



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

---

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

---

Estudio de las propiedades ópticas de cristales fotónicos a  
base de grafeno.

Tesis presentada al

**Colegio de Física**

como requisito parcial para la obtención del grado de

**LICENCIADO EN FÍSICA**

por

Gerardo Barrera Flores

Asesorado por

Dr. José Alejandro Hernández López.

y

Dr. Ivan Fuentesilla Carcamo

Puebla Pue.  
6 de febrero de 2025





Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

---

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

---

Estudio de las propiedades ópticas de cristales fotónicos a  
base de grafeno.

Tesis presentada al

**Colegio de Física**

como requisito parcial para la obtención del grado de

**LICENCIADO EN FÍSICA**

por

Gerardo Barrera Flores

Asesorado por

Dr. José Alejandro Hernández López.

y

Dr. Ivan Fuentesilla Carcamo

Puebla Pue.  
6 de febrero de 2025



**Título:** Estudio de las propiedades ópticas de cristales fotónicos a base de grafeno.

**Estudiante:** GERARDO BARRERA FLORES

COMITÉ

---

Dr. Miller Toledo Solano  
Presidente

---

Dr. Adalberto Alejo Molina  
Secretario

---

Dr. Víctor Manuel Altuzar Aguilar  
Vocal

---

Dr. José Alejandro Hernández López.  
Asesor

---

Dr. Ivan Fuentesilla Carcamo  
Asesor



# Dedicatoria

Este trabajo es para mi familia y profesores, quienes desde hace años guían mi camino, que cargaron en sus hombros la responsabilidad de mi formación y dieron parte de su vida para hacer de mí el hombre que soy ahora. Este trabajo es para ustedes, es mi peculiar manera de mostrarles que toda su fe y confianza dieron frutos. No es más que mi humilde manera de darles las gracias.

A mi hermana, que a pesar de la distancia, es su guía y ejemplo lo que me hace avanzar todos los días.

A Ximena, mi amada. Pues existen límites para lo que yo puedo hacer, pero todos desaparecen cuando estás a mi lado.

A mi madre, por sus cuidados diarios y apoyo emocional. Su café matutino acompañado de un consejo hacen de mi vida algo extraordinario.

Especialmente a mi padre, por proveer todo lo necesario para hacer de este sueño una realidad. Sin su trabajo diario y desvelos nada de esto sería posible.

A todos mis amigos que hicieron de mi estancia en la universidad una aventura.

A mis profesores. Celia, Luz, Rubén, Eduardo, Lucio y todos aquellos que dedican su tiempo a hacer de la juventud personas de bien.

Con un cálido abrazo a los profesores Alejandro e Ivan por dedicar parte de su tiempo a mi aprendizaje, su compromiso con la educación y las ciencias me inspiraron e hicieron de este trabajo una experiencia inolvidable.

Al profesor Luis Rendón y Juan Castillo, por tutorar mi camino en esta última etapa universitaria, así como proveer de los medios necesarios para la conclusión en tiempo y forma.

Al siguiente estudiante que tendrá en sus manos este trabajo, pues su mera existencia y la necesidad de un texto con estas características fue el detonante para plasmar lo mejor de mí en estas páginas. Espero cumpla con tus expectativas.



# Índice general

<b>1. Materiales bidimensionales</b>	<b>1</b>
1.1. Definiciones generales . . . . .	1
1.2. El grafeno . . . . .	2
1.3. Conductividad del grafeno . . . . .	5
<b>2. Cristales fotónicos</b>	<b>7</b>
2.1. Definiciones generales . . . . .	7
2.2. Estructura cristalina . . . . .	8
2.3. Red recíproca . . . . .	9
2.4. Descripción geométrica del grafeno . . . . .	10
2.5. CF basados en materiales bidimensionales . . . . .	12
<b>3. Formalismo de la matriz de transferencia</b>	<b>13</b>
3.1. Deducción de la matriz de transferencia . . . . .	13
<b>4. Modos resonantes</b>	<b>17</b>
4.1. Incidencia normal . . . . .	17
4.1.1. Coeficientes de reflexión y transmisión . . . . .	17
4.1.2. Monocapa . . . . .	18
4.1.3. Multicapa . . . . .	19
4.2. Incidencia oblicua . . . . .	21
4.2.1. Reflexión Total Atenuada. . . . .	21
4.2.2. Relación de dispersión. . . . .	23
4.2.3. Monocapa . . . . .	23
4.2.4. Multicapa . . . . .	25
<b>5. Excitación de modos superficiales mediante ATR</b>	<b>29</b>
5.1. Perfil de campos . . . . .	31
<b>6. Conclusiones</b>	<b>33</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>35</b>



# Capítulo 1

## Materiales bidimensionales

El como estén estructurados y la composición de los átomos determina la materia a niveles macroscópicos [1], es por eso que al momento de estudiar la materia se cataloga con estas características. Un tipo de material de bastante interés en la investigación e industria son los materiales bidimensionales [2, 3], los cuales, a lo largo de este capítulo se definirán. En esta sección, se hará énfasis en el grafeno junto con sus propiedades y métodos de obtención.

### 1.1. Definiciones generales

Un material bidimensional es una pequeña capa de un ancho del orden de nanómetros o decenas de átomos. Por lo que en los cálculos pasa a ser despreciable, de ahí su nombre, pues solo es su alto y largo lo que resulta relevante [4]. La dimensionalidad y tamaño resulta de gran interés, por ejemplo, para el desarrollo de transistores a una menor escala, consiguiendo un consumo menor de energía y operaciones a altas frecuencias [3]. Es ahí donde se puede ver la importancia y la necesidad de que posean una conductividad eléctrica extraordinaria.

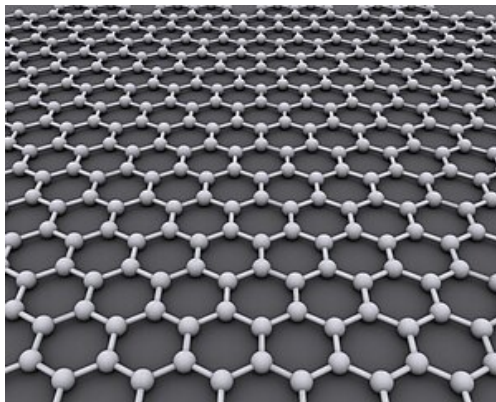


Figura 1.1: Diagrama de la estructura del grafeno.

Dentro de los materiales bidimensionales, el grafeno ha tomado gran popularidad en las últimas décadas por sus excentricidades mecánicas, químicas y ópticas [3], razón por la cual fue seleccionado para los estudios elaborados en este trabajo. En la siguiente sección se presentará un poco de contexto histórico y propiedades particulares del grafeno.

## 1.2. El grafeno

El descubrimiento del grafeno fue accidental. En 2004 Andre Geim se encontraba estudiando las propiedades de decenas de capas de grafito, él junto con un estudiante de nombre Novoselov estaban jugando con cinta adhesiva retirando delgadas muestras de grafito [2]. Con el tiempo encontraron que el material obtenido se podía transferir a una oblea de silicio y al ser observada bajo un microscopio encontraron que solo había una o dos capas de grafito, logrando así una técnica de obtención de láminas sin la necesidad de equipo especializado y de gran calidad para futuros experimentos. Esta lámina fue denominada como *grafeno* [3]. Pusieron a prueba el grafeno y descubrieron las siguientes propiedades del material.

- La velocidad del flujo de cargas eléctricas mostró ser 250 veces más rápida que la reportada en otro semiconductor [4].
- Los portadores de carga se propagan a través del material con una masa efectiva muy reducida [4].
- Es un millón de veces más delgado que un cabello humano promedio pero tres veces más fuertes que el acero [3]. Se puede estirar más del doble de su forma original sin mostrar daños mecánicos, pues posee un módulo de Young de al rededor de 1100 GPa [2].
- Tiene una estructura electrónica de tipo cónica (denominado como de Dirac), donde las bandas de conducción y valencia se encuentran en los puntos de Dirac [4].

Estas propiedades superlativas en el grafeno permiten su integración en dispositivos optoelectrónicos innovadores. En ese sentido se exploran las propiedades ópticas de configuraciones basadas en grafeno en este trabajo. En la siguiente figura se muestra un esquema de la estructura electrónica, a diferencia de un metal donde las bandas se encuentran superpuestas o un dieléctrico que tiene sus bandas separadas por un *GAP*, el grafeno posee esta estructura particularmente interesante [5]. Solo en el punto de Dirac las bandas se tocan, es por esto que se le denomina un *semimetal*.

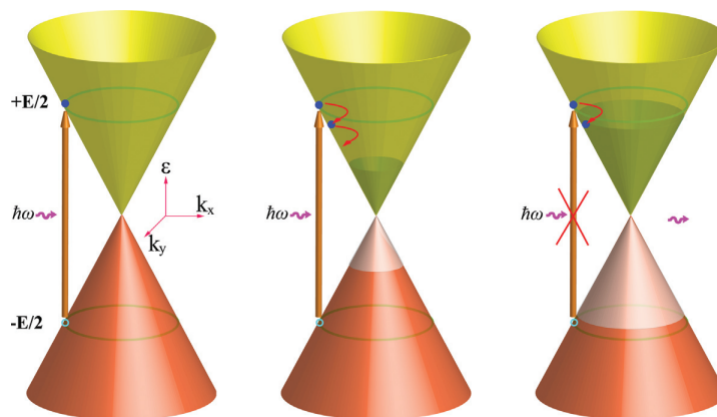


Figura 1.2: Conos de Dirac [6].

Todas estas propiedades (mecánicas, eléctricas y ópticas) hacen del grafeno uno de los mejores materiales para el diseño de futuros dispositivos optoelectrónicos [5]. no es de sorprender que en los últimos veinte años la investigación relacionada con el grafeno ha aumentado de manera exponencial [2].

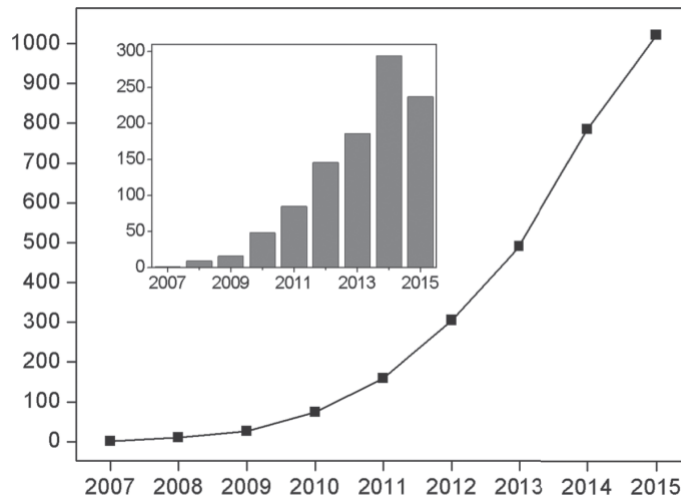


Figura 1.3: Publicaciones donde el título contiene la palabra *grafeno* entre 2007 y 2015 [6].

En la actualidad, dispositivos ópticos y optoelectrónicos a base de grafeno ya se encuentran en investigación y producción como fotodetectores, láseres, polarizadores, moduladores, diodos emisores de luz, entre otros [2].

### Producción del grafeno

Dependiendo de los intereses de investigación se puede usar alguna otra técnica que ha sido desarrollada en la última década para la obtención del grafeno. A continuación se enuncian y resumen algunas de ellas.

- Exfoliación mecánica

Esta sencilla técnica con la que se descubrió el grafeno se basa en la separación literal de capas de grafito. Usualmente se emplea una cinta adhesiva, colocándola sobre la muestra presionando firmemente para lograr una buena adherencia [7]. Si bien esta técnica es una de las más populares por su simplicidad, suele causar problemas porque no se tiene un buen control de la cantidad y ancho de capas, provocando retrasos en la producción por la lentitud y detalle que se requiere [8].

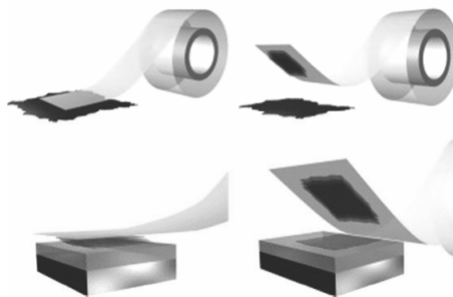


Figura 1.4: Diagrama del proceso de exfoliación mecánica [6].

- Deposición por vapor químico

También conocida como *CVD* por sus siglas en inglés, es una técnica para la obtención de capas delgadas de algún material, popular por su alta calidad y uniformidad de trabajo [9]. Primeramente se prepara un sustrato donde se realizará el crecimiento del grafeno (suele ser cobre o níquel) para después introducirlo en una cámara donde se contenga gases con presencia de algún carbono (puede ser  $CH_4$ ,  $C_2H_2$ ) y se calienta a altas temperaturas rondando los  $1000^\circ C$  para lograr una descomposición química [10]. Los átomos de carbono se depositan en el sustrato, mientras que los átomos de hidrógeno pasan a un estado gaseoso de menor densidad, por lo que un control de temperatura y presión es fundamental. Esta técnica es caracterizada por la gran calidad y velocidad de producción de laminas, con el único inconveniente de la necesidad de maquinaria especializada [9].

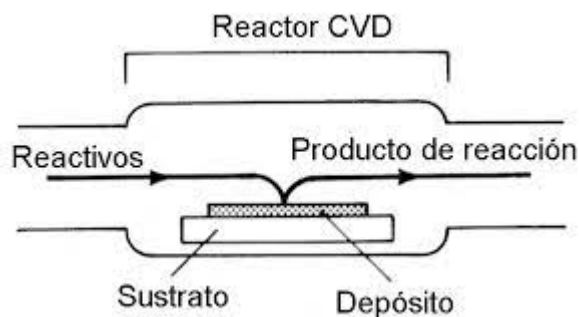


Figura 1.5: Diagrama del proceso de *CVD* [6].

- Oxido de grafeno reducido mediante reducción química

En este caso, se permite la obtención del grafeno a partir de un óxido de grafito. Como primer paso es necesario oxidar el grafito mediante una mezcla con reactivos (como ácido sulfúrico o permanganato de potasio) para después pasar por un proceso de reducción química [11], esto quiere decir que se va a agregar un conjunto de compuestos a la mezcla (como óxido ascórbico) que permita la *limpieza* y obtención de una estructura muy similar al grafeno [10, 11]. Con esta metodología se puede reducir costos de producción y la calidad es muy buena, pero como se acaba de mencionar se consigue un material *similar*, pues el proceso de reducción no siempre es perfecto y quedan restos de los reactivos empleados [11].



