



**Centro de Investigación y de Estudios  
Avanzados del  
Instituto Politécnico Nacional**

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**Efecto de la deformación uniforme en  
plasmones de superficie en grafeno**

**Tesis que presenta**

**Corina María de la Cruz Lemus Martínez**

para obtener el Grado de

Maestro en Ciencias

en la Especialidad de

Física

Director de tesis: **Dr. Gerardo González de la Cruz**

Ciudad de México

Febrero, 2023

## Agradecimientos

Agradezco enormemente a mi asesor de tesis, el Dr. Gerardo González de la Cruz por haberme aceptado como su estudiante, compartir conmigo sus amplios conocimientos académicos y motivarme a seguir en la academia.

También agradezco a mis sinodales, el Dr. Carlos Vázquez López y el Dr. Jaime Santoyo Salazar por participar en el proceso de revisión y corrección de la tesis.

Finalmente, agradezco a CONACYT por haberme otorgado la beca con CVU 1071061.

## Abstract

This paper reports a study of the reflectance of the optical sensors based on graphene under uniform strain. Assuming the graphene layer is surrounded by two different semi-infinite dielectric media, the generalized Fresnel coefficients are derived as a function of usual quantities (e.g., dielectric constants, incident angles and strain) and anisotropic optical conductivity. The strain not only changes the electronic band structure, but also can be employed to tune the electronic collective excitations (plasmons) and thus the optical reflectance of graphene monolayers. One of the most common techniques for plasmon excitation is the Kretschmann configuration. It is based on the observation of a sharp minimum in the reflection coefficient versus angle (or wavelength) curve. Because strain induces anisotropy in graphene optical conductivity the strain-dependent orientation plays an important role to manipulate the variation of graphene plasmon energy, which may be useful to synchronize graphene properties in plasmonic devices to enhance light-matter interactions.

## Resumen

Este artículo reporta un estudio de la reflectancia de los sensores ópticos basados en grafeno bajo tensión uniforme. Suponiendo que la capa de grafeno está rodeada por dos medios dieléctricos semi-infinitos diferentes, los coeficientes de Fresnel generalizados se derivan en función de parámetros físicos (p. ej., constantes dieléctricas, ángulos incidentes y deformación) y conductividad óptica anisotrópica. La tensión no solo cambia la estructura de la banda electrónica, sino que también se puede emplear para sintonizar las excitaciones colectivas electrónicas (plasmones) y, por lo tanto, la reflectancia óptica de las monocapas de grafeno. Una de las técnicas más comunes para la excitación de plasmones es la configuración de Kretschmann. Se basa en la observación de un mínimo pronunciado en la curva del coeficiente de reflexión en función del ángulo (o longitud de onda). Debido a que la tensión induce anisotropía en la conductividad óptica del grafeno, la orientación dependiente de la tensión juega un papel importante para manipular la variación de la energía del plasmón del grafeno, lo que puede ser útil para sincronizar las propiedades del grafeno en dispositivos plasmónicos para mejorar las interacciones luz-materia.

## Artículos aceptados y publicados

- Los resultados de este trabajo están aceptados en la revista “Plasmonics” y serán publicados bajo el mismo nombre “Efecto de la deformación uniforme plasmones de superficie en grafeno”. Al momento de entregar esta tesis el artículo aún no se ha publicado, sin embargo, el link de seguimiento se encuentra con la cita [1]
- Los resultados de este trabajo se presentaron en la modalidad de poster en el “XV-INTERNATIONAL CONFERENCE IN MATERIALS SURFACES AND VACUUM” cuyo libro corresponde a la referencia [2]

## Contenido

Agradecimientos.....	1
Abstract.....	2
Resumen.....	3
Artículos aceptados y publicados .....	4
Introducción .....	6
Capítulo 1.....	10
1.1 Configuración electrónica del grafeno.....	10
1.2 Estructura Cristalina.....	12
1.3 Modelo de amarre fuerte .....	14
1.4 Grafeno deformado uniformemente .....	17
Capítulo 2.....	20
2.1 Conductividad óptica.....	20
2.2 Conductividad óptica para grafeno prístino .....	21
2.3 Función de polarizabilidad .....	24
2.4 Plasmones superficiales.....	26
Capítulo 3.....	32
3.1 Matriz de transferencia .....	32
3.2 Coeficientes de Fresnel para la reflectancia .....	38
3.3 Resultados numéricos .....	42
Conclusiones.....	46
Bibliografía.....	47

## Introducción

El grafeno es una hibridación especial que proviene del carbono ( $sp^2$ ), en donde sus átomos se empaquetan en una estructura cristalina hexagonal en 2 dimensiones (monocapa) en forma de panal, que se puede ver como un plano atómico individual extraído del grafito.

Inicialmente, Landau demostró se había supuesto que el grafeno plano en sí mismo no existía en estado libre, siendo inestable desde el punto de vista termodinámico debido a su dimensionalidad. Esto es, no existen en la naturaleza sistemas cristalinos en 2 dimensiones. No fue hasta 2004 que Novoselov y Geim reportaron evidencias experimentales de la existencia estable de grafeno monocapa. Observaron también el efecto del campo eléctrico en estructuras de grafeno, un fenómeno que en metales es casi indetectable [3]. Estos hechos dieron inicio a intensas investigaciones en torno a al grafeno y sus propiedades.

Una peculiaridad importante que distingue al grafeno del resto de semiconductores es la existencia de puntos de alta simetría en la red recíproca llamados conos de Dirac caracterizados por una estructura de banda electrónica que se traduce como una relación de dispersión lineal de electrones y huecos cerca de los puntos de Dirac [4]. Por lo tanto, a bajas energías, los electrones y los huecos se comportan como fermiones bidimensionales de Dirac sin masa. Este comportamiento de los portadores de carga hace del grafeno un material bidimensional con propiedades ópticas y electrónicas diferentes de cualquier metal o semiconductor en la naturaleza, además todos los electrones (huecos) tienen una velocidad constante denominada velocidad de Fermi [5].

Algunas de las propiedades físicas del grafeno más importantes que valen la pena destacar, resaltan su alta movilidad de los portadores de carga (hasta  $2 \times 10^5 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  para grafeno suspendido) y su elevada velocidad de Fermi ( $v_F \approx 10^6 \text{ cm/s}$ ), así como su baja resistividad ( $10^{-8} \Omega \text{ m}$  a temperatura ambiente) [6]. En cuanto a las propiedades mecánicas, el grafeno presenta una resistencia

mecánica excepcional, 42 N/m, la cual corresponde con un módulo de Young de 1 TPa [6].

Dichas propiedades convierten al grafeno en un material prometedor para aplicaciones en diversos sectores tecnológicos como sensores químicos, dispositivos emisores de luz, energía, paneles táctiles, electrónica de alta frecuencia, aplicaciones biomédicas y plasmónica [7]. Este último es de gran importancia para este trabajo.

El estudio del grafeno como un material plasmónico se debe a su capacidad de excitar, propagar y confinar plasmones. Los plasmones polaritones de superficie (SPP) son ondas electromagnéticas polarizadas magnéticas transversales (TM) acopladas con oscilaciones de densidad de carga que viajan a lo largo de una interfaz metal-dieléctrica. Cuando el vector de onda de la luz incidente coincide con el vector de onda, el SPP se acopla resonantemente con la luz incidente y se puede realizar un notable aumento en la intensidad del campo eléctrico. De aquí que se produce el fenómeno de resonancia SPP. Por lo general, los plasmones de superficie se pueden excitar a través de ondas evanescentes en la configuración de Kretschmann utilizando prismas de alto índice de refracción. Una vez que el SPP se excita en la configuración de Kretschmann, parte de la energía asociada a la radiación electromagnética incidente se transferirá al SPP y se observará un mínimo pronunciado en la curva de reflectancia versus ángulo (o longitud de onda).

En años anteriores, se han diseñado diferentes arquitecturas de sensores plasmónicos que involucran metales [8], [9]. Sin embargo, el mayor obstáculo en el desarrollo de aplicaciones plasmónicas en dispositivos metálicos son procesos disipativos de la energía en el plasmón de superficie, que limita la longitud de propagación y además la superficie se oxida fácilmente degradando sus propiedades plasmónicas [10].

Para superar estas deficiencias, se han propuesto algunas estructuras para investigar resonancias de plasmones superficiales en nuevos materiales plasmónicos; entre ellos, el grafeno ha surgido como un material bidimensional único y alternativo capaz de extender el campo de la plasmónica para aplicaciones

ópticas en la región de los terahertz y en el infrarrojo medio [11], [12], [13]. Esto convierte al grafeno en un candidato prometedor para dispositivos plasmónicos y posibles aplicaciones en fotónica, optoelectrónica y tecnologías de sensores [14].

Cuando una capa de grafeno se somete a tensión mecánica, no rompe la simetría de la red, pero los puntos de alta simetría de la zona de Brillouin se modifican de tal manera que los conos de Dirac ubicados en el grafeno en los puntos K y K' se mueven en direcciones opuestas [15], [16]. Se ha demostrado que el grafeno monocapa puede tolerar deformaciones por estiramiento de hasta un 23% sin destruir sustancialmente su estructura cristalina, pero abre una brecha por encima de este umbral. Otros sólidos dejan de ser elásticos por encima del 3% [5].

Esta gran deformación elástica afecta sustancialmente la estructura de las bandas de energía del grafeno y, por lo tanto, sus propiedades térmicas, ópticas y otras propiedades plasmónicas [17].

En este trabajo, investigamos teóricamente la reflectancia óptica del grafeno de monocapa bajo tensión uniforme. Para ello, primero introducimos el modelo de amarre fuerte ("tight binding" en inglés) para grafeno deformado uniformemente, el cual contiene toda la información relevante sobre los electrones próximos a los conos de Dirac, que es en donde ocurre toda la física interesante de este material. Continuaremos calculando la conductividad óptica para grafeno con anisotropía usando el formalismo de Kubo y la teoría de respuesta lineal. Esta propiedad nos da la relación entre la densidad de corriente inducida en el material y la magnitud del campo eléctrico para frecuencias arbitrarias. Finalmente, con todas lo anterior procederemos a encontrar el coeficiente de Fresnel para la reflectancia.

Hemos encontrado resultados analíticos y numéricos que muestran el efecto de la deformación sobre las excitaciones de densidad de carga electrónica en el límite de onda larga al variar varios parámetros, como el ángulo de incidencia de la radiación electromagnética, la dirección de la deformación aplicada, las constantes dieléctricas y la frecuencia de las ondas SPP

Además, los plasmones a bajas frecuencias en sistemas anisotrópicos de Dirac han sido estudiados teóricamente, estos autores demostraron que la fuerte anisotropía puede usarse para guiar los modos de plasmones con nuevas propiedades en el campo de la plasmónica. Además, se han investigado plasmones en estructuras de fósforo negro de una y dos capas bajo tensión uniaxial, encontraron que la orientación dependiente de la tensión puede considerarse para controlar las variaciones de la energía del plasmón [18].

## Capítulo 1

En este capítulo estudiaremos las bandas de energía del grafeno usando el modelo de amarre fuerte, el cual nos da toda la información relevante sobre la energía de los electrones de Dirac, los cuales contribuyen en mayor parte a las propiedades más interesantes del grafeno. Para ello, en la sección 1.1 analizaremos la configuración electrónica del grafeno en su composición química. Luego, en la sección 1.2 hablaremos de la estructura cristalina para grafeno prístino, esto con el fin de introducir el modelo de amarre fuerte y su aproximación alrededor de los puntos de Dirac en la sección 1.3.

En la sección 1.4 se muestra el Hamiltoniano a bajas energías para grafeno bajo deformación uniaxial.

### 1.1 Configuración electrónica del grafeno

El carbono es el elemento fundamental en la química orgánica y la razón se debe a la alotropía que posee, es decir, puede tomar distintas estructuras cristalinas o amorfas [19]. Centrándonos solo en las estructuras cristalinas tenemos al diamante y al grafito y en sus formas más exóticas y novedosas se encuentran los fullerenos, los nanotubos de carbono y el grafeno. Siendo este último el tema de esta tesis.

