



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas

**Contribución de la conductividad del grafeno a
los modos de superficie de origen TE**

Tesis presentada para la obtener el título de:
Licenciatura en Física

Presenta: Edgar Obed Pérez Reyes

Asesorado por

Dra. Martha A. Palomino Ovando

Dr. José Alejandro Hernández López

Puebla Pue.
Diciembre 2016

Índice general

1. Desarrollo Teórico	3
1.1. Ecuaciones de Maxwell	3
1.2. Método de la matriz de transferencia	4
1.2.1. Polarización TE	5
1.2.2. Polarización TM	9
1.3. Coeficientes de reflexión y transmisión	12
2. Grafeno	15
2.1. Descripción del grafeno	15
2.2. Propiedades mecánicas	18
2.2.1. Propiedades elásticas	18
2.3. Propiedades eléctricas	20
2.4. Propiedades ópticas	22
2.5. Conductividad del grafeno	23
3. Resultados	25
3.1. Cálculos de transmisión de luz en una placa de grafeno	25

3.2. Estudio de espectros de reflexión y transmisión en medios periódicos alternando dieléctricos con placas de grafeno	26
3.3. Cálculo de espectros de reflexión en función del ángulo de incidencia, número de capas de grafeno, prisma y el ancho del dieléctrico.	28
4. Conclusiones	33

Resumen

Se estudian las condiciones para la excitación de modos de superficie en un cristal fotónico construido con placas alternadas de grafeno y dieléctricos cuando se le hace incidir luz con polarización transversal eléctrica. Se usa la técnica de Reflexión Total Atenuada, o ATR por sus siglas en inglés, en una configuración de Otto. De manera específica se analizan espectros de reflexión en función del ángulo de incidencia así como los efectos que producen varias capas de grafeno en un cristal fotónico anteponiendo un prisma de un índice alto de refracción superior al del dieléctrico. Se tiene como resultado importante la excitación de modos de superficie de origen TE por medio de la presencia de más de una capa de grafeno en la configuración de Otto para distancias entre el prisma y grafeno del orden de $10 \mu\text{m}$. Se muestra también cálculos de espectros de reflexión en función del índice de refracción del prisma.

Introducción

El control y la manipulación de la luz a través de los materiales ha revestido especial importancia en las últimas décadas por sus implicaciones tecnológicas, en este contexto los cristales fotónicos desempeñan un papel importante ya que su estructura y composición permiten manejar la luz y sus propiedades en una gran variedad de formas [1 - 5]. Los Cristales Fotónicos son materiales para los cuales existe un rango de frecuencias donde la propagación de las ondas electromagnéticas está prohibida, éstas se denominan bandas fotónicas prohibidas en analogía a las bandas de energía prohibidas para electrones en los sólidos. La riqueza de los materiales constituyentes se refleja en la amplia gamma de su respuesta óptica ante la incidencia de la luz, y el estudio de sus propiedades está revolucionando la tecnología, como ejemplos podemos citar a los cables de fibra óptica como guías de ondas, que han hecho un aporte muy relevante a la industria de las telecomunicaciones; o bien láseres, computadoras de alta rapidez; y otros casos en espectroscopia, son algunos de los beneficios obtenidos con el conocimiento del comportamiento de la luz en los materiales.

El grafeno es una lámina monoatómica plana de átomos de carbono unidos mediante enlaces covalentes SP² (monocapa de grafito). Ha sido empleado durante las últimas décadas como modelo teórico de estudio de diversos materiales grafiticos, permitiendo explicar muchas de sus propiedades. A pesar de esto, hasta el año 2004 no se creía posible su existencia como entidad aislada, ya que se suponía que los cristales estrictamente bidimensionales eran termodinámicamente inestables.

Recientemente se ha podido sintetizar el grafeno, y depositarlo sobre diversos sustratos, esto ha permitido la construcción de superredes que pueden crecerse de manera periódica, siendo esta estructura de menor tamaño que los cristales construidos con otros materiales

que tienen espesor [6,7].

Dado el interés por reducir los dispositivos electrónicos y la amplia gama de aplicaciones que tienen las estructuras periódicas, ha surgido la motivación de estudiar las propiedades de una estructura donde se alternan capas de grafeno y dieléctricos, se ha mostrado que en estas interfaces existen plasmones de superficies de naturaleza transversal magnética, en regiones de frecuencia de los terahertz, ha resultado interesante encontrar que en las interfaces grafeno dieléctricos es posible que existan modos de superficie para la polarización transversal eléctrica.

En este proyecto, se pretende estudiar los espectros de reflexión en rangos de frecuencia donde sea posible detectar la presencia de modos de superficie debidos a la incidencia de radiación electromagnética con polarización transversal eléctrica, estos modos pueden ser excitados mediante ATR (reflexión total atenuada), esto es, se pretende construir un cristal fotónico unidimensional de capas alternadas de grafeno con dieléctrico y hacer pasar luz a través de un prisma y que posteriormente incida sobre el cristal fotónico, con el fin de excitar modos de superficie [8].

Capítulo 1

Desarrollo Teórico

1.1. Ecuaciones de Maxwell

Las ecuaciones de Maxwell son un conjunto de cuatro ecuaciones las cuales son la base para la descripción de los fenómenos electromagnéticos. Estas ecuaciones representan matemáticamente algunas observaciones de fenómenos experimentales. La ecuación 1.1 corresponde a la ley de Ampère mientras que la ecuación 1.2 es la forma diferencial de la ley de inducción electromagnética de Faraday, la ecuación 1.3 es conocida como la ley de Gauss la cual puede deducirse a partir de la ley de Coulomb, finalmente la ecuación 1.4 representa el hecho de que hasta el momento no se han observado los monopolos magnéticos [9].

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (1.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho \quad (1.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.4)$$

Estas ecuaciones están expresadas en el sistema de unidades MKS. Donde \mathbf{E} representa el vector de campo eléctrico y \mathbf{H} el vector de intensidad magnética, mientras que \mathbf{D} y \mathbf{B} representan los vectores de desplazamiento eléctrico y campo magnético respectivamente. Las cantidades ρ y \mathbf{J} son densidades de carga y corriente. Por otro lado es importante señalar las relaciones que existen entre el campo magnético y el vector de intensidad magnética así como la relación entre el campo eléctrico y el vector de desplazamiento eléctrico, estas relaciones están dadas por las llamadas ecuaciones constitutivas

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \tag{1.5}$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \tag{1.6}$$

donde ε y μ representan la permeabilidad eléctrica y la permeabilidad magnética respectivamente.

1.2. Método de la matriz de transferencia

Cuando una onda incide de un medio con índice refracción n_i sobre otro medio con índice de refracción diferente digamos n_t entonces parte de la onda incidente se refleja y otra se transmite. Las amplitudes de estas ondas se pueden conocer a través de las ecuaciones de Fresnel en función de la onda incidente. Sin embargo para el caso en que se presentan una mayor cantidad de medios por los cuales se propagará la onda incidente, el tratamiento del problema a partir de las ecuaciones de Fresnel se vuelve extenso y laborioso por esta razón se emplea en esta tesis al método de la matriz de transferencia. Este método parte del análisis de las condiciones de frontera entre cada medio de propagación. A partir de este análisis se plantea un sistema de ecuaciones del cual se deriva una matriz asociada a cada uno de los medios presentes, de tal manera que la relación entre las amplitudes de las ondas incidentes, transmitidas y reflejadas se puede conocer efectuando el producto de las matrices asignadas a cada medio. Note que el orden en que se efectúa este producto es de suma importancia puesto que el producto entre matrices no es conmutativo lo cual

representa físicamente que el ordenamiento de los medios involucrados en diferentes posiciones son sistemas distintivos por lo cual es de esperarse que las amplitudes de las ondas incidentes, reflejadas y transmitidas no sean iguales para cada sistema. A continuación presentamos un desarrollo del método de la matriz de transferencia para dos polarizaciones: Transversal Eléctrica (TE) y Transversal Magnética (TM)

1.2.1. Polarización TE

Consideremos un sistema conformado por varias capas de dieléctricos con distintos índices de refracción en cuyas interfaces se encuentra un recubrimiento de grafeno caracterizado por una conductividad σ y al cual se le hace incidir a un ángulo θ , respecto a la normal del plano de incidencia, una onda electromagnética con polarización TE es decir una onda cuya componente de campo eléctrico es perpendicular al plano de propagación justo como se indica en la **Figura. 1.1**.

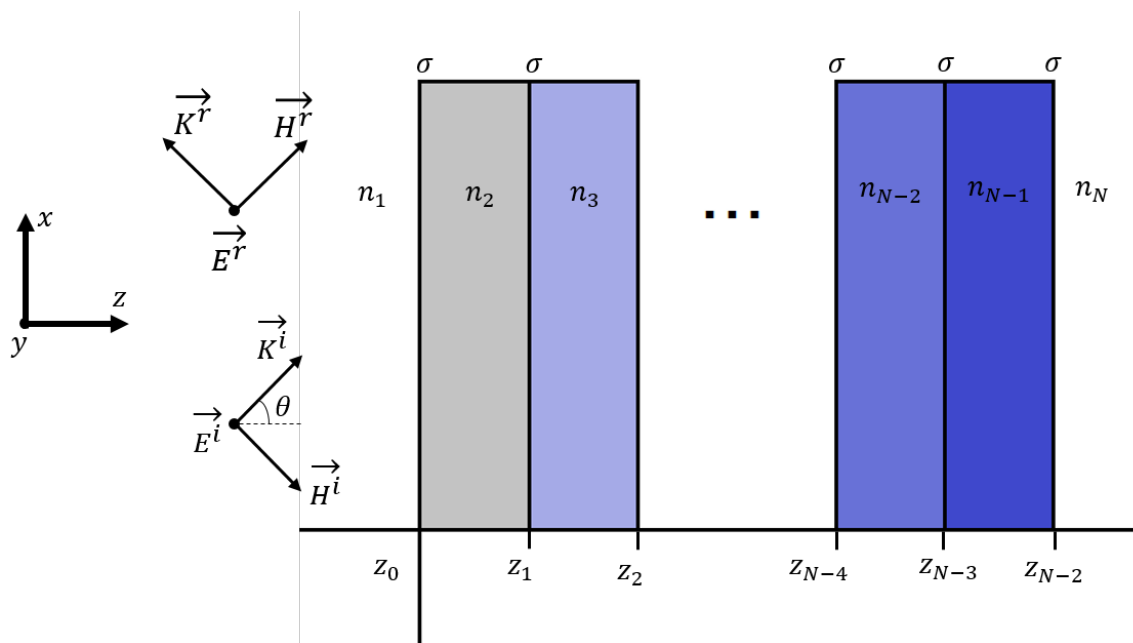


Figura 1.1: Incidencia oblicua de una onda electromagnética con polarización transversal eléctrica sobre dieléctricos con interfaces de grafeno

De las consideraciones anteriores se observa que los campos eléctrico, magnético y el

vector de propagación se pueden representar de la siguiente manera

$$\mathbf{E} = (0, E_y, 0) \quad (1.7)$$

$$\mathbf{H} = (H_x, 0, H_z) \quad (1.8)$$

$$\mathbf{K} = (K_x, 0, K_z) \quad (1.9)$$

Donde la magnitud del vector de onda está dada por la siguiente expresión

$$|\mathbf{K}| = K_x^2 + K_z^2 = \varepsilon_j \mu_j \frac{\omega^2}{c^2} \quad (1.10)$$

Analizando las condiciones de frontera de las componentes tangenciales de los campos eléctricos y magnéticos en $z = z_0$ se tiene que

$$\mathbf{E}_{2y} - \mathbf{E}_{1y} = 0 \quad (1.11)$$

$$\mathbf{H}_{2x} - \mathbf{H}_{1x} = \mathbf{J} \quad (1.12)$$

de donde podemos encontrar la relación entre las magnitudes de los campos en los medios 1 y 2. Por lo tanto si consideramos la expresión de la ley de Ohm $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$ y los campos incidentes y reflejados, entonces el sistema de ecuaciones anterior toma la siguiente forma

$$\mathbf{E}_{1y}^i + \mathbf{E}_{1y}^r = \mathbf{E}_{2y}^i + \mathbf{E}_{2y}^r \quad (1.13)$$

$$(\mathbf{H}_{2x}^i + \mathbf{H}_{2x}^r) - (\mathbf{H}_{1x}^i + \mathbf{H}_{1x}^r) = \sigma \mathbf{E}_{2y} \quad (1.14)$$

Para expresar las ecuaciones únicamente en términos de campos eléctricos, se halla la relación entre las componentes tangenciales de los campos incidentes y reflejados usando la ley de inducción de Faraday y la ecuación constitutiva (2.6)

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (1.15)$$

y considerando ondas planas de la forma $E_{1y}^{i,r} e^{i(K_{1x} \pm K_{1z} - \omega t)}$ y $H_{1x}^{i,r} e^{i(K_{1x} \pm K_{1z} - \omega t)}$ se ob-

tiene que para las componentes de los campos incidentes

$$\nabla \times \mathbf{E} = (-iE_{1y}^i K_{1z} e^{i(K_{1x}+K_{1z}-\omega t)}, 0, iE_{1y}^i K_{1x} e^{i(K_{1x}+K_{1z}-\omega t)}) \quad (1.16)$$

$$-\mu_1 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = (iH_{1x}^i \omega \mu_1 e^{i(K_{1x}+K_{1z}-\omega t)}, 0, iH_{1z}^i \omega \mu_1 e^{i(K_{1x}+K_{1z}-\omega t)}) \quad (1.17)$$

de tal manera que igualando componente a componente se obtienen las siguientes relaciones

$$H_{1x}^i = -Y_1 E_{1y}^i \quad (1.18)$$

$$H_{1z}^i = Y_1' E_{1y}^i \quad (1.19)$$

donde $Y_1 = K_{1z}/\omega\mu_1$ y $Y_1' = K_{1x}/\omega\mu_1$ las cuales definimos como las impedancias del medio. En tanto que para las componentes de los campos reflejados

$$\nabla \times \mathbf{E} = (iE_{1y}^r K_{1z} e^{i(K_{1x}-K_{1z}-\omega t)}, 0, iE_{1y}^r K_{1x} e^{i(K_{1x}-K_{1z}-\omega t)}) \quad (1.20)$$

$$-\mu_1 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = (iH_{1x}^r \omega \mu_1 e^{i(K_{1x}-K_{1z}-\omega t)}, 0, iH_{1z}^r \omega \mu_1 e^{-i(K_{1x}-K_{1z}-\omega t)}) \quad (1.21)$$

nuevamente igualando componente a componente tenemos como resultado

$$H_{1x}^r = Y_1 E_{1y}^r \quad (1.22)$$

$$H_{1z}^r = Y_1' E_{1y}^r \quad (1.23)$$

Las expresiones 1.18 y 1.22 se cumplen de igual forma en el segundo dieléctrico considerado por supuesto los vectores de campo y la permeabilidad magnética asociados a dicho medio. Por lo tanto sustituyendo las expresiones correspondientes a los medios uno y dos en las ecuaciones 1.13 y 1.14 y realizando el álgebra adecuada se obtiene

$$E_{1y}^i e^{iK_{1z}z_0} + E_{1y}^r e^{-iK_{1z}z_0} = E_{2y}^i e^{iK_{2z}z_0} + E_{2y}^r e^{-iK_{2z}z_0} \quad (1.24)$$

$$Y_1 E_{1y}^i e^{iK_{1z}z_0} - Y_1 E_{1y}^r e^{-iK_{1z}z_0} = (\sigma + Y_2) E_{2y}^i e^{iK_{2z}z_0} + (\sigma - Y_2) E_{2y}^r e^{iK_{2z}z_0} \quad (1.25)$$

expresando el sistema de ecuaciones anterior en forma matricial resulta

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} E_{1y}^i \\ E_{1y}^r \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{iK_{1z}z_0} & 0 \\ 0 & e^{-iK_{1z}z_0} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_1 & -Y_1 \end{pmatrix}^{-1} \\ &\quad \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \sigma + Y_2 & \sigma - Y_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{iK_{2z}z_0} & 0 \\ 0 & e^{-iK_{2z}z_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{2y}^i \\ E_{2y}^r \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.26)$$

Esta expresión muestra la relación entre las amplitudes de los campos en los medios uno y dos, y es válida para cualquier interface entre dieléctricos de tal manera que para la j -ésima frontera se cumple lo siguiente

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} E_{jy}^i \\ E_{jy}^r \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{iK_{jz}z_{j-1}} & 0 \\ 0 & e^{-iK_{jz}z_{j-1}} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_j & -Y_j \end{pmatrix}^{-1} \\ &\quad \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \sigma + Y_{j+1} & \sigma - Y_{j+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{iK_{(j+1)z}z_{j-1}} & 0 \\ 0 & e^{-iK_{(j+1)z}z_{j-1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{(j+1)y}^i \\ E_{(j+1)y}^r \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.27)$$

Con la ecuación anterior podemos relacionar las magnitudes de los campos en el medio inicial y final mediante una matriz asociada a nuestra estructura de tal manera que se cumple la siguiente expresión[10].

$$\begin{pmatrix} E_{1y}^i \\ E_{1y}^r \end{pmatrix} = \mathbf{Y}_1^{-1} \left(\prod_{j=1}^{N-1} \sigma_j \mathbf{D}_j \mathbf{Y}_{j+1}^{-1} \right) \sigma_N \begin{pmatrix} E_{Ny}^i \\ E_{Ny}^r \end{pmatrix} \quad (1.28)$$

Donde

$$\sigma_j = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \sigma + Y_j & \sigma - Y_j \end{pmatrix} \quad (1.29)$$

$$\mathbf{D}_j = \begin{pmatrix} e^{-iK_{jz}d_j} & 0 \\ 0 & e^{iK_{jz}d_j} \end{pmatrix} \quad \text{con } d_j = z_j - z_{j-1} \quad (1.30)$$

$$\mathbf{Y}_{j+1}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ Y_{j+1} & -Y_{j+1} \end{pmatrix}^{-1} \quad (1.31)$$

El producto entre paréntesis en la ecuación 1.28 es la denominada Matriz de transferencia asociada a la polarización transversal eléctrica y es conveniente representarla en una forma mas explicita de tal manera que

$$\prod_{j=1}^{N-1} \sigma_j \mathbf{D}_j \mathbf{Y}_{j+1}^{-1} = \prod_{j=1}^{N-1} \begin{pmatrix} \cos K_{jz} d_j & -\frac{i}{Y} \sin K_{jz} d_j \\ \sigma \cos K_{jz} d_j - iY \sin K_{jz} d_j & \cos K_{jz} d_j - \frac{i}{Y} \sigma \sin K_{jz} d_j \end{pmatrix} \quad (1.32)$$

1.2.2. Polarización TM

De igual manera que en la sección anterior nuestro sistema está conformado por varias capas de dieléctricos con distintos índices de refracción en cuyas interfaces se encuentra un recubrimiento de grafeno de conductividad σ . En este caso se hace incidir a un ángulo θ respecto a la normal del plano $x - y$ una onda electromagnética con polarización TM es decir la componente del campo magnético es perpendicular el plano de propagación tal cual se puede apreciar en la **Figura. 1.2**.

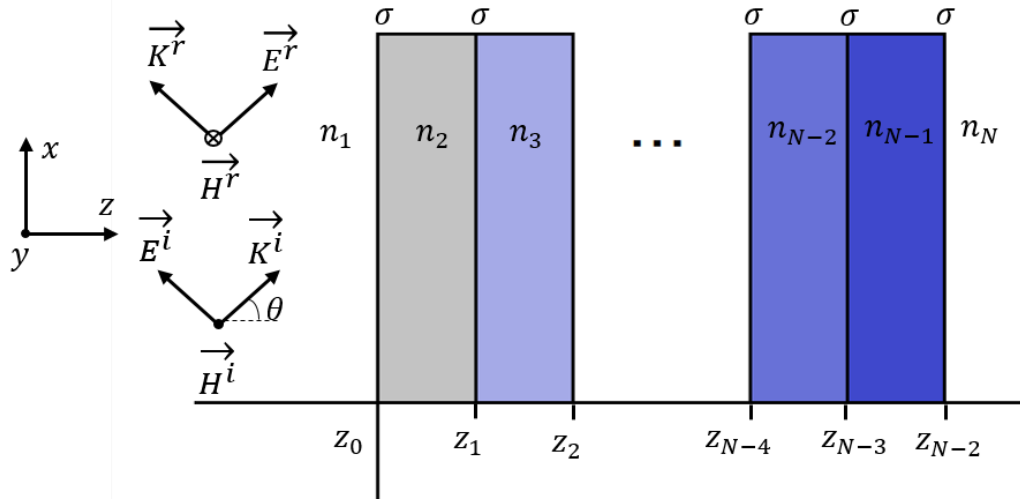


Figura 1.2: Incidencia oblicua de una onda electromagnética con polarización transversal magnética sobre dieléctricos con interfaces de grafeno

De acuerdo a la figura anterior donde la onda electromagnética incidente presenta una polarización TM, los campos eléctrico, magnético y el vector de propagación se pueden representar de la siguiente manera

$$\mathbf{E} = (E_x, 0, E_z) \quad (1.33)$$

$$\mathbf{H} = (0, H_y, 0) \quad (1.34)$$

$$\mathbf{K} = (K_x, 0, K_z) \quad (1.35)$$

Nuevamente nos fijamos en la condiciones de frontera de las componentes tangenciales de los campos eléctrico y magnético en $z = z_0$, tomando la consideración adicional de que para la polarización TM la condición de frontera del campo magnético difiere en un signo menos con respecto de la polarización TE.

$$\mathbf{E}_{2x} - \mathbf{E}_{1x} = 0 \quad (1.36)$$

$$\mathbf{H}_{2y} - \mathbf{H}_{1y} = -\sigma \mathbf{E}_{2x} \quad (1.37)$$

expresado los campos en términos de sus componentes incidentes y reflejadas, las ecuaciones 1.35 y 1.36 toman la siguiente forma

$$\mathbf{E}_{1x}^i + \mathbf{E}_{1x}^r = \mathbf{E}_{2x}^i + \mathbf{E}_{2x}^r \quad (1.38)$$

$$(\mathbf{H}_{2y}^i + \mathbf{H}_y^r) - (\mathbf{H}_{1y}^i + \mathbf{H}_{1y}^r) = -\sigma \mathbf{E}_{2x} \quad (1.39)$$

Usando la ecuación 1.1 tomando en cuenta que la densidad de corriente libre es cero y la ecuación constitutiva 1.5 obtenemos la siguiente expresión con la cual podemos hallar las relaciones que existen entre los campos incidente y reflejados de los vectores de campo eléctrico y magnético.

$$\nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (1.40)$$

si consideramos ondas planas de la forma $E_{1y}^{i,r} e^{i(K_{1x} \pm K_{1z} - \omega t)}$ y $H_{1x}^{i,r} e^{i(K_{1x} \pm K_{1z} - \omega t)}$ se obtiene que para las componentes de los campos incidentes

$$\nabla \times \mathbf{H} = (-iH_{1y}^i K_{1z} e^{i(K_{1x} + K_{1z} - \omega t)}, 0, iH_{1y}^i K_{1x} e^{i(K_{1x} + K_{1z} - \omega t)}) \quad (1.41)$$

$$\varepsilon_1 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = (-iE_{1x}^i \omega \varepsilon_1 e^{i(K_{1x} + K_{1z} - \omega t)}, 0, -iE_{1z}^i \omega \varepsilon_1 e^{i(K_{1x} + K_{1z} - \omega t)}) \quad (1.42)$$

de tal manera que igualando componente a componente se obtienen las siguientes relaciones

$$H_{1y}^i = Y_1 E_{1x}^i \quad (1.43)$$

$$H_{1y}^i = -Y_1' E_{1z}^i \quad (1.44)$$

donde $Y_1 = \omega \varepsilon_1 / K_{1z}$ y $Y_1' = \omega \varepsilon_1 / K_{1x}$. En tanto que para las componentes de los campos reflejados

$$\nabla \times \mathbf{H} = (iH_{1y}^r K_{1z} e^{i(K_{1x} + K_{1z} - \omega t)}, 0, iH_{1y}^r K_{1x} e^{i(K_{1x} + K_{1z} - \omega t)}) \quad (1.45)$$

$$\varepsilon_1 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = (-iE_{1x}^r \omega \varepsilon_1 e^{i(K_{1x} + K_{1z} - \omega t)}, 0, -iE_{1z}^r \omega \varepsilon_1 e^{i(K_{1x} + K_{1z} - \omega t)}) \quad (1.46)$$

nuevamente igualando componente a componente se obtienen las siguientes relaciones

$$H_{1y}^r = -Y_1 E_{1x}^r \quad (1.47)$$

$$H_{1y}^r = -Y_1' E_{1z}^r \quad (1.48)$$

De igual manera que en la sección anterior sustituimos las expresiones correspondientes a los medios uno y dos en las ecuaciones 1.38 y 1.39 y reordenando el sistema tenemos que

$$E_{1x}^i e^{iK_{1z}z_0} + E_{1x}^r e^{-iK_{1z}z_0} = E_{2x}^i e^{iK_{2z}z_0} + E_{2x}^r e^{-iK_{2z}z_0} \quad (1.49)$$

$$-Y_1 E_{1x}^i e^{iK_{1z}z_0} + Y_1 E_{1y}^r e^{-iK_{1z}z_0} = (-\sigma - Y_2) E_{2x}^i e^{iK_{2z}z_0} + (-\sigma + Y_2) E_{2x}^r e^{iK_{2z}z_0} \quad (1.50)$$

de tal manera que expresando el sistema de ecuaciones anterior en forma matricial resulta

$$\begin{pmatrix} E_{1x}^i \\ E_{1x}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{iK_{1z}z_0} & 0 \\ 0 & e^{-iK_{1z}z_0} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -Y_1 & Y_1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\sigma - Y_2 & -\sigma + Y_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{iK_{2z}z_0} & 0 \\ 0 & e^{-iK_{2z}z_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{2x}^i \\ E_{2x}^r \end{pmatrix} \quad (1.51)$$

Nuevamente encontramos una expresión que relaciona las amplitudes de los campos en los medios uno y dos, y es valida para cualquier interface por lo que de manera similar al procedimiento realizado en caso de la polarización TE podemos relacionar los campos del medio incidente con los campos en el medio final con la siguiente expresión[10].

$$\begin{pmatrix} E_{1x}^i \\ E_{1x}^r \end{pmatrix} = \mathbf{Y}_1^{-1} \left(\prod_{j=1}^{N-1} \sigma_j \mathbf{D}_j \mathbf{Y}_{j+1}^{-1} \right) \sigma_N \begin{pmatrix} E_{Nx}^i \\ E_{Nx}^r \end{pmatrix} \quad (1.52)$$

Donde

$$\sigma_j = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\sigma - Y_j & -\sigma + Y_j \end{pmatrix} \quad (1.53)$$

$$\mathbf{D}_j = \begin{pmatrix} e^{-iK_{jz}d_j} & 0 \\ 0 & e^{iK_{jz}d_j} \end{pmatrix} \quad \text{con } d_j = z_j - z_{j-1} \quad (1.54)$$

$$\mathbf{Y}_{j+1}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -Y_{j+1} & +Y_{j+1} \end{pmatrix}^{-1} \quad (1.55)$$

De igual manera que en la sección previa identificamos la Matriz de transferencia, pero en esta ocasión asociada a la polarización transversal magnética, como el producto entre paréntesis en la ecuación 1.52 y la expresamos convenientemente en la siguiente forma

$$\prod_{j=1}^{N-1} \sigma_j \mathbf{D}_j \mathbf{Y}_{j+1}^{-1} = \prod_{j=1}^{N-1} \begin{pmatrix} \cos K_{jz}d_j & -\frac{i}{Y} \sin K_{jz}d_j \\ iY \sin K_{jz}d_j - \sigma \cos K_{jz}d_j & \cos K_{jz}d_j - \frac{i}{Y} \sigma \sin K_{jz}d_j \end{pmatrix} \quad (1.56)$$

1.3. Coeficientes de reflexión y transmisión

De acuerdo con las ecuaciones 1.28 y 1.52 obtenidas en las secciones 1.2 y 1.3 respectivamente es posible relacionar las amplitudes de los campos inicial y final mediante una matriz correspondiente a cada una de las polarizaciones, Transversal Magnética y Transversal Eléctrica. Independientemente de la polarización usada esta matriz resulta ser de dimensión 2×2 puesto que todas las matrices involucradas en el producto total tienen esta misma dimensión. Por lo tanto para el cálculo de los coeficientes reflexión y transmisión es útil expresar esta matriz de la siguiente manera

$$\mathbf{Y}_1^{-1} \left(\prod_{j=1}^{N-1} \sigma_j \mathbf{D}_j \mathbf{Y}_{j+1}^{-1} \right) \sigma_N = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} = M \quad (1.57)$$

Es importante también considerar que en el medio final existe únicamente una onda transmitida y no una onda reflejada debido a lo cual los campos iniciales y finales están relacionados conforme a la siguiente expresión

$$\begin{pmatrix} E_1^i \\ E_1^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_N^t \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.58)$$

Efectuando el producto entre la matriz que representa nuestra estructura óptica y el vector de la onda transmitida se tiene que

$$\begin{pmatrix} E_1^i \\ E_1^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11}E_N^t \\ m_{21}E_N^t \end{pmatrix} \quad (1.59)$$

El coeficiente de reflexión representa el porcentaje de la luz incidente que se refleja, de modo que este coeficiente se calcula a partir de la razón entre la amplitud de campo reflejado y el incidente en tanto que el coeficiente de transmisión es el porcentaje de luz incidente que se transmite y se calcula por medio de la razón entre la amplitud del campo transmitido y el incidente. Puesto que las entradas de la matriz M pueden ser números complejos se toma su módulo al cuadrado para los cálculos de dichos coeficientes de modo que

$$|R|^2 = \left| \frac{E_1^r}{E_1^i} \right|^2 = \left| \frac{m_{21}E_N^t}{m_{11}E_N^t} \right|^2 = \left| \frac{m_{21}}{m_{11}} \right|^2 \quad (1.60)$$

$$|T|^2 = \left| \frac{E_N^t}{E_1^i} \right|^2 = \left| \frac{E_N^t}{m_{11}E_N^t} \right|^2 = \left| \frac{1}{m_{11}} \right|^2 \quad (1.61)$$

Donde $|R|^2$ representa el coeficiente de reflexión y $|T|^2$ el coeficiente de transmisión.

Capítulo 2

Grafeno

2.1. Descripción del grafeno

El grafeno es un material de estructura bidimensional, descubierto en el año 2004 por A. K. Geim and K. S. Novoselov, que ha despertado gran interés por sus propiedades mecánicas, ópticas y eléctricas entre otras. Es una forma alotrópica del carbono es decir que las moléculas de carbono pueden poseer distintas estructuras moleculares y el grafeno es una de ellas. Es un material bidimensional de un átomo de espesor formado únicamente por átomos de carbono los cuales se encuentran dispuestos en un patrón hexagonal parecido a las celdas de un panal de abejas.

Para hacer un estudio adecuado de la estructura atómica del grafeno es necesario hacer un análisis de las propiedades que posee el átomo de carbono a partir de su configuración electrónica puesto que ésta determina las formas alotrópicas en la que este elemento se presenta. La especial configuración electrónica del carbono le proporciona la capacidad de formar diferentes tipos de enlaces de valencia con diversos elementos incluyendo otros átomos de carbono a través de hibridación atómica[12].

El átomo de carbono tiene como número atómico 6 por lo que su configuración electrónica en su estado fundamental es de la forma: $1s^2 2s^2 2p^2$. Mientras que en estado excitado su configuración es: $1s^2 2s 2p_x 2p_y 2p_z$. La cual corresponde a un estado de hibridación en donde un electron del orbital $2s$ es promovido a un orbital $2p$. El grafeno presenta un tipo

de hibridación llamado sp^2 en la cual se forman tres enlaces covalentes contenidos dentro de un mismo plano orientados a 120° dando como consecuencia al patrón hexagonal que lo caracteriza.

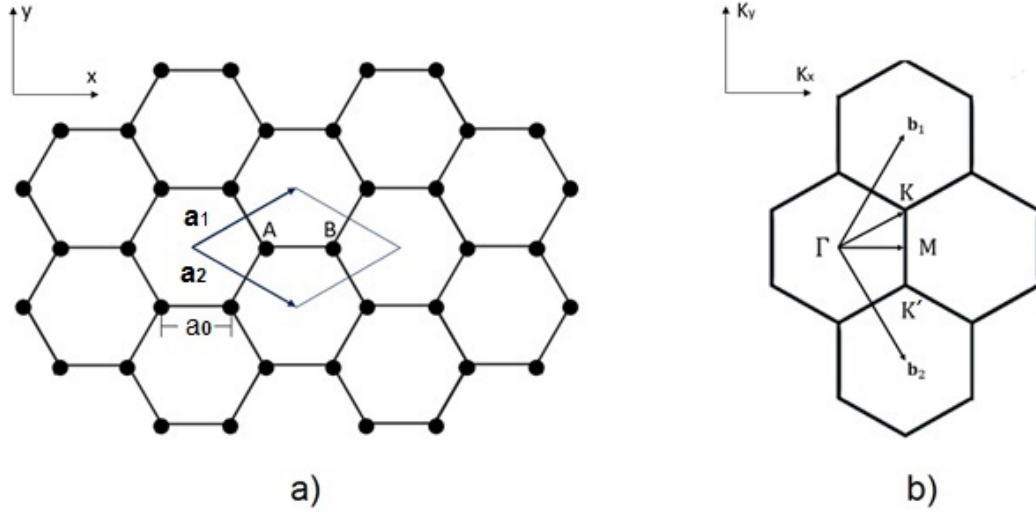


Figura 2.1: a) Celda unitaria en el espacio real y los vectores bases \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 b) Red recíproca y los vectores de la red recíproca \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 . Se Muestra la primera zona de Brillouin y los puntos de alta simetría Γ , M, K y K' .

Dentro de la red hexagonal que lo conforma se considera una celda unitaria de grafeno un rombo dentro del cual se encuentran dos átomos de carbono como se muestra en la **Figura 2.1 a)** . La celda unitaria está dividida en dos subredes triangulares representadas por los átomos **A** y **B**. Se definen dos vectores base de la celda unitaria \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 cuya expresión en coordenadas cartesianas es la siguiente.

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{3}a/2 \\ a/2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{3}a/2 \\ -a/2 \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

Donde $a = \sqrt{3}a_0$ y a_0 es la distancia más corta entre átomos de la red. A partir de los vectores \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 se determinan los vectores \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 de la red recíproca. La **Figura 2.1 b)** muestra la primera zona de Brillouin y los puntos de alta simetría Γ , M, K y K' . Las expresiones para los vectores b_1 y b_2 son las siguientes.

$$\mathbf{b}_1 = \begin{pmatrix} 2\pi/\sqrt{3}a \\ 2\pi/a \end{pmatrix} \quad \mathbf{b}_2 = \begin{pmatrix} 2\pi/\sqrt{3}a \\ -2\pi/a \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

La red recíproca es usada entre otras cosas para representar la estructura de banda del material donde Γ es el centro de la zona de Brillouin y los puntos K y K' son los llamados puntos de Dirac y se encuentran en el borde de esta zona.

El nivel de Fermi es el nivel de máxima energía que puede poseer un átomo en un sólido. En el caso de los metales el nivel de Fermi está en la banda de conducción en cambio en los semiconductores y aislantes el nivel de Fermi se encuentra entre la banda de conducción y la banda de valencia las cuales están separadas por una brecha llamada gap o banda prohibida. El gap en un semiconductor es significativamente menor que en un aislante y por tanto puede conducir corriente eléctrica. El grafeno es un caso especial en el cual las bandas de conducción y valencia tienen forma de cono y se tocan exactamente en un solo punto. El nivel de Fermi está justo en dicha intersección. Puesto que el gap en el grafeno es cero, los electrones pueden ir de una banda a otra, por lo que esto facilita en gran medida la conducción eléctrica. Por estas razones el grafeno es considerado como un excelente candidato para ser usado en una gran variedad de dispositivos electrónicos.

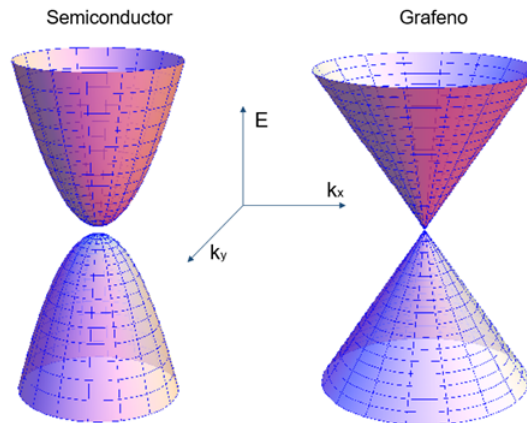


Figura 2.2: Representación de las bandas de valencia y conducción para un semiconductor y grafeno

2.2. Propiedades mecánicas

Fuerzas externas aplicadas sobre un material cristalino pueden modificar propiedades como el transporte de carga o inclusive formar un gap en su estructura electrónica[13]. Una forma en la que se pueden determinar estas propiedades es medir la variación en la frecuencia de fonones al aplicar tensión o compresión sobre el material. Un material sometido a tensión o compresión puede causar disminución o incremento en la frecuencia vibracional. Una de las técnicas empleadas para medir estos parámetros es la espectroscopia Raman[4]. En otras palabras es de suma importancia conocer la propiedades mecánicas de los materiales debido al efecto que tienen sobre otras.

2.2.1. Propiedades elásticas

Dos parámetros importantes para determinar el comportamiento elástico de un material son el modulo de Young y la tensión de fractura. Ambos pueden obtenerse a partir de una gráfica de esfuerzo-deformación la cual generalmente se obtiene de manera experimental. El módulo de Young determina cuánta deformación tendrá un material al aplicarse una fuerza de tensión o compresión sobre él siempre y cuando se encuentre en la zona elástica de la gráfica esfuerzo deformación. La tensión de fractura es la tensión máxima que un material puede soportar antes de romperse. Materiales como el grafeno y derivados de este son considerados altamente resistentes a la deformación pues poseen valores altos de estos parámetros. A pesar de las dificultades que representa realizar experimentos debido a las dimensiones del grafeno se han logrado concretar estudios en laminas de grafeno principalmente con un instrumento llamado Microscopio de fuerza atómica el cual es capaz de medir fuerzas del orden de 10^{-9} N. Una de las técnicas consiste en modular el haz de un láser que se incide sobre la lámina de grafeno lo cual provoca contracciones y expansiones debido al aumento de la temperatura en la lámina[12]. Se puede determinar el módulo de Young del grafeno a partir de la constante de elasticidad calculando la deflexión estática en un arreglo como el mostrado en la **Figura. 2.3**.

Usando un Microscopio de fuerza atómica se ha observado que monocapas de grafeno presentan comportamiento elástico es decir las laminas regresan a su forma original después de que se deja de aplicar tensión sobre estas. En el caso en que la tensión se ha llevado

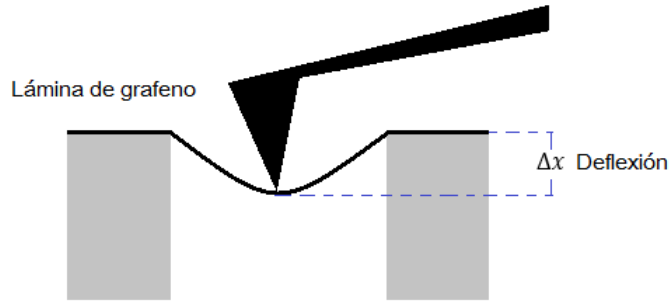


Figura 2.3: Determinación del módulo de Young de una lámina de grafeno con un Microscopio de fuerza atómica

al punto de ruptura y se observa que el grafeno puede expandirse hasta un 25 % antes de romperse. Esto se encuentra en concordancia con cálculos teóricos reportados[14] en los que se predice un 20 % de expansión antes de la ruptura. La tensión de fractura para una lámina de grafeno de aproximadamente 0.335 nm de espesor fue de 42 N/m de donde el cálculo del módulo de Young se estima del orden de los Terapascales (TPa) lo cual coloca al grafeno como de uno de los materiales mas resistentes. La dependencia de las propiedades elásticas del grafeno de otras variables como la temperatura se han tratado principalmente a través de simulaciones [15].

Defectos estructurales

Las características microscópicas de un material determinan muchas de las propiedades macroscópicas del mismo, así que los defectos a escala atómica modifican los valores de parámetros macroscópicos calculados de manera teórica. En particular algunos defectos en la estructura molecular pueden modificar por ejemplo el valor de la tensión de fractura. Los defectos comunes en el grafeno son vacancias, adatoms, defectos de Stone-Wales e impurezas debidas a dopaje entre otras. El término vacancy en este caso hace referencia a un espacio de hueco en la estructura molecular de un cristal en otras palabras es la falta de un átomo en dicha estructura. Por otro lado el término adatom es considerado lo opuesto a vacancy, es decir es un átomo de más que se encuentra por ejemplo sobre la superficie de un cristal.

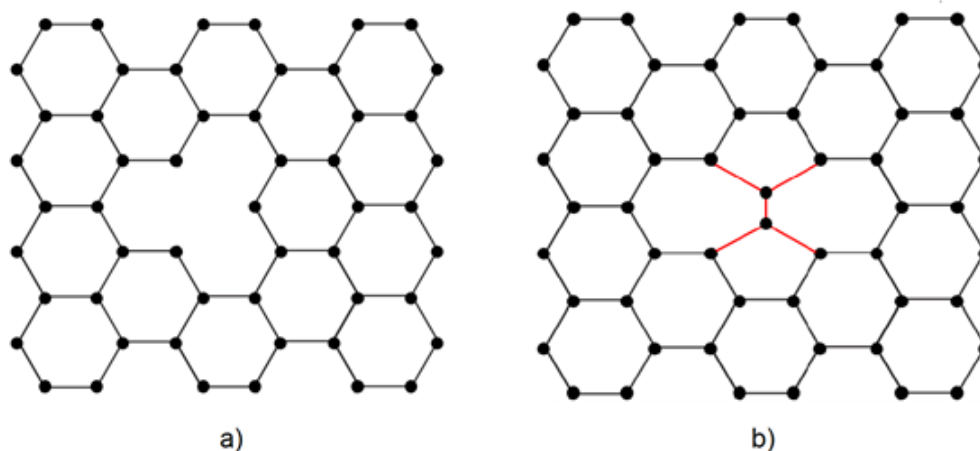


Figura 2.4: Defectos estructurales en la red cristalina del grafeno. a) Vacancy b) Defecto de Stone-Wales .

Los defectos de Stone-Wales son una imperfección en la conectividad de los átomos de carbono. La reacción ocurre de tal manera que involucra 4 hexágonos vecinos de la red bidimensional los cuales se transforman en dos polígonos de 5 lados y dos polígonos de 7 lados. Por otro lado puesto que el grafeno es un material con un solo átomo de espesor el término vacancy es específicamente la falta puntual de un átomo en la red bidimensional que lo conforma. Debido a estas características este defecto estructural es considerado en la categoría de defectos puntuales los cual como lo sugiere su nombre no tienen extensión más allá de una dimensión espacial. Son pocos los resultados experimentales que muestran la relación que existe entre la cantidad de huecos en una lámina de grafeno y sus propiedades elásticas. Sin embargo existen algunos resultados a partir de modelos teóricos los cuales sugieren una disminución de carácter lineal a medida que la cantidad de huecos aumenta.

2.3. Propiedades eléctricas

Gran parte del interés que ha generado el grafeno se remite a las particulares propiedades eléctricas que este material posee. En su mayoría estas propiedades son gracias a su especial estructura de bandas.

El grafeno es considerado como un semiconductor con gap nulo, esto se debe a que la

banda de conducción y la banda de valencia se intersectan en un puntos específicos que se encuentran sobre la red recíproca denominados puntos de Dirac. La densidad de estados de energía accesibles es cero en estos puntos. Esta estructura da como consecuencia interesantes propiedades de transporte eléctrico, una de estas propiedades es que muy cerca de los puntos de Dirac la relación de dispersión es lineal por lo que puede ser descrita mediante la ecuación de Dirac, así que bajo esta descripción los electrones se mueven como fermiones sin masa de Dirac alcanzando velocidades del orden de $v_F \approx 10^6 m/s$.

Otra propiedad importante resulta del hecho de que el grafeno muestra un campo eléctrico ambipolar y como consecuencia la cantidad de portadores de carga puede ser controlada mediante un voltaje aplicado entre grafeno y una capa metálica separados únicamente por una capa muy delgada de algún aislante. Al variar el voltaje aplicado, el nivel de Fermi también es modificado y como consecuencia también se modifica la densidad de portadores de carga los cuales pueden ser electrones en la banda de conducción o ausencia de ellos en la banda de valencia, la ausencia de un electrón es comúnmente llamada hueco. A medida que el nivel de Fermi se acerca al punto de intersección de la banda de valencia y la banda de conducción el número de portadores disminuye y por lo tanto la resistividad aumenta.

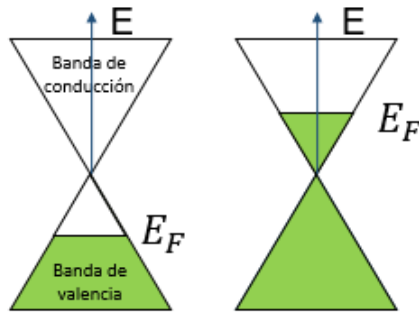


Figura 2.5: Modificación del nivel de Fermi al aplicar voltaje entre grafeno y una capa metálica. Cuando el nivel de Fermi se encuentra en la banda de conducción hay electrones adicionales mientras que si el nivel de Fermi se encuentra en la banda de valencia entonces hay una ausencia de estos.

Cuánticamente cuando una partícula incide sobre una barrera de potencial con energía menor a esta barrera, existe la probabilidad de que la partícula sea transmitida. Esta probabilidad depende del ancho y altura de la barrera. Si consideramos partículas relativistas,

como los electrones en el grafeno que se mueven como partículas sin masa, la situación es diferente pues la probabilidad de que una partícula de esta naturaleza sea transmitida aumenta a medida que la altura de la barra crece. Inclusive si un electrón que se encuentra en una capa de grafeno incide de manera normal sobre una barrera de potencial finita la probabilidad de que sea transmitido es del cien por ciento. A este fenómeno se la llama la paradoja de Klein y muestra un interesante comportamiento en el transporte de electrones dentro del grafeno.

2.4. Propiedades ópticas

El grafeno presenta importantes propiedades ópticas relacionadas con absorción y fotoluminiscencia. En el caso de una monocapa, el grafeno es un material que absorbe aproximadamente 2.3% de la luz incidente y presenta 97.7% de luz transmitida principalmente para longitudes onda largas. La absorción se incrementa con el número de capas de grafeno, cada capa contribuye con $2,3\% = \pi\alpha$ donde α es la constante de estructura fina. Como consecuencia de estas propiedades ópticas y en adición con sus propiedades químicas, mecánicas y eléctricas el grafeno se presenta como un excelente candidato para sustituir materiales conductores y con una elevada transmisión de luz como el ITO[16].

El grafeno puede presentarse en una peculiar estructura llamada Graphene Quantum Dots (GQD) cuyo tamaño es del orden de los nanómetros el cual varía de 5 a 10 nm de diámetro. Estas estructuras presentan gran variedad de propiedades ópticas. Cuando un material fluorescente absorbe luz algunos electrones pasan del estado base a un estado excitado posteriormente cuando el electrón regresa al estado base el material emite luz con una longitud de onda correspondiente a la diferencia de energía entre el estado base y el excitado. Normalmente el color de luz que emite un material fluorescente no cambia pero a escala nanométrica esto es diferente ya que con sólo cambiar las dimensiones de la estructura se puede cambiar el color de luz emitido obedeciendo que a menor tamaño de la estructura más alto es el valor de la frecuencia emitida, GQD muestran un rango de emisión que va desde el azul hasta el rojo. Se ha observado que algunas moléculas orgánicas se vuelven fotoluminiscientes como consecuencia de haber sido unidas a GQD[16]. La absorción en estas nanoestructuras de grafeno tiene un rango que abarca desde la región ultravioleta y puede extenderse hasta el visible mediante pasivación química la cual consiste en

formación de una película inerte sobre la superficie del material que lo aísla de agentes externos. Otros procesos mediante los cuales se observa fotoluminiscencia en GQD son la excitación multifotónica que en otras palabras es la excitación de un electrón a partir de la múltiple interacción con fotones de baja energía y la fotoluminiscencia de conversión ascendente en la que la absorción de varios fotones provoca emisión de luz con longitud de onda mas corta que la longitud de onda de excitación. Estas y adicionales propiedades ópticas auguran un futuro prometedor para el grafeno como material fundamental en la nuevas generaciones de dispositivos inteligentes.

2.5. Conductividad del grafeno

La conductividad eléctrica es la capacidad de un material de transportar electrones o en otras palabras es la medida de que tan apto es un material para dejar pasar corriente eléctrica a través de él. Si a un material con conductividad σ se le aplica un campo eléctrico \mathbf{E} entonces la relación entre estas cantidades y la densidad de corriente provocada está dada por la ley de Ohm

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} \tag{2.3}$$

Debido a las propiedades de transporte eléctrico del grafeno la conductividad de este material puede ser descrita mediante un modelo teórico de respuesta lineal. En este caso se usa el formalismo de Kubo del cual se obtendrá una expresión para la conductividad. En el límite local en donde los efectos de dispersión espacial son despreciables es decir $\omega \gg \tau^{-1}$ y $\omega \gtrsim q_x v_F$ se pueden obtener expresiones analíticas de la conductividad del grafeno para temperaturas finitas a partir del formalismo de Kubo. La fórmula para la conductividad σ viene dada por la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \sigma(\omega, \mu_c, \tau, T) = & \frac{e^2(\omega + i\tau^{-1})}{i\pi\hbar^2} \left[\frac{1}{(\omega + i\tau^{-1})^2} \int_0^\infty \varepsilon \left(\frac{\partial F(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} - \frac{\partial F(-\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon \right. \\ & \left. - \int_0^\infty \frac{F(\varepsilon) - F(-\varepsilon)}{(\omega + i\tau^{-1})^2 - 4(\varepsilon/\hbar)^2} d\varepsilon \right] \end{aligned} \tag{2.4}$$

Donde ω es la frecuencia angular, μ_c el potencial químico, τ el tiempo de relajación fenomenológico del electrón, T la temperatura, ε la energía, e representa la carga del electrón, $F(\varepsilon) = (e^{\varepsilon - \mu_c/kT} + 1)^{-1}$ y k la constante de Boltzman. Note que el lado derecho la ecuación 2.4 consta de dos términos. El primer término corresponde a las contribuciones intrabanda mientras que el segundo término corresponde a la contribución interbanda. Efectuando la integración del primer término tenemos que

$$\sigma_{intra} = \frac{2ie^2kT}{\pi\hbar^2(\omega + i\tau^{-1})} \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\mu_c}{2kT} \right) \right] \quad (2.5)$$

Tomando el límite $\mu_c \gg kT$ se tiene que

$$\sigma_{intra} = \frac{ie^2\mu_c}{\pi\hbar^2(\omega + i\tau^{-1})} \quad (2.6)$$

Para el término interbanda el valor de la integral se obtiene tomando nuevamente el límite $\mu_c \gg kT$

$$\sigma_{inter} = \frac{e^2}{4\hbar} \left[1 + \frac{i}{\pi} \ln \frac{\hbar(\omega + i\tau^{-1}) - 2\mu_c}{\hbar(\omega + i\tau^{-1}) + 2\mu_c} \right] \quad (2.7)$$

De tal manera que la expresión total de la conductividad es la suma de la contribución interbanda y la contribución intrabanda $\sigma = \sigma_{intra} + \sigma_{inter}$

$$\sigma = \frac{ie^2}{\pi\hbar} \left[\frac{\mu_c}{\hbar(\omega + i\tau^{-1})} - \frac{1}{4} \ln \left(\frac{2\mu_c + \hbar(\omega + i\tau^{-1})}{2\mu_c - \hbar(\omega + i\tau^{-1})} \right) \right] \quad (2.8)$$

Esta última expresión es la que se usará en esta tesis para los cálculos de los coeficientes de reflexión y transmisión presentados en el capítulo 3.

Capítulo 3

Resultados

En este capítulo se presenta la contribución de esta tesis donde se incluyen resultados de los cálculos de espectros de reflexión en función de la frecuencia en una monocapa de grafeno a incidencia normal, también se muestran espectros de reflexión para la polarización transversal eléctrica en función del ángulo de incidencia de la estructura descrita anteriormente pero anteponiendo un prisma de un índice de refracción superior al del dieléctrico lo cual corresponde a la técnica llamada (ATR) por sus siglas en inglés. Se exponen los efectos que producen varias capas de grafeno en el cristal fotónico descrito sobre la reflexión en condiciones de ATR. Se tiene como resultado mas importante la excitación de modos de superficie de naturaleza TE modificando el valor del potencial químico y el número de capas de grafeno.

3.1. Cálculos de transmisión de luz en una placa de grafeno

La estructura mas sencilla a estudiar es una monocapa de grafeno considerando como medio circundante aire. De esta estructura se muestran los espectros de transmisión y reflexión en función de la frecuencia para incidencia normal, modificando los valores del potencial químico es decir se varía la cantidad de portadores de carga sobre la monocapa de grafeno.

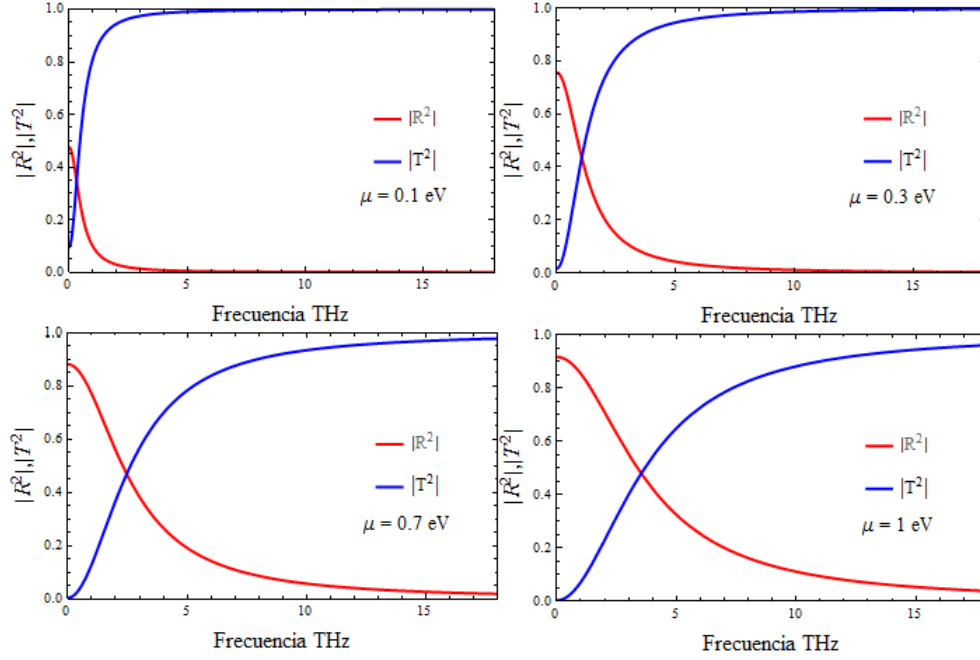


Figura 3.1: Espectros de Reflexión y Transmisión a incidencia normal sobre una monocapa de grafeno inmersa en aire para diferentes valores del potencial químico

Los espectros mostrados en la figura anterior se calculan con un sacattreing $\tau = 1$ ps. Para el valor de 0.1 eV, una monocapa de grafeno presenta una alta transmisión a partir de 1 THz en adelante mientras que para valores menores a 1 THz predominan la absorción y reflexión. A medida que se aumenta el potencial químico se reducen los valores de transmisión y absorción en tanto la reflexión aumenta en un rango 0 de hasta 15 Thz.

3.2. Estudio de espectros de reflexión y transmisión en medios periódicos alternando dieléctricos con placas de grafeno

Se analiza los espectros de transmisión y reflexión en función de la frecuencia y la distancia entre capas para incidencia normal de una estructura bicapa de grafeno es decir

3.2. ESTUDIO DE ESPECTROS DE REFLEXIÓN Y TRANSMISIÓN EN MEDIOS PERIÓDICOS ALTERNANDO DIELECTRICOS CON PLACAS DE GRAFENO

dos monocapas de grafeno separadas por un dieléctrico con índice refracción $n = 1,5$ a una distancia d y una estructura multicapa con ocho interfaces de grafeno separados por distancias iguales con aire entre cada uno de ellos. El sistema bicapa de grafeno induce un gap es decir transmisión nula de la onda incidente. Para una separación $50 \mu m$ este gap se localiza en frecuencias menores a 1 THz. En la **Figura 3.2** b) y d) se muestran el gap inducido y la absorción en el sistema la cual es provocada por la presencia del grafeno. Para enfatizar la absorción debida al grafeno se muestran en a) y c) de la **Figura 3.2** la reflexión, transmisión y absorción del sistema pero sin la presencia de grafeno, se observa que la absorción es nula dando como consecuencia la desaparición del gap.

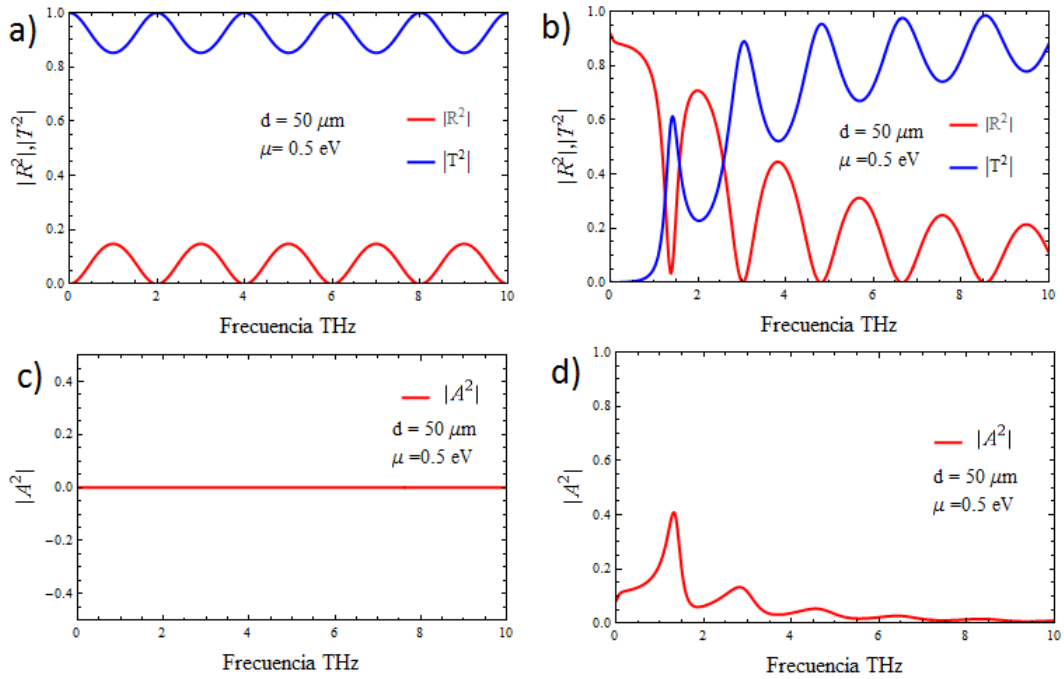


Figura 3.2: Espectros de Reflexión y Transmisión a incidencia normal sobre un sistema bicapa de grafeno suspendida en aire para una distancia entre capas de $50 \mu m$

En el siguiente sistema se consideran ocho capas de grafeno equidistantes entre sí con aire entre ellas, se presentan en la **Figura 3.3** los espectros de reflexión y transmisión para diferentes distancias entre capas de grafeno. Al igual que en el sistema bicapa se induce un gap debido al grafeno para todas la distancias de separación $10, 50$ y $90 \mu m$ siendo el de mayor anchura el correspondiente a $10 \mu m$ el cual está ubicado en valores menores a

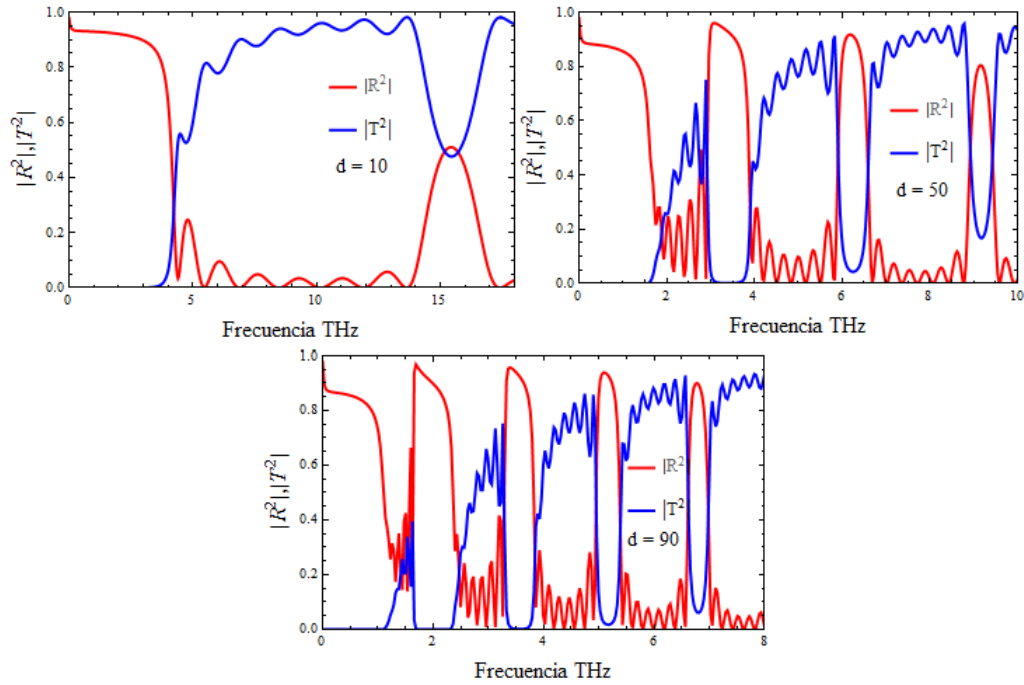


Figura 3.3: Espectros de Reflexión y Transmisión a incidencia normal sobre un sistema multicapa de ocho capas grafeno suspendida en aire para diferentes distancias entre capas

4 THz en tanto que para 50 y 90 μm el gap se ubica entre 0 y 2 THz. Los gaps que se encuentran después del inducido por el grafeno son llamados gaps de Bragg y estos surgen como consecuencia de la periodicidad de la estructura.

3.3. Cálculo de espectros de reflexión en función del ángulo de incidencia, número de capas de grafeno, prisma y el ancho del dieléctrico.

Los resultados más relevantes se presentan en el análisis de ATR usando la configuración de Otto la cual se muestra en la **Figura 3.4** en el que se propone un sistema con una única interfaz de grafeno. La relevancia radica en el hecho de que es posible excitar modos de superficie con polarización TE a partir de incrustar varias capas de grafeno sobre la interface.

3.3. CÁLCULO DE ESPECTROS DE REFLEXIÓN EN FUNCIÓN DEL ÁNGULO DE INCIDENCIA, NÚMERO DE CAPAS DE GRAFENO, PRISMA Y EL ANCHO DEL DIELECTRICO.

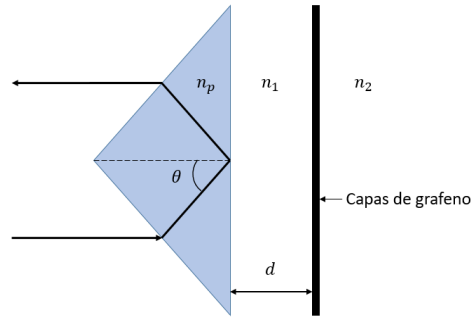


Figura 3.4: Técnica de reflexión total atenuada o ATR por sus sigla en inglés en configuración de Otto

Se inicia el análisis de los modos de superficie de naturaleza TE excitados por medio de ATR en una configuración de Otto partiendo de los resultados mostrados en [17]. Se reproducen las gráficas de los modos de superficie ahí mostrados con el fin de confirmar que los cálculos empleados en esta tesis son correctos. La reproducción de resultados se muestran en la siguiente figura.

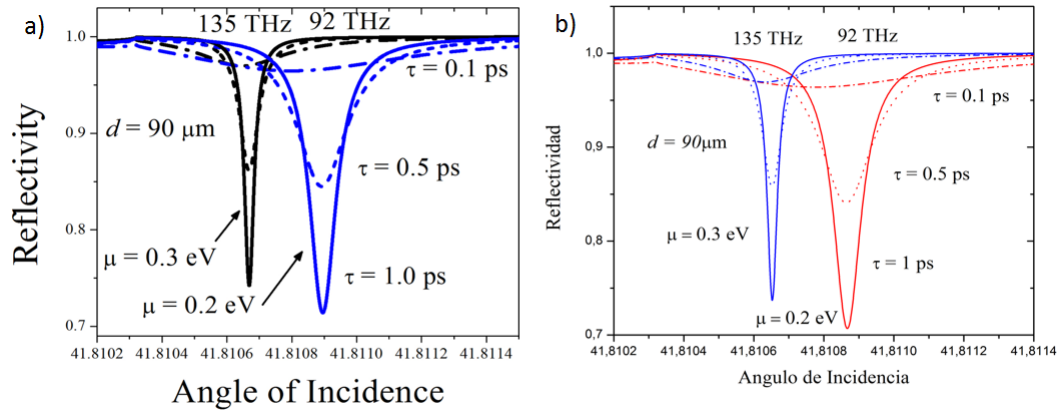


Figura 3.5: a) Modos de superficie para $\mu = 0,2$ y $0,3$ eV y $\tau = 0,1, 0,5$ y 1 ps reportados en [17] b) Reproducción de resultados usando los mismos parámetros de a) a partir de cálculos propios

Con el fin de observar la contribución del grafeno sobre los modos de superficie de naturaleza TE se grafican algunos resultados reportados en [17] pero variando el número de capas de grafeno sobre la interfaz haciendo el cálculo para dos y tres capas lo cual

duplica y triplica la conductividad. Se aprecia en la **Figura 3.6** que el aumento de la conductividad debido a la colocación de más de una capa de grafeno reduce la presencia de los modos al grado de casi desaparecerlos para el caso de tres capas, se observa también un desplazamiento de los mismos alejándose del ángulo crítico. Este efecto de reducción de los modos se presenta para distancias del orden de $90 \mu\text{m}$ entre el prisma y el grafeno en una configuración de Otto como la mostrada en la **Figura 3.4**.

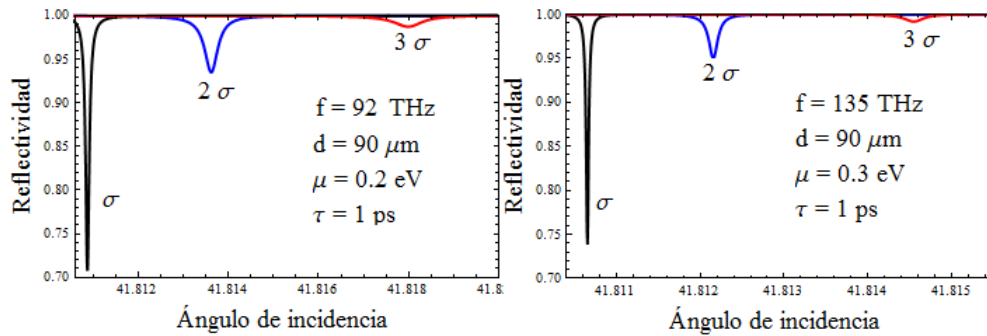


Figura 3.6: Efecto de la conductividad del grafeno sobre modos de superficie TE excitados mediante ATR en configuración de Otto

Como se mencionó al principio del capítulo se tiene como resultado relevante la excitación de modos de superficie de origen TE por medio de la presencia de más una capa de grafeno en una configuración de Otto para distancias de entre prisma-grafeno de 13 a $16 \mu\text{m}$. En la **Figura 3.7** se muestran tres casos en los cuales con una sola capa de grafeno no se detectaba ningún modo de superficie. En la misma figura se observa la aparición de estos modos para distinto número de capas, se toman valores de potencial químico de 0.2 y 0.3 eV y un rango de frecuencias ubicado en el mediano infrarrojo esto en concordancia con lo reportado en [17]. Es importante mencionar que el plasmón óptimo en cada caso se presenta para valores diferentes de la conductividad lo que muestra que no necesariamente con mayor número de capas se aumenta la presencia de los modos pues dependiendo de los parámetros usados en cada configuración puede incluso reducirla como se puede notar en los cálculos mostrados en la **Figura 3.6**. Hasta el momento no se ha determinado la cantidad óptima de capas de grafeno necesarias para obtener un plasmón más definido partiendo de parámetros determinados.

3.3. CÁLCULO DE ESPECTROS DE REFLEXIÓN EN FUNCIÓN DEL ÁNGULO DE INCIDENCIA, NÚMERO DE CAPAS DE GRAFENO, PRISMA Y EL ANCHO DEL DIELECTRICO.

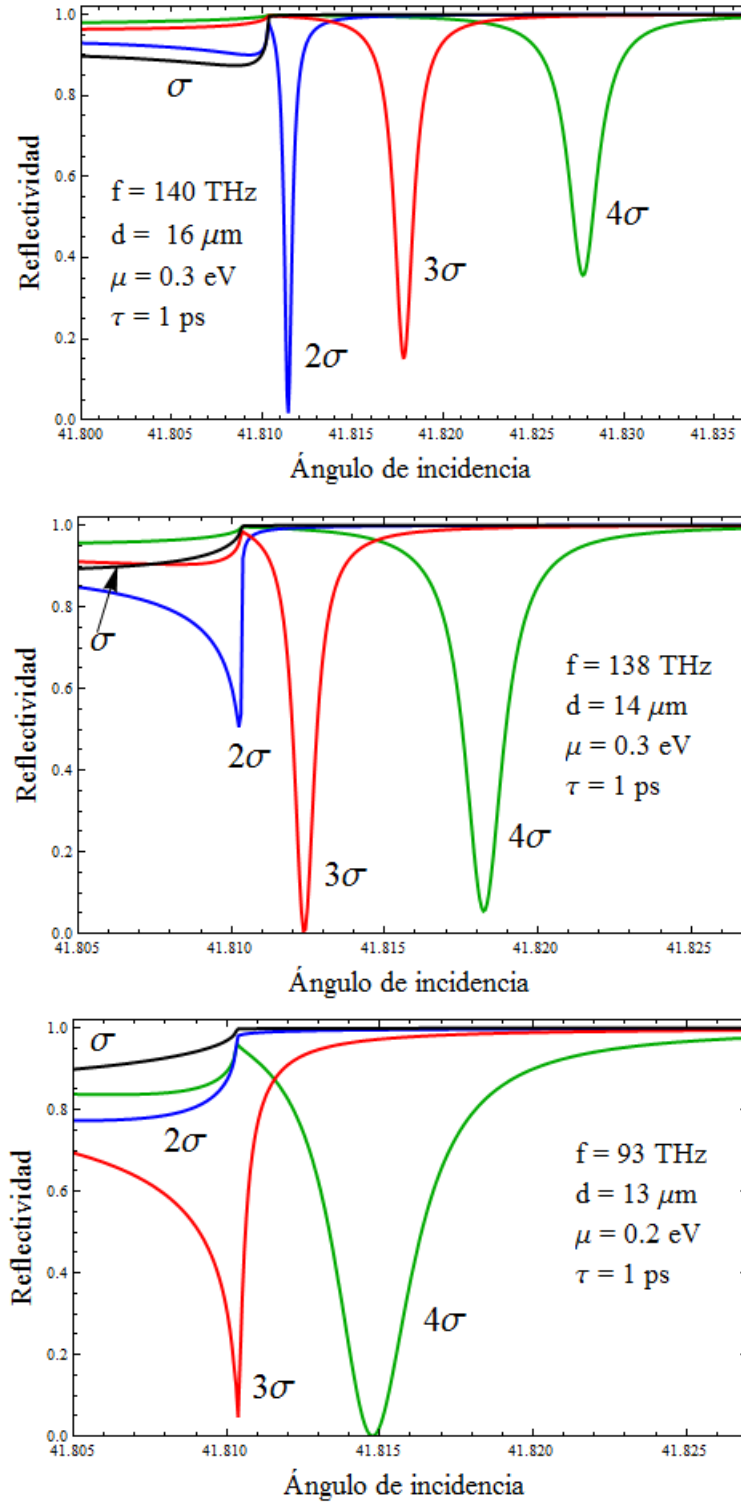


Figura 3.7: Efecto de la conductividad del grafeno sobre modos de superficie TE excitados mediante ATR

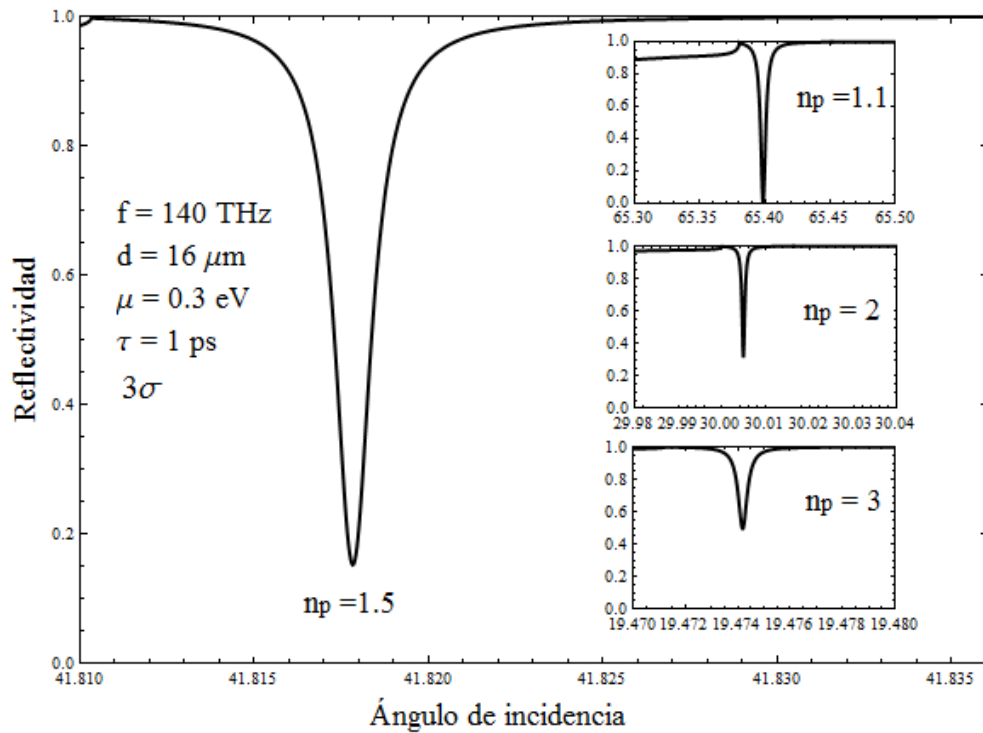


Figura 3.8: Efecto del índice de refracción del prisma sobre modos de superficie TE excitados mediante ATR

Como resultado final se muestra la influencia que tiene el valor del índice de refracción del prisma sobre los plasmones excitados. La primera consecuencia de variar el índice de refracción es el desplazamiento del ángulo en el que se detectaría el modo de superficie esto está directamente relacionado con el hecho de que el ángulo crítico o ángulo de reflexión total interna se calcula a partir de la ley de Snell con los índices de refracción del prisma y dieléctricos usados. Pero resulta aún más interesante el hecho de que se puede lograr un plasmón bien definido eligiendo el índice refracción adecuado como se aprecia en la **Figura 3.8** donde se usan distintos índices refracción mostrando que para valores mayores a 1.5 la presencia del plasmón disminuye mientras que para el valor de 1.1 se define completamente.

Capítulo 4

Conclusiones

- Es posible modificar la absorción de una monocapa de grafeno variando el valor del potencial químico en ella es decir modificando el número de portadores de carga sobre su superficie.
- La presencia de grafeno en las interfaces de un sistema multicapa propicia la aparición de un gap de naturaleza distinta a los gaps de Bragg generados por la periodicidad de la estructura.
- La presencia de más de dos capas de grafeno propicia la aparición de modos de superficie de origen TE para algunos sistemas en los que usando una monocapa de grafeno no se observan mínimos de naturaleza plasmónica.
- De manera similar, se puede observar que la contribución de la conductividad no es la misma para todas las configuraciones, depende del potencial químico y de la separación prisma-grafeno.
- Se puede observar que los modos de superficie TE desaparecen al emplear más de dos capas de grafeno tomando distancias de separación prisma-dieléctrico del orden de 90 micras, lo cual significa que no necesariamente estos modos son considerablemente extendidos.
- Se puede lograr una mejor definición de un modo de superficie eligiendo el índice de refracción adecuado para el prisma.

- Resultaría de suma importancia establecer una metodología analítica o numérica con la cual deducir los parámetros adecuados para obtener plasmones óptimos.

Bibliografía

- [1] D. Joannopoulos, Robert D. Meade, and Joshua N. Winn Photonic Crystals: molding the flow of light, Princeton University Press, 1995.
- [2] E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. 58, 2486 (1987)
- [3] Kinto-Ramírez, H., M. A. Palomino-Ovando and F. Ramos-Mendieta, Photonic Modes In Dispersive And Lossy Superlattices Containing Negative-Index Materials, Progress In Electromagnetics Research B, Vol. 35, 133-149, 2011.
- [4] K. Sakoda, Optical Properties of Photonic Crystals, 2^a. Ed, Springer (2005).
- [5] S. Ya. C. Aguilar-Galicia, M. Palomino-Ovando, F. Ramos-Mendieta, Optical Materials. 29, 1667-1671. (2007).
- [6] Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S. V., Grigorieva I. V. and Firsov A. A., Science 306, 666 ? 669 (2004).
- [7] Novoselov K. S., Jiang D., Schedin F., Booth T. J., Khotkevich V. V., Morozov S. V. and Geim A. K., Procl. Natl. Acad. Sci. USA 102, 10451 ? 10453 (2005).
- [8] Choon How Gan, Appl. Phys. Lett. 101, 111609 (2012)
- [9] Fundamentos de la teoría electromagnética / John R. Reitz, Frederick J. Milford ; versión en español de Susana Blumovicz Perelberg, revision de la traduccion Santiago Alonso. Pearson Educacion 1996
- [10] Pochi Yeh Optical waves in Layered Media, Wiley, (2005).
- [11] Graphene - Synthesis, Characterization, Properties and Applications Edited by Jian Ru Gong Published by InTech Janeza Trdine 9, 51000 Rijeka, Croatia

- [12] Graphene: Fundamentals and emergent applications By Jamie H. Warner, Franziska Schaffel, Mark Rummeli, Alicja Bachmatiuk
- [13] Graphene-Based Materials Science and Tecnology. Subbiah Alwarappan, Ashok Kumar
- [14] Ansari,R.,Motevalli,B.,Montazeri,A.,Ajori,S.,2011.Fracture analysis of monolayer graphene sheets with double vacancy defects via MD simulation. Solid State Commun. 151 (17), 1141?1146
- [15] Han, T., He, P., Zheng, B., Dependence of the Tensile Behavior of Single Graphene Sheet on Temperature and Strain Rate, 17th International Conference on Composites or Nano Engineering, ICCE-17 Honolulu, Hawaii, USA, July 26-August 1, 2009, Supplement 2009.
- [16] Graphene An Introduction to the Fundamentals and Industrial Applications. Madhuri Sharon and Maheshwar Sharon Walchand Centre of Research for Nanotechnology and Bionanotechnology, India.
- [17] Mid-infrared Otto excitation of transverse electric modes in doped graphene F.Ramos Mendieta, Journal of Applied Physics 117,133101(2015);doi:10.1063/1.4916721