Figura 1.6: Diagrama del proceso de reducción química [6].

En la figura 1.7 se muestra una proyección hecha en 2015 por Novoselov acerca de las posibles aplicaciones modernas del grafeno.

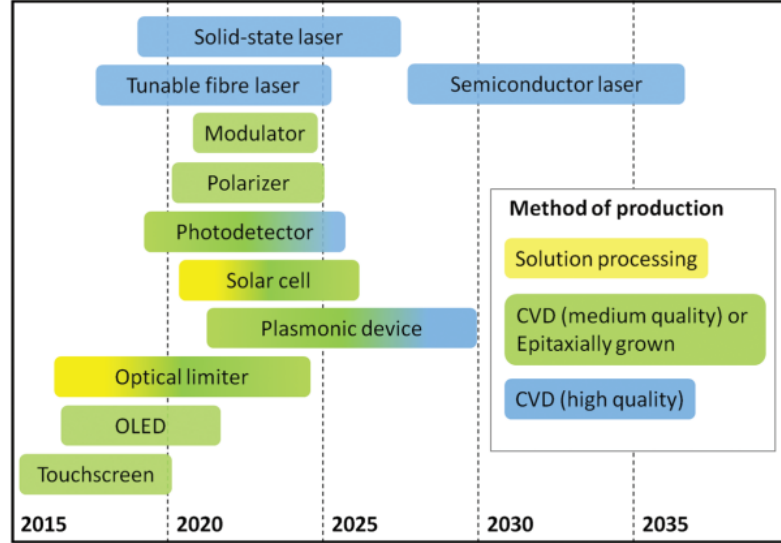


Figura 1.7: Proyección a 20 años de dispositivos ópticos y optoelectrónicos a base de grafeno junto con el método de obtención del grafeno [6].

Con base en las referencias actuales es posible ver que el año de elaboración de esta tesis se encuentra dentro del trabajo en tecnología plasmónica [2, 3]. Las propiedades ópticas y las características estructurales de los cristales a base de grafeno estudiados en este proyecto brindan una introducción a las herramientas teórico-computacionales para el diseño de esta tecnología [5], así mismo, se presenta la localización de un modo plasmónico encontrado en 2014 [12] con fuertes aplicaciones en esta área.

### 1.3. Conductividad del grafeno

Como ya se enunció en la sección pasada, el grafeno es uno de los materiales bidimensionales más populares de las últimas décadas [5]. Proviene de la separación de una ligera capa del ancho de uno o dos átomos de carbono [4] y es en sus propiedades físicas donde yace toda su popularidad. Las configuraciones de capas de grafeno brindan diferentes estructuras con distintas aplicaciones.

Mecánicamente, el grafeno es mucho más resistente que una capa de acero de su mismo tamaño, así mismo, posee propiedades electrónicas de gran provecho al tener una alta conductividad eléctrica [3, 4]. Al poseer una gran movilidad de los portadores de carga [13] el grafeno se convierte en un conductor por excelencia, siendo el más resistente, el más liviano y además de todo eso, tiene la bondad que su conductividad eléctrica es deducida de manera analítica de la formula de Kubo [14]. Para temperaturas finitas y en el límite donde el potencial químico es mucho mayor a la constante de Boltzman,  $\mu_c \gg k_B T$ , su conductividad eléctrica  $\sigma(\omega)$  está dada por

$$\sigma(\omega) = \frac{ie^2}{\pi\hbar} \left[ \frac{\mu_c}{\hbar(\omega + i\tau)^{-1}} - \frac{1}{4} \ln \left( \frac{2\mu_c + \hbar(\omega + i\tau^{-1})}{2\mu_c - \hbar(\omega + i\tau^{-1})} \right) \right] \quad (1.1)$$

donde  $\tau$  es el tiempo de relajación fenomenológico del electrón y  $\mu_c$  es el potencial químico. Se puede observar que es una función compleja que depende de la frecuencia angular, además, es

posible mostrar que para altas frecuencias  $\sigma$  se aproxima a un valor constante  $\sigma_0 \approx \frac{e^2}{4\hbar}$  [13] y es bastante cercano al valor mínimo de la función  $\frac{e^2}{2\pi\hbar}$ . La figura 1.8 muestra un modelo de la ecuación (1.1) normalizado en un rango de altas frecuencias, se graficó parte real (superior) e imaginaria (inferior) con diferentes valores de  $\mu_c$ .

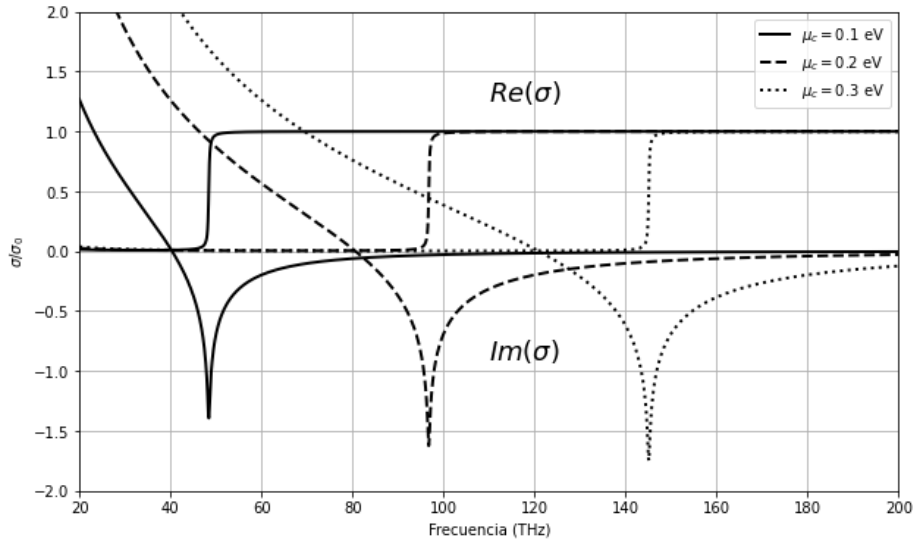


Figura 1.8: Conductividad del grafeno normalizada para distintos valores de  $\mu_c$ .

## Capítulo 2

# Cristales fotónicos

La ciencia de materiales cataloga la materia en función de sus propiedades o características. Lo que coloquialmente se llama *cristales* da origen a un área llamada cristalografía, pues su estructura física permiten darle un estudio analítico, específicamente geométrico, como el que se presenta en este trabajo. A lo largo de este capítulo se definirá lo que es un cristal fotónico y motivos por los cuales son de interés en el proyecto.

### 2.1. Definiciones generales

Un cristal, en el sentido más general de la palabra, es una estructura periódica, esto quiere decir que los átomos que lo constituyen siguen algún patrón reconocible el cual se irá repitiendo a lo largo del espacio. Un cristal fotónico (CF) posee la propiedad de moldear, controlar y propagar los campos electromagnéticos que viajan a través de él y al modificar dicho cristal podemos esperar un cambio en la respuesta óptica. Los CF se dividen en tres clases de acuerdo a la dirección de periodicidad [15]. Los hay de una, dos y tres dimensiones (Figura 2.1). En este proyecto se estudia la respuesta óptica de cristales fotónicos de una dimensión.

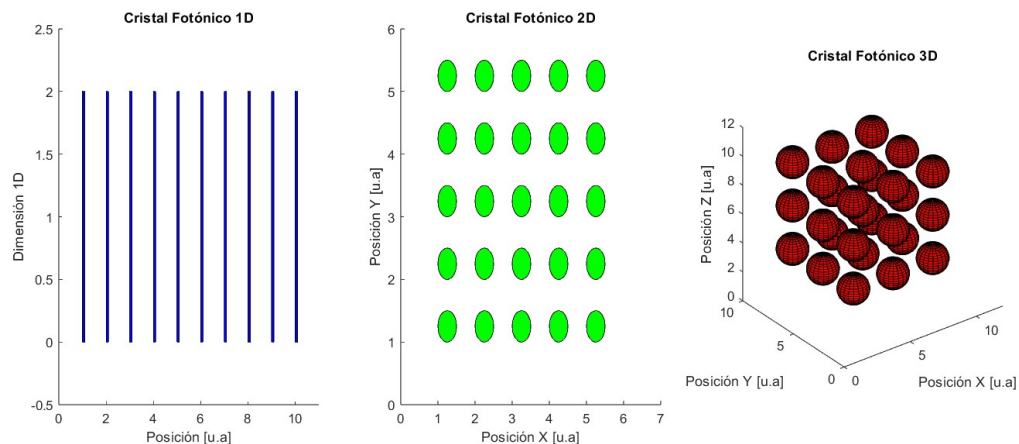


Figura 2.1: Diferentes clases de cristales fotónicos.

## 2.2. Estructura cristalina

Se define una red de *Bravais* [16] como un arreglo periódico de puntos en el espacio conectados a través de vectores de traslación.

$$\mathbf{t}_n = n_1 \mathbf{t}_1 + n_2 \mathbf{t}_2 + n_3 \mathbf{t}_3 \quad (2.1)$$

Donde los vectores no coplanares  $\mathbf{t}_i$  son llamados *vectores fundamentales de traslación* con  $n_i \in \mathbb{Z}$ , así mismo, el paralelepipedo generado por los vectores  $\mathbf{t}_i$  denominado  $\Omega$  tiene un volumen definido como

$$\Omega = \mathbf{t}_1 \cdot (\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3) \quad (2.2)$$

El paralelepipedo  $\Omega$  contiene al menos un punto de la red de *Bravais* y se denomina celda primitiva, que por convención posee longitudes con etiquetas  $a, b, c$  y ángulos  $\alpha, \beta, \gamma$ . Tanto los vectores de traslación como la forma de la celda primitiva no es única. Lo único que es invariante es  $\Omega$ , gracias a este hecho se suele elegir una celda unitaria con la mayor cantidad de ejes de simetría. Un mero ejercicio elemental para ejemplificar lo anterior parte de una red de Bravais en dos dimensiones con vectores de traslación  $\mathbf{t}_1 = (a, 0, 0)$  y  $\mathbf{t}_2 = (0, b, 0)$ . Del álgebra lineal se sabe que  $\mathbf{t}_1$  y  $\mathbf{t}_2$  son suficientes para poder generar la red, que si bien es la elección trivial, hay un sin fin de elecciones, en el caso bidimensional  $\Omega$  pasa de ser un volumen a un área, es por eso que de elegir  $\tilde{\mathbf{t}}_1 = \mathbf{t}_1$  y  $\tilde{\mathbf{t}}_2 = (3a, b, 0)$  las condiciones de celda primitiva se siguen conservando al poder construir todo el espacio, no poseer puntos dentro de la celda y el área  $ab$  se conserva.

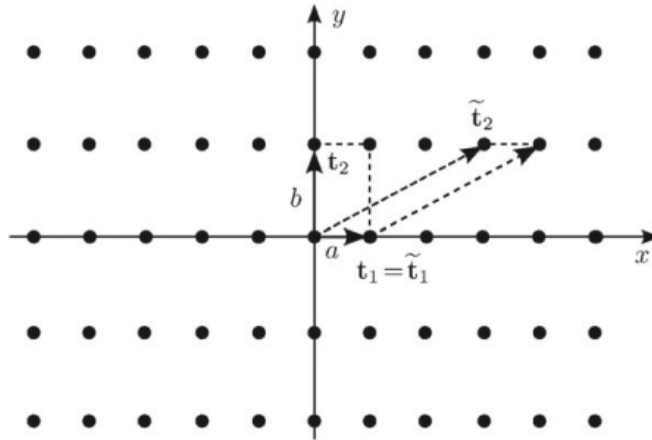


Figura 2.2: Ejemplo de selecciones de celda primitiva [16].

La elección de forma de la celda unitaria, al ser variada, es determinada por la cantidad de consideraciones simétricas y depende únicamente de los intereses del trabajo. Pueden variar  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$  dando pie a rectángulos, cuadrados, hexágonos, etc. En 3 dimensiones existen 14 redes de Bravais [16].

Así entonces, gracias a la descripción geométrica es posible ubicar el centro de un átomo en cada punto de la red, donde cada átomo posee una etiqueta  $d_1, d_2, \dots, d_\nu$  denominados *base* y es posible localizarlo con un vector  $\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{t}_1 + n_2 \mathbf{t}_2 + n_3 \mathbf{t}_3$

Como se ha hecho énfasis en todo el capítulo, el cristal por definición posee periodicidad, es por esto que ya sea desde el origen del sistema de coordenadas o desde algún otro punto de la red es posible localizar cualquier átomo, entonces

$$\mathbf{R}_n^{(\nu)} = d_\nu + n_1 \mathbf{t}_1 + n_2 \mathbf{t}_2 + n_3 \mathbf{t}_3$$

Con toda esta descripción, se provee de las herramientas necesarias para lograr mapear cualquier átomo en la red y, de las constantes repeticiones de la celda unitaria o primitiva, generar un cristal. Llegando así a la forma general de la estructura cristalina.

$$\text{Estructura cristalina} = \text{Vectores primitivos} + \text{Base}$$

En este trabajo se estará estudiando cristales construidos a partir de una celda primitiva unidimensional con dos lados simétricos y todos los ángulos iguales a  $\frac{\pi}{2}$

### 2.3. Red recíproca

La red de Bravais permite la localización de átomos en el espacio de tal suerte que pueda generar periodicidad y por ende un cristal, además es sencillo ver que la expresión para la red (2.1) genera un espacio vectorial, por lo que es automático asociar ahora un espacio dual. En adelante, la red de Bravais será denominada *red directa en el espacio directo* y su dual como *red recíproca en el espacio recíproco*, es entonces que se puede llegar a la conclusión que para cada  $\mathbf{t}_i$  en el espacio directo, hay un  $\mathbf{g}_j$  que pertenece al espacio recíproco y ambos vectores se encuentran asociados mediante la siguiente definición

$$\mathbf{t}_i \cdot \mathbf{g}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (2.3)$$