Un átomo de carbono tiene 6 electrones con la configuración  $1s^2 2s^2 2p^2$ , esto implica que tiene 2 electrones por subcapa en el estado base, es decir, dos para la subcapa  $1s^2$ , dos en la subcapa  $2s^2$  y dos más para la subcapa  $2p^2$ , estos últimos distribuidos en los orbitales  $2p_x$  y  $2p_y$ . (Ver figura 1.1)

En la figura 1.2 se muestra el estado excitado del carbono. Uno de los electrones de la subcapa  $2s$  es promovido a la capa  $2p$  de forma que quedan cuatro electrones sin hibridar como, uno por orbital  $2s$   $2p_x$   $2p_y$   $2p_z$ .

Cuando los cuatro orbitales se unen (unión representada en la figura 1.1) forman enlaces  $\sigma$  con ángulos de  $109.5^\circ$ , se tiene la hibridación  $sp^3$  dando como resultado

Configuración electrónica del Carbono	1s	2s	2p <sub>x</sub>	2p <sub>y</sub>	2p <sub>z</sub>
Estado base	↑ ↓	↑ ↓	↑	↑	
Estado excitado	↑ ↓	↑	↑	↑	↑
Hibridación sp <sup>3</sup>	↑ ↓	↑ ↑ ↑ ↑			
Hibridación sp <sup>2</sup>	↑ ↓	↑ ↑ ↑			↑

Figura 1.1 Esquema de configuraciones posibles del carbono.

una estructura tetraédrica, el diamante es un ejemplo de esta estructura [20]. Ver figura 1.2 a.

Para el grafeno, como vemos de forma esquemática en la figura 1.1, tenemos la hibridación  $sp^2$  que ocurre cuando los tres orbitales  $2s^1 2p_x^1 2p_y^1$  se unen formando enlaces  $\sigma$  (*sigma*) y ángulos de  $120^\circ$ . La estructura del grafeno es demasiado fuerte debido a los enlaces  $\sigma$  (Ver figura 1.2 b). Por otro lado, el orbital restante  $2p_z$  forma los enlaces  $\pi$  (*pi*) que yacen perpendiculares al plano. El electrón en el orbital  $2p_z$  es el responsable de las propiedades eléctricas en el grafeno [21].

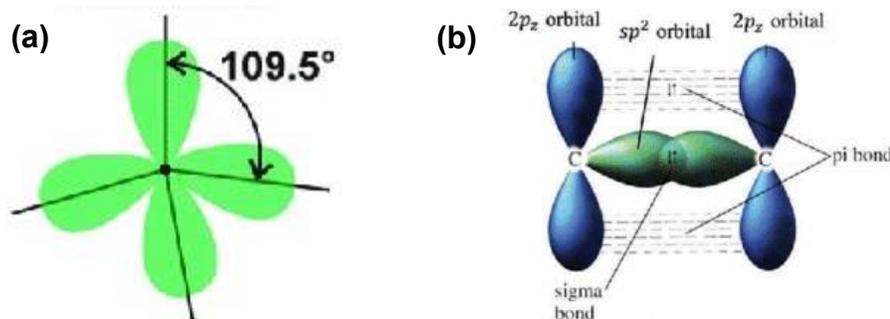


Figura 1.2 Hibridaciones posibles del carbono. a) Hibridación  $sp^3$ . b) Hibridación de grafeno  $sp^2$ . a) Adaptada de [49]. b) Adaptada de [50]

## 1.2 Estructura Cristalina

Debido al ángulo de  $120^\circ$  entre los enlaces  $\sigma$  de la configuración  $sp^2$  de los átomos de carbono la red del grafeno es una red hexagonal. De física de estado sólido sabemos que la red de panal (o hexagonal) no es una red de Bravais, por lo tanto, se usará una red de Bravais triangular con dos átomos por celda unitaria, llamados  $A$  y  $B$ , como se muestra en la figura 1.3 a (los círculos blancos corresponden a los átomos  $A$  y los puntos, a los átomos  $B$ ). Usando el sistema coordenado  $xy$  de tal forma que el eje  $x$  está en la dirección "zigzag" y el eje  $y$  en la dirección "armchair" (ver figura 1.4). Definiendo los vectores de la base, tenemos [6]

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 3), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 3) \quad (1.1)$$

con  $a = 1.42\text{\AA}$  como la distancia interatómica.

Cada átomo tipo  $A$ , está conectado a sus primeros vecinos por medio de los vectores [6]

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1), \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 1), \quad \boldsymbol{\delta}_3 = a(0, -1) \quad (1.2)$$

Los vectores de la red recíproca del grafeno se obtienen de la relación  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$  y son los siguientes [6]

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(\sqrt{3}, 1), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(-\sqrt{3}, 1) \quad (1.3)$$

Estos vectores definen la primera zona de Brillouin correspondiente. Un interés particular en la física del grafeno surge en las seis esquinas de la primera zona de Brillouin. Las coordenadas de dos de estos puntos en el espacio de momentos están dadas por [6]

$$\mathbf{K}_{\pm} = \left( \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right)$$

(1.4)

El resto de las esquinas resulta de combinaciones entre los vectores  $\mathbf{K}_+$  o  $\mathbf{K}_-$  más (o menos) un vector de la red recíproca.

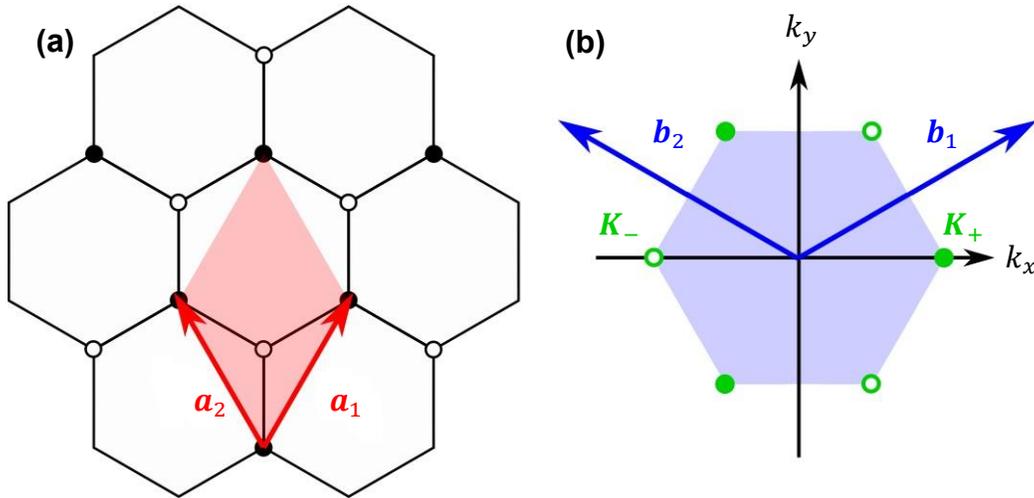


Figura 1.3 a) Red directa del grafeno, la celda unitaria contiene un átomo A (círculo blanco) y un átomo B (punto). Se muestran los vectores de la base (en rojo) b) Primera zona de Brillouin. Se muestran los vectores de la red recíproca (en azul) y los puntos  $\mathbf{K}_{\pm}$  (en verde). Adaptada de [51]

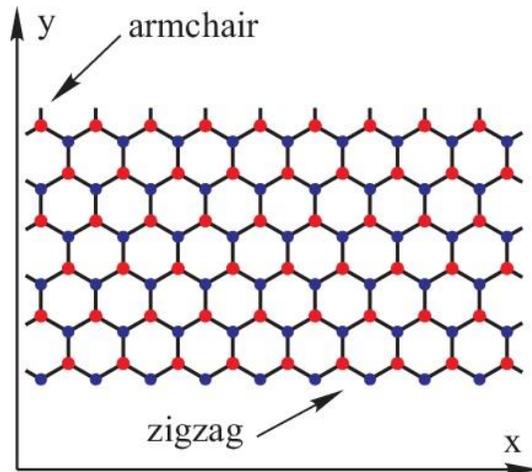


Figura 1.4 Direcciones “zigzag” y “armchair” del grafeno. Adaptada de [52]

### 1.3 Modelo de amarre fuerte

Ya hemos dicho en las dos secciones anteriores que las propiedades eléctricas del grafeno están completamente gobernadas por el electrón en el orbital  $2p_z$  del átomo de carbono, por ende, el salto de un electrón de un átomo a otros átomos vecinos está directamente relacionado con la energía cinética del electrón. A continuación, presentaremos un modelo de amarre fuerte sólo a primeros vecinos.

Considerando un átomo independiente, las funciones de onda para los orbitales atómicos son eigenvalores del Hamiltoniano atómico, sin embargo, en un cristal estas funciones tienen un traslape y dejan de ser eigenvalores del Hamiltoniano atómico. En este caso, la solución es conocida como funciones de Bloch,

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\mathbf{R}_j} \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j] |\Phi_{\mathbf{R}_j}\rangle \quad (1.5)$$

donde  $\mathbf{R}_j = m_j \mathbf{a}_1 + n_j \mathbf{a}_2$  son los vectores de la red de Bravais y el estado vector  $|\Phi_{\mathbf{R}_j}\rangle$  es tal que  $\langle \Phi_{\mathbf{R}_j} | \mathbf{r} \rangle = \Phi^{(a)}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  son las funciones de onda de los orbitales de un átomo en el sitio  $\mathbf{R}_i$ .

En grafeno, una celda unitaria contribuye con dos átomos; uno tipo  $A$  y uno tipo  $B$ , entonces la función de onda debe modificarse.

Con la corrección mencionada, la solución para dos electrones es [22], [6]:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{R}_j} \left\{ e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \psi_A(\mathbf{k}) |A_{\mathbf{R}_j}\rangle + e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j + \delta_3)} \psi_B(\mathbf{k}) |B_{\mathbf{R}_j + \delta_3}\rangle \right\}, \quad (1.6)$$

donde  $\psi_A(\mathbf{k})$  y  $\psi_B(\mathbf{k})$  son funciones complejas dependientes de  $\mathbf{k}$ , el vector de onda del electrón. Los estados  $|A_{\mathbf{R}_j}\rangle$ ,  $|B_{\mathbf{R}_j + \delta_3}\rangle$  son tal que  $\langle A_{\mathbf{R}_j} | \mathbf{r} \rangle = p_z(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ ,  $\langle B_{\mathbf{R}_j + \delta_3} | \mathbf{r} \rangle = p_z(\mathbf{r} - (\mathbf{R}_j + \delta_3))$  son las funciones de onda de los orbitales  $p_z$  de los

átomos de carbono en los sitios  $\mathbf{R}_i$  y  $\mathbf{R}_i + \boldsymbol{\delta}_3$ , respectivamente.  $N_c$  es el numero de celdas unitarias, el cual es un requerimiento para que la función de onda este normalizada.

Por otro lado, la ecuación de Schödinger para grafeno prístino [6]

$$\begin{pmatrix} 0 & -t \sum_{n=1}^3 e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_n} \\ -t \sum_{n=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_n} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A(\mathbf{k}) \\ \psi_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A(\mathbf{k}) \\ \psi_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (1.7)$$

donde  $t$  es la integral de salto (representa la probabilidad de salto de un electrón de un átomo A a uno de sus 3 átomos vecinos) cuyo valor obtenido mediante cálculos teóricos es 2.7 eV [23]

De (1.7) resultan las energías dadas por [6]

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_x a) + 4 \cos(\sqrt{3}k_x a/2) \cos(\sqrt{3}k_y a/2)}, \quad (1.8)$$

Las bandas de valencia ( $E_-$ ) y conducción ( $E_+$ ) energía se muestran en la figura 1.4. Las bandas de valencia y conducción se tocan en los seis puntos de la zona de Brillouin (figura 1.4 a), en estos puntos la ecuación (1.8) es igual a cero. Al hacer un acercamiento cerca de estos puntos vemos que las bandas son cónicas, es decir, a bajas energías la energía de dispersión es lineal, lo cual se asemeja a los fotones (Ver figura 1.4 b). Por esta razón, los electrones en grafeno son frecuentemente llamados electrones de Dirac sin masa y a los puntos  $\mathbf{K}_+$  y  $\mathbf{K}_-$ , puntos de Dirac.

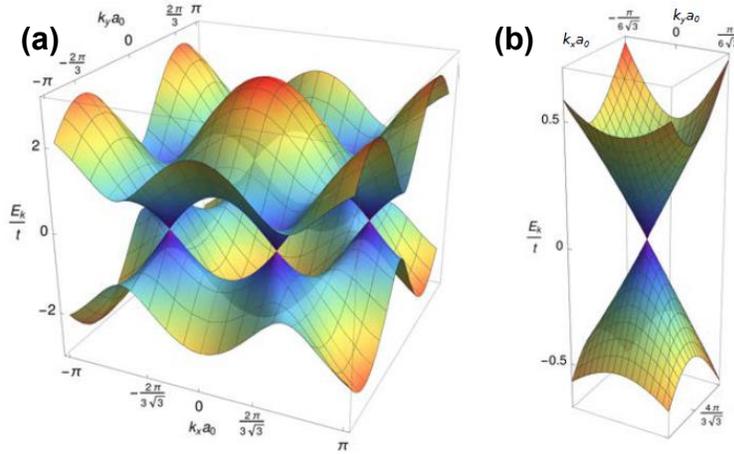


Figura 1.4. a) Bandas de conducción  $E_+$  y de valencia  $E_-$  b) Puntos de Dirac. Adaptada de [31].

Desarrollando a primer orden la relación de dispersión (1.8) alrededor de alguna de las esquinas de la primera zona de Brillouin, usando la sustitución  $\mathbf{k} = \mathbf{K}_{\pm} + \mathbf{q}$  donde  $\mathbf{q}$  es el momento medido respecto a los puntos de Dirac y debe cumplir  $|\mathbf{q}|/|\mathbf{K}_{\pm}| \ll 1$ . De esta forma se obtiene [6]:

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{q}| \tag{1.9}$$

Donde  $\hbar = h/2\pi$  es la constante de Planck reducida y  $v_F$  es la velocidad de Fermi. Dicha relación que coincide con lo esperado.

El hamiltoniano efectivo de Dirac (a bajas energías), correspondiente a la ec. (1.9), se debe calcular alrededor de los puntos  $\mathbf{K}_{\pm}$ . Llevando a cabo ese procedimiento para el punto  $\mathbf{K}_+$  se obtiene [6], [15]

$$H = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F (\sigma_x q_x + \sigma_y q_y) \tag{1.10}$$

donde  $\{\sigma_x, \sigma_y\}$  son las matrices de Pauli definidas como

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

$v_F = 3ta/2\hbar$  es la velocidad de Fermi ( $c$  es la velocidad de la luz en el vacío). El Hamiltoniano de la ecuación (1.10) asemeja el Hamiltoniano de Dirac para fermiones sin masa. En este caso, el análogo a la velocidad de la luz es la velocidad de Fermi,  $v_F$ .

## 1.4 Grafeno deformado uniformemente

La anisotropía de un material es una propiedad según la cual algunas características como la conductividad varían dependiendo la dirección en la que son examinadas. Una forma de inducir anisotropía sobre una red de grafeno es deformando uniformemente el plano del grafeno en alguna dirección. La deformación uniaxial está caracterizada por el tensor de deformaciones dado por [6]

$$\bar{\epsilon} = \epsilon \begin{pmatrix} \cos^2\theta - \nu\sin^2\theta & (1 + \nu)\cos\theta\sin\theta \\ (1 + \nu)\cos\theta\sin\theta & \sin^2\theta - \nu\cos^2\theta \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

donde  $\theta$  es el ángulo de deformación. Ver figura 1.5. El coeficiente de Poisson  $\nu$  del grafeno es muy pequeño,  $\nu \sim 0.1$ ,  $\epsilon$  es la magnitud de la deformación.

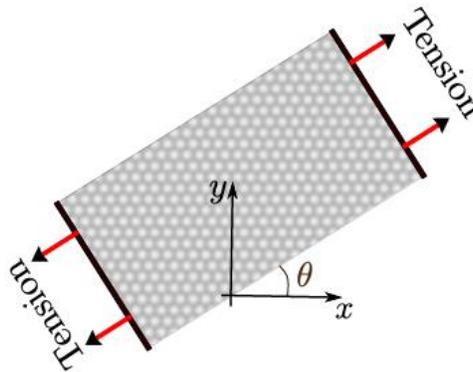


Figura 1.5. Deformación uniforme en grafeno con ángulo de deformación  $\theta$

Los vectores a primeros se transforman a través de [24]

$$\boldsymbol{\delta}'_n = (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \boldsymbol{\delta}_n \quad (1.12)$$

Puesto que la distancia entre átomos vecinos  $|\boldsymbol{\delta}'_n|$  sufrió un cambio con respecto al caso del grafeno no deformado, las integrales de salto pueden ser escritas en función de dicha distancia. Una manera común de hacerlo es mediante un decaimiento exponencial y se encuentra en la referencia [25], [24].

$$t_n = t \exp[-\beta(|\boldsymbol{\delta}'_n|/a - 1)] \quad (1.13)$$

Donde  $\beta = 3.37$  que está relacionada con la tasa de decaimiento, tal valor proviene de resultados experimentales [25]. Como prueba de la consistencia de (1.13) consideremos la distancia entre segundos vecinos  $|\mathbf{a}_i| = \sqrt{3}a$ , entonces

$$t \exp[-\beta(|\mathbf{a}_i|/a - 1)] = 0.23 \text{ eV}$$

Lo que concuerda con las estimaciones existentes para esta integral de salto [23].

Por otro lado, el Hamiltoniano de amarre fuerte a primeros vecinos, queda como [24]

$$H = - \sum_{n=1}^3 t_n \begin{pmatrix} 0 & e^{-ik \cdot (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \boldsymbol{\delta}_n} \\ e^{ik \cdot (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \boldsymbol{\delta}_n} & 0 \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

Debido a la anisotropía del sistema, los puntos de Dirac sufren un corrimiento, de forma que para encontrar el Hamiltoniano efectivo es necesario primero encontrar las nuevas posiciones de los puntos de Dirac y luego hacer el desarrollo de (1.14) alrededor de estos puntos. Tal procedimiento se lleva a cabo en la referencia [24]. Después de llevar a cabo el procedimiento mencionado el hamiltoniano efectivo para grafeno deformado uniformemente resulta ser [24]

$$H = \hbar v_f \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}} - \beta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \mathbf{q}$$

(1.15)

## Capítulo 2

Siendo el objetivo de esta tesis estudiar ciertas propiedades ópticas para grafeno deformado, todo lo que necesitamos para lograrlo se engloba dentro de la conductividad óptica pues esta es el puente entre la descripción microscópica (modelo de amarre fuerte) y la interacción con radiación electromagnética externa. De aquí que la finalidad de las secciones 2.1 y 2.2 sea derivar la conductividad óptica para el grafeno deformado.

En la sección 2.3 vamos a definir la función de polarizabilidad  $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$  para cuantificar la respuesta de un material a un campo que varía espacial y temporalmente. Esta función quedara escrita en términos de la conductividad óptica  $\sigma(\mathbf{q}, \omega)$ . De aquí que el conocer  $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$ , deriva en describir la respuesta de una muestra de grafeno en presencia de un campo externo. La relación entre la permitividad eléctrica  $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$  del grafeno y la función de polarizabilidad de la superficie  $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$  del grafeno se obtiene al final de esta sección.

Por otro lado, en la sección 2.4 introduciremos de forma simple el concepto plasmón polaritón de superficie (SPP). En pocas palabras los plasmones polaritones de superficie (SPP) son ondas electromagnéticas polarizadas magnéticas transversales (TM) acopladas con oscilaciones de densidad de carga que viajan a lo largo de la una interfaz metal-dieléctrica, o bien dieléctrico-grafeno-dieléctrico. En esta sección, también deduciremos la ecuación que describe la interacción entre los SPP en grafeno con deformación uniaxial y la radiación electromagnética.

### 2.1 Conductividad óptica

Estamos interesados en estudiar la respuesta del grafeno deformado bajo la perturbación externa dada por una onda electromagnética de frecuencia  $\omega$ . En teoría de respuesta lineal se asume que el sistema exhibe un comportamiento lineal

frente a dicha perturbación. Partiendo de lo anterior, el tensor de conductividad óptica puede ser escrito usando la fórmula de Kubo como [26], [27].

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{i}{\hbar} \iint \text{Tr}\{j_i \delta(H - E') j_j \delta(H - E)\} \frac{1}{E - E' + \omega - i\alpha} \frac{f(E) - f(E')}{E - E'} dE dE' \quad (2.1)$$

Donde  $f(E) = 1/[1 + \exp(E/k_B T)]$  es la función de Fermi a temperatura  $T$  y  $k_B$  la constante de Boltzmann [28]

$$j_l = -ie[H, r_l] \quad (2.2)$$

es el operador de corriente en la dirección  $l = x, y$  y  $e$  es la carga del electrón.

Para el caso de deformaciones uniformes, la conductividad óptica para grafeno deformado queda como [28],

$$\bar{\sigma}(\omega) \approx \sigma_0(\omega)(\bar{\mathbf{I}} + 2\tilde{\beta}\tilde{\epsilon} - \text{Tr}\{\tilde{\beta}\tilde{\epsilon}\}\bar{\mathbf{I}}) \quad (2.3)$$

donde  $\sigma_0(\omega)$  es la conductividad para el grafeno prístino dada por

$$\sigma_0(\omega) = \iint \text{Tr}\{j_x^* \delta(H - E') j_x \delta(H - E)\} \frac{1}{E - E' + \omega - i\alpha} \frac{f(E) - f(E')}{E - E'} dE dE' \quad (2.4)$$

## 2.2 Conductividad óptica para grafeno prístino

En el cálculo de la ecuación (3.12) se dedujo el tensor de conductividad  $\bar{\sigma}(\omega)$  en términos de  $\sigma_0(\omega)$ , la conductividad óptica del grafeno prístino. Como se ha hecho en la literatura [29], [30], [31].  $\sigma_0(\omega)$  se caracteriza mejor si se separa en dos contribuciones distintas; intrabanda e interbanda.

$$\sigma_0(\omega) = \sigma_{intra} + \sigma_{inter}$$

Con

$$\sigma_{intra} = \frac{2ie^2k_B T}{\pi\hbar^2(\omega + i\Gamma)} \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{E_F}{2k_B T} \right) \right]$$

$$\sigma_{inter} = \frac{e^2}{4\hbar} \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} + \arctan \left( \frac{\hbar\omega - E_F}{2k_{BT}} \right) - \frac{i}{2\pi} \ln \frac{(\hbar\omega + E_F)^2}{(\hbar\omega - E_f)^2 + (2k_{BT})^2} \right]$$

Donde  $E_F$  es la energía de Fermi y  $\Gamma$  es la constante de relajación del modelo Drude [32].

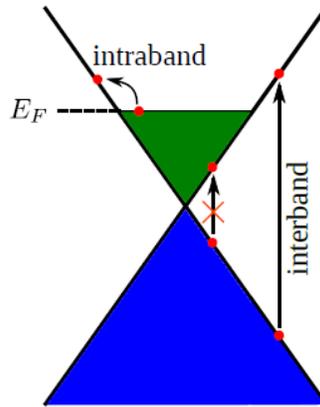


Figura 2.1 Representación esquemática de las transiciones interbanda e intrabanda para grafeno dopado. Adaptada de [31].

Estos últimos términos describen las transiciones entre los niveles de energía de los portadores de carga que pueden existir en el grafeno.

Como se muestra en la figura 2.1, para el grafeno dopado, el nivel de energía de Fermi está lejos del punto de Dirac y por el principio de exclusión de Pauli se permiten ambas transiciones: intrabanda (dentro de la misma banda) e interbanda (entre distintas bandas) [29].

- Contribución intrabanda:

La parte real de este término (cero para  $\Gamma = 0$ ) contribuye a la absorción o disipación de energía debido a los electrones. Si  $E_F \gg k_B T$ , los portadores están degenerados y el material actúa como un metal. En este caso, la

contribución intrabanda se reduce a la conductividad del modelo de Drude [30].

$$\sigma_{intra}(\omega) = \frac{ie^2 E_F}{\pi \hbar^2 (\omega + i\Gamma)} \quad (2.5)$$

Se puede observar que  $Re \sigma_{intra} \geq 0$  y  $Im \sigma_{intra} > 0$ . Por tanto,  $\sigma_{intra}$  corresponde a una impedancia superficial  $Z$  (la inversa de la conductividad), con  $Im Z < 0$ , es decir, una impedancia superficial inductiva. Dependiendo del signo de la parte imaginaria de la conductividad, será el tipo de oscilaciones que una lámina de grafeno podrá dispersar [30]. La contribución intrabanda está relacionada con la dispersión de ondas TM (Transversal magnética), las cuales se detallan en la sección 2.4.

- Contribución interbanda

En la literatura se puede encontrar la aproximación [33], [34] y [35].

$$\sigma_{inter}(\omega) = \frac{e^2}{4\hbar} \left[ \theta(\hbar\omega - 2E_F) + \frac{i}{\pi} \ln \left| \frac{\hbar(\omega + i\Gamma) - 2E_F}{\hbar(\omega + i\Gamma) + 2E_F} \right| \right] \quad (2.6)$$

donde  $\theta(\hbar\omega - 2E_F)$  es la función escalón. Esta expresión muestra que para  $\Gamma = 0$ ,  $Re \sigma_{inter} = 0$  e  $Im \sigma_{inter} < 0$ , es decir, la contribución interbanda es puramente imaginaria y negativa. Por tanto, en estas condiciones,  $\sigma_{inter}$  corresponde a una impedancia superficial  $Z$  con  $Im Z > 0$ , es decir, una impedancia superficial capacitiva. La contribución interbanda está relacionada con la dispersión de ondas TE (Tranversal eléctrica).

Acorde con los datos experimentales [34], [35]. El modelo de Kubo predice, por un lado, que las contribuciones interbanda son dominantes en el rango de frecuencias correspondiente al infrarrojo cercano y a la radiación visible. Por otro lado, en el rango de frecuencias correspondiente a los THz y al lejano infrarrojo las contribuciones intrabanda son dominantes. Este último rango de frecuencias es al que nos restringiremos en este trabajo.

## 2.3 Función de polarizabilidad

En vista de que los campos ópticos son campos que varían sinusoidalmente con el tiempo es conveniente utilizar campos complejos. Definimos el campo eléctrico complejo dependiente del espacio y el tiempo,  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ , a través de su relación con el campo eléctrico real,  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, t)$  donde  $\mathbf{E}^*(\mathbf{r}, t)$  es el complejo conjugado. En esta convención  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  varía con el tiempo como  $e^{-i\omega t}$ , donde  $\omega$  tiene un valor positivo, mientras que  $\mathbf{E}^*(\mathbf{r}, t)$  varía con el tiempo como  $e^{i\omega t}$ .

Cantidades de campo escalar complejas como la densidad de carga compleja  $\rho(\mathbf{r}, t)$  y el potencial escalar complejo  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  también se definen de manera similar:  $\rho(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) + \rho^*(\mathbf{r}, t)$  y  $\varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t) + \varphi^*(\mathbf{r}, t)$ , donde  $\rho(\mathbf{r}, t)$  es la densidad de carga real y  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  es el potencial escalar real.

Debido a la variación espacial del campo eléctrico externo  $\mathbf{E}_{ext}(\mathbf{r}, t)$ , los portadores libres en el grafeno originalmente homogéneo se redistribuyen, creando una densidad de carga inducida  $\rho_{ind}(\mathbf{r}, t)$  y un campo eléctrico inducido  $\mathbf{E}_{ind}(\mathbf{r}, t)$  en respuesta al campo externo.

El potencial escalar complejo está relacionado con el campo eléctrico complejo total  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{ext}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}_{ind}(\mathbf{r}, t)$  (definidos anteriormente) por [32]

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla\varphi(\mathbf{r}, t) \tag{2.7}$$

Tomando la transformada de Fourier de (2.7) se tiene [32]

$$\mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega) = -i\mathbf{q}\varphi(\mathbf{q}, \omega) \tag{2.8}$$

Para la densidad de carga inducida  $\rho_{ind}(\mathbf{r}, t)$  y la corriente inducida  $\mathbf{J}_{ind}(\mathbf{r}, t)$  tenemos la ecuación de continuidad en el espacio de Fourier [32]

$$-i\omega t\rho_{ind}(\mathbf{q}, \omega) + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{J}_{ind}(\mathbf{q}, \omega) = 0 \tag{2.9}$$

Por otro lado

$$\mathbf{J}_{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{q}, \omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega) = -i\bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{q}, \omega) \cdot \mathbf{q}\varphi(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.10)$$

En la última relación se usó (2.8).  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{q}, \omega)$  es el tensor de conductividad eléctrica para grafeno deformado uniformemente dado por la ecuación (2.3). Sustituyendo (2.10) en (2.9), se encuentra que

$$\rho_{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{i\omega} \mathbf{q} \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{q}, \omega) \cdot \mathbf{q}\varphi(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.11)$$

Es posible medir la respuesta del material ante una perturbación externa mediante la relación de la densidad electrónica inducida  $n_{ind}(\mathbf{q}, \omega) = \rho_{ind}(\mathbf{q}, \omega)/(-e)$  entre la energía potencial eléctrica total  $V(\mathbf{q}, \omega) = -e\varphi(\mathbf{q}, \omega)$ . Esta relación se define como la función de respuesta  $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$ , igualmente es llamada “polarizabilidad” debido a que también determina la tendencia de las cargas en el material a ser polarizadas por un campo eléctrico. Entonces, tenemos

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{n_{ind}(\mathbf{q}, \omega)}{V(\mathbf{q}, \omega)} = \frac{\rho_{ind}(\mathbf{q}, \omega)}{e^2\varphi(\mathbf{q}, \omega)} \quad (2.12)$$

Usando la ecuación (2.11)

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{i\omega e^2} \mathbf{q} \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{q}, \omega) \cdot \mathbf{q} \quad (2.13)$$

Aquí  $\mathbf{q}$  es un vector en dos dimensiones  $\mathbf{q} = q(\cos \phi, \sin \phi)$ , donde  $\phi$  es el ángulo de propagación de la onda SP.

Sustituyendo la ecuación (2.3) en (2.13), tenemos

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\sigma_0(\omega)}{i\omega e^2} \mathbf{q} \cdot (\bar{\mathbf{I}} + 2\tilde{\beta}\tilde{\epsilon} - \text{Tr}\{\tilde{\beta}\tilde{\epsilon}\}\bar{\mathbf{I}}) \cdot \mathbf{q} \quad (2.14)$$

Con  $\bar{\epsilon}$ , el tensor de deformaciones, dado por la ec. (1.11)

De (2.14) y (1.11) se sigue que

$$\begin{aligned} & \Pi(\mathbf{q}, \omega) \\ = & \frac{\sigma_0(\omega)q^2}{i\omega e^2} (\cos \phi, \sin \phi) \begin{pmatrix} 1 + \tilde{\beta}\epsilon(1 + \nu) \cos 2\theta & \tilde{\beta}\epsilon(1 + \nu) \sin 2\theta \\ \tilde{\beta}\epsilon(1 + \nu) \sin 2\theta & 1 - \tilde{\beta}\epsilon(1 + \nu) \cos 2\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.15)$$

De donde se obtiene la polarizabilidad para grafeno deformado

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\sigma_0(\omega)q^2}{i\omega e^2} [1 - \tilde{\beta}\epsilon(1 + \nu) \cos(2\theta - 2\phi)] \quad (2.16)$$

se puede observar, el grafeno deformado presenta una respuesta óptica anisotrópica y, como consecuencia, la polarizabilidad de los electrones del grafeno que no interactúa depende del módulo de deformación y la dirección de la deformación uniforme aplicada.

## 2.4 Plasmones superficiales

Considere un metal cuyos electrones de conducción se mueven libremente. En equilibrio, la carga electrónica negativa está equilibrada por la carga positiva de los átomos de metal ionizados. Si este equilibrio se aumenta de alguna manera, perturbando la densidad de electrones en una región del espacio, R (dejándola cargada negativamente), los electrones serían posteriormente expulsados de esa región por repulsión mutua. El estado de equilibrio no se restablecería de forma

inmediata ya que los electrones seguirían alejándose de R debido a su inercia. Por lo tanto, después de algún intervalo de tiempo, R se cargaría positivamente. Entonces, los electrones serían atraídos por esta carga positiva, deteniendo su movimiento e induciendo un movimiento hacia R, rebasando nuevamente la posición de equilibrio, R volvería a ser negativo y todo el ciclo se repetiría hasta que la energía asociada con la perturbación se pierda a través algún proceso disipativo [36].

Las oscilaciones de carga descritas anteriormente se conocen como plasmones y tienen una frecuencia característica  $\omega_p$  que depende de la masa, densidad y carga de los portadores, conocida como la frecuencia de plasma. En modelos simples  $\omega_p$  está dada por

$$\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{m}} \tag{2.17}$$

Donde  $n$  es la densidad de electrones y  $m$  la masa de los electrones.

Estas oscilaciones colectivas de los portadores de carga libres pueden existir ya sea en la superficie o en el volumen de un conductor. Las oscilaciones superficiales de plasma se denominan “plasmones superficiales (SP, por sus siglas en inglés)” y se dan en la interfaz entre un conductor y un dieléctrico, la frecuencia característica está dada por

$$\omega_{sp} = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}} \tag{2.18}$$

El movimiento de carga en la interfaz de un dieléctrico con un metal (plasmón superficial) siempre crea campos electromagnéticos en el dieléctrico (así como dentro del metal). Para cierto rango de frecuencias puede darse un acoplamiento entre el SP y el campo electromagnético asociado. A esta excitación se le denomina “plasmón polaritón de superficie (SPP, por sus siglas en inglés)”. Los SPP se pueden

excitar haciendo incidir un campo electromagnético polarizado, en el cual el campo magnético es transversal a la superficie (transversal magnético, TM).

Un modelo más complejo de los modos SPP se puede seguir en la referencia [37], [38]. De donde se encuentra la relación de dispersión para los plasmones dada por

$$\frac{qc}{\omega_p} = \frac{\omega}{\omega_p} \sqrt{\frac{\epsilon_d[1 - (\omega/\omega_p)^2]}{1 + \epsilon_d - (\omega/\omega_p)^2}} \quad (2.19)$$

donde  $\epsilon_d$  es la constante dieléctrica del dieléctrico y  $q$  es el vector de onda del SPP en la superficie. Está relación se grafica en la figura 2.3, junto con la relación de dispersión para la luz,  $\omega = ck$ , la frecuencia de plasmon de superficie,  $\omega_{sp}$ , y la frecuencia de plasmon,  $\omega_p$ . Note que para  $q$  pequeña, el SPP se tiende a comportar como un fotón, mientras que para  $q$  grande,  $\omega \sim \omega_p$ , esto es, el comportamiento es como el de un plasmon superficial, en donde se va perdiendo el acoplamiento con la radiación. El acoplamiento más fuerte ocurre en el punto más cercano entre el

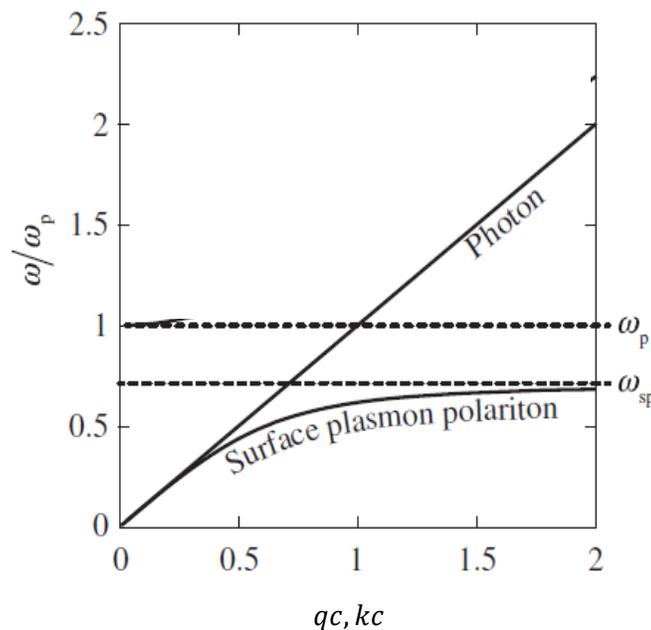


Figura 2.2 Relación de dispersión para SPP en metales (curva con el nombre “Surface plasmon polariton”). La recta “Photon” corresponde a la dispersión  $\omega = ck$ .  $\omega_p$  es la frecuencia de plasma y  $\omega_{sp}$  la frecuencia de los SP. Adaptada de [32]

cruce de la recta asociada al fotón y la línea horizontal para el SP,  $\omega_{SP}$ . Para SPP en metales,  $\omega_{SP} \sim 10^{16}$  (ultravioleta).

Es posible inducir oscilaciones de la densidad de carga de los electrones en grafeno monocapa haciendo incidir radiación electromagnética *TM* para excitar los modos SPP, en este caso la lámina de grafeno monocapa se dispone entre dos dieléctricos caracterizados por permitividades  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$ , como se muestra en la figura 2.3. Los SPP se encuentran igualando la función dieléctrica con cero, es decir, al hacer esto, se obtiene la relación de dispersión de los plasmones tal como se desarrolla en la referencia [32] en donde se obtiene la siguiente relación de dispersión para SPP en una lámina de grafeno

$$q = \frac{\pi \hbar^2 \omega^2}{e^2 E_F} (\epsilon_1 + \epsilon_2) \tag{2.20}$$

La grafica de esta relación se encuentra en la figura 2.4 (Notar la escala usada). Se puede notar que, de forma semejante al caso de SPP en metales, el punto de acoplamiento más fuerte se encuentra en la intersección entre la gráfica para fotones y la función para SPP, el cual se encuentra en la región de los terahertz.



Figura 2.3 Configuración dieléctrico-grafeno-dieléctrico.  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$  corresponden a las constantes dieléctricas del medio 1 y del medio 2, respectivamente.

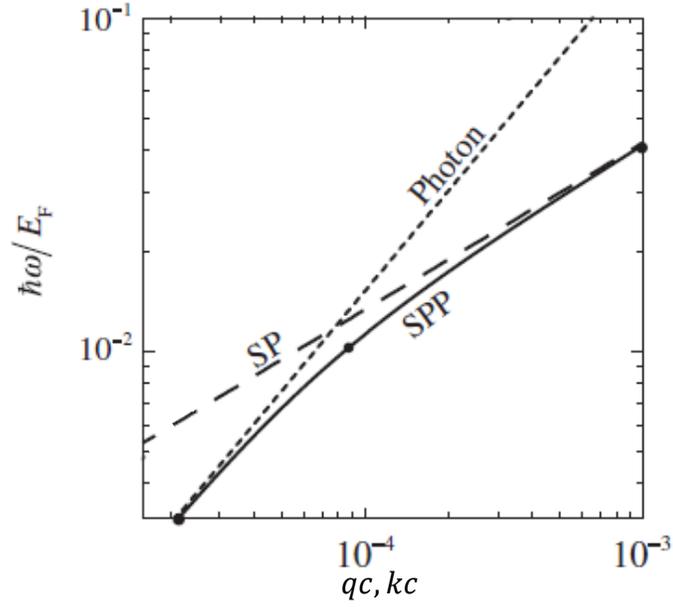


Figura 2.4 Relación de dispersión para SPP en grafeno (curva con el nombre “SPP”). La recta “Photon” corresponde a la dispersión  $\omega = ck$ . Adaptada de [32]

En el caso de grafeno bajo deformación uniforme la relación de dispersión dependerá de los parámetros del grafeno y la deformación aplicada.

Dentro del marco de teoría de respuesta lineal, la función dieléctrica está dada por [32]

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{2\pi e^2}{\varepsilon_{ave} q} \Pi(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.21)$$

donde  $\varepsilon_{ave} = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2$ . Usando (2.16), tenemos

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{2\pi}{\varepsilon_{ave}} \frac{q}{i\omega} [1 + \tilde{\beta}\varepsilon(1 + \nu) \cos(2\theta - 2\phi)] \sigma_0(\omega) \quad (2.22)$$

Debido a que trabajaremos en el rango de frecuencias correspondiente a los THz, la contribución interbanda a la conductividad óptica es despreciable, de forma que

$$\sigma_0(\omega) = \sigma_{intra}(\omega) = \frac{ie^2 E_F}{\pi \hbar^2 (\omega + i\Gamma)} \quad (2.23)$$

Nos interesa tener una idea simple de la dependencia de la relación de dispersión respecto a la anisotropía. De forma que a modo de ilustración tomaremos el caso más sencillo, donde  $\Gamma = 0$ . De esta manera, tenemos

$$\sigma_0(\omega) = \frac{ie^2 E_F}{\pi \hbar^2 \omega} \quad (2.24)$$

Sustituyendo en (65)

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{2e^2 E_F}{\hbar^2 \omega^2 \varepsilon_{ave}} q [1 - \tilde{\beta} \varepsilon (1 + \nu) \cos(2\theta - 2\phi)] \quad (2.25)$$

Igualando a cero y despejando  $\omega^2$

$$\omega^2 = \frac{2e^2 E_F}{\hbar^2 \varepsilon_{ave}} q [1 - \tilde{\beta} \varepsilon (1 + \nu) \cos(2\theta - 2\phi)] \quad (2.26)$$

Se puede ver que la energía del plasmón sigue teniendo la dependencia en  $\sqrt{q}$ , la cual es una característica del sistema gas de electrones de dos dimensiones. Es máxima cuando se propaga perpendicularmente a la tensión aplicada y mínima para  $\theta = \phi$ . Estas últimas propiedades de los modos de SPP de grafeno nos permiten manipular la energía y mejorar las interacciones luz-materia.

## Capítulo 3

Por lo general, los SPP se pueden excitar a través de ondas evanescentes en la configuración de Kretschmann utilizando prismas de alto índice de refracción [7]. Una vez que el SPP se excita en la configuración de Kretschmann, parte de la energía asociada a la radiación electromagnética incidente se transferirá al SPP y se observa un mínimo pronunciado en la curva de reflectancia versus ángulo (o longitud de onda). En la sección 3.1, derivaremos la matriz de transferencia para cálculos ópticos de una capa de grafeno deformado uniformemente. Un desarrollo semejante para grafeno con anisotropía inducida por un campo magnético se encuentra en la referencia [39]. En la sección 3.2, Empleamos este método para calcular la reflectancia de una configuración, como la mencionada anteriormente, que se puede utilizar para la excitación óptica de los modos de plasmones superficiales en una capa de grafeno, rodeada por dos medios dieléctricos bajo la iluminación de una onda polarizada. Finalmente, en la sección 3.3 se muestran los resultados numéricos.

### 3.1 Matriz de transferencia

Primero consideramos la propagación de la luz a través de una interfaz formada por una capa de grafeno que separa dos dieléctricos de constantes dieléctricas  $\varepsilon_1$  y  $\varepsilon_2$ , como se muestra esquemáticamente en la figura 3.1 Las ondas que viajan en la dirección  $+z$  ( $-z$ ) son proporcionales a  $e^{ik_{1z}z}$  ( $e^{-ik_{1z}z}$ ). La capa de grafeno anisotrópico tiene una conductividad óptica  $\bar{\sigma}$  en  $z = 0$ . Se supone que la luz está polarizada en la dirección  $y$  y se propaga en la dirección  $z$ . Para las estructuras consideradas, las polarizaciones  $TM$  y  $TE$  pueden desacoplarse. Como resultado, podemos tratar las polarizaciones  $TM$  y  $TE$  por separado.

Para el medio 1 tenemos que

$$H_{1y}^{TM} = (a_1 e^{ik_{1z}z} + b_1 e^{-ik_{1z}z}) e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (3.1 a)$$

$$E_{1y}^{TE} = (c_1 e^{ik_{1z}z} + d_1 e^{-ik_{1z}z}) e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (3.1 b)$$

$$k_{1z} = \sqrt{\varepsilon_1 \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - (k_x)^2}$$

De forma similar en el medio 2 tenemos

$$H_{2y}^{TM} = (a_2 e^{ik_{2z}z} + b_2 e^{-ik_{2z}z}) e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (3.2 a)$$

$$E_{2y}^{TE} = (c_2 e^{ik_{2z}z} + d_2 e^{-ik_{2z}z}) e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (3.2 b)$$

$$k_{2z} = \sqrt{\varepsilon_2 \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - (k_x)^2}$$

Aquí se supone una dependencia temporal armónica para los modos de propagación en la dirección  $x$ . Sabemos por la ley de Snell que la componente  $x$  del vector de onda,  $k_x$ , es continua a través de la interfaz. Cabe destacar que la

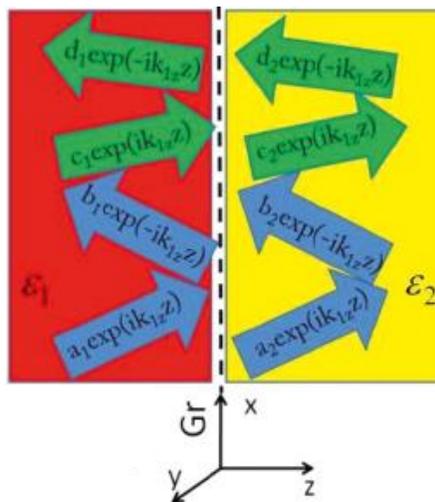


Figura 3.1 Representación esquemática de una capa de grafeno rodeado por dos materiales dieléctricos con constantes dieléctricas  $\varepsilon_1$  y  $\varepsilon_2$ . Adaptada de [39]

componente  $k_x$  corresponde a la componente en  $x$  de  $\mathbf{q}$  (el vector de onda asociado al pasmón) cuando  $\phi = 0$ , es decir

$$\mathbf{q}|_{\phi=0} = [q(\cos \phi, \sin \phi)]|_{\phi=0} = (k_x, 0)$$

Suponiendo que no hay magnetización ( $\mu = 1$ )  $\mathbf{B} = \mathbf{H}$ , aplicaremos las leyes de Maxwell a (3.1) y (3.2)

- De  $\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = 0$  se obtiene

$$ik_{jz}(c_j e^{ik_{jz}z} - d_j e^{-ik_{jz}z}) e^{i(k_x x - \omega t)} = \frac{1}{c} \frac{\partial H_{jx}}{\partial t} \quad (3.3 a)$$

$$ik_x(c_j e^{ik_{jz}z} + d_j e^{-ik_{jz}z}) e^{i(k_x x - \omega t)} = -\frac{1}{c} \frac{\partial H_{jz}}{\partial t} \quad (3.3 b)$$

Donde  $j = 1, 2$  se refiere al medio.

- De  $\nabla \times \mathbf{H} + \frac{\varepsilon}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 0$  se obtiene

$$-ik_{jz}(a_j e^{ik_{jz}z} - b_j e^{-ik_{jz}z}) e^{i(k_x x - \omega t)} = \frac{\varepsilon_j}{c} \frac{\partial E_{jx}}{\partial t} \quad (3.4 a)$$

$$ik_x(a_j e^{ik_{jz}z} + b_j e^{-ik_{jz}z}) e^{i(k_x x - \omega t)} = \frac{\varepsilon_j}{c} \frac{\partial E_{jz}}{\partial t} \quad (3.4 b)$$

De combinar (3.3 a) con (3.3 b) y (3.4 a) con (3.4 b) se obtiene

$$E_{jx}^{TM} = \frac{ck_{jz}}{\varepsilon_j \omega} (a_j e^{ik_{jz}z} - b_j e^{-ik_{jz}z}) e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (3.5 a)$$

$$E_{jz}^{TM} = -\frac{ck_x}{\varepsilon_j \omega} (a_j e^{ik_{jz}z} + b_j e^{-ik_{jz}z}) e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (3.5 b)$$

$$H_{jx}^{TE} = -\frac{ck_{jz}}{\omega} (c_j e^{ik_{jz}z} - d_j e^{-ik_{jz}z}) e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (3.5 c)$$

$$H_{jz}^{TE} = \frac{ck_x}{\omega} (c_j e^{ik_{jz}z} + d_j e^{-ik_{jz}z}) e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (3.5 d)$$

Ahora sigue aplicar las condiciones de frontera

$$\hat{\mathbf{z}} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = 0 \quad (3.6 a)$$

$$\hat{\mathbf{z}} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J} \quad (3.6 b)$$

Donde  $\mathbf{J} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{E} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \mathbf{E}$

Usando las ecuaciones (3.1), (3.2), (3.5) y (3.6) se encuentra que

$$a_1 - b_1 = \frac{k_{2z} \varepsilon_1}{k_{1z} \varepsilon_2} (a_2 - b_2) \quad (3.7 a)$$

$$a_1 + b_1 = \left(1 + \frac{4\pi}{\omega} \sigma_{xx} \frac{k_{2z}}{\varepsilon_2}\right) a_2 + \left(1 + \frac{4\pi}{\omega} \sigma_{xx} \frac{k_{2z}}{\varepsilon_2}\right) b_2 + \frac{4\pi}{c} \sigma_{xy} (c_2 + d_2) \quad (3.7 b)$$

$$c_1 + d_1 = c_2 + d_2 \quad (3.7 c)$$

$$c_1 - d_1 = \frac{4\pi}{c} \sigma_{yx} \frac{k_{2z}}{k_{1z} \varepsilon_2} (a_2 - b_2) + \left(\frac{4\pi}{c^2} \sigma_{yy} \frac{\omega}{k_{1z}} + \frac{k_{2z}}{k_{1z}}\right) c_2 + \left(\frac{4\pi}{c^2} \sigma_{yy} \frac{\omega}{k_{1z}} - \frac{k_{2z}}{k_{1z}}\right) d_2 \quad (3.7 d)$$

Combinando (3.7 a) con (3.7 b) y (3.7 c) con (3.7 d) de tal forma que las componentes del medio 1 queden en términos de las componentes del medio 2, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones escrito de forma matricial

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \\ d_1 \end{pmatrix} = \bar{\mathbf{D}} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \\ c_2 \\ d_2 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Donde  $\bar{\mathbf{D}}$  está dada por

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{4\pi}{\omega} \sigma_{xx} \frac{k_{2z}}{\varepsilon_2} + \frac{k_{2z} \varepsilon_1}{k_{1z} \varepsilon_2}\right) & \left(1 - \frac{4\pi}{\omega} \sigma_{xx} \frac{k_{2z}}{\varepsilon_2} - \frac{k_{2z} \varepsilon_1}{k_{1z} \varepsilon_2}\right) & \frac{4\pi}{c} \sigma_{xy} & \frac{4\pi}{c} \sigma_{xy} \\ \left(1 + \frac{4\pi}{\omega} \sigma_{xx} \frac{k_{2z}}{\varepsilon_2} - \frac{k_{2z} \varepsilon_1}{k_{1z} \varepsilon_2}\right) & \left(1 - \frac{4\pi}{\omega} \sigma_{xx} \frac{k_{2z}}{\varepsilon_2} + \frac{k_{2z} \varepsilon_1}{k_{1z} \varepsilon_2}\right) & \frac{4\pi}{c} \sigma_{xy} & \frac{4\pi}{c} \sigma_{xy} \\ \frac{4\pi}{c} \sigma_{yx} \frac{k_{2z}}{k_{1z} \varepsilon_2} & -\frac{4\pi}{c} \sigma_{yx} \frac{k_{2z}}{k_{1z} \varepsilon_2} & \frac{\omega}{k_{1z}} \left(\frac{k_{1z} + k_{2z}}{\omega} + \frac{4\pi}{c^2} \sigma_{yy}\right) & \frac{\omega}{k_{1z}} \left(\frac{k_{1z} - k_{2z}}{\omega} + \frac{4\pi}{c^2} \sigma_{yy}\right) \\ -\frac{4\pi}{c} \sigma_{yx} \frac{k_{2z}}{k_{1z} \varepsilon_2} & \frac{4\pi}{c} \sigma_{yx} \frac{k_{2z}}{k_{1z} \varepsilon_2} & \frac{\omega}{k_{1z}} \left(\frac{k_{1z} - k_{2z}}{\omega} - \frac{4\pi}{c^2} \sigma_{yy}\right) & \frac{\omega}{k_{1z}} \left(\frac{k_{1z} + k_{2z}}{\omega} - \frac{4\pi}{c^2} \sigma_{yy}\right) \end{pmatrix}$$

Y donde, las entradas de la matriz  $\bar{\sigma}$  están dadas explícitamente por (ec. (2.3))

$$\sigma_{xx} = (1 + \tilde{\beta} \varepsilon_{xx} - \tilde{\beta} \varepsilon_{yy}) \sigma_0(\omega)$$

$$\sigma_{yy} = (1 + \tilde{\beta}\epsilon_{yy} - \tilde{\beta}\epsilon_{xx})\sigma_0(\omega)$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 2\tilde{\beta}\epsilon_{xy}\sigma_0(\omega)$$

Por otro lado, es necesario expresar  $k_{2z}$  y  $k_{1z}$  en términos de  $\theta_i$ , el ángulo incidente.

Sean

$$k_j = \sqrt{(k_{jz})^2 + (k_x)^2} = \sqrt{\epsilon_j} \frac{\omega}{c}$$

las magnitudes de los vectores de onda incidente ( $j = 1$ ) y transmitida ( $j = 2$ ) (ver fig. 11), así

$$k_{1z} = k_1 \cos \theta_i = \sqrt{\epsilon_1} \frac{\omega}{c} \cos \theta_i$$

$$k_{2z} = k_2 \cos \theta_t = \sqrt{\epsilon_2} \frac{\omega}{c} \cos \theta_t$$

donde  $\theta_t$  es el ángulo de la onda transmitida. Entonces,

$$k_{2z} = \sqrt{\epsilon_2} \frac{\omega}{c} \sqrt{1 - (\sin \theta_t)^2}$$

Por la ley de Snell  $\sin \theta_t = \sqrt{\epsilon_1}/\sqrt{\epsilon_2} \sin \theta_i$ . De tal forma que

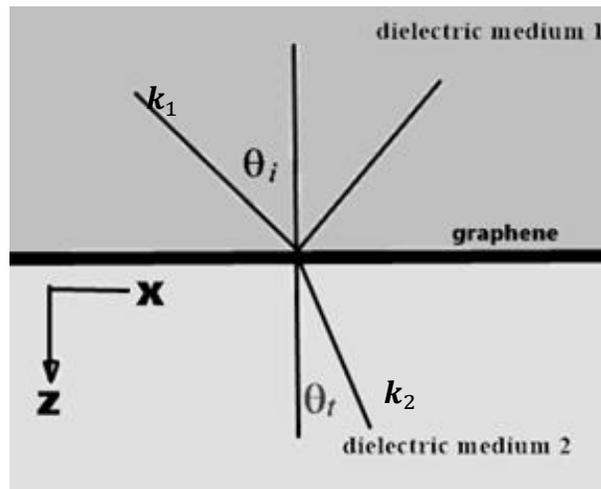


Figura 3.2 Representación esquemática la onda incidente ( $k_1$ ) y transmitida ( $k_2$ )

$$k_{2z} = \sqrt{\varepsilon_2} \frac{\omega}{c} \sqrt{1 - \left( \frac{\sqrt{\varepsilon_1}}{\sqrt{\varepsilon_2}} \sin \theta_i \right)^2}$$

En resumen, se tiene para  $k_{1z}$  y  $k_{2z}$

$$k_{1z} = \sqrt{\varepsilon_1} \frac{\omega}{c} \cos \theta_i$$

$$k_{2z} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_2 - \varepsilon_1 (\sin \theta_i)^2}$$

### 3.2 Coeficientes de Fresnel para la reflectancia

Vamos a analizar el caso en donde solo inciden ondas  $TM$ . Se tiene la siguiente ecuación

$$\begin{pmatrix} 1 \\ b_1 \\ 0 \\ d_1 \end{pmatrix} = \bar{D} \begin{pmatrix} a_2 \\ 0 \\ c_2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(3.9)

Vemos que, a pesar de que  $c_1 = 0$ ,  $d_1$  es diferente de cero, significa que además de la onda  $TM$  reflejada (con coeficiente  $b_1$ ), existe una onda  $TE$  en la dirección  $-z$ . Esto es debido a la presencia de la anisotropía en grafeno.

Sustituyendo los valores de las constantes  $a_1 = 1$  y  $c_1 = 0$  en las ecuaciones (3.1) y (3.5) para el medio 1 y reconociendo las ondas incidentes (reflejadas) como aquellas proporcionales a  $e^{ik_{1z}z}$  ( $e^{-ik_{1z}z}$ ), podemos definir los campos incidentes y reflejados de la forma

- Onda incidente  $TM$

$$\mathbf{H}_{1I}^{TM} = e^{i(k_{1z}z + k_x x - \omega t)} \hat{\mathbf{y}} \quad (3.10 a)$$

$$\mathbf{E}_{1I}^{TM} = \left( \frac{ck_{1z}}{\varepsilon_1 \omega} \hat{\mathbf{x}} - \frac{ck_x}{\varepsilon_1 \omega} \hat{\mathbf{z}} \right) e^{i(k_{1z}z + k_x x - \omega t)} \quad (3.10 b)$$

- Onda reflejada  $TM$

$$\mathbf{H}_{1R}^{TM} = b_1 e^{i(-k_{1z}z + k_x x - \omega t)} \hat{\mathbf{y}} \quad (3.11 a)$$

$$\mathbf{E}_{1R}^{TM} = \left( -\frac{ck_{1z}}{\varepsilon_1 \omega} b_1 \hat{\mathbf{x}} - \frac{ck_x}{\varepsilon_1 \omega} b_1 \hat{\mathbf{z}} \right) e^{i(-k_{1z}z + k_x x - \omega t)} \quad (3.11 b)$$

- Onda reflejada  $TE$

$$\mathbf{E}_{1R}^{TE} = d_1 e^{i(-k_{1z}z + k_x x - \omega t)} \hat{\mathbf{y}} \quad (3.12 a)$$

$$\mathbf{H}_{1R}^{TE} = \left( \frac{ck_{1z}}{\omega} d_1 \hat{\mathbf{x}} + \frac{ck_x}{\omega} d_1 \hat{\mathbf{z}} \right) e^{i(-k_{1z}z + k_x x - \omega t)} \quad (3.12 b)$$

Ya estamos en condiciones de definir al coeficiente de reflectancia como

$$R = R^{TM} + R^{TE} \quad (3.13 a)$$

Con

$$R^{TM(TE)} = \frac{\langle \mathbf{S}_r^{TM(TE)} \rangle \cdot (-\hat{\mathbf{z}})}{\langle \mathbf{S}_i^{TM} \rangle \cdot (\hat{\mathbf{z}})} \quad (3.13 b)$$

como coeficiente de reflectancia para la onda  $TM (TE)$ .

Donde  $\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{c}{8\pi} \text{Re}[\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*]$  es el promedio del vector de Poynting.  $\mathbf{H}^*$  corresponde al conjugado de  $\mathbf{H}$ .

Calculando  $\langle \mathbf{S}_i^{TM} \rangle$  y  $\langle \mathbf{S}_r^{TM(TE)} \rangle$ , tenemos

- Para  $\langle \mathbf{S}_i^{TM} \rangle$

Usando (3.10), tenemos

$$\langle \mathbf{S}_i^{TM} \rangle = \frac{c^2}{8\pi\omega} \left( \frac{k_x}{\varepsilon_1} \hat{\mathbf{x}} + \frac{k_{1z}}{\varepsilon_1} \hat{\mathbf{z}} \right) \quad (3.14 a)$$

- Para  $\langle \mathbf{S}_r^{TM} \rangle$

Usando (3.11), tenemos

$$\langle \mathbf{S}_r^{TM} \rangle = \frac{c^2}{8\pi\omega} \left( b_1^2 \frac{k_x}{\varepsilon_1} \hat{\mathbf{x}} - b_1^2 \frac{k_{1z}}{\varepsilon_1} \hat{\mathbf{z}} \right) \quad (3.14 b)$$

- Para  $\langle \mathbf{S}_r^{TE} \rangle$

Usando (3.12), tenemos

$$\langle \mathbf{S}_r^{TE} \rangle = \frac{c^2}{8\pi\omega} (d_1^2 k_x \hat{\mathbf{x}} - d_1^2 k_{1z} \hat{\mathbf{z}}) \quad (3.14 c)$$

Sustituyendo (3.14) en (3.13 b)

$$R^{TM} = b_1^2$$

$$R^{TE} = \varepsilon_1 d_1^2$$

Sustituyendo en (3.13 a)

$$R = b_1^2 + \varepsilon_1 d_1^2 \quad (3.15)$$

Ahora, se sigue calcular los coeficientes  $b_1$  y  $d_1$  en términos de las componentes de  $\bar{D}$ . De (3.9) tenemos que

$$1 = D_{11}a_2 + D_{13}c_2$$

$$b_1 = D_{21}a_2 + D_{23}c_2$$

$$0 = D_{31}a_2 + D_{33}c_2$$

$$d_1 = D_{41}a_2 + D_{43}c_2$$

De este sistema de ecuaciones se obtiene

$$a_2 = -\frac{D_{33}}{D_{13}D_{31} - D_{11}D_{33}}$$

$$c_2 = \frac{D_{31}}{D_{13}D_{31} - D_{11}D_{33}}$$

$$b_1 = \frac{D_{31}D_{23} - D_{21}D_{33}}{D_{13}D_{31} - D_{11}D_{33}}$$

$$d_1 = \frac{D_{43}D_{31} - D_{41}D_{33}}{D_{13}D_{31} - D_{11}D_{33}}$$

Finalmente, sustituyendo  $b_1$  y  $d_1$  en (3.15)

$$R = \left( \frac{D_{31}D_{23} - D_{21}D_{33}}{D_{13}D_{31} - D_{11}D_{33}} \right)^2 + \varepsilon_1 \left( \frac{D_{43}D_{31} - D_{41}D_{33}}{D_{13}D_{31} - D_{11}D_{33}} \right)^2 \quad (3.16)$$

Vale la pena mencionar que cuando la deformación desaparece ( $\epsilon = 0$ ), entonces  $\sigma_{xy} = 0$ , y el coeficiente de reflexión para una sola capa de grafeno dispuesta entre dos dieléctricos con constantes dieléctricas  $\varepsilon_1$  y  $\varepsilon_2$  son como los obtenidos en la referencia [40].

### 3.3 Resultados numéricos

Por lo general, el plasmón de superficie se puede excitar a través de ondas evanescentes en la configuración de Kretschmann, utilizando prismas de alto índice de refracción como el medio donde se propaga la onda incidente. Una vez que el plasmón superficial se excita en la configuración de Kretschmann, se observa un mínimo pronunciado en la curva del coeficiente de reflexión frente al ángulo de incidencia (o longitud de onda).

La figura 3.3 muestra la reflectancia en función del ángulo de incidencia,  $\theta_i$ , para diferentes direcciones de la deformación aplicada ( $\theta$ ), tomando el ángulo de propagación del plasmón como  $\phi = 0$  y con  $\epsilon = 0.1$  fijo. Como puede verse, cuando aumenta el ángulo de la deformación aplicada, se produce un desplazamiento del pico de resonancia hacia un ángulo de incidencia más bajo y una reducción de la amplitud de la caída de resonancia.

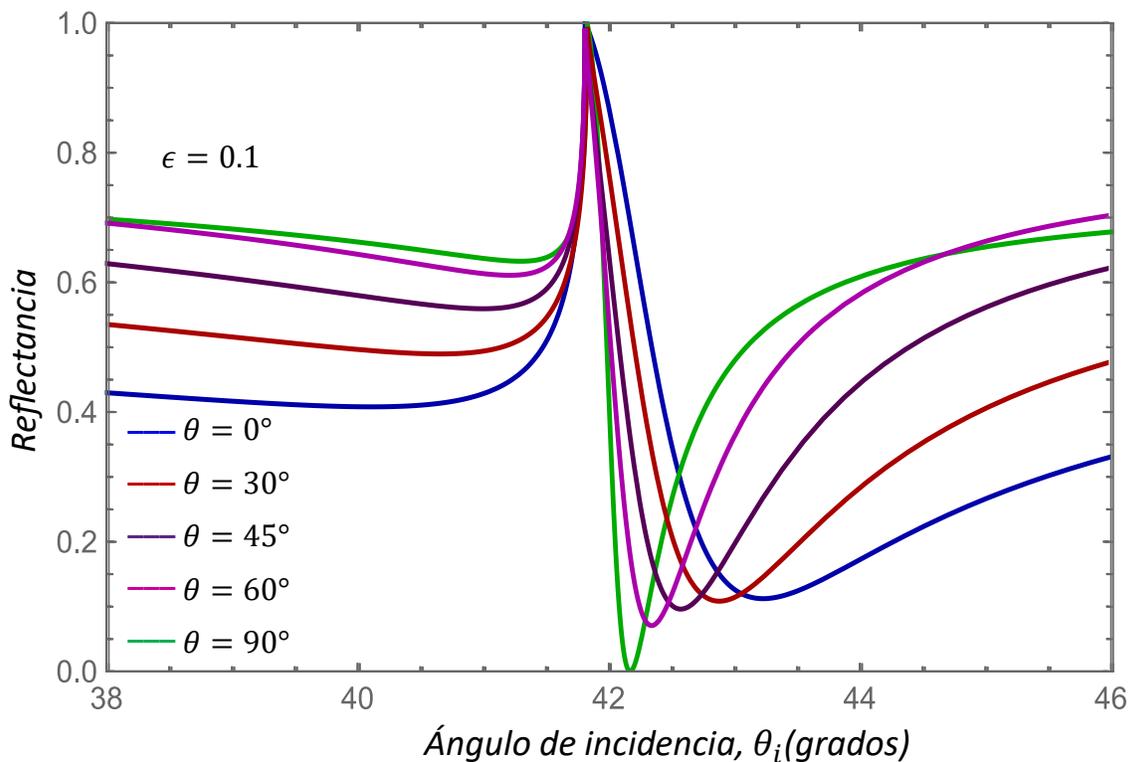


Figura 3.3 Dependencia de la reflectancia en el ángulo de incidencia,  $\theta_i$ , para  $\epsilon_1 = 2.25$ ,  $\epsilon_2 = 1$ , frecuencia de la radiación incidente  $\omega = 2\pi$  THz para diferentes ángulos de deformación,  $\theta$ , con  $\epsilon = 0.1$  y  $E_F = 1$  eV.

El mínimo de la curva de resonancia de los plasmones superficiales corresponde a la absorción parcial de energía de la luz incidente a los plasmones superficiales. Indicando que a mayor profundidad del mínimo es mejor la eficiencia de la resonancia, y esto ocurre cuando la deformación aplicada es perpendicular a la dirección de propagación del plasmón,  $\theta = 90^\circ$ .

En la Fig. 3.4, la reflectancia de la monocapa de grafeno bajo deformación se representa como una función del ángulo de la radiación incidente. Nótese el corrimiento del mínimo hacia ángulos de incidencia más bajos cuando la deformación ( $\epsilon$ ) aumenta (para  $\theta = 90^\circ$ , una deformación aplicada perpendicular a la dirección de propagación del plasmón).

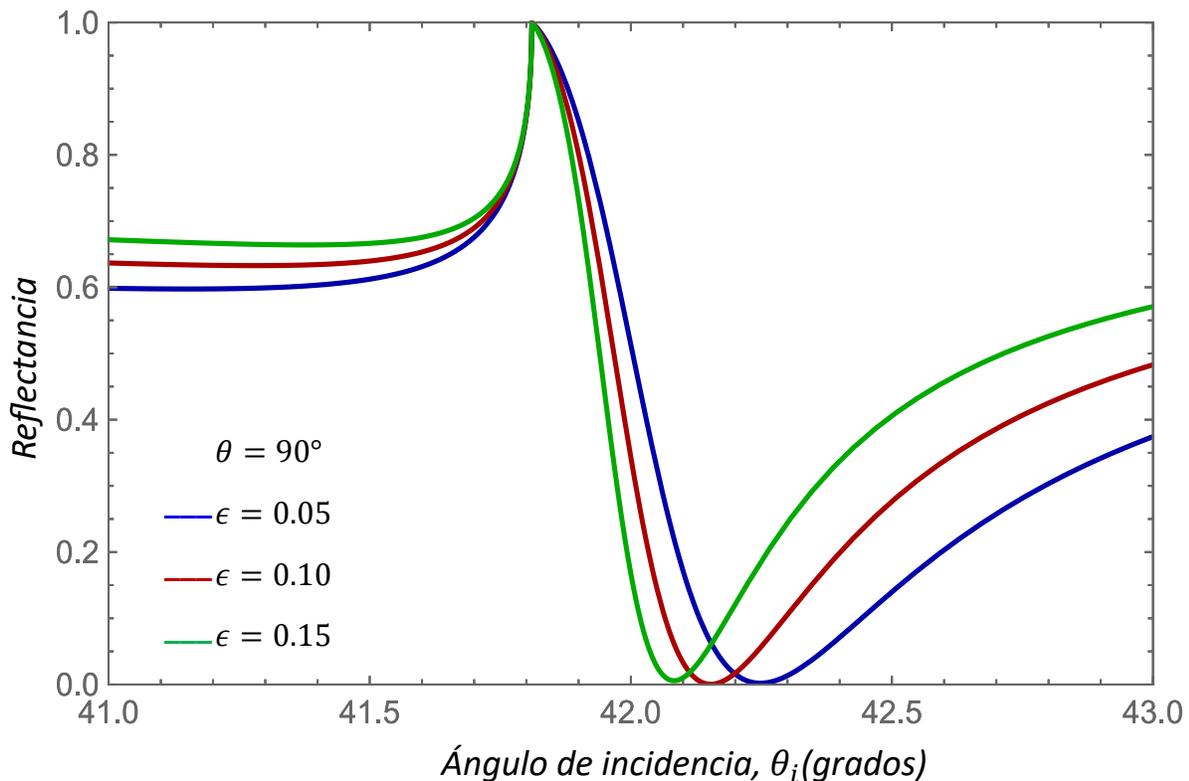


Figura 3.4 Dependencia de la reflectancia en el ángulo de incidencia,  $\theta_i$ , para  $\epsilon_1 = 2.25$ ,  $\epsilon_2 = 1$ , frecuencia de la radiación incidente  $\omega = 2\pi$  THz para diferentes magnitudes de la deformación uniaxial aplicada,  $\epsilon$ , con  $\theta = 90^\circ$  y  $E_F = 1$  eV.

La Figura 3.5 muestra la reflectancia contra el ángulo de incidencia para diferentes índices de refracción del medio 2 ( $\epsilon_2$ ) y para deformación uniaxial con la misma magnitud  $\epsilon = 0.1$ , con  $\theta = 90^\circ$  y para energía de Fermi fija  $E_F = 1$  eV. Como puede verse, hay una reducción en la amplitud y un corrimiento en el ángulo de resonancia de la curva al aumentar el índice de refracción  $n = \sqrt{\epsilon_2}$ . Por lo tanto, estos metamateriales plasmónicos son muy sensibles a los cambios de índice de refracción del medio dieléctrico en la vecindad de la capa de grafeno. Esta característica se usa en el diseño de biosensores ópticos para detectar moléculas biológicas, los cuales pueden medir el índice de refracción cuando las biomoléculas se adsorben en la superficie del grafeno y crean una capa de índice de refracción más alto que el del aire ( $\epsilon_2$  en la Fig. 4.1), lo que resulta en un cambio en el ángulo de resonancia.

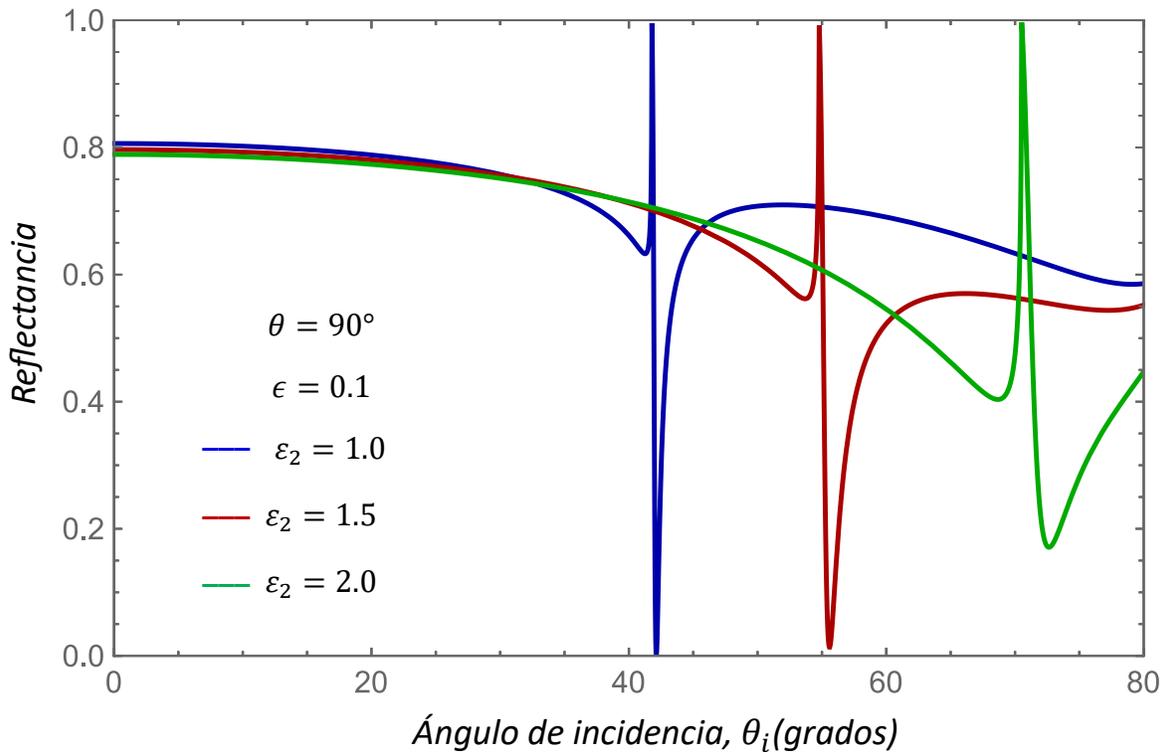


Figura 3.5 Dependencia de la reflectancia en el ángulo de incidencia,  $\theta_i$ , para  $\epsilon_1 = 2.25$ , frecuencia de la radiación incidente  $\omega = 2\pi$  THz, con  $\epsilon = 0.1$ ,  $\theta = 90^\circ$  y  $E_F = 1$  eV para diferentes constantes dieléctricas del medio de detección,  $\epsilon_2$ .

Por otro lado, la Figura 3.6 ilustra la reflectancia para deformación uniaxial  $\epsilon = 0.1$ , para diferentes frecuencias de la radiación incidente en  $\theta = \pi/2$  y para energía de Fermi fija  $E_F = 0.1$  eV. La reflectancia exhibe una caída máxima para  $\omega = 2\pi$  THz en comparación con  $\omega = 3\pi$  THz y  $\omega = 4\pi$  THz. Estas características importantes indican que las resonancias de plasmones son más eficientes a frecuencias más bajas.

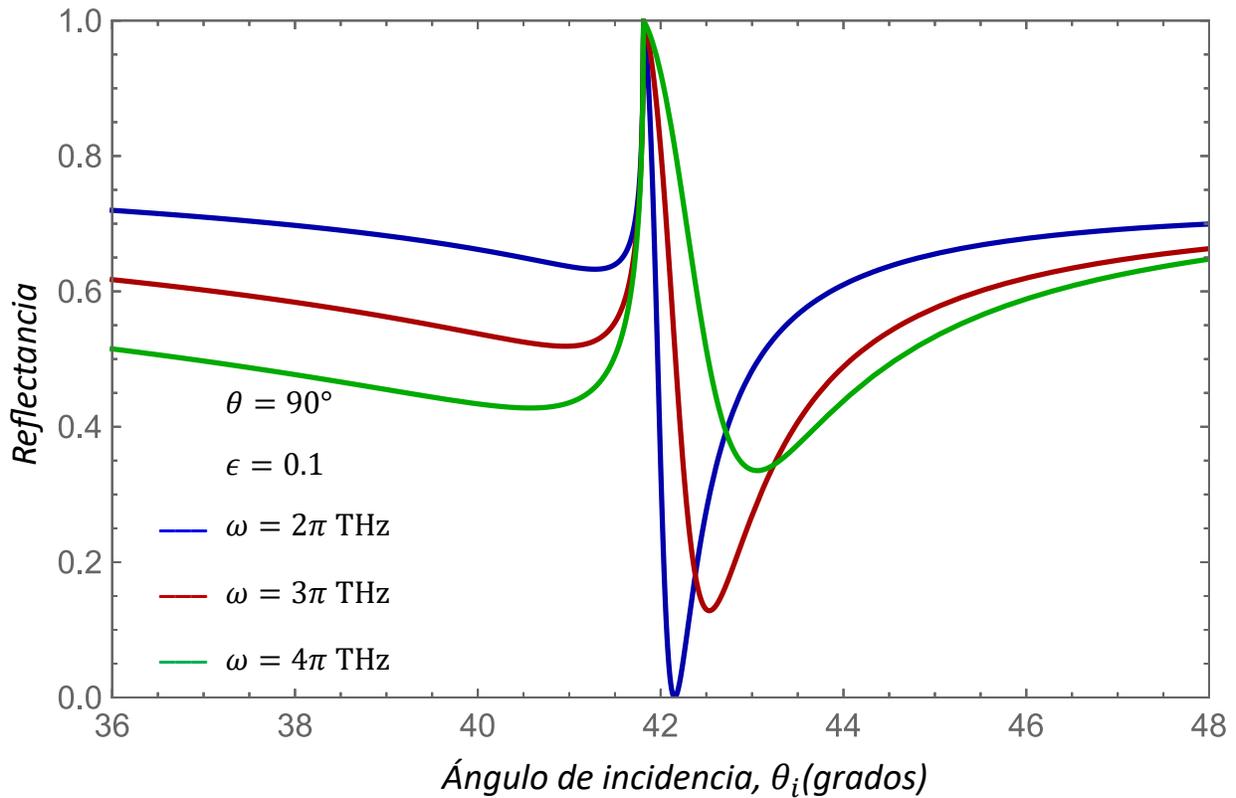


Figura 3.6 Dependencia de la reflectancia en el ángulo de incidencia,  $\theta_i$ , para  $\epsilon_1 = 2.25$ ,  $\epsilon_2 = 1$ , con  $\epsilon = 0.1$ ,  $\theta = 90^\circ$  y  $E_F = 1$  eV para diferentes frecuencias,  $\omega$ .

## Conclusiones

En este estudio se investigaron las excitaciones electrónicas colectivas en la estructura de grafeno monocapa bajo tensión uniaxial. Las interacciones de radiación con grafeno deformado conducen a nuevos espectros de plasmones polaritones de superficie, que dependen de determinados parámetros característicos de la tensión aplicada. Estas fluctuaciones de densidad de carga pueden ser excitadas por la luz utilizando la configuración de Kretschmann. Bajo esta configuración, derivamos los coeficientes de Fresnel para la incidencia oblicua de la luz polarizada linealmente p (TM) a través de dos medios dieléctricos con una capa de grafeno anisótropo en la interfaz. Sobre la base de estos coeficientes generalizados, se demostró que el problema de la dispersión de la luz no se puede desacoplar en ondas polarizadas p puras. En otras palabras, siempre que la componente de conductividad no diagonal  $\sigma_{xy}$  sea diferente de cero, la polarización incidente no se conserva, de aquí que la reflectancia tenga dos componentes,  $R^{TM}$  y  $R^{TE}$ . Los efectos de la deformación sobre la reflectancia se estimaron en función de la magnitud o de la dirección de la deformación. Esto abre nuevas posibilidades para controlar la interacción luz-materia en estructuras de grafeno.

## Bibliografía

- [1] G. G. d. I. C. M. O.-L. P. (. 1. a. a. R. S. [-2. C. Lemus, "Effect of uniform strain on graphene surface plasmon excitations, PREPRINT (Version 1)," *Plasmonics*, 09 January 2023.
- [2] S. M. D. C. Y. T. D. S. Y. M. A.C., "BOOK OF ABSTRACTS XV-INTERNATIONAL CONFERENCE IN MATERIALS SURFACES AND VACUUM," 2022, p. 183.
- [3] K. S. N. e. at, "Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films," *Science*, vol. 306, p. 666, 2004.
- [4] J. M. C. T. a. P. O. S. Reich, "Tight-binding description of graphene," *Phys. Rev. B*, vol. 66, no. 035412, 2002.
- [5] e. a. A. C. Ferrari, "Science and technology roadmap for graphene, related two dimensional crystals, and hybrid systems," *Nanoscale*, vol. 7, no. 4598, 2015.
- [6] M. O. Leyva, Hamiltoniano efectivo de Dirac para el grafeno deformado: propiedades electrónicas y ópticas, Ciudad de México, 2016.
- [7] M. S.A, Plasmonics:Fundamentals and Applications, Springer, 2007.
- [8] Y. Y. D. R. a. B. S. Ding Fei, " A review of gap-surface plasmon metasurfaces: fundamentals and applications," *Nanophotonics*, vol. 7, no. 1129, 2018.
- [9] L. K. a. S. C. 2. 1. Han X., "Plasmonics for Biosensing," *Materials*, vol. 12, no. 14111, 2019.
- [10] J. R. K. Y. A. D. A. D. T. B. N. K. ., G. A. a. G. A. Kravets V.G., "Graphene-protected copper and silver plasmonics," *Sci. Rep.*, vol. 4, no. 5517, 2014.
- [11] Y. L. a. J. T. Y. Feng, "Design of an ultrasensitive SPR biosensor based on a graphene-MoS<sub>2</sub> hybrid structure with a MgF<sub>2</sub> prism," *Apl. Optics*, vol. 57, no. 3639, 2018.
- [12] e. a. 2. ., 1. 1. Pravin O. Patil, "Graphene-based nanocomposites for sensitivity enhancement of surface plasmon resonance sensor for biological and chemical sensing: A review," *Biosensors and Bioelectronics*, vol. 139, no. 111324, 2019.
- [13] S. C. Z. G. Y. H. Huang S, "Graphene plasmonics: physics and potential applications," *Nanophotonics*, vol. 6, no. 1191, 2017.
- [14] J. S. L. Z. L. C. X. J. P. J. H. Y. M. B. L. A. a. C. C. Gong W., "Experimental and theoretical investigation for surface plasmon resonance biosensor based on graphene/Au film/D-POF," *Op. Express*, vol. 27, no. 3483, 2019.

- [15] B.-L. S. O.-L. M. a. T. H. Naumis G G, "Electronic and optical properties of strained graphene and other strained 2D materials: a review," *Rep. Prog. Phys.*, vol. 80, no. 096501 , 2017.
- [16] W. C. Y. X. M. R. X. Z. a. J. X. Zengong Ma, "Dynamic spontaneous emission control of an optical emitter coupled to plasmons in strained graphene," *Op. Express*, vol. 25, no. 23070, 2017.
- [17] C.-G. A. C. E. a. G. F. Roldán R, "Strain engineering in semiconducting two-dimensional crystals," *J. Phys.: Condens. Matter* , vol. 27, no. 313201 , 2015.
- [18] V. T. S. M. F. M. a. S.-F. T. Poya S., "Plasmon modes in monolayer and double-layer black phosphorus under applied uniaxial strain," *J. Appl. Phys.*, vol. 123, no. 174301 , 2018.
- [19] O. V. K. Boris Ildusovich Kharisov, *Carbon Allotropes: Metal-Complex Chemistry, Properties and Applications*, Cham, Switzerland: Springer, 2019.
- [20] G. Patrick, *Instant Notes in Organic Chemistry*, 2nd ed., New York, NY: Garland Science, 2012.
- [21] L. L. W. B. L. & M. C. N. Gao Yang, "Structure of graphene and its disorders: a review," *Science and Technology of Advanced Materials*, vol. 19, no. 1, pp. 613-648, 2018.
- [22] M. Sullivan, *Tight-binding model for graphene*, Manchester, 2017.
- [23] Y. Hancock, "Generalized tight-binding transport model for graphene nanoribbon-based systems," *PHYSICAL REVIEW B*, vol. 81, 2010.
- [24] M. O.-L. a. G. G. d. I. Cruz, "Unveiling optical in-plane anisotropy of 2D materials from oblique incidence of light," *J. Phys.: Condens. Matter* , vol. 31, no. 335701, 2019.
- [25] V. M. P. y. A. H. C. Neto, "Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene," *PHYSICAL REVIEW B 80*, vol. 80, no. 045401, 2009.
- [26] K. Ziegler, "Robust Transport Properties in Graphene," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 97, no. 266802, 2006.
- [27] K. Ziegler, "Minimal conductivity of graphene: Nonuniversal values from the Kubo formula,," *Phys. Rev. B*, vol. 75, no. 233407, 2007.
- [28] M. O.-L. a. G. G. Naumis, "Effective Dirac Hamiltonian for anisotropic honeycomb lattices: Optical properties," *PHYSICAL REVIEW B*, vol. 93, no. 035439, 2016.
- [29] J. W. M. S. Lin Cui, "Graphene plasmon for optoelectronics," *Rev. Phys*, vol. 6, no. 100054, 2021.
- [30] R. A. Depine, *Graphene Optics: Electromagnetic Solution of Canonical Problems*, San Rafael, California: Morgan & Claypool Publishers, 2016.

- [31] N. P. A. D Goncalves, *An Introduction to Graphene Plasmonics*, Singapore: World Scientific, 2016.
- [32] I.-T. L. Jia-Ming Liu, *Graphene photonics*, