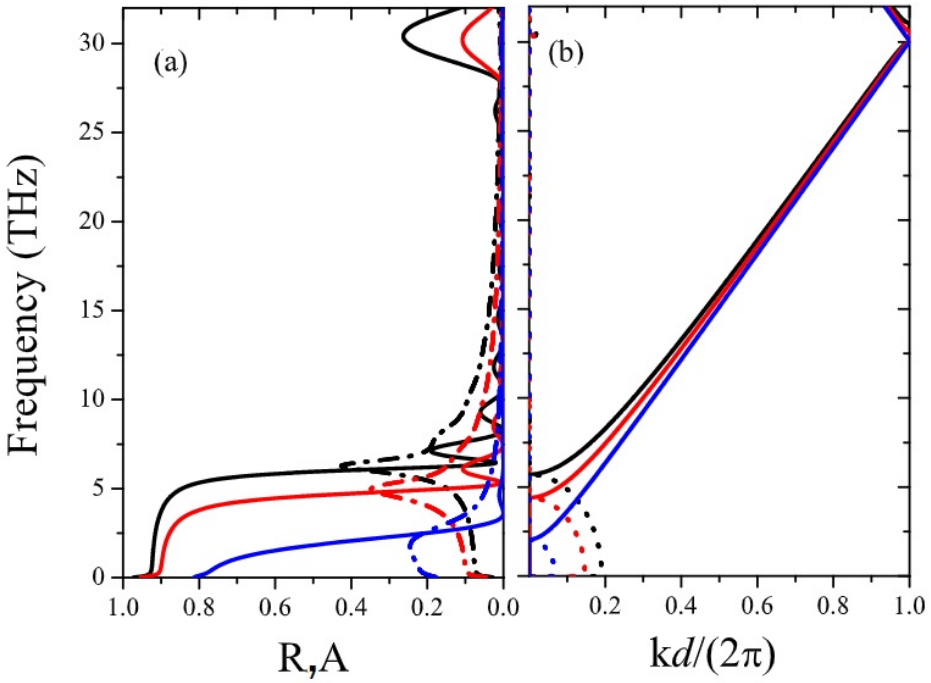


FIGURA 4.2: Reflexión, absorción y bandas fotónicas para un cristal fotónico a base de grafeno (negro) y fosforeno (rojo y azul para las direcciones de armchair (AC) y zig-zag (ZZ) respectivamente), la distancia entre láminas es de $d = 5\mu m$ y el medio envolvente es caractirizado por una constante dieléctrica $\varepsilon_d = 1$. (a) Reflexión (línea sólida) y absorción (línea punteado) para una muestra de 10 capas de grafeno (fosforeno) / dieléctrico; (b) Vector de onda de Bloch real (sólido) e imaginario (punteado) para la estructura infinita correspondiente.

4.0.2. Frecuencia de corte

Una alternativa para obtener las propiedades ópticas del cristal fotónico es por medio de una frecuencia de plasma efectiva que se obtiene como un promedio simple de los materiales constitutivos que en este caso es grafeno (fosforeno)/dieléctrico, a dicho método se le conoce como un enfoque de medio eficaz (EMA de sus siglas en inglés). A continuacón realizamos el desarrollo para la obtención de dichas expresiones

De acuerdo a la figura 4.1 la función dieléctrica depende de la posición por lo cual podemos escribirla como

$$\varepsilon(z,\omega) = \varepsilon_{2D}(\omega) + (\varepsilon_d + \varepsilon_{2D}(\omega))\Theta(z - d_{2D}) \tag{4.9}$$

Donde hemos utilizado la función de Heaviside que es $\Theta(z) = 1$ si $z \geq 1$ y $\Theta(z) = 0$ si $z < 0$. La función dieléctrica es periódica en el eje z y se puede ampliar en la serie de Fourier en la forma

$$\varepsilon(z,\omega) = \sum_G \varepsilon(G)e^{iGz} = \varepsilon(0) + \sum_{G'} \varepsilon(G')e^{iG'z} \tag{4.10}$$

Aquí $G = 2\pi n/d$ es el vector recíproco y n es un número entero. Los números primados indican que los términos con $G = 0$ están excluidos de la suma. Los coeficientes de Fourier $\varepsilon(G)$ se pueden encontrar integrado en la celda unitaria

$$\varepsilon(G) = \frac{1}{d}\int_0^d \varepsilon(z)e^{-iGz}dz \tag{4.11}$$

El resultado de esta integral es

$$\varepsilon(G) = \varepsilon(0)\delta_{G,0} + \varepsilon(G)(1 - \delta_{G,0}) \tag{4.12}$$

Los coeficientes de Fourier para $G = 0$ son

$$\varepsilon(0) = f\varepsilon_{2D}(\omega) + (1 - f)\varepsilon_d \tag{4.13}$$

Donde hemos tomado $f = d_{2D}/d$. Los coeficientes de Fourier para $G \neq 0$ son

$$\varepsilon(G) = \frac{\varepsilon_{2D}(\omega) - \varepsilon_d}{iGd}(1 - e^{-iGd_{2D}}) \tag{4.14}$$

El valor efectivo puede tomarse como el promedio de la celda unitaria en el arreglo

$$\varepsilon_{eff}(\omega) = \langle \varepsilon(z,\omega) \rangle = \int dz'(z')\varepsilon(z-z',\omega) \tag{4.15}$$

Si consideramos el caso más simple donde $f(z') = 1/d$ obtenemos

$$\varepsilon_{eff}(\omega) = \varepsilon(0) + \frac{1}{d}\sum_{G'} \varepsilon(G') \int_0^d e^{iG'(z-z')} dz' \tag{4.16}$$

La integral del segundo término es cero, entonces solo retenemos el término con $G = 0$

$$\varepsilon_{eff}(\omega) = f\varepsilon_{2D}(\omega) + (1-f)\varepsilon_d = \varepsilon_d + i\frac{\sigma}{\omega\varepsilon_0 d} \tag{4.17}$$

De esta ecuación podemos deducir la frecuencia de plasma para las multicapas grafeno y fosforeno como

$$\Omega_p^2 = \omega_p^2 f = \frac{e^2 v_F}{\hbar\varepsilon_0 d}\sqrt{\frac{n}{\pi}} \quad \text{y} \quad {\Omega_p}^2 = \omega_p^2 f = \frac{e^2 n m_j^{-1}}{\varepsilon_0 d} \tag{4.18}$$

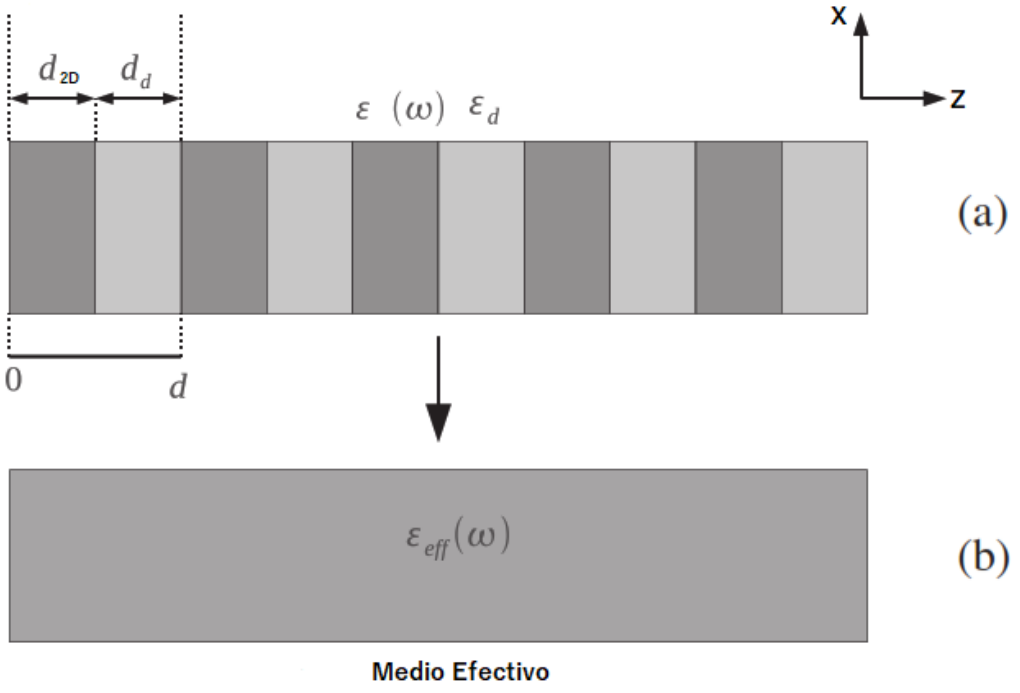


FIGURA 4.3: En el panel (a), se muestra el esquema de un cristal fotónico con celda unitaria conformada de un dieléctrico y un medio 2D. En el panel (b), el medio efectivo.

Consideramos la figura 4.3 donde ilustramos cómo el cristal compuesto por un medio 2D y un dieléctrico se puede convertir en un medio efectivo de donde resulta que la ecuación de onda para el campo eléctrico del medio efectivo es

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}E_x(z) = -\frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_{eff}(\omega)E_x(z) \tag{4.19}$$

La solución a esta ecuación es

$$E_x(z) = E_x^i(z)e^{iK_{eff}(\omega)z} + E_x^r(z)e^{-iK_{eff}(\omega)z} \tag{4.20}$$

Donde hemos definido $K_{eff}(\omega) = \frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon_{eff}(\omega)}$. Al considerar que la absorción tiende a cero. Los modos de propagación son posibles en el medio efectivo cuando $\varepsilon_{eff}(\omega) > 0$, por otro lado cuando $\varepsilon_{eff}(\omega) < 0$ existen modos evanescentes. Estas restricciones permiten escribir una frecuencia de corte para los modos de propagación en la forma $\omega_{cut}(f) = \frac{\Omega_p}{\sqrt{\varepsilon_0}}$, así para le caso del grafeno y foforeno tenemos

$$\omega_{cut} = \frac{\Omega_p}{\sqrt{\varepsilon_d}} = \left(\frac{e^2 v_F (n\pi)^{1/2}}{\pi\hbar\varepsilon_0\varepsilon_d d}\right)^{1/2} \quad \text{y} \quad \omega_{cut} = \frac{\Omega_p}{\sqrt{\varepsilon_d}} = \left(\frac{e^2 n m_j^{-1}}{\varepsilon_0\varepsilon_d d}\right)^{1/2} \tag{4.21}$$

Esta ecuación define, de manera sencilla, las condiciones donde el medio compuesto se vuelve transparente y es el principal resultado de este trabajo. Con esta ecuación estamos proponiendo que la transparencia se puede determinar en función de los parámetros estructurales del medio compuesto, como de la frecuencia de plasma del medio 2D (ω_p) y la constante dieléctrica, ε_d.

Un cálculo directo de la frecuencia de corte a partir de la ecuación 4.21 muestra concordancia con la frecuencia de corte obtenida de las bandas fotónicas y perfiles de reflexión mostrados en la figura 4.2. Este último punto se considera a continuación en la siguiente discusión.

La figura 4.4 muestra un mapa de contorno que representa las regiones donde se encuentran las frecuencias de corte para diferentes valores de distancia entre capas y densidad de portadores correspondientes a una estructura de grafeno-dieléctrico. La frecuencia de corte en el panel (a) se ha calculado imponiendo un límite superior a la componente compleja del vector de onda de Bloch correspondiente a la estructura periódica. Como se ve, para una pequeña distancia entre capas, es posible pasar a través de un amplio rango de frecuencias, correspondiente a un orden de cambio de magnitud en la frecuencia de corte. También se representan dos trayectos con densidades de portadora constantes ($n_1 = 1.1 \times 10^{17}$ m^{-2} y $n_2 = 4.7 \times 10^{17}$m^{-2}) en la figura 4.4 a, cuya variación en su

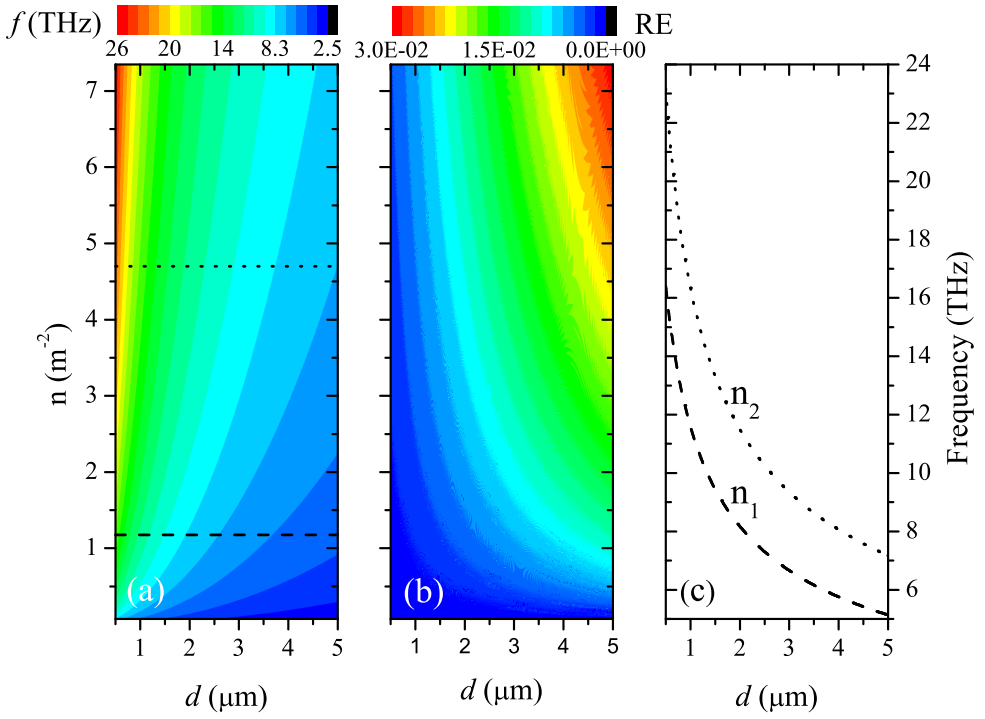


FIGURA 4.4: Mapa de contorno que muestra (a) los regímenes de frecuencia donde se encuentra la frecuencia de corte para una cristal fotonico basada en grafeno, (b) la desviación entre las frecuencias de corte calculadas por el enfoque del medio efectivo y de las bandas fotónicas de la estructura periódica y (c) la variación de la frecuencia de corte en función de la distancia entre las laminas de grafeno. Las densidades de portadores y las distancias entre capas se encuentran en el rango $7 \times 10^{15}\mathrm{m}^{-2} < n < 7 \times 10^{17}\ \mathrm{m}^{-2}$

frecuencia de corte se muestra en el panel (c). Para niveles altos de dopaje y distancias entre capas pequeñas, es posible lograr frecuencias de corte de decenas de THz, como se muestra en la figura 4.4c para n_2 donde la frecuencia de corte va de 5.0 a 23.0 THz. A partir de la figura 4.4, es importante destacar que para una distancia entre capas fija, la frecuencia de corte podría cambiar a través de un amplio rango de frecuencia a medida que se varía la densidad de portadores y se puede obtener un reflector óptico sintonizable si se considera la sintonización del nivel de dopaje. Además, representamos en la figura 4.4b las desviaciones del cálculo de la frecuencia de corte usando EMA (que llamamos ω_{cEMA}) y el cálculo usando la estructura de banda fotónica de la multicapa periódica (que llamamos ω_c). Como se muestra en el panel (b), ambos cálculos coinciden para niveles bajos de dopaje y distancias entre capas pequeñas, en la escala de sublongitud de onda. Hemos calculado el error relativo, $RE = |\omega_c \omega_{cEMA}|/\omega c$, para diferentes valores de nivel de dopaje y distancia entre capas; mostramos que para la mayoría de los valores, la desviación no supera el 3 %.

Las figuras 4.5a y 4.5b muestran un mapa de contorno donde se presentan las frecuencias de corte para diferentes valores de distancia entre capas y densidad de portadora para un cristal fotónico con celda unitaria fosforeno-dieléctrico; consideramos el campo eléctrico

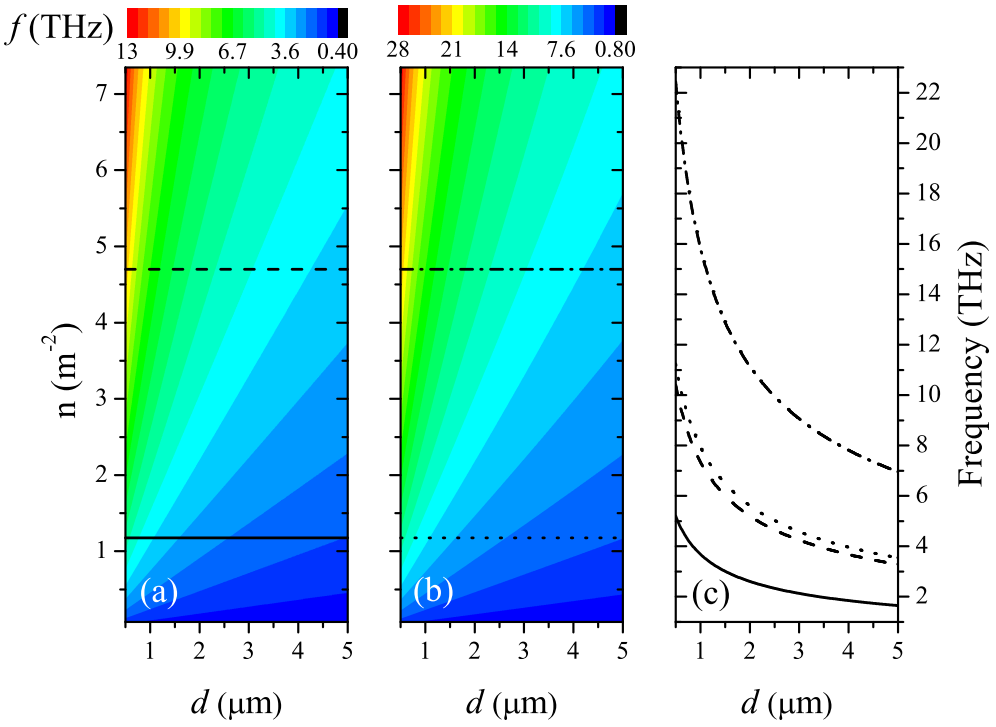


FIGURA 4.5: Mapa de contorno que muestra los regímenes de frecuencia de la frecuencia de corte de un cristal fotónico a base de fosforeno con el campo eléctrico que se encuentra en la dirección (a) zig-zag y (b) armchair. Los niveles de dopaje y la distancia entre capas se encuentran en el rango $7 \times 10^{15}\mathrm{m}^{-2} < n < 7 \times 10^{17}\mathrm{m}^{-2}$ y $0.5\mu\mathrm{m} < d < 5\mu\mathrm{m}$ respectivamente.(c) Variación de la frecuencia de corte a medida que la distancia entre capas se cambia para las dos rutas que se muestran en el panel (a y b).

que se encuentra a lo largo del eje x o y, correspondiente a las direcciones principales del fosforeno. Para ambos paneles, se ha utilizado un enfoque similar al de la figura 4.4a, donde la frecuencia de corte se calcula usando baja absorción. Como se ve, para las dos direcciones principales del fosforeno, es posible obtener un reflector sintonizable con un amplio rango de frecuencia en la frecuencia de corte, ya que se consideran pequeñas distancias entre capas, correspondiente a un cambio de orden de magnitud en la frecuencia de corte. En la figura 4.5c, el comportamiento de la frecuencia de corte se muestra para los casos de las figuras 4.5a y 4.5b con densidades de portadora constantes, n_1 ($1.1\times10^{17}\mathrm{m}^2$) y n_2 ($4.7\times10^{17}\mathrm{m}^2$). Una comparación directa entre los paneles (a) y (b) muestra que el rango de frecuencia de corte para la dirección en zig-zag corresponde casi a la mitad (13.0 Thz) del rango de frecuencias para la dirección armchair (28Thz) debido a que la masa efectiva en el primero es aproximadamente seis veces mayor que en el segundo. Esta última característica, implícita en la anisotropía del fosforeno, da lugar a dos ventanas independientes en los rangos de frecuencia de corte si se considera una rotación de 90^o de la estructura. El error relativo correspondiente para la frecuencia de corte del cristal fotónico basado en fosforeno (no se muestra aquí), calculada de la misma manera del panel 4.4b, muestra que la desviación no excede el 3 %, lo que implica

que la frecuencia de corte, calculada por medio de EMA, es una buena aproximación.

Como una forma de complementar el análisis en la figura 4.6a y 4.6b, el cambio en la frecuencia de corte se muestra claramente para parámetros estructurales fijos a medida que se modifica la densidad de portadores. Debido a la relación de dispersión lineal del grafeno cerca de los puntos de Dirac, la frecuencia de corte para los cristales fotónicos basadas en grafeno y fosforeno muestran una dependencia de la densidad de portadores diferente. En el primero, la frecuencia de corte tiene una dependencia de la densidad de portadores como su raíz cuarta, en el segundo, la dependencia va en su raíz cuadrada. Teniendo en cuenta que los límites inferior y superior en la densidad de portadores en ambos paneles tienen una correspondencia, se ve claramente que, en la ventana de densidad de portadores considerada, las estructuras basadas en grafeno y fosforeno (en la dirección armchair) muestran un rango de frecuencia de corte similar. Por otro lado, destacamos que de acuerdo con los cálculos usando EMA y cálculos de banda fotónica descritos anteriormente, las desviaciones de ambas aproximaciones son pequeñas. Esta última afirmación también es válida para la dependencia del espesor óptico. Según el modelo de la ecuación 4.21, se espera una relación inversa en $\sqrt{\varepsilon d}$ para las estructuras basadas en grafeno y fosforeno. La figura 4.6c muestra esta dependencia y su correspondencia con los cálculos de EMA (líneas continuas). En este panel, hemos calculado esta dependencia para tres medios dieléctricos diferentes (n = 1, 1,5 y 2) observando un acuerdo entre los cálculos de la banda fotónica y EMA.

4.1. Modos de superficie (Plasmones) S

Para obtener la relación de dispersión electromagnética de una capa de grafeno inmersa en dos medios dieléctricos distintos, situando al grafeno en $z = 0$, consideramos una onda evanescente en la dirección de propagación de tal manera que la componente del vector de onda tangente a la interface, q_x, sea complejo.

Las componentes tangenciales de los campos electromagénticos para $z < 0$ están dados por

$$E^i_{y1} e^{iq_x \cdot x} e^{-q^i_{1z} \cdot z} + E^r_{y1} e^{-iq_x \cdot x} e^{q^r_{1z} \cdot z}$$
$$H^i_{x1} e^{iq_x \cdot x} e^{-q^i_{1z} \cdot z} + H^r_{x1} e^{-iq_x \cdot x} e^{q^r_{1z} \cdot z}$$

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

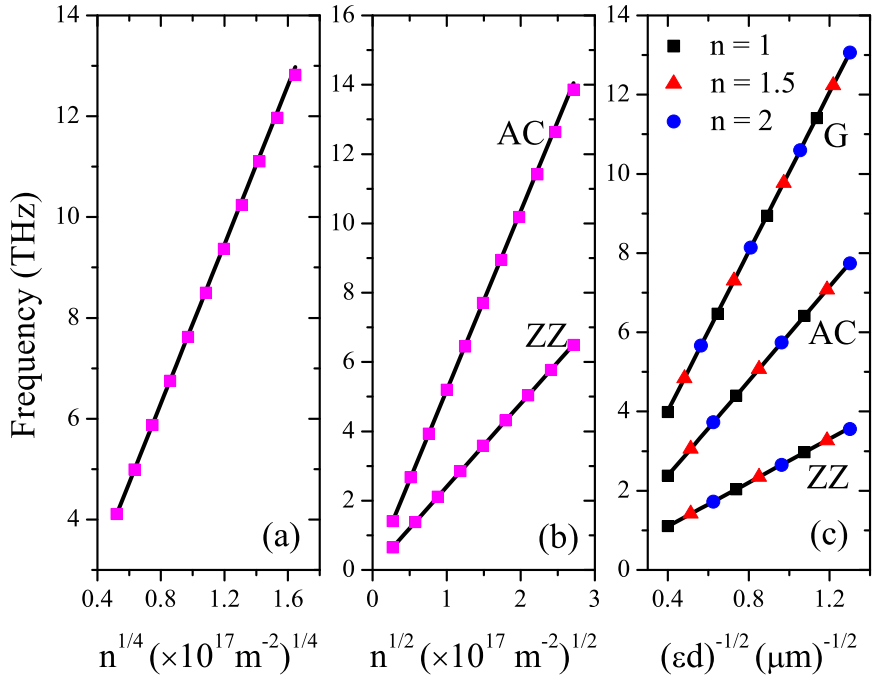


FIGURA 4.6: Frecuencia de corte en función de los parámetros del material. Los parámetros estructurales se fijan (d =2.0μm) y se varían las densidades de portadores en (a) grafeno y (b) fosforeno. (c) La densidad del portador se fija y el espesor óptico se varía para tres materiales dieléctricos diferentes que llenan el espacio entre capas. Para los tres paneles, las líneas continuas se calculan usando EMA. En los paneles (b) y (c) AC (ZZ) significa campo eléctrico alineado en la dirección del armchair (zig-zag) y G para grafeno.

$$E^t_{y2} e^{iq_x \cdot x} e^{-q^t_{2z} \cdot z}$$
$$H^t_{x2} e^{iq_x \cdot x} e^{-q^t_{1z} \cdot z}$$

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 magnéticos evanescentes

$$H^i_x = \frac{q^i_{1z}}{i\mu_1\omega} E^i_y \quad , \quad H^r_x = -\frac{q^r_{1z}}{i\mu_1\omega} E^r_y \quad , \quad H^t_x = \frac{q^t_{2z}}{i\mu_2\omega} E^t_y \tag{4.22}$$

Aplicando las condiciones de frontera 3.3 en $z = 0$ y haciendo uso de las relaciones anteriores se llega al siguiente par de ecuaciones

$$E_y^i + E_y^r = E_y^t$$
$$\frac{q_{1z}^i}{\mu_1} E_y^i - \frac{q_{1z}^r}{\mu_1} E_y^r = \left(\frac{q_{2z}^t}{\mu_2} - i\omega\sigma \right) E_y^t$$

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

$$r = \frac{E_y^r}{E_y^i} = \frac{i\omega\sigma - \frac{q_{2z}^t}{\mu_2} + \frac{q_{1z}^i}{\mu_1}}{-i\omega\sigma + \frac{q_{2z}^t}{\mu_2} + \frac{q_{1z}^r}{\mu_1}} \tag{4.23}$$

Para que exista propagación sobre la interface necesariamente se debe cumplir

$$-i\omega\sigma + \frac{q_{2z}^t}{\mu_2} + \frac{q_{1z}^r}{\mu_1} = 0 \tag{4.24}$$

Haciendo uso de $\mu_j = \mu_0 \mu_j^r$, $c\varepsilon_0 = \frac{1}{\eta_0}$ y reacomodando términos se llega a la relación de dispersión electromagnética más general de una capa de grafeno inmerso en dos medios dieléctricos distintos

$$\frac{q_{1z}}{\mu_1^r} + \frac{q_{2z}}{\mu_2^r} + \frac{\omega\sigma\eta_0}{ic} = 0 \tag{4.25}$$

Aquí c es la velocidad de la 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 $\eta_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}$, dado que estamos interesados en estudiar el caso de 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 última ecuación a:

$$1 + \frac{2icq_z}{\omega\eta_0\sigma} = 0 \tag{4.26}$$

Haciendo uso de esta ecuación en la figura 4.7 se muestra la relación de dispersión de los plasmones de superficie bajo polarización S en pocas capas de grafeno con diferentes niveles de dopaje, en el rango de frecuencia apropiado. Consideramos estructuras de una y dos capas de grafeno con (i) $\mu = 0.2$ eV (parte inferior de la Figura 4.7a) y (ii) $\mu = 0.3$ eV (parte superior de la Figura 4.7a). La muestra de bicapa se construye apilando dos capas de grafeno con cero esperanza cuántica y el mismo nivel de dopaje, la conductividad óptica de pocas capas de grafeno aumenta linealmente con el número de capas de grafeno [44] y luego, la ecuación 4.26 implica que el número de ondas y

la localización del modo aumentan. La última afirmación se muestra claramente en la figura 4.7 en las frecuencias de transición donde la desviación de la relación de dispersión de la línea de luz (línea negra) es más pronunciada para la bicapa en comparación con la muestra monocapa. Las desviaciones máximas ocurren a frecuencias dadas por $f_T = 2\mu/(2\pi\hbar)$. Para $\mu = 0.2$ eV ($\mu = 0.3$ eV), la frecuencia de transición corresponde a $f_T = 96.72$ Thz ($f_T = 145.08$ THz) que es la desviacion máxima mostrada en las figuras 4.7b y c. Teniendo en cuenta los efectos de absorción del grafeno, la desviación de la línea de luz se suprime fuertemente alrededor de las frecuencias de transición, lo que lo hace muy sensible a la absorción, como lo muestra Ramos-Mendieta [36]. De la figura 4.7, concluimos un punto importante: la desviación máxima de la relación de dispersión de los plasmones de superfice de la línea de luz se obtiene en las frecuencias de transición para los niveles de dopaje considerados; las bandas plasmónicas para la estructura infinita correspondiente a cristales fotónicos de grafeno son más pronunciadas precisamente en estas frecuencias de transición como se demuestra a continuación.

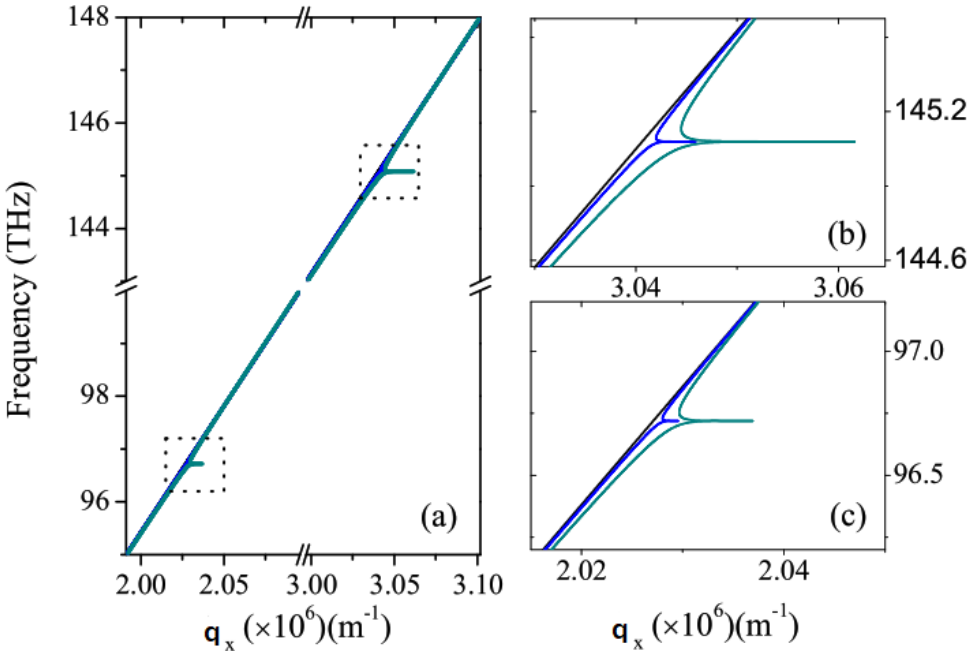


FIGURA 4.7: Relación de dispersión de plasmones se superficie bajo polarización S, el cálculo ha sido realizado para pocas capas de grafeno con $\mu = 0.2$ eV y $\mu = 0.3$ eV. (a) Relaciones de dispersión para monocapa (azul) y bicapa (cian) para el nivel de dopaje $\mu = 0{,}2$ eV (abajo) y $\mu = 0.3$ eV (arriba) con $\tau \to \infty$. (b) acercamiento de la relación de dispersión correspondiente a la parte superior de la figura (a) alrededor de $f = 145.08$ THz y (c) acercamiento de la relación de dispersión correspondiente a la parte superior de la figura (a) alrededor de $f = 96.72$ THz.

4.2. Bandas Proyectadas

Las bandas proyectadas son bandas de frecuencia de propagación oblicua, es decir muestran la relación de la componente paralela a las interfaces, q_x, en función de la frecuencia, estas bandas muestran la naturaleza de "bulk"de la estuctura periódica, de ahí que se debe considerar al sistema periódico como infinito. Esta descripción es de gran utilidad para observar los distintos modos electromagnéticos sobre determinadas estructuras fotónicas, en este caso estamos interesados en modos de superficie ya que estos estan asociados a los plasmones de superficie. Estas bandas se obienen de la ecuación 4.6 al igual que las bandas K, solo que en este caso $q_x \neq 0$.

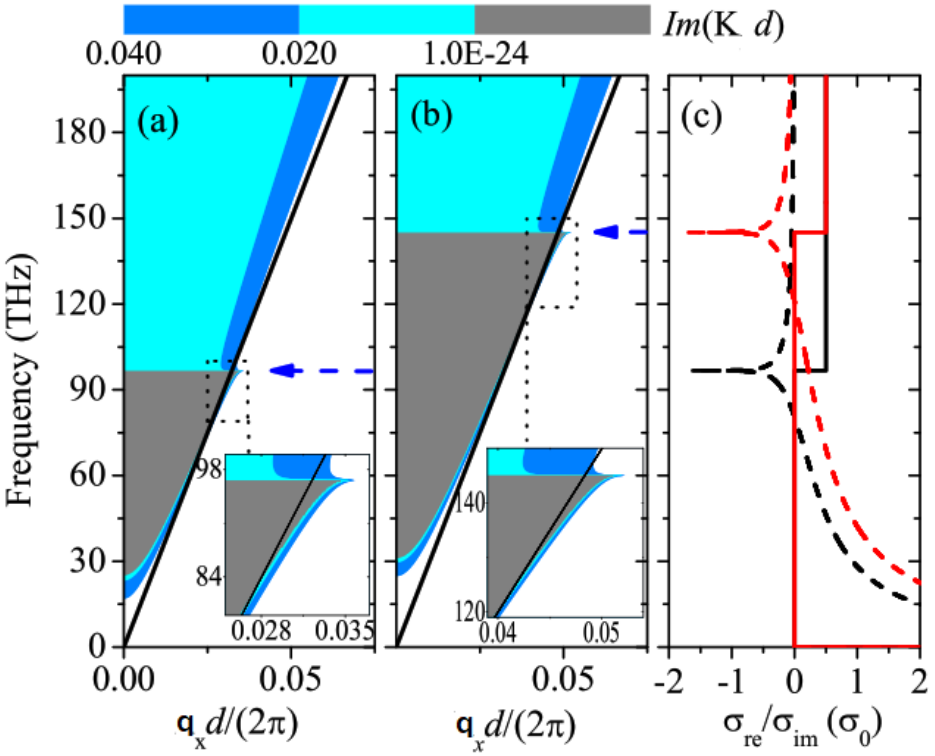


FIGURA 4.8: Mapas de vectores de ondas imaginarios correspondientes a un cristal fotónico a base de grafeno con una distancia entre capas de $d = 0.1$ μm; aparecen bandas plasmónicas alrededor de las frecuencias de transición de la absorción entre bandas en el grafeno. Se considera el dopaje homogéneo con (a) $\mu = 0.2$ eV y (b) $\mu = 0.3$ eV; (c) Se muestran los componentes reales (línea continua) e imaginaria (línea punteada) de la conductividad óptica del grafeno para $\mu = 0.2$ eV (negro) y $\mu = 0.3$ eV (rojo) ($\sigma_0 = \pi e^2/\hbar$). La absoción considera para los tres paneles es $\tau \to \infty$.

En la figura 4.8 mostramos un mapa del componente imaginario del vector de onda de Bloch en polarización S para un cristal fotónico a base de grafeno con $\mu = 0.2$ eV y $\mu = 0.3$ eV y una distancia entre capas de $d = 0.1$ μm. Se representan diferentes regiones con diferentes niveles de absorción obtenidos mediante la ecuación 4.6. Como se muestra, por encima de la línea de luz, los modos radiativos están fuertemente suprimidos por encima de la frecuencia de transición para los niveles de Fermi considerados; este

comportamiento se debe a un componente real distinto de cero de la conductividad óptica del grafeno por encima de la frecuencia de transición, lo que hace que el índice de refracción efectivo correspondiente tenga un componente imaginario. Para los paneles (a) y (b) de la figura 4.8, por encima de $f_T \approx 96.72$ THz y $f_T \approx 145.08$ THz respectivamente, la componente imaginaria del vector de onda de Bloch suprime la propagación de la onda en la estructura infinita. Por debajo de la línea de luz, se muestra que existen bandas permitidas de carácter plasmónico con una larga longitud de decaimiento $\sim 30\mu$m; estos modos guiados surgen como consecuencia del acoplamiento de modos de los plasmones de superficie en cada capa de grafeno y aparecen alrededor de las frecuencias de transición (donde $Im(\sigma) < 0$). Para los modos que se muestran en gris en la figura 4.8 a y b, las longitudes de decaimiento $(Im(k)^{-1})$ son prácticamente infinitas debido a la componente imaginaria casi nula del vector de onda de Bloch; para frecuencias por encima de la frecuencia de transición, la absorción entre bandas es responsable de la amortiguación de los modos plasmonicos superficiales. Resumimos que, de acuerdo con nuestros cálculos, observamos una fuerte supresión de las bandas plasmónicas alrededor de las frecuencias de transición a medida que aumenta la distancia entre capas.

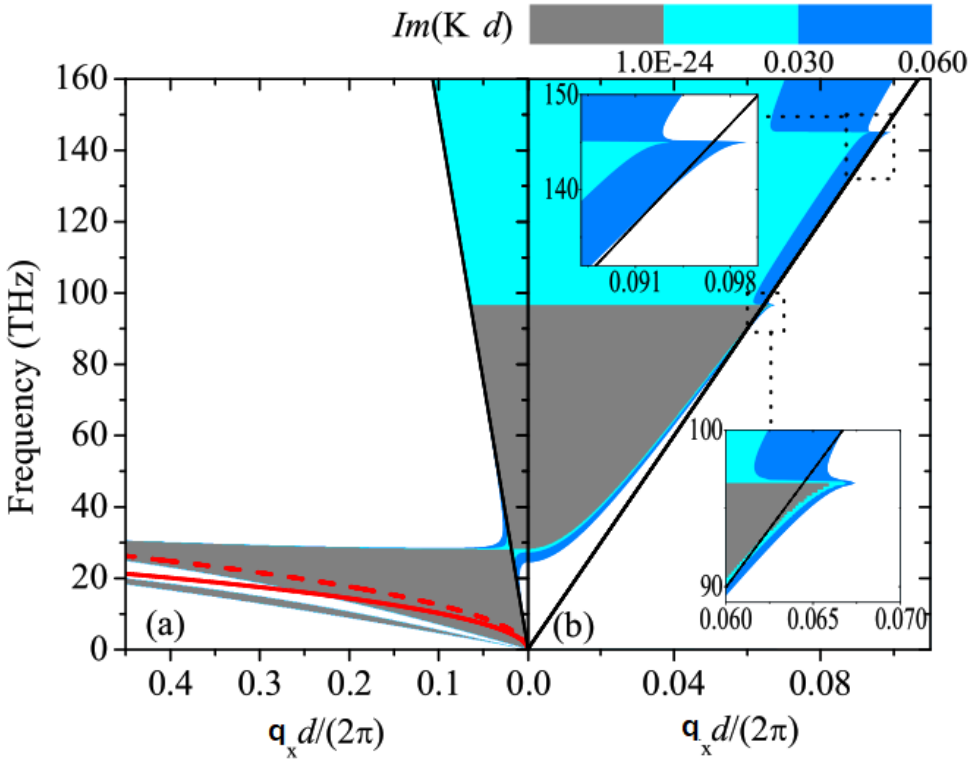


FIGURA 4.9: Mapas de vectores de ondas imaginarios correspondientes a un cristal fotónico con celda unitaria dieléctrico A/grafeno/dieléctrico B con una distancia entre láminas de $d = 0.1$ μm , $\mu_A = 0.2$ eV y $\mu_B = 0.3$ eV para (a) polarización P y (b) polarización S. Se ha considerado la absorción $\tau \to \infty$

Las bandas plasmónicas también están presentes para cristales fotónicos a base de grafeno con niveles de dopaje periódicos. En la figura 4.9, mostramos la estructura de bandas correspondiete a niveles de dopaje $\mu_A = 0.2$ eV y $\mu_B = 0.3$ eV. Mostramos la estructura de banda para ambas polarizaciones, P y S, para observar el rango de frecuencia característico donde existe el acomplamiento de modo plasmónico para S ($Im(\sigma) < 0$) y P ($Im(\sigma) > 0$). Como se muestra, las regiones de fuerte absorción para los dos niveles de dopaje considerados están delimitadas por $f_T = 96.72$ THz y $f_T = 145.08$ THz. Como se discutió anteriormente, esta característica se debe a los procesos de absorción entre bandas. Por debajo de la línea de luz, las bandas plasmónicas para la polarización de P muestran acoplamiento plasmonico en el régimen de THz; este aspecto surge debido a la diferencia entre las capas μ_A y μ_B. A medida que aumenta el confinamiento de los plasmones de superficie ($k_c \to \infty$), la estructura de banda tiene una degeneración infinita que tiende a las relaciones de dispersión que se muestran para los plasmones de superficie en la monocapa de grafeno (líneas rojas en el panel (a)) como se esperaba. Las bandas plasmónicas para la polarización S existen en la región de frecuencia IR ($Im(\sigma) < 0$) y son más pronunciadas en las frecuencias de transición como se muestra en los recuadros de la figura 4.9 b. Para la región de frecuencia alrededor de f_T =145.08 THz y por debajo de la línea de luz, los efectos de absorción son más pronunciados debido a las transiciones entre bandas y la componente de vector de onda de Bloch imaginaria distinta de cero; la longitud de decaimiento a largo de la dirección de crecimiento para los modos que se muestran en azul, se encuentra en la escala micrométrica.

4.3. Campos Internos

Para profundizar en el estudio de un cristal fotónico se analiza el comportamiento de la radiación electromagnética dentro de la estructura, pues a partir de esto es posible explicar fenómenos de resonancia, de superficie, de bulk, etc. Por esta razón a continuación hacemos el desarrollo teórico para el cálculo de los campos internos bajo polarización S. El campo presente en cada medio es el resultado de la superposición de la radiación incidente y reflejada presente en dicho medio, el cual es $E_{x/y} = a_j e^{ik_{jz}z + b_j e^{-ik_{jz}z}}$, en donde, a_j y b_j representa los coeficientes (la amplitud) del campo del j-ésimo medio. Para describir la evolución del campo dentro de la estructura basta conocer 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 muestra en la siguiente ecuación

$$\begin{bmatrix} a_j e^{ik_j d_j} + b_j e^{-ik_j d_j} \\ Y_j(a_j e^{ik_j d_j} - b_j e^{-ik_j d_j}) \end{bmatrix} = m_j \begin{bmatrix} 1 + r_f \\ Y_i(1 - r_f) \end{bmatrix} \tag{4.27}$$

donde r_f es el coeficiente de reflexión del cristal fotónico considerado. Al realizar el álgebra correspondiente y reordenando la ecuación matricial anterior, obtenemos

$$\begin{bmatrix} a_j \\ b_j \end{bmatrix} = M_j \begin{bmatrix} 1 \\ r_f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ r_f \end{bmatrix} \tag{4.28}$$

M_j es la matriz de transferencia que relaciona el j-ésimo medio con el medio incidente. Finalmente de esto se desprende

$$a_j = m_{11} + r_f m_{12}$$
$$b_j = m_{21} + r_f m_{22}$$

con estas expresiones es posible obtener el campo presente en el cristal fotónico. Para la polarización S el campo eléctrico tiene una componente, $\vec{E} = (0, E_y, 0)$, así al calcular la intensidad del campo eléctrico total tenemos $|E| = |E_y|$.

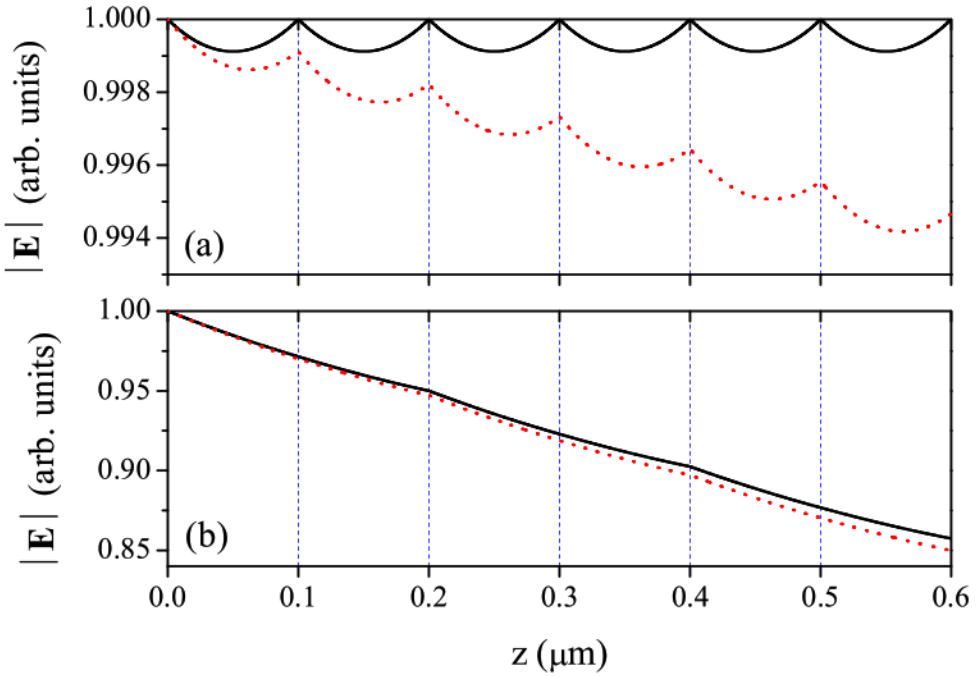


FIGURA 4.10: Perfiles de campo eléctrico para modos plasmónicos mostrados en la figura 4.11a (modo A) y 4.11b (modo B). (a) el modo A corresponde a un cristal fotonico primario con $\mu = 0.2$ eV y (b) el modo B corresponde a un cristal fotonico secundario con $\mu_A = 0.2$ eV y $\mu_B = 0.3$ eV. También hemos considerado dos valores diferentes para τ' : $\tau = \infty$ (línea continua) y $\tau = 10$ ps (línea de puntos). En estas figuras el campo eléctrico resultante es normalizado con respecto al campo eléctrico inicial.

A continuación en la figura 4.10 calculamos los perfiles de campo eléctrico de los plasmones de superficie de un cristal fotónico a base de grafeno para mostrar el confinamiento del campo a lo largo de las láminas. Los perfiles de campo se calculan para los modos que se encuentran en las bandas plasmónicas que se muestran en la figura 4.11 a y b respectivamente (puntos A y B). Se han considerado dos valores de absorción en grafeno que muestran el efecto de las pérdidas en la propagación del campo. Además, se puede ver en la figura 4.10 b el efecto de la absorción interbanda para el modo B que da lugar a una alta atenuación en comparación con el modo A. Esta última característica se puede ver claramente en la figura 4.11 a y b donde se muestra un mapa de las componentes imaginarias del vector de onda de Bloch mostrando los diferentes niveles de atenuación de dicha onda. Como puede verse, debido a la alta componente imaginaria del vector de onda de Bloch, los plasmones de superficie alrededor de 145.08 THz están muy atenuados. Finalmente, un resultado importante es que los plasmones de superficie pueden excitarse mediante la técnica ATR en la configuración Otto. La última afirmación se muestra en la figura 4.11c, donde los espectros de reflexión para dos distancias diferentes entre el grafeno y el prisma se calculan, se considera una muestra de 30 celdas para el cristal fotónico primario (rojo) y 15 celdas para el caso secundario (negro). Los modos de superfie excitados (puntos A y B) se encuentran en la región evanescente debajo de la línea de luz.

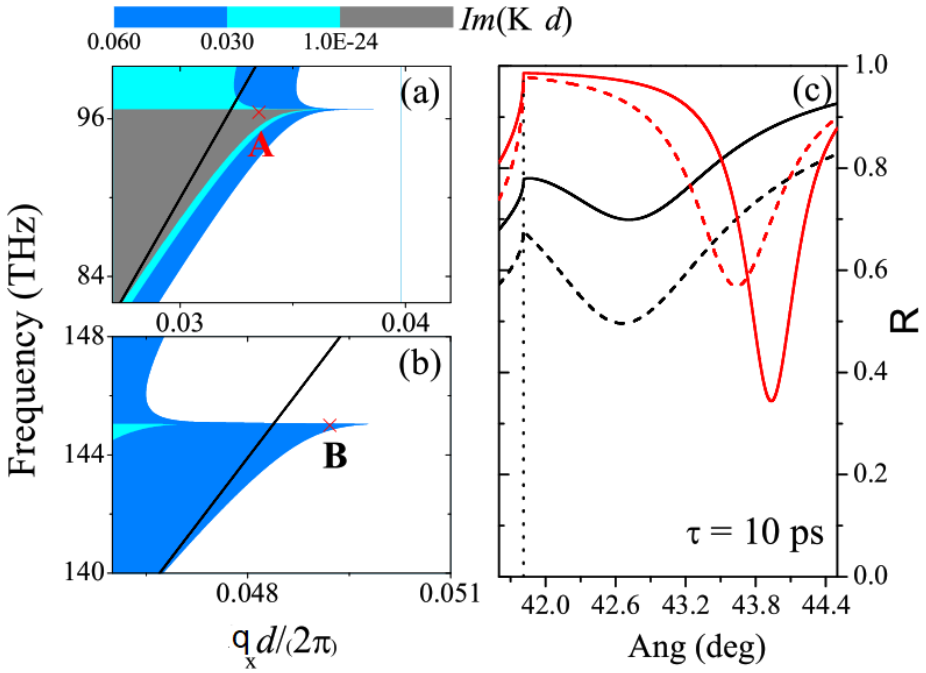


FIGURA 4.11: Estructura de bandas para (a) un cristal fotónico a base de grafeno con $\mu = 0.2$ eV (b) con $\mu_A = 0.2$ eV y $\mu_B = 0.3$ eV. (c) Espectros de reflexión correspondientes a ATR en configuración Otto para una muestra de cristal fotónco primario (roja) y secundaria (negra) con dos distancias prisma-multicapa diferentes: $d = 0.5$ μm (punteado) y $d = 1.0$ μm (sólido).

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo hemos estudiado sistemas multicapa grafeno(fosforeno)-dieléctrico en el regimen de THz, las capas de grafeno y fosforeno han sido descritas por medio de la función dieléctrica obtenida a través de la teoría de Kubo y Drude respectivamente. Por otro lado para determinar la frecuencia de corte se uso la aproximación de medio efectivo, ademas se ha calculado la respuesta óptica, partícularmente la reflexión, la cual se interpreta con respecto a las mini bandas en el régimen de THz, las cuales se han calculado para sistemas infinitos.

Utilizando un modelo efectivo válido para espesores dieléctricos de sub-longitud de onda, fue posible obtener la dependencia de la frecuencia de corte, marcando el inicio de la primera región de transmisión, en función de los parámetros estructurales. Hemos encontrado que se obtiene una dependencia a la cuarta (cuadrática) entre la densidad de portadores del grafeno (fosforeno) y la frecuencia de corte en el rango de densidad de portadores baja. Hemos concluido que para los niveles de dopaje correspondientes a las densidades de portadores en el intervalo 7×10^{15} m^{-2} <n<7×10^{17} m^{-2}, es posible definir una frecuencia de plasma efectiva que represente de manera confiable la frecuencia de corte, que se puede resumir en una fórmula muy simple. También hemos demostrado, a partir de un análisis numérico, que se obtiene una mejor concordancia, entre la aproximación efectiva del modelo y el cálculo numérico de la frecuencia de corte a partir de la estructura de bandas fotónicas, para niveles bajos de dopaje y distancias entre capas pequeñas en la escala de sub-longitud de onda.

Por otro lado nuestros cálculos mostraron que las bandas plasmónicas en polarización S se encuentra muy proximas a la línea de luz en frecuencias donde $Im(\sigma) < 0$ y que aparecen bandas plasmónicas para las dos secuencias de niveles de dopaje consideradas con diferentes niveles de atenuación debido a la absorción entre bandas. Desde la perspectiva experimental, mostramos que los modos SP acoplados pueden excitarse mediante

la técnica ATR en la configuración Otto, lo que hace que su estudio sea adecuado en matrices experimentales.

Bibliografía

[1] Xi Ling, Han Wang, Shengxi Huang, Fengnian Xia, and Mildred S Dresselhaus. The renaissance of black phosphorus. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 112(15):4523–4530, 2015.

[2] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306:666–669, 2004.

[3] Pengcheng Tao, Shan Yao, Fangyan Liu, Biao Wang, Feng Huang, and Mengye Wang. Recent advances in exfoliation techniques of layered and non-layered materials for energy conversion and storage. *J. Mater. Chem. A*, 7:23512–23536, 2019.

[4] Fengnian Xia, Han Wang, and Yichen Jia. Rediscovering black phosphorus as an anisotropic layered material for optoelectronics and electronics. *Nature communications*, 5(1):1–6, 2014.

[5] A. Khandelwal. Phosphorene–the two-dimensional black phosphorous: Properties, synthesis and applications. *Materials Science and Engineering*, 221:17–34, 2017.

[6] Xing Chen, Joice Sophia Ponraj, Dianyuan Fan, and Han Zhang. An overview of the optical properties and applications of black phosphorus. *Nanoscale*, 12:3513–3534, 2020.

[7] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81:109–162, 2009.

[8] Ya Yi, Zhengbo Sun, Jia Li, Paul K Chu, and Xue-Feng Yu. Optical and optoelectronic properties of black phosphorus and recent photonic and optoelectronic applications. *Small Methods*, 3(10):1900165, 2019.

[9] Tony Low, Rafael Roldán, Han Wang, Fengnian Xia, Phaedon Avouris, Luis Martín Moreno, and Francisco Guinea. Plasmons and screening in monolayer and multilayer black phosphorus. *Physical review letters*, 113(10):106802, 2014.

[10] Jimin Kim, Seung Su Baik, Sae Hee Ryu, Yeongsup Sohn, Soohyung Park, Byeong-Gyu Park, Jonathan Denlinger, Yeonjin Yi, Hyoung Joon Choi, and Keun Su Kim. Observation of tunable band gap and anisotropic dirac semimetal state in black phosphorus. *Science*, 349(6249):723–726, 2015.

[11] Jin Tao, XueChao Yu, Bin Hu, Alexander Dubrovkin, and Qi Jie Wang. Graphene-based tunable plasmonic bragg reflector with a broad bandwidth. *Opt. Lett.*, 39(2):271–274, Jan 2014.

[12] A.N. Grigorenko, M. Polini, and K.S. Novoselov. Graphene plasmonics. *Nature Photonics*, 6:749–758, 2012.

[13] Ashkan Vakil and Nader Engheta. Transformation optics using graphene. *Science*, 332(6035):1291–1294, 2011.

[14] Chandra S. R. Kaipa, Alexander B. Yakovlev, George W. Hanson, Yashwanth R. Padooru, Francisco Medina, and Francisco Mesa. Enhanced transmission with a graphene-dielectric microstructure at low-terahertz frequencies. *Phys. Rev. B*, 85:245407, Jun 2012.

[15] I. Fuentecilla-Carcamo, J.A. Gaspar-Armenta, M.A. Palomino-Ovando, Y. Panecatl-Bernal, L.A. Tepanecatl Fuentes, and F. Ramos-Mendieta. Plasmonic mode coupling in graphene-based photonic crystals. *Superlattices and Microstructures*, 139:106396, 2020.

[16] I Fuentecilla-Carcamo, JA Gaspar-Armenta, MA Palomino-Ovando, and F Ramos-Mendieta. Tunable wave localization for tamm modes in graphene-based photonic crystals. *Journal of Applied Physics*, 125(24):243110, 2019.

[17] J. S. Gomez-Diaz, C. Moldovan, S. Capdevila, J. Romeu, L. S. Bernard, A. Magrez, A. M. Ionescu, and J. Perruisseau-Carrier. Self-biased reconfigurable graphene stacks for terahertz plasmonics. *Nature Communications*, 6:6334, 2015.

[18] Novoselov, Geim, Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *Nature*, 438(11):197–200, 2005.

[19] Shaoliang Yu, Xiaoqin Wu, Yipei Wang, Xin Guo, and Limin Tong. 2d materials for optical modulation: Challenges and opportunities. *Advanced Materials*, 29(14):1606128, 2017.

[20] K. Zhang and J. Robinson. Doping of two-dimensional semiconductors: A rapid review and outlook. *MRS Advances*, 4:2743–2757, 2019.

[21] Vinod K. Sangwan and Mark C. Hersam. Electronic transport in two-dimensional materials. *Annual Review of Physical Chemistry*, 69(1):299–325, 2018.

[22] Z. Peng, X. Chen, Y. Fan, D. J. Srolovitz, and D. Lei. Strain engineering of 2d semiconductors and graphene: from strain fields to band-structure tuning and photonic applications. *Light Sci Appl.*, 9:190, 2020.

[23] Doan Quoc Khoa, Masoumeh Davoudiniya, Bui Dinh Hoi, and Mohsen Yarmohammadi. Strain engineering of optical activity in phosphorene. *RSC Adv.*, 9:19006–19015, 2019.

[24] Philip Richard Wallace. The band theory of graphite. *Physical review*, 71(9):622, 1947.

[25] Dodd Gray, Adam McCaughan, and Bhaskar Mookerji. Crystal structure of graphite, graphene and silicon. *Physics for Solid State Applications*, 6, 2009.

[26] Antonio Maffucci and Giovanni Miano. Electrical properties of graphene for interconnect applications. *Applied Sciences*, 4(2):305–317, 2014.

[27] Muhammad Tayyab, Akhtar Hussain, Waqar Adil, Shafqat Nabi, et al. Band-gap engineering of graphene by al doping and adsorption of be and br on impurity: A computational study. *Computational Condensed Matter*, 23:e00463, 2020.

[28] AA Avetisyan, B Partoens, and FM Peeters. Electric field tuning of the band gap in graphene multilayers. *Physical Review B*, 79(3):035421, 2009.

[29] MK Kavitha and M Jaiswal. Graphene: A review of optical properties and photonic applications. *Asian journal of Physics*, 7:809–831, 2016.

[30] Phaedon Avouris. Graphene: electronic and photonic properties and devices. *Nano letters*, 10(11):4285–4294, 2010.

[31] PW Bridgman. Two new modifications of phosphorus. *Journal of the American Chemical Society*, 36(7):1344–1363, 1914.

[32] V. Tran. Layer-controlled band gap and anisotropic excitons in few-layer black phosphorus. *Physical Review B*, 89:235319., 2014.

[33] A. Rodin. Strain-induced gap modification in black phosphorus. *Physical review letters*, 112:176801, 2014.

[34] B. Radisavljevic. Single-layer mos 2 transistors. *Nature nanotechnology*, 6:147–150, 2011.

[35] X Wang. Optical properties of black phosphorus. advances in optics and photonics. *Advances in Optics and Photonics*, 8:618–655, 2016.

[36] F Ramos-Mendieta. Mid-infrared otto excitation of transverse electric modes in doped graphene. *Journal of Applied Physics*, 117(13):133101, 2015.

[37] Gabriele Giuliani and Giovanni Vignale. *Quantum theory of the electron liquid*. Cambridge university press, 2005.

[38] Neil W Ashcroft, N David Mermin, et al. *Solid state physics*, volume 2005. holt, rinehart and winston, new york London, 1976.

[39] Ivor Lončarić and Vito Despoja. Benchmarking van der waals functionals with noncontact rpa calculations on graphene-ag (111). *Physical Review B*, 90(7):075414, 2014.

[40] Shaffique Adam, EH Hwang, VM Galitski, and S Das Sarma. A self-consistent theory for graphene transport. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 104(47):18392–18397, 2007.

[41] Choon How Gan. Analysis of surface plasmon excitation at terahertz frequencies with highly doped graphene sheets via attenuated total reflection. *Applied Physics Letters*, 101(11):111609, 2012.

[42] Dmitri K Efetov and Philip Kim. Controlling electron-phonon interactions in graphene at ultrahigh carrier densities. *Physical review letters*, 105(25):256805, 2010.

[43] D. Soto-Puebla, M. Xiao, and F. Ramos-Mendieta. Optical properties of a dielectric–metallic superlattice: the complex photonic bands. *Physics Letters A*, 326(3):273 – 280, 2004.

[44] PI Buslaev, Ivan Vladimirovich Iorsh, IV Shadrivov, Pavel Aleksandrovich Belov, and Yu S Kivshar. Plasmons in waveguide structures formed by two graphene layers. *JETP letters*, 97(9):535–539, 2013.