Si los vectores  $\mathbf{t}_i$  y  $\mathbf{g}_j$  son no coplanares y satisfacen la regla de la mano derecha se sabe que una rotación en  $\mathbf{t}_i$  implica una rotación del mismo tipo en  $\mathbf{g}_j$ . Es de notar que un vector de onda  $\mathbf{k}$  de una onda plana  $\exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}]$  puede tener una *longitud recíproca* en el espacio recíproco. De manera análoga, todo punto de la red recíproca en tres dimensiones se puede expresar como

$$\mathbf{g}_m = m_1 \mathbf{g}_1 + m_2 \mathbf{g}_2 + m_3 \mathbf{g}_3; m_i \in \mathbb{Z} \quad (2.4)$$

Al hacer uso de la ecuación (2.3) se puede notar que  $\mathbf{g}_1$  es ortogonal a  $\mathbf{t}_1$  (El factor de  $2\pi$  se usa para reducir expresiones), lo que implica que  $\mathbf{g}_1$  es ortogonal a  $\mathbf{t}_2$ ,  $\mathbf{t}_3$  y como  $\mathbf{t}_1$  es ortogonal a  $\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3$  se llega a la conclusión que  $\mathbf{g}_1$  es paralelo a  $\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3$ . Usando estos hechos y las propiedades del producto escalar entre vectores se puede escribir cada  $\mathbf{g}_j$  como

$$\mathbf{g}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} (\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3); \mathbf{g}_2 = \frac{2\pi}{\Omega} (\mathbf{t}_3 \times \mathbf{t}_1); \mathbf{g}_3 = \frac{2\pi}{\Omega} (\mathbf{t}_1 \times \mathbf{t}_2) \quad (2.5)$$

con  $\Omega = \mathbf{t}_1 \cdot (\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3)$ . Es así como se ha logrado mapear cualquier punto de la red recíproca en términos de la red directa. De forma análoga al análisis de la sección pasada, es natural buscar una expresión para el volumen de la celda unitaria o primitiva también escrita en los mismos términos. Partiendo de una ecuación similar a (2.2) pero ahora denominada  $\Omega_k = \mathbf{g}_1 \cdot (\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3)$  e insertando los valores de (2.5) se tiene que

$$\Omega_k = \mathbf{g}_1 \cdot (\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3) = \left(\frac{2\pi}{\Omega}\right)^3 (\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3) \cdot [(\mathbf{t}_3 \times \mathbf{t}_1) \times (\mathbf{t}_1 \times \mathbf{t}_2)] \quad (2.6)$$

y al emplear las relaciones vectoriales  $\mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C})$  y  $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C}$  se encuentra que el triple producto vectorial de la ecuación (2.6) es igual a  $\Omega^2$ , por lo tanto

$$\Omega_k = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \quad (2.7)$$

siendo entonces que el volumen de la celda  $\Omega_k$  de la red recíproca es inversamente proporcional a la celda de la red directa.

Si bien, no se adentrará en el comportamiento de la red recíproca y directa, son conceptos necesarios para un estudio introductorio en la ciencia de materiales y cristalografía.

## 2.4. Descripción geométrica del grafeno

El grafeno es una monocapa de arreglo hexagonal con átomos de carbono en cada vértice [4], esta estructura es bidimensional y denominada de tipo *colmena*. Por lo que la red directa puede ser descrita en un plano con sus vectores de traslación  $\vec{t}_1$ ,  $\vec{t}_2$  y  $\vec{d}_1$ ,  $\vec{d}_2$  su base. Por conveniencia se eligió la geometría de la Figura 2.3.

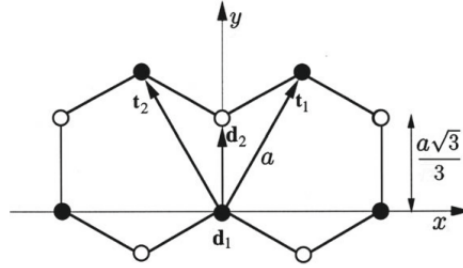


Figura 2.3: Geometría del grafeno [16].

Esta configuración garantiza que el ángulo generado entre los vectores  $\vec{t}_1$  y  $\vec{t}_2$  es de  $60^\circ$  y por consiguiente el ángulo entre  $\vec{d}_2$  y  $\vec{t}_1$  es de  $30^\circ$ , así entonces con relaciones trigonométricas los vectores de traslación tienen coordenadas

$$\vec{t}_1 = a\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right)$$

$$\vec{t}_2 = a\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right)$$

donde  $a$  es el parámetro de red y de manera experimental fue calculado, obteniendo un valor de  $a = 2,46\text{\AA}$  [3, 16]. Por otra parte, a partir de la ley de senos y que el ángulo generado por cada vértice y par de aristas de un hexágono es de  $120^\circ$  se puede encontrar fácilmente que  $d_2$  tiene coordenadas

$$\vec{d}_2 = a\left(0, \frac{\sqrt{3}}{3}, 0\right)$$

Con  $\vec{d}_1$  ubicado en el origen. Así se ha logrado una descripción geométrica que permite localizar todos los átomos de la red. La estructura bidimensional del grafeno consta de dos *subredes* de carbono que corresponden a  $\vec{d}_1$ ,  $\vec{d}_2$ .

Esta estructura hexagonal no es exclusiva del grafeno, de tomar la misma geometría pero cambiando la base por átomos de nitrógeno y boro se obtiene el nitruro de boro. Otro material bidimensional de gran interés[4].

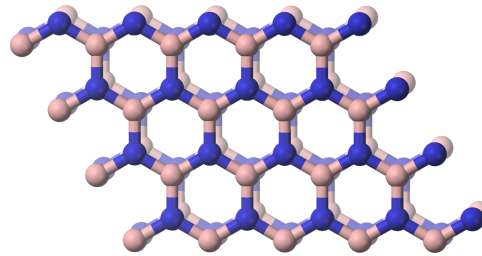


Figura 2.4: Nitruro de Boro con geometría hexagonal.

La superposición constante de capas de grafeno genera el grafito, dando pie a un material tridimensional. El ancho entre cada capa de grafeno fue determinado de manera experimental con un valor de  $c = 6,71\text{Å}$  [3, 16] y su celda unitaria contiene cuatro átomos de carbono con vectores de traslación de la forma [2, 3, 4]

$$\vec{t}_1 = a\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right); \vec{t}_2 = a\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right); \vec{t}_3 = c(0, 0, 1)$$

$$\vec{d}_1 = (0, 0, 0); \vec{d}_2 = a\left(0, \frac{\sqrt{3}}{3}, 0\right); \vec{d}_3 = c\left(0, 0, \frac{1}{2}\right); \vec{d}_4 = \left(0, a\frac{2\sqrt{3}}{3}, \frac{c}{2}\right)$$

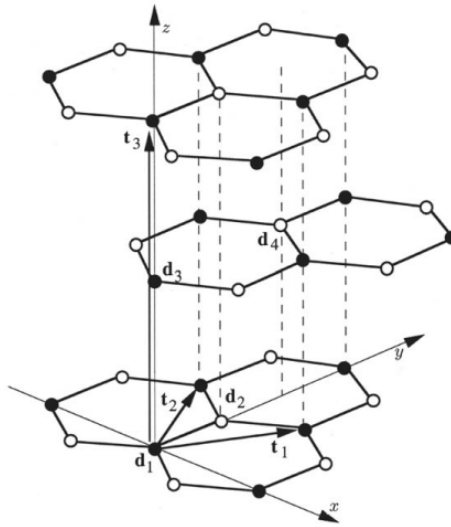


Figura 2.5: Geometría del grafito como una superposición de capas de grafeno [16].

La figura 2.6 muestra otro tipo de geometría del grafeno. Constituida únicamente por átomos de carbono, lo que implica que es un material alótopo, es un icosaedro truncado propuesto originalmente por H. W. Kroto et al. en 1985 [4]

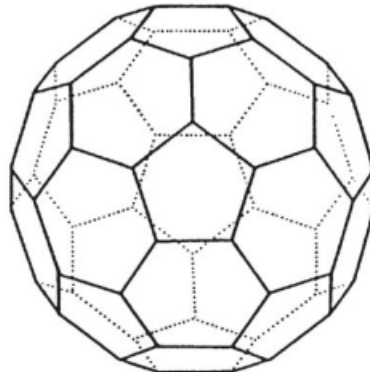


Figura 2.6: Icosaedro truncado [16].

Este polígono cuenta con 60 vértices, 32 caras. De las cuales 12 son de forma pentagonal y 20 hexagonales. El parámetro de red generado por los lados de los pentágonos es de  $1,47\text{Å}$ , mientras que el parámetro de red entre un par de hexágonos es de  $1,41\text{Å}$

## 2.5. CF basados en materiales bidimensionales

En 2008 Falkovsky [17] comenzó un estudio mimetizando el comportamiento de un cristal fotónico, con la importante diferencia de colocar capas de grafeno *abrazando* un medio dieléctrico logrando reportar la transmitancia y reflectancia de ondas electromagnéticas viajando a través de este cristal como función de la frecuencia. De repetir de manera periódica esa geometría (Figura 2.7) es posible generar una nueva estructura. Es así que un cristal fotónico a base de grafeno es aquella estructura periódica donde dos medios dieléctricos se encuentran separados por grafeno y siguen una periodicidad finita o infinita [18]

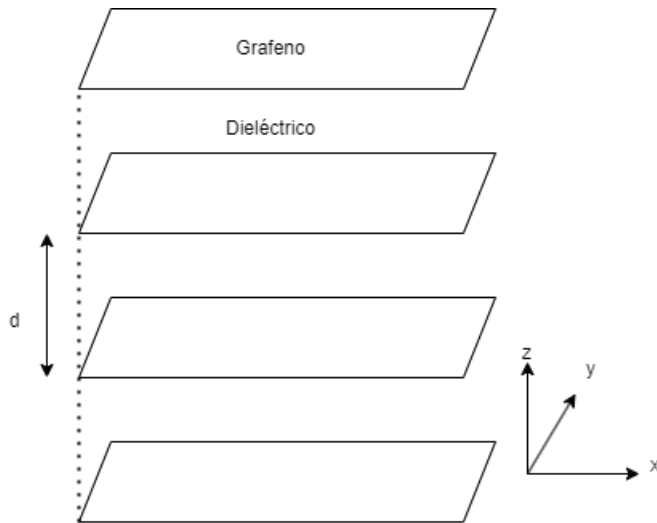


Figura 2.7: Cristal fotónico a base de grafeno.

Un dieléctrico con índice de refracción  $n$ , un ancho  $d$  y capas de grafeno en sus costados con una dirección de propagación en  $z$  son las características principales de la configuración de los cristales fotónicos por estudiar.

La elección del grafeno como interfaz de separación entre medios fue por la posibilidad de modificar el nivel de Fermi de forma externa a través de configuraciones tipo transistor [19]. En la actualidad se están estudiando estructuras de este tipo con diferentes materiales bidimensionales, entre estos se encuentra el fosforeno negro [18]

## Capítulo 3

# Formalismo de la matriz de transferencia

El mayor reto en el estudio del comportamiento de la luz en los CF unidimensionales a base de grafeno es encontrar expresiones tales que permitan asociar los campos eléctricos y magnéticos antes y después del grafeno considerando su conductividad, es por esto que en este capítulo se desarrollará el formalismo del método de la matriz de transferencia (TMM, por sus siglas en inglés). Un conjunto de operaciones matriciales que resuelven esta problemática.

### 3.1. Deducción de la matriz de transferencia

En todo trabajo de TMM la notación juega un papel fundamental en el análisis [20]. Primeramente, se define una onda plana monocromática viajante de izquierda a derecha (incidente) y una onda viajante de derecha a izquierda (reflejada) respectivamente como

$$\begin{aligned} E^i e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-wt)} \\ E^r e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}+wt)} \end{aligned}$$

donde  $E^r, E^i$  son las amplitudes del campo reflejado e incidente y la misma notación se hereda para los campos magnéticos con amplitudes  $H^r, H^i$ . Puesto que es de interés el comportamiento de la interfaz, es importante considerar las condiciones de frontera [21, 22, 20]

$$\begin{aligned} \vec{E}_{2\beta} - \vec{E}_{1\beta} &= 0; \beta = x, y \\ \vec{H}_{2x} - \vec{H}_{1x} &= \sigma \vec{E}_y; (TE) \\ \vec{H}_{2y} - \vec{H}_{1y} &= -\sigma \vec{E}_x; (TM) \end{aligned} \tag{3.1}$$

**Formalismo de la matriz de transferencia**  
3.1 Deducción de la matriz de transferencia

---

Suponga ahora un sistema con multicapas de grafeno como se muestra en la figura 3.1.

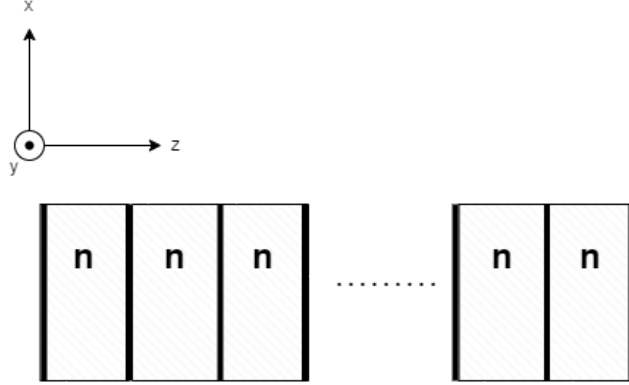


Figura 3.1: Sistema multicapa de grafeno.

Así mismo, si una onda plana armónica y monocromática con polarización transversa magnética incide al cristal se tendrá en el medio  $j$ -ésimo campos de la forma

$$\begin{aligned} (E_{xj}^i \hat{i} + E_{zj}^i \hat{k}) e^{i(\vec{k}_j \cdot \vec{r} - \omega t)} + (E_{xj}^r \hat{i} + E_{zj}^r \hat{k}) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} + \omega t)} \\ H_{yj}^i \hat{j} e^{i(\vec{k}_j \cdot \vec{r} - \omega t)} + H_{yj}^r \hat{j} e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} + \omega t)} \end{aligned} \quad (3.2)$$

De aplicar las formas de los campos (3.2) en la ecuación de Maxwell  $\nabla \times \vec{H} = -i\varepsilon \vec{E}$  se llega a un conjunto de relaciones para las amplitudes de los campos como

$$\begin{aligned} H_{yj}^i &= Y_j E_{xj}^i \\ H_{yj}^r &= -Y_j E_{xj}^r \end{aligned} \quad (3.3)$$

donde  $Y_j = \frac{\omega \varepsilon_j}{k_{jz}}$  es conocida como la *aceptancia*,  $k_{jz} = \sqrt{(\frac{\omega}{c} n_j)^2 - k_x^2}$  y  $k_x = \frac{\omega}{c} n_{inc} \sin \theta_{inc}$  son las componentes del vector de onda. El subíndice *inc* denota el medio incidente, mientras que el subíndice  $j$  el medio actual. Con este par de relaciones, es posible ahora escribir las amplitudes del campo solo en términos de H o E según sea el caso.

Si se supone una onda plana viajando a lo largo de la dirección de propagación, para la frontera entre el medio  $j$  y el medio  $j+1$  se cumple que

$$\begin{aligned} E_{jx}^i e^{ik_{jz}z} + E_{jx}^r e^{-ik_{jz}z} &= E_{(j+1)x}^i e^{ik_{(j+1)z}z} + E_{(j+1)x}^r e^{-ik_{(j+1)z}z} \\ H_{jy}^i e^{ik_{jz}z} + H_{jy}^r e^{-ik_{jz}z} &= (H_{(j+1)y}^i + \sigma E_{(j+1)x}^i) e^{ik_{(j+1)z}z} + (H_{(j+1)y}^r + \sigma E_{(j+1)x}^r) e^{-ik_{(j+1)z}z} \end{aligned}$$

y haciendo uso de las relaciones (3.3)

$$\begin{aligned} \frac{1}{Y_j} H_{jy}^i e^{ik_{jz}z} - \frac{1}{Y_j} H_{jy}^r e^{-ik_{jz}z} &= \frac{1}{Y_{j+1}} H_{(j+1)y}^i e^{ik_{(j+1)z}z} - \frac{1}{Y_{j+1}} H_{(j+1)y}^r e^{-ik_{(j+1)z}z} \\ H_{jy}^i e^{ik_{jz}z} + H_{jy}^r e^{-ik_{jz}z} &= \left(1 + \frac{\sigma}{Y_{j+1}}\right) H_{(j+1)y}^i e^{ik_{(j+1)z}z} + \left(1 - \frac{\sigma}{Y_{j+1}}\right) H_{(j+1)y}^r e^{-ik_{(j+1)z}z} \end{aligned}$$

es posible construir un arreglo matricial de la forma

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{Y_j} & \frac{-1}{Y_j} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{jz}z} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{jz}z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_{jy}^i \\ H_{jy}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{Y_{j+1}} & \frac{-1}{Y_{j+1}} \\ 1 + \frac{\sigma}{Y_{j+1}} & 1 - \frac{\sigma}{Y_{j+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{(j+1)z}z} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{(j+1)z}z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_{(j+1)y}^i \\ H_{(j+1)y}^r \end{pmatrix}$$

y al multiplicar todo por  $Y_j Y_{j+1}$

$$Y_{j+1} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ Y_j & Y_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_j z} & 0 \\ 0 & e^{-ik_j z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_{jy}^i \\ H_{jy}^r \end{pmatrix} = Y_j \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ Y_{j+1} + \sigma & Y_{j+1} - \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{(j+1)} z} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{(j+1)} z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_{(j+1)y}^i \\ H_{(j+1)y}^r \end{pmatrix}$$

Y despejando el vector columna de las amplitudes incidentes se consigue la matriz de transferencia entre el medio  $j$  y  $j + 1$ . Por último se reescribe cada matriz asignándole una etiqueta.

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} H_{jy}^i \\ H_{jy}^r \end{pmatrix} &= \frac{Y_j}{Y_{j+1}} \begin{pmatrix} e^{ik_j z} & 0 \\ 0 & e^{-ik_j z} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ Y_j & Y_j \end{pmatrix}^{-1} \\ &\quad \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ Y_{j+1} + \sigma & Y_{j+1} - \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{(j+1)} z} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{(j+1)} z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_{(j+1)y}^i \\ H_{(j+1)y}^r \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} H_{jy}^i \\ H_{jy}^r \end{pmatrix} &= \frac{Y_j}{Y_{j+1}} \mathbb{E}_j \mathbb{Y}_j \mathbb{Y}_\sigma \mathbb{E}_{j+1} \begin{pmatrix} H_{(j+1)y}^i \\ H_{(j+1)y}^r \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Es natural que al considerar  $N$  medios, implica correr el índice  $j$  desde uno hasta  $N$ , llegando a un producto constante de matrices.

$$\begin{pmatrix} H_{1y}^i \\ H_{1y}^r \end{pmatrix} = \frac{Y_1}{Y_f} \prod_{j=1}^N \mathbb{E}_j \mathbb{Y}_j \mathbb{Y}_\sigma \mathbb{E}_{j+1} \begin{pmatrix} H_{fy}^i \\ H_{fy}^r \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

Al desarrollar la ecuación (3.5) considerando el mismo medio dieléctrico entre capas de grafeno con un ancho  $d$ , se puede encontrar un patrón dado por

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ Y_j + \sigma & Y_j - \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik_j z d} & 0 \\ 0 & e^{ik_j z d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ Y_j & Y_j \end{pmatrix}^{-1} = \\ \begin{pmatrix} \cos(k_j z d) & \frac{-i}{Y_j} \sin(k_j z d) \\ -iY_j \sin(k_j z d) + \sigma \cos(k_j z d) & \cos(k_j z d) - \frac{i\sigma}{Y_j} \sin(k_j z d) \end{pmatrix} \equiv \mathbb{N}_j \end{aligned} \quad (3.6)$$

Sustituyendo  $\mathbb{N}_j$  en (3.5) se obtiene la matriz total de transferencia para un cristal fotónico de  $N$  capas de grafeno y ancho total  $\Lambda$

$$\begin{pmatrix} H_{1y}^i \\ H_{1y}^r \end{pmatrix} = \frac{Y_1}{Y_f} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ Y_1 & Y_1 \end{pmatrix}^{-1} \mathbb{N}^{N-1} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ Y_f + \sigma & Y_f - \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{fz} \Lambda} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{fz} \Lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_{fy}^i \\ H_{fy}^r \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Si se realiza en mismo análisis pero escribiendo la matriz de transferencia en términos de  $E_{xj}$  se tiene

$$\begin{pmatrix} E_{1x}^i \\ E_{1x}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_1 & -Y_1 \end{pmatrix}^{-1} \mathbb{N}^{N-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_f + \sigma & -Y_f + \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{fz} \Lambda} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{fz} \Lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{fx}^i \\ E_{fx}^r \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Por otra parte, al prestar atención en las ecuaciones (3.7) y (3.8) se puede observar que son de la forma

$$\begin{pmatrix} H_{1y}^i \\ H_{1y}^r \end{pmatrix} \equiv \mathbb{M} \begin{pmatrix} H_{fy}^i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

$$\begin{pmatrix} E_{1x}^i \\ E_{1x}^r \end{pmatrix} \equiv \mathbb{O} \begin{pmatrix} E_{fx}^i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

## Formalismo de la matriz de transferencia

### 3.1 Deducción de la matriz de transferencia

---

donde  $E_{fx}^r = H_{fy}^r = 0$ , pues en el medio final ya no hay una lámina de grafeno donde la onda pueda ser reflejada y la luz solo se transmite.

Así que las matrices  $\mathbb{M}, \mathbb{O}$  determinarán si se habla en términos de  $E_{jx}$  o  $H_{jy}$ . Para un estudio completo, se encontró una matriz generalizada con un par de parámetros que contiene ambos casos

$$\mathbb{A}_s = \zeta_s \begin{pmatrix} 1 & \delta_s \\ Y_1 & -Y_1 \delta_s \end{pmatrix}^{-1} \mathbb{N}^{N-1} \begin{pmatrix} 1 & \delta_s \\ Y_f + \sigma & \delta_s(-Y_f + \sigma) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{fz}\Lambda} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{fz}\Lambda} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

donde  $s = (1, -1)$  y por lo tanto  $\delta_1 = \zeta_1 = 1$  permite obtener  $\mathbb{O}$ , mientras que  $\delta_{-1} = -1$  y  $\zeta_{-1} = \frac{Y_1}{Y_f}$  permite obtener  $\mathbb{M}$ .

Es así como se ha determinado un producto matricial que vincula las amplitudes iniciales y finales de una estructura con multicapas de grafeno con polarización TM.

Es importante señalar que la matriz de transferencia  $\mathbb{N}$  tiene la propiedad de ser unimodular, por lo que una buena manera de corroborar que la matriz tiene la forma correcta es calcular su determinante, además es posible encontrar la misma matriz para polarización TE con la misma generalización mostrada en este capítulo. Los cambios relevantes entre polarizaciones ocurren en algunos signos.

Por otra parte, es evidente que este formalismo es un caso totalmente general para cualquier material bidimensional isotrópico a considerar, pues solo basta con conocer la  $\sigma$  característica del material y aplicar estas ecuaciones

# Capítulo 4

## Modos resonantes

Dentro del estudio de las propiedades ópticas de los sólidos, son el espectro de reflexión y transmisión partes fundamentales del análisis. Dichos espectros se encuentran definidos mediante las amplitudes de los campos, es por esto que a lo largo de este capítulo se aprovecharán todos los resultados anteriores para conocer el comportamiento de una monocapa, bicapa y multicapa con diferentes características químicas. Todo lo anterior estudiado a incidencia normal ( $\theta_{inc} = 0$ ) e incidencia oblicua ( $\theta_{inc} \neq 0$ )

### 4.1. Incidencia normal

#### 4.1.1. Coeficientes de reflexión y transmisión

En términos generales el coeficiente de reflexión es la razón entre la amplitud del campo reflejado y el incidente definido como  $r = E_{1x}^r/E_{1x}^i$ . De manera similar ocurre para la transmisión,  $t = E_{fx}^i/E_{1x}^i$ . Con esto en mente y retomando la ecuación (3.11) se puede generalizar que

$$\begin{pmatrix} E_{1x}^i \\ E_{1x}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{fx}^i \\ E_{fx}^r \end{pmatrix}$$

donde  $E_{fx}^r = 0$  porque al final de la estructura la luz ya no se refleja, solo se transmite. Desarrollando el producto con esta consideración las amplitudes son

$$E_{1x}^i = m_{11}E_{fx}^i \quad (4.1)$$

$$E_{1x}^r = m_{21}E_{fx}^i \quad (4.2)$$

y al dividir (4.2) con (4.1) es posible determinar los coeficientes de reflexión y transmisión en términos de la matriz de transferencia.

$$r = \frac{E_{1x}^r}{E_{1x}^i} = \frac{m_{21}}{m_{11}} \quad (4.3)$$

$$t = \frac{E_{fx}^i}{E_{1x}^i} = \frac{1}{m_{11}} \quad (4.4)$$

En todo este capítulo se estará haciendo uso de una polarización tipo TM en términos de las amplitudes  $E_x$ , por lo que la ecuación (3.11) tomará el parámetro  $s = 1$  llegando a la matriz de transferencia dada por (3.8).

### 4.1.2. Monocapa

Al considerar una monocapa de grafeno situada en el origen e inmersa en aire implica que en la ecuación (3.8)  $N = 1$  y  $d = 0$ , por lo tanto la expresión queda reducida a

$$\begin{pmatrix} E_{1x}^i \\ E_{1x}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_1 & -Y_1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_f + \sigma & -Y_f + \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{fx}^i \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} E_{1x}^i \\ E_{1x}^r \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{Y_f}{Y_1} + \frac{\sigma}{Y_1} & 1 - \frac{Y_f}{Y_1} + \frac{\sigma}{Y_1} \\ 1 - \frac{Y_f}{Y_1} - \frac{\sigma}{Y_1} & 1 + \frac{Y_f}{Y_1} - \frac{\sigma}{Y_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{fx}^i \\ 0 \end{pmatrix}$$

y al dividir todo esto por  $E_{1x}^i$  se tiene que

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{Y_f}{Y_1} + \frac{\sigma}{Y_1} & 1 - \frac{Y_f}{Y_1} + \frac{\sigma}{Y_1} \\ 1 - \frac{Y_f}{Y_1} - \frac{\sigma}{Y_1} & 1 + \frac{Y_f}{Y_1} - \frac{\sigma}{Y_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

Con las expresiones (4.3), (4.4), los elementos  $m_{ij}$  de (4.5) y el modelo de la conductividad de grafeno, se obtuvo el espectro de reflexión  $|r|^2$  y espectro de transmisión  $|t|^2$  como se muestra en la figura 4.1

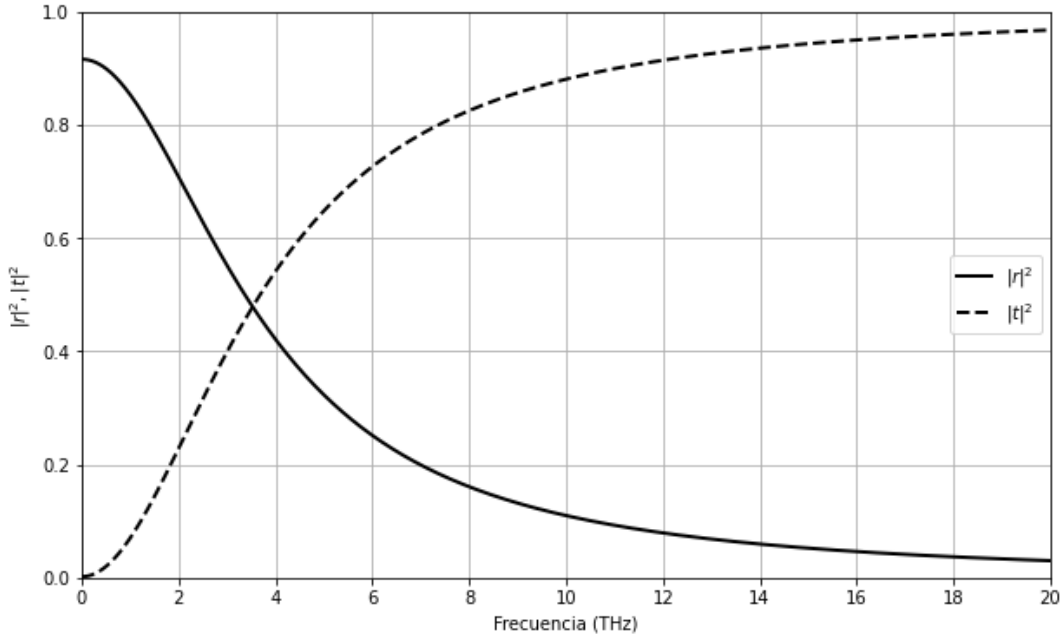


Figura 4.1: Espectro de reflexión y transmisión de una monocapa inmersa en aire con un potencial químico  $\mu_c = 1\text{eV}$  y un tiempo de relajación  $\tau = 1\text{ps}$ .

De la figura 4.1 se puede observar que a bajas frecuencias la monocapa de grafeno es altamente reflectora, casi como un espejo. Cuando la frecuencia del haz incidente se localiza entre los 3 THz y 4 THz pasa de ser reflector a ser transparente, para frecuencias mucho más altas prácticamente toda la luz se transmite. A frecuencia cero se debería esperar que  $|r|^2$  sea uno, más no lo es. Esto implica que la energía restante pudo haber sido dirigida a la excitación de fonones o alguna pérdida por efecto Joule.

### 4.1.3. Multicapa

Para iniciar el análisis de una multicapa, primero se consideraron dos capas de grafeno, donde la primera se encuentra en el origen y la segunda a una distancia  $z = d$ . En este caso, la ecuación (3.8) toma un valor de  $N = 2$ , así mismo, el cristal se encuentra inmerso en aire y el medio entre capas es sustrato de vidrio de código SF5 de la marca SCHOTT ( $n_{sv} = 1.67$ ). Entonces, sustituyendo valores y dividiendo por  $E_{1x}^i$  se llega a la ecuación (4.6), para posteriormente calcular  $|r|^2$ .

$$\begin{pmatrix} E_{1x}^i \\ E_{1x}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_1 & -Y_1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \cos(k_{sv}d) & -\frac{i}{Y_{sv}} \sin(k_{sv}d) \\ -iY_j \sin(k_{sv}d) + \sigma \cos(k_{sv}d) & \cos(k_{sv}d) - \frac{i\sigma}{Y_j} \sin(k_{sv}d) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_f + \sigma & -Y_f + \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{fz}d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{fz}d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{fx}^i \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_1 & -Y_1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \cos(k_{sv}d) & -\frac{i}{Y_{sv}} \sin(k_{sv}d) \\ -iY_{sv} \sin(k_{sv}d) + \sigma \cos(k_{sv}d) & \cos(k_{sv}d) - \frac{i\sigma}{Y_{sv}} \sin(k_{sv}d) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_f + \sigma & -Y_f + \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_{fz}d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{fz}d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

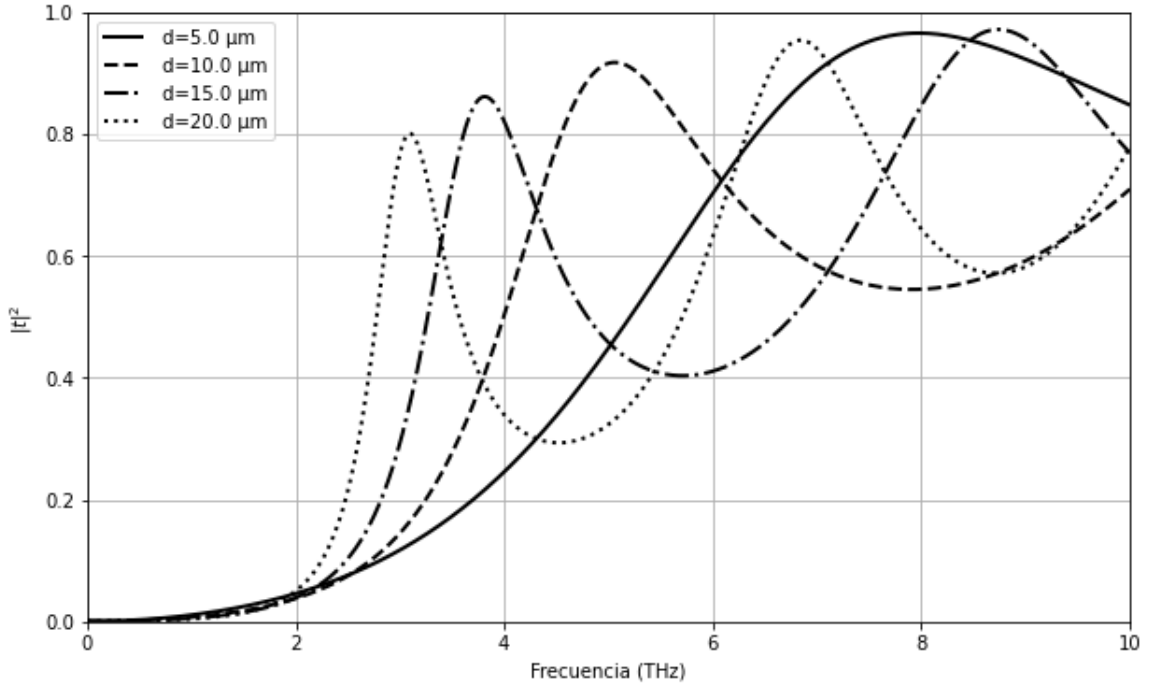


Figura 4.2: Espectro de transmisión de una bicapa de grafeno para diferentes distancias entre capas con  $\mu_c = 1eV$  y  $\tau = 1ps$ .

En esta ocasión se omitió la presentación de  $|r|^2$  por motivos prácticos. Gran parte de la literatura actual [18] está orientada al diseño de dispositivos optoelectrónicos, por lo que la transmitancia es mucho más relevante. Además, de manera similar al caso de la monocapa, hay rangos de frecuencia donde la transmitancia es mínima o máxima, generando una resonancia muy característica entre capas que depende explícitamente de la distancia entre ellas.

A continuación (Figura 4.3), se muestra el espectro de transmisión donde se consideran 4, 8 y 16 capas de grafeno con un ancho de  $10\mu m$ . De igual manera se tomó sustrato de vidrio entre capas, un tiempo de relajación de  $1ps$  y la estructura completa se encuentra inmersa en aire.

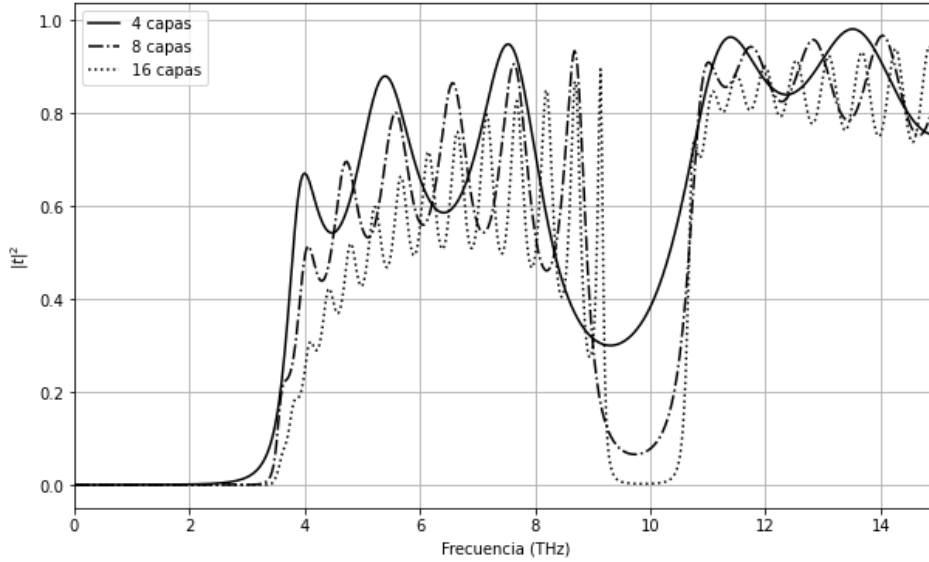


Figura 4.3: Espectro de transmisión para distintas estructuras de un ancho de  $10\mu m$  con  $\mu_c = 1eV$ ,  $\tau = 1ps$  y un ancho de  $10\mu m$ .

El potencial químico  $\mu_c$  juega un papel crucial en el comportamiento óptico del sistema como se muestra en la figura 4.4, logrando que los mínimos de transmitancia ocurran a diferentes frecuencias y sean más elongados conforme aumenta  $\mu_c$ .

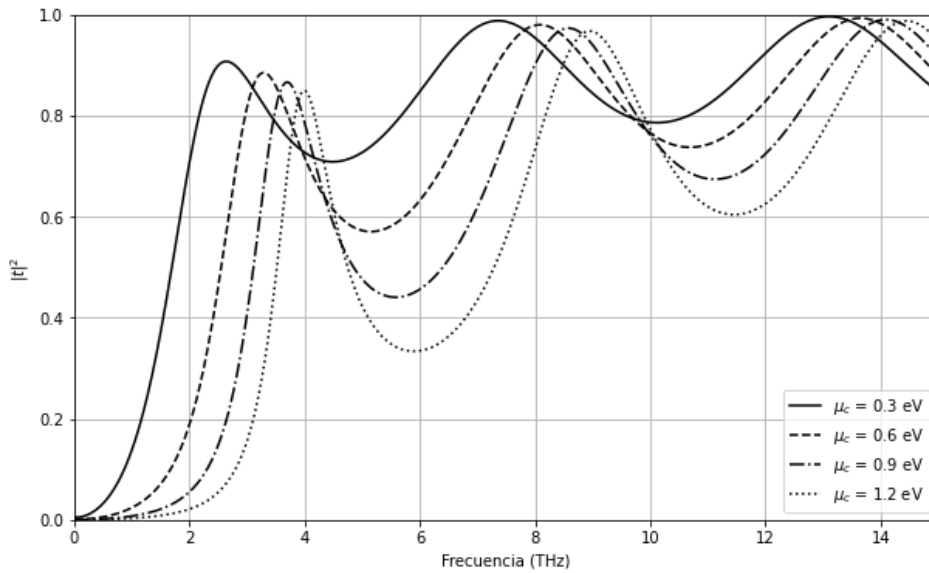


Figura 4.4: Bicapa de grafeno con ancho de  $10\mu m$ ,  $\tau = 1ps$  y sustrato de vidrio entre capas expuesto a diferentes potenciales químicos.

Ya sea con la distancia  $d$ , el potencial químico  $\mu_c$  o la cantidad de capas, es posible la localización de mínimos o máximos de transmitancia. De variar todos estos parámetros es posible modificar la respuesta óptica de un sistema multicapa, creando lo que se conoce como un *band GAP* o una *banda prohibida* volviendo a este tipo de cristales *sintonizables*. Esta propiedad es la más relevante en investigaciones actuales [4, 14, 18] pues permite tener un control total del flujo de luz en función de una frecuencia dada, siendo así un candidato idóneo para el desarrollo de dispositivos optoelectrónicos o puramente ópticos [2].

## 4.2. Incidencia oblicua

Al considerarse una incidencia oblicua ( $\theta_{inc} \neq 0$ ) se abre una ventana de oportunidad para identificar modos superficiales en el grafeno y, para ser localizados, es necesario encontrar los rangos de frecuencias donde surgen estos fenómenos. Para conocer dichos rangos, es necesaria la configuración de Otto [12] (Figura 4.5), una pequeña modificación a la estructura de interés. En esta sección se presentará la configuración de Otto junto con su análisis matricial para una monocapa y multicapa, se encontrará su relación de dispersión y se estudiará la respuesta óptica de dichas estructuras.

### 4.2.1. Reflexión Total Atenuada.

En términos experimentales existe la técnica de reflexión total atenuada (ATR por sus siglas en inglés) que generalmente se emplea en espectroscopia Raman [23], es una técnica que permite conocer el espectro de un sólido o líquido y trabaja mediante la Reflexión Total Interna (RTI), es por eso que se está interesado en conocer un modelo matemático de ATR, esa es la configuración de Otto. La configuración es sencilla, se coloca algún prisma con un índice de reflexión alto y se separa alguna distancia  $D$  del material a estudiar, que en este caso es un cristal fotónico unidimensional.

La figura 4.5 muestra el diagrama de ATR para este trabajo, gracias a todo esto se puede conseguir el comportamiento de la reflectancia como una función del ángulo.

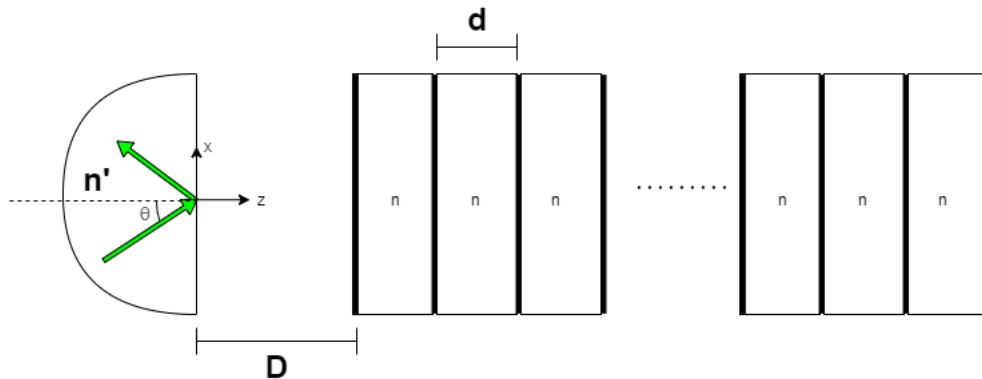


Figura 4.5: Configuración ATR de un cristal fotónico unidimensional.

En ATR, la luz incidente dentro del prisma es víctima de la reflexión total interna, generando una onda evanescente a lo largo del medio en la dirección de propagación y permite obtener información estructural del medio [23, 12]. Al poder medir el espectro de manera no invasiva es por mucho una de las mejores técnicas de espectroscopia. Sin embargo, para lograr físicamente este fenómeno son necesarias dos consideraciones.

1. El material del sensor (el prisma), idealmente, no debe absorber energía, lo que implica que el material tenga poca interacción con el haz incidente
2. El índice de refracción del prisma necesita ser mayor al índice de refracción del medio a estudiar

La onda evanescente interactúa con el medio de interés, provocando cambios en el haz de salida, los cuales brindan información de dicho medio.

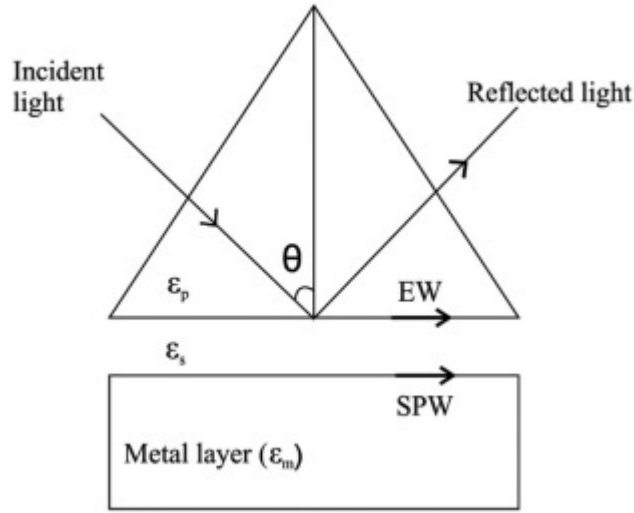


Figura 4.6: Geometría de Otto para excitar un modo superficial. [24].

Uno de los principales objetivos de este proyecto es la localización de modos guiados a lo largo de la interfaz de grafeno, esto implica la existencia de una onda evanescente a lo largo de la dirección de propagación y una onda plana viajando sobre la interfaz. Para ser esto posible, el vector de onda necesita cumplir ciertas características. La primera es que la componente en la dirección de propagación sea puramente imaginaria, mientras que la componente tangencial sea de tipo compleja. Eso implica sustituir  $k_{zj}$  por  $ik'_{zj}$  y  $k_x$  por  $k'_x \in \mathbb{C}$  en todos los cálculos anteriores.

Con estas consideraciones, la forma de los campos para una monocapa en  $z < 0$  son

$$\begin{aligned} E_{x1}^i e^{ik'_x x} e^{-k'_{1z} z} + E_{x1}^r e^{-ik'_x x} e^{k'_{1z} z} \\ H_{y1}^i e^{ik'_x x} e^{-k'_{1z} z} + H_{y1}^r e^{-ik'_x x} e^{k'_{1z} z} \end{aligned} \quad (4.7)$$

y para  $z > 0$  son

$$\begin{aligned} E_{x2}^i e^{ik'_x x} e^{-k'_{1z} z} \\ H_{y2}^i e^{ik'_x x} e^{-k'_{1z} z} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Haciendo un análisis idéntico al de la sección 3.1 se puede encontrar una relación entre amplitudes al sustituir (4.7) y (4.8) en  $\nabla \times \vec{H} = -i\varepsilon\omega\vec{E}$  de la forma

$$\begin{aligned} H_{yj}^i &= \frac{\omega\varepsilon_j}{ik'_{jz}} E_{xj}^i \\ H_{yj}^r &= -\frac{\omega\varepsilon_j}{ik'_{jz}} E_{xj}^r \end{aligned} \quad (4.9)$$

Y es sencillo notar que estas *aceptancias*  $Y'_j$ , son de la misma forma que las estudiadas en la sección 3.1, con la diferencia de tener la unidad imagina. Así mismo, la componente del vector de onda  $k_{jz} = \sqrt{k_x'^2 - (\frac{w}{c})^2 \varepsilon_j}$  sufre modificaciones en el signo.

Teniendo estas consideraciones y replicando los cálculos del capítulo anterior, se tiene que la matriz de transferencia total es de la forma

$$\begin{pmatrix} \Sigma_{1\varepsilon}^i \\ \Sigma_{1\varepsilon}^r \end{pmatrix} = \mathbb{A}'_s \begin{pmatrix} \Sigma_{f\varepsilon}^i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

donde

$$\mathbb{A}'_s = \begin{pmatrix} e^{k'_{1z}D} & 0 \\ 0 & e^{-k'_{1z}D} \end{pmatrix} \zeta_s \begin{pmatrix} 1 & \delta_s \\ Y'_1 & -Y'_1 \delta_s \end{pmatrix}^{-1} \mathbb{G}'^{N-1} \begin{pmatrix} 1 & \delta_s \\ Y'_f + \sigma & \delta_s(-Y'_f + \sigma) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-k'_{fz}\Lambda} & 0 \\ 0 & e^{k'_{fz}\Lambda} \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

con

$$\mathbb{G}' = \begin{pmatrix} \cosh(k'_{jz}d) & \frac{1}{Y'_j} \sinh(k'_{jz}d) \\ Y'_j \sinh(k'_{jz}d) + \sigma \cosh(k'_{jz}d) & \cosh(k'_{jz}d) + \frac{\sigma}{Y'_j} \sinh(k'_{jz}d) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$$

Con el mismo parámetro  $s$  que la sección anterior. Además, si  $\mathbb{A}' = \mathbb{O}'$  entonces  $\Sigma_{\varepsilon}^{i,r} = E_x^{i,r}$ , por otra parte si  $\mathbb{A}' = \mathbb{M}'$  entonces  $\Sigma_{\varepsilon}^{i,r} = H_y^{i,r}$ .

Las etiquetas de cada elemento de matriz A, B, C, D son definidas por fines prácticos que serán mencionados en secciones posteriores.

### 4.2.2. Relación de dispersión.

La relación de dispersión es el par de puntos  $k'_x$  y frecuencia que garantizan la existencia de modos superficiales a lo largo de la interfaz, pues la presencia de un ángulo de incidencia aumenta la complejidad del problema. Es fundamental que la reflectividad sea máxima, tendiendo a infinito, pues si el haz que se refleja es muy alto implica que la configuración ATR es correcta y las ondas evanescentes penetran la muestra. Retomando la expresión  $r = \frac{m_{21}}{m_{11}}$ , es sencillo ver que dichos puntos de la relación serán todos los elementos donde  $m_{11} = 0$ , por lo que el problema a resolver es del tipo

$$m_{11} = m_{11}(k'_x, \nu) = 0 \quad (4.12)$$

Cada estructura tiene una matriz de transferencia distinta en función del número de capas y el medio entre ellas. Se abordarán y estudiarán distintas configuraciones calculando su relación de dispersión.

### 4.2.3. Monocapa

Al retomar la ecuación (4.5) y hacer los cambios pertinentes mencionados en esta sección, el elemento  $m_{11}$  es

$$\frac{1}{2} + \frac{Y'_2}{2Y'_1} + \frac{\sigma}{2Y'_1} = 0$$

Al considerar el caso más sencillo, donde la monocapa está inmersa en aire implica que  $Y'_1 = Y'_2$  y por lo tanto

$$1 + \frac{\sigma}{2Y'} = 0 \Rightarrow Y' + \frac{\sigma}{2} = 0 \quad (4.13)$$

Sustituyendo los resultados de (4.9)

$$\frac{w\varepsilon}{ik'_z} + \frac{\sigma}{2} = 0 \Rightarrow \sqrt{k_x'^2 - \left(\frac{w}{c}\right)^2} = \frac{-2w\varepsilon}{i\sigma} \Rightarrow k_x'^2 = -\left(\frac{2w\varepsilon}{\sigma}\right)^2 + \left(\frac{w}{c}\right)^2$$

al modificar un poco la expresión anterior y recordando que la impedancia en el vacío es  $\eta_0 = 1/\varepsilon_0 c$  se obtiene una forma analítica para resolver el problema (4.12).

$$k'_x = \frac{w}{c} \sqrt{1 - \left(\frac{2}{\eta_0 \sigma}\right)^2} \quad (4.14)$$

Este resultado es de suma importancia, pues permite crear una relación uno a uno entre la componente tangencial y la frecuencia, logrando graficar la relación de dispersión (figura 4.7). Todos los puntos entre las líneas de luz del vidrio y del aire son los que garantizan un modo superficial, así mismo, se observa como el dopaje químico juega un papel importante.

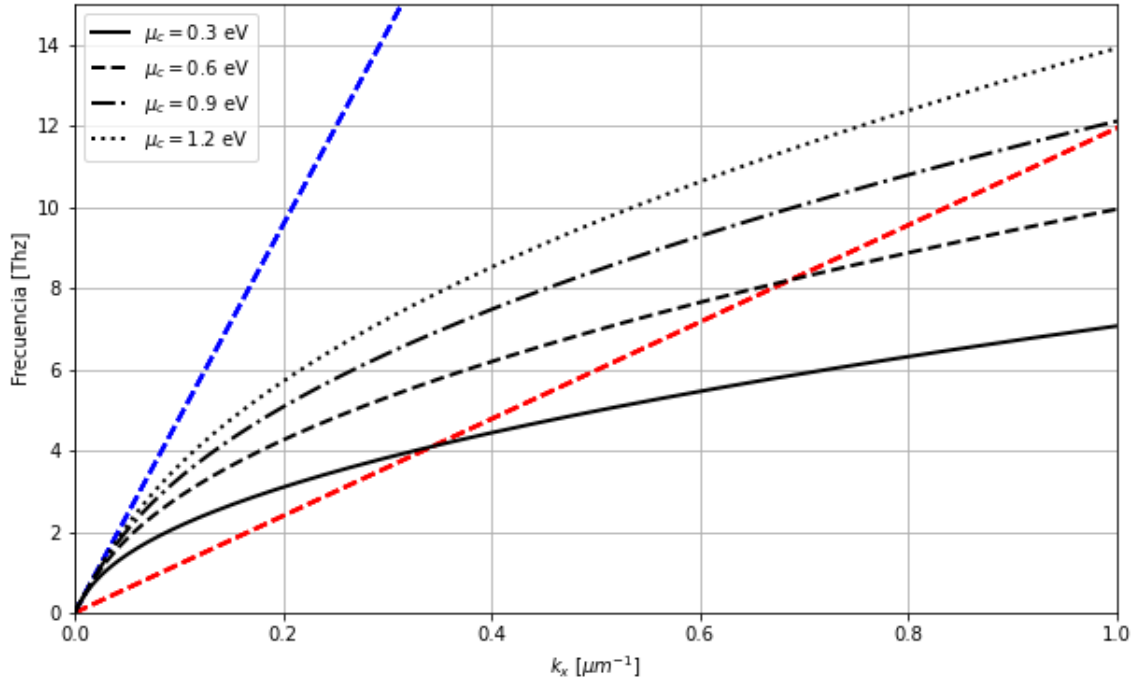


Figura 4.7: Relación de dispersión de una monocapa de grafeno inmerso en aire. La línea azul (roja) es la línea de luz del aire (prisma ATR);  $n_{prisma} = 4$  y  $\tau = 1ps$

Si bien, se obtuvo una expresión analítica tal que  $k'_x = k'_x(\nu)$ , el análisis numérico es de gran importancia cuando las ecuaciones toman una gran complejidad o no es posible llegar a un despeje conveniente. A continuación (figura 4.8) se muestra un gráfico similar al anterior pero con la superposición de puntos discretos calculados a partir de la ecuación (4.13) y sin haber hecho el despeje de (4.7). Es sencillo ver que no es explícito realizar el despeje de  $k'_x$  y cómo la aproximación numérica entrega valores de gran precisión, este hecho será bastante útil para el caso multicapa como se verá en la siguiente sección.

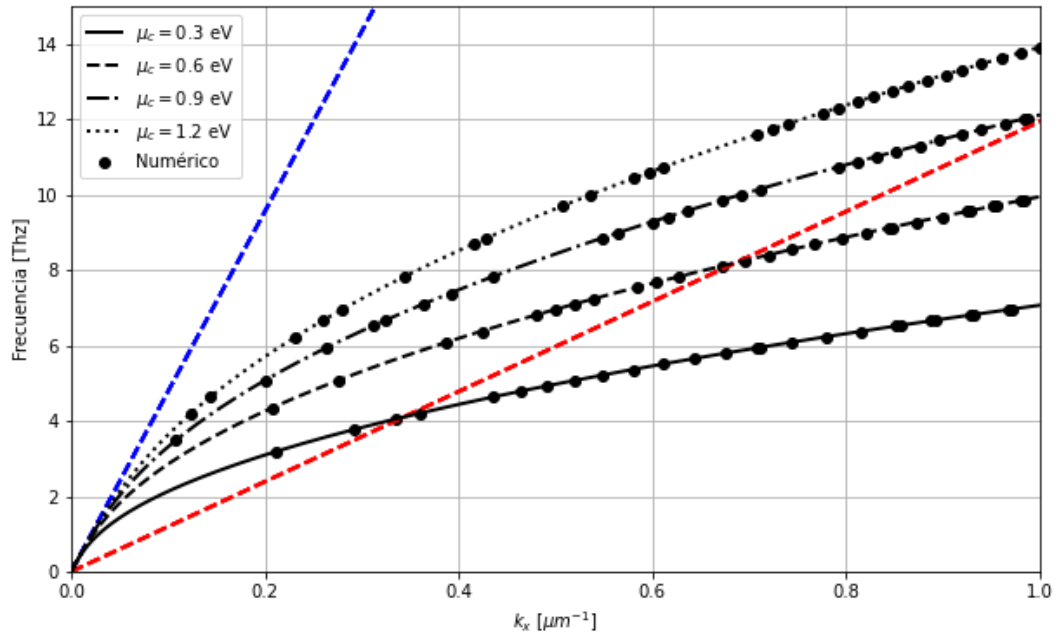


Figura 4.8: Mismos resultados que la figura anterior. Los puntos negros son resultados del análisis numérico

#### 4.2.4. Multicapa

Considere una bicapa de grafeno inmersa en aire, con una separación entre capas  $D$  y la primera de ellas situada en  $z = D$  como se muestra en la figura 4.9.

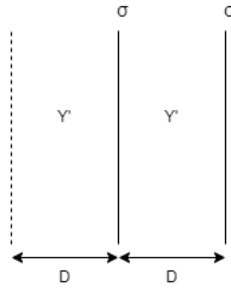


Figura 4.9: Geometría de una bicapa de grafeno para el cálculo de la relación de dispersión.

Al colocar estos parámetros en (4.11) se tiene que

$$\begin{pmatrix} E_{x_1}^i \\ E_{x_1}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{k'_{1z}D} & 0 \\ 0 & e^{-k'_{1z}D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y'_1 & -Y'_1 \end{pmatrix}^{-1} \mathbb{G}' \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y'_f + \sigma & -Y'_f + \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-k'_{fz}\Lambda} & 0 \\ 0 & e^{k'_{fz}\Lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{x_1}^i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

Si se realiza con cuidado el producto matricial y se hacen las factorizaciones pertinentes es posible demostrar que el elemento  $m_{11}$  de la matriz de transferencia igualado a cero es

$$Y'A + C + Y'(Y' + \sigma)B + (Y' + \sigma)D = 0 \quad (4.16)$$

con A, B, C, D los elementos de matriz de  $\mathbb{G}'$ .

La figura 4.10 muestra los resultados numéricos de la ecuación 4.15 con un ancho de  $5\mu m$  expuesto a diferentes potenciales químicos, generando las curvas de la relación de dispersión.

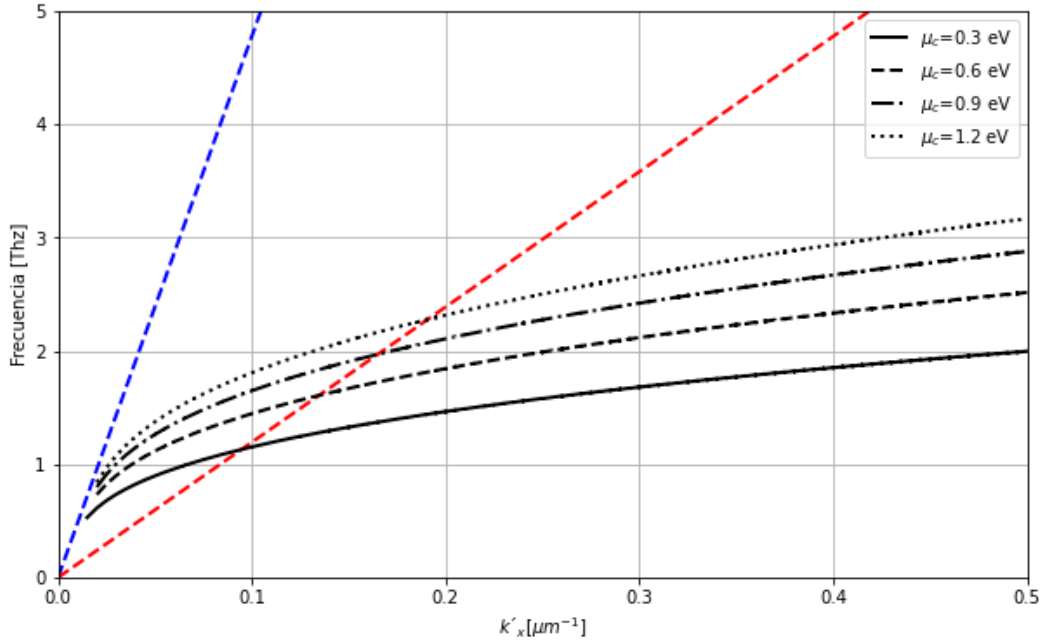


Figura 4.10: Relación de dispersión de una bicapa de grafeno de ancho  $d = 5\mu m$  y  $\tau = 1ps$

Es importante señalar que este cálculo por si mismo implica un arduo trabajo y tiempo invertido. Las complejidad del producto matricial aumenta al tener más de dos capas, pues  $\mathbb{G}'$  se encontrará elevado a cierta potencia. Para dar una solución a dicha complejidad, se partirá de una tricapa de grafeno con las mismas consideraciones que la bicapa, como se muestra en la siguiente figura

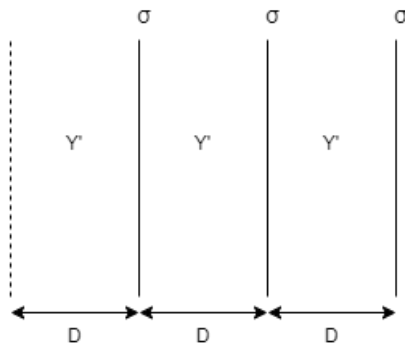


Figura 4.11: Geometría de una tricapa de grafeno para el cálculo de la relación de dispersión.

Llegando así a un resultado muy similar al de (4.15) pero con  $\mathbb{G}'$  elevada al cuadrado

$$\begin{pmatrix} E_{x_1}^i \\ E_{x_1}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{k'_{1z}D} & 0 \\ 0 & e^{-k'_{1z}D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y'_1 & -Y'_1 \end{pmatrix}^{-1} \mathbb{G}'^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y'_f + \sigma & -Y'_f + \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-k'_{fz}\Lambda} & 0 \\ 0 & e^{k'_{fz}\Lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{x_1}^i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

Intentar desarrollar  $\mathbb{G}'^N$  a mano es una tarea que ronda lo imposible, por lo que se hace uso de una identidad matricial en términos de los polinomios de Chebyshev de segundo orden [22]. Dicha identidad indica que

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}^N = \begin{pmatrix} \alpha U_{N-1} - U_{N-2} & \beta U_{N-1} \\ \gamma U_{N-1} & \delta U_{N-1} - U_{N-2} \end{pmatrix} \equiv M^N \quad (4.18)$$

donde

$$U_N = \frac{\sin(\mathbb{K}\Lambda(N+1))}{\sin(\mathbb{K}\Lambda)}; \mathbb{K} = \frac{1}{\Lambda} \text{ArcCos}\left(\frac{1}{2} \text{Tr}M\right)$$

Para el caso de una tricapa, los polinomios  $U_{N-1}$  y  $U_{N-2}$  con  $N = 2$  son  $U_1 = \text{Tr}\mathbb{G}'$  y  $U_0 = 1$ , por lo tanto

$$\mathbb{G}'^2 = \begin{pmatrix} A\text{Tr}\mathbb{G}' - 1 & B\text{Tr}\mathbb{G}' \\ C\text{Tr}\mathbb{G}' & D\text{Tr}\mathbb{G}' - 1 \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

Sustituyendo (4.19) en (4.17) y realizando el álgebra necesaria el elemento  $m_{11}$  igualado a cero es

$$\text{Tr}\mathbb{G}'[Y'A + C + (Y'B + D)(Y' + \sigma)] - (Y' + \sigma) - Y' = 0 \quad (4.20)$$

La figura 4.12 muestra el resultado numérico de resolver la ecuación (4.20).

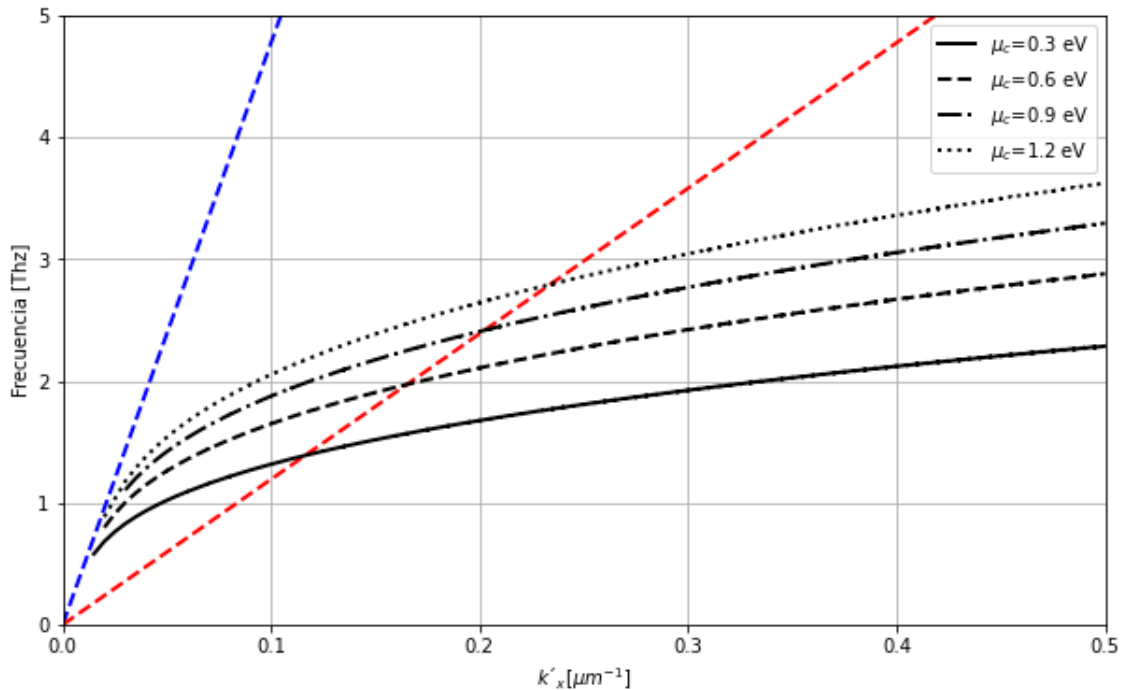


Figura 4.12: Relación de dispersión de una tricapa de grafeno de ancho  $d = 5\mu\text{m}$  y  $\tau = 1\text{ps}$

La elección de  $n_{cristal} = 4$  no fue al azar, pues un material que suele ser usado en maquinas experimentales de ATR es el germanio y posee este índice de refracción, además de cumplir con las características necesarias mencionadas con anterioridad. Por otra parte, es necesario remarcar que ya sea en una bicapa, tricapa o multicapa de grafeno, el despeje de  $k'_x$  no es posible ni siquiera al considerar los casos más sencillos, razón por la cual se ha mencionado la importancia de soluciones numéricas[18, 15].

A lo largo de toda esta sección se presentó la configuración ATR, su geometría y el cálculo de la relación de dispersión para diferentes casos de estructuras periódicas. Se pudo observar como el potencial químico, sin importar la cantidad de capas, modifica dicha relación, además se puede ver que los puntos localizados entre líneas de luz tienen mayor presencia a bajas frecuencias y un valor de  $k_x$  menor, lo que implica que la aparición de modos superficiales solo ocurren con estas características.

Así mismo, se presentó una metodología para conocer la relación de dispersión en términos de los polinomios de Chebishev, una técnica útil para el análisis de cristales fotónicos unidimensionales.

## Capítulo 5

# Excitación de modos superficiales mediante ATR

El capítulo anterior se centró en el cálculo de la relación de dispersión para diferentes estructuras periódicas a base de grafeno, obteniendo así pares ordenados del tipo  $(k_x, \nu)$ . Aquellos pares localizados entre la línea de luz del aire y el prisma ATR brindan los parámetros necesarios para la excitación de modos superficiales o modos guiados, ahí la importancia de las curvas obtenidas con anterioridad. En esta sección se presentará un modo superficial denominado *plasmón de superficie* en una monocapa de grafeno encontrado por Ramos Mendieta, Hernández López y Palomino Ovando en 2014 [12].

Al retomar la figura 4.8 para una curva con  $\mu_c = 0.8$  eV existe un punto con coordenadas  $(5\text{THz}, 0,2131\mu\text{m}^{-1})$  dentro de la relación de dispersión y de colocar este par de parámetros en la geometría ATR se observan dos formas muy particulares, una recta vertical y un mínimo de la curva. Recordando que  $k_x = \frac{\omega}{c} n_{\text{cristal}} \sin \theta_{\text{inc}}$  donde  $n_{\text{cristal}} = 4$  se encuentra que el ángulo de incidencia es  $\theta_{\text{inc}} = 30.55^\circ$ , así mismo si se considera que el medio de inmersión es aire ( $n = 1$ ) y con la definición de ángulo crítico  $\theta_c = \arcsin(\frac{n}{n_p})$  se obtiene que  $\theta_c = 14.47^\circ$ . Este par de ángulos obtenidos coinciden con las figuras ya mencionadas, lo que significa que el mínimo obtenido después de los  $14.47^\circ$  grados es un candidato para la excitación de un modo superficial, pues garantiza la reflexión total interna.

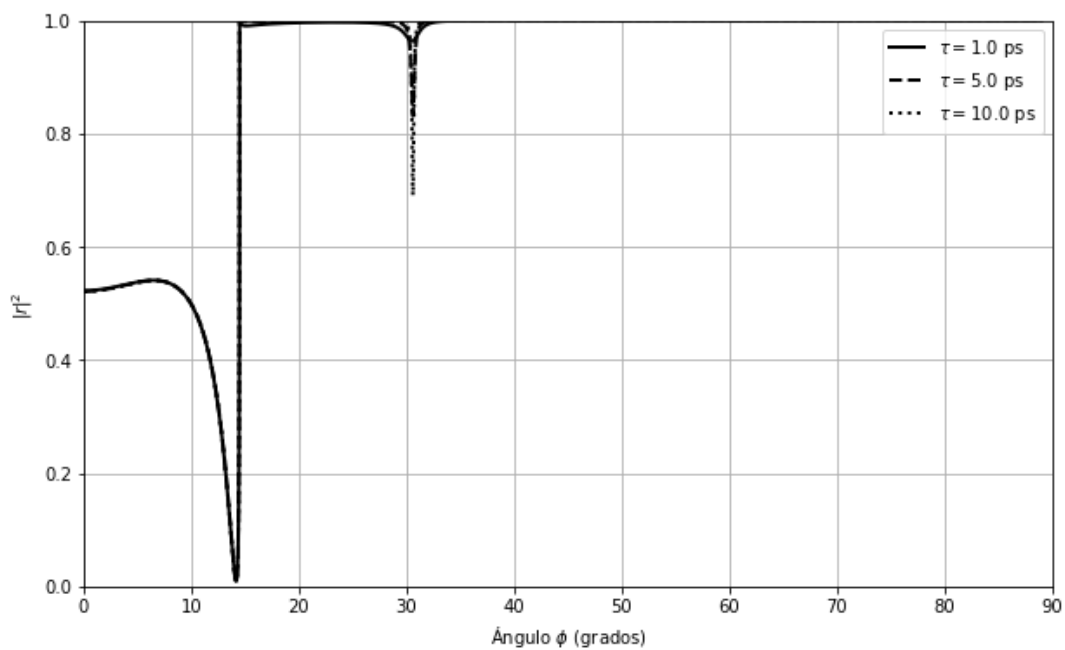


Figura 5.1: Monocapa de grafeno inmersa en aire en configuración ATR con  $n_{cristal} = 4$

Al centrarse en el comportamiento del mínimo, se observa que los cambios en  $\tau$  simplemente pronuncian más el resultado, pero mantienen su posición respecto al ángulo, otra gran señal que la configuración analizada es un modo superficial.

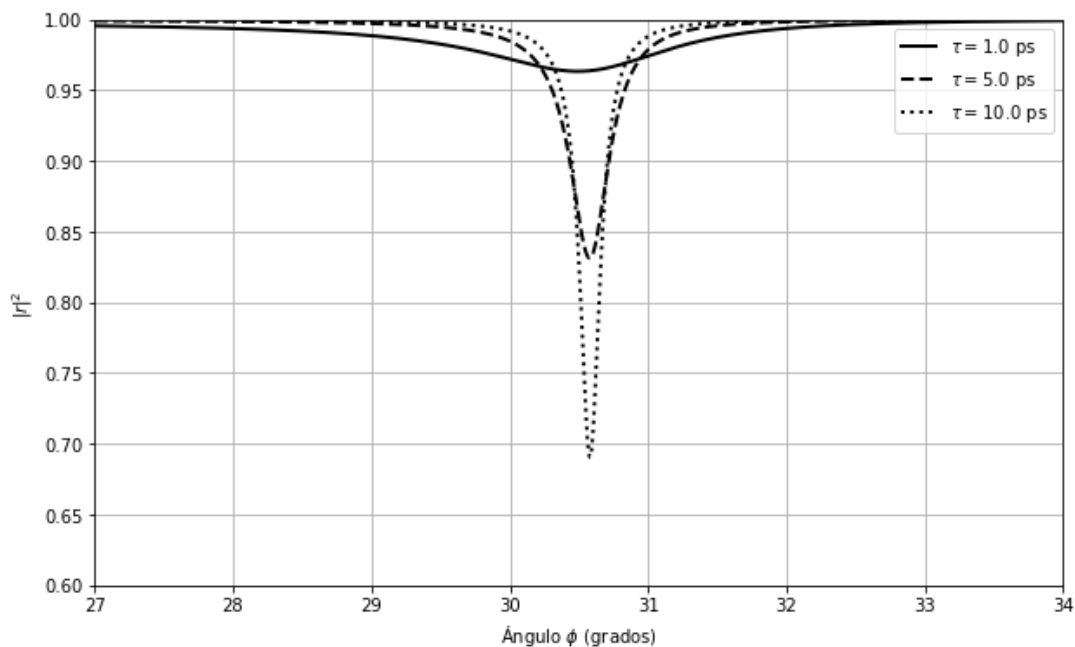


Figura 5.2: Mismos resultados que la imagen anterior pero centrado en el mínimo

La localización de modos superficiales puede ser vista como un *recetario*. Una vez obtenida su reflexión, transmisión, relación de dispersión y geometría ATR se finaliza con los denominados *perfiles de campos* para comprobar que el mínimo de la figura 5.2 es un modo superficial.

## 5.1. Perfil de campos

Retomando las consideraciones de este capítulo, es sencillo ver que para una monocapa inmersa en aire situada en una posición  $d$  del prisma las amplitudes de sus campos son de la forma.

$$\begin{aligned} z < d &\Rightarrow (1)e^{ik_z z} + (r)e^{-ik_z z} \\ z > d &\Rightarrow (t)e^{ik_z z} + (0)e^{-ik_z z} \end{aligned}$$

Al aplicar TMM en términos de  $H_y$  y considerando el prisma de ATR, la matriz de transferencia total es

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ Y_p & Y_p \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \cos(k_z d) & \frac{-i}{Y} \sin(k_z d) \\ -iY \sin(k_z d) & \cos(k_z d) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y + \sigma & Y - \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_z d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_z d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

que en términos generales puede ser expresada como

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow r = \frac{m_{21}}{m_{11}} \quad \& \quad t = \frac{1}{m_{11}} \quad (5.2)$$

Así, al resolver (5.2) y sustituir en la forma de los campos  $z < d, z > d$  respectivamente, se llega a conocer la forma de su perfil en términos de  $H_y$ , además, este método es tan poderoso que permite observar las amplitudes del campo  $H_y$  para la región antes y después del prisma, así como antes y después de la capa de grafeno como se muestra en la figura 5.3

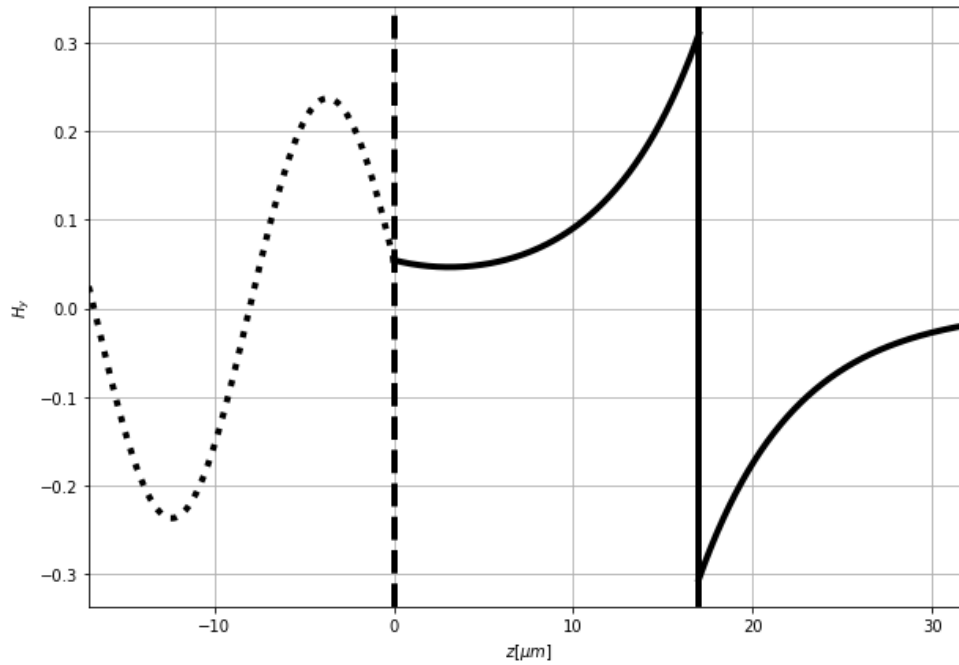


Figura 5.3: Perfil de campo de una monocapa de grafeno situada a  $18 \mu\text{m}$  de un prisma con índice de refracción  $n_p = 4$

Para la interacción en el prisma ( $z < 0$ ) es interesante ver el comportamiento oscilatorio propio de una onda electromagnética, una vez que la luz ha salido del prisma ( $0 < z < 18\mu m$ ) la amplitud del campo aumenta exponencialmente, una vez que ha cruzado la capa de grafeno ( $z > 18\mu m$ ) la amplitud comienza en el valor antisimétrico al máximo obtenido, esto implica que se ha logrado excitar de manera satisfactoria un plasmón de superficie y la luz ha comenzado a viajar a lo largo de la interfaz del grafeno. Por último, si se quiere conocer un mapeo de contorno del campo, es necesario conocer información de la componente  $x$  del vector de onda y esto es posible al agregar un término  $e^{ik_x x}$  en los campos  $z < d, z > d$ . La figura 5.4 muestra el mismo comportamiento que 5.3 pero ahora en ambas direcciones, así mismo durante la interacción con el prisma se puede observar la oscilación del campo.

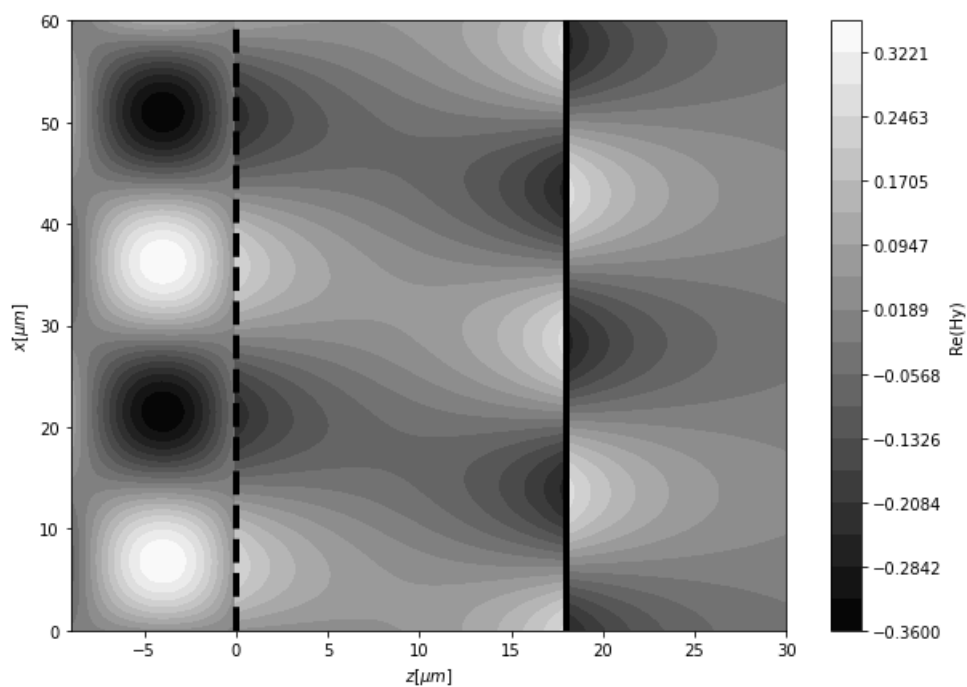


Figura 5.4: Mapa de contorno del perfil de campo mostrado en la figura anterior

## Capítulo 6

# Conclusiones

A lo largo de este trabajo, se expusieron las definiciones elementales de la estructura cristalina; su descripción geométrica general y como se constituye un cristal macroscópico como consecuencia de su forma microscópica, así mismo se usaron estos hechos para estudiar las propiedades del grafeno y su geometría.

Se definió un cristal fotónico y los cristales fotónicos a base de grafeno, así como la construcción periódica grafeno-dieléctrico y se presentaron diferentes casos como la monocapa, bicapa y multicapa de grafeno. Se usaron las ecuaciones de Maxwell y las condiciones de frontera para conocer una relación entre las amplitudes de los campos entre interfaces de grafeno, logrando así desarrollar el formalismo de la matriz de transferencia. Un producto matricial que relaciona las amplitudes del campo incidente, reflejado y transmitido en un arreglo periódico ya sea en términos de  $\vec{E}$  o  $\vec{H}$ , pues se construyó una matriz general que engloba ambos casos para polarización TM.

Se estudió la incidencia de luz a incidencia normal de la interfaz, mostrando los espectros de transmisión y observando como el dopaje químico, la distancia entre capas y la cantidad de las mismas modifica la respuesta óptica de la estructura. Dando continuación se estudió la incidencia oblicua junto con una breve introducción a la geometría de Otto y la configuración ATR, mostrando como las consideraciones físicas de este arreglo genera cambios pequeños pero significativos en el formalismo matricial. A continuación se usó todo lo anterior para determinar la relación de dispersión de un cristal fotónico.

Se dedujo de manera analítica el caso de la monocapa, pues las ecuaciones lo permitían, mientras que en los demás casos se usó una metodología numérica. Dicha metodología replicó los resultados analíticos y con esto brindó la certeza de su funcionamiento. La relación de dispersión fue expuesta bajo diferentes potenciales químicos y se comparó con las líneas de luz del vacío y de un prisma de germanio, así mismo se aprovecharon estos resultados para la localización de modos superficiales en una monocapa de grafeno mediante la técnica de ATR [12].

A largo plazo y en futuras investigaciones, es posible la búsqueda de plasmones de superficie, guías de onda o algún otro modo óptico de interés en diferentes estructuras periódicas complementando con un estudio de estructura de bandas.



# Bibliografía

- [1] F. Bonaccorso, Z. Sun, T. Hasan, and A. C. Ferrari. Graphene photonics and optoelectronics. *Nat. Photonics.*, 4:611–622, 2010.
- [2] A.K Geim and K. S. Novoselov. The rise of graphene. *Nat. Materials.*, 6:183–191, 2007.
- [3] K. S. Novoselov and A. K. Geim. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science.*, 306:666–669, 2004.
- [4] A. H. Castro, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81:109–164, 2009.
- [5] A. K Geim and P. Kim. Carbon wonderland. *Rev. Mod. Phys.*, 298:90–97, 2008.
- [6] Qiaoliang Bao. *Graphene photonics, optoelectronics and plasmonics*. Pan Stanford Publishing, 8 Temasek Boulevard Singapore, 2017.
- [7] V. Ongun Özçelik, S. Cahangirov, and S. Ciraci. Epitaxial growth mechanisms of graphene and effects of substrates. *Phys. Rev. B*, 85:235–256, Jun 2012.
- [8] H. Huang, W. Chen, S. Chen, A. Thye, and S. Wee. Bottom-up growth of epitaxial graphene on 6h-sic(0001). *ACS Nano*, 12:2513–2518, 2008.
- [9] W. Yang, G. Chen, and Z. Shi. Epitaxial growth of single-domain graphene on hexagonal boron nitride. *Nat. Mat.*, 12:792–797, 2013.
- [10] X. Li, W. Cai, and J. An. Large-area synthesis of high-quality and uniform graphene films on copper foils. *Science.*, 324:1312–1314, 2009.
- [11] J. Shen, T. Li, Y. Long, M. Shi, N. Li, and M. Ye. One-step solid state preparation of reduced graphene oxide. *Carbon.*, 50:2134–2140, 2012.
- [12] F. Ramos-Mendieta, J. A. Hernández-López, and M. Palomino-Ovando. Transverse magnetic surface plasmons and complete absorption supported by doped graphene in otto configuration. *AIP advances.*, 2014.
- [13] George W. Hanson. Dyadic green’s functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene. *J. Appl. Phys.*, 103, 2008.
- [14] S. R. Kaipa, B. Yakovlev, W. Hanson, R. Padooru, F. Medina, and F. Mesa. Enhanced transmission with a graphene-dielectric microstructure at low-terahertz frequencies. *Physical Review B.*, 306:666–669, 2012.
- [15] A. Hernández López. Tesis de doctorado. *Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.*, 2016.
- [16] Giuseppe Grosso. *Solid state physics*. Academic Press, Kidlington, Oxford, 2014.

- [17] L. A. Falkovsky. Optical properties of graphene. *Journal of Physics.*, 129, 2008.
- [18] I. Fuentecilla-Carcamo, J. A. Gaspar-Armenta, M. A. Palomino-Ovando, and F. Ramos-Mendieta. Tunable wave localization for tamm modes in graphene-based photonic crystals. *Journal of Applied Physics.*, 2019.
- [19] 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, 2015.
- [20] T. Zhan, X. Shi, Y. Dai, X. Liu, and J. Zi. Transfer matrix method for optics in graphene layers. *Journal of physics: condensed matter.*, 25, 2013.
- [21] David J Griffiths. *Introduction to electrodynamics*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1989.
- [22] Pochi Yeh. *Optical waves in layered media*. Wiley, 1988.
- [23] Peter Larkin. *Infrared and Raman Spectroscopy*. Elsevier, 2011.
- [24] S. Nivedha. Surface plasmon resonance: physics and technology. *Current Science.*, 115:56–63, 2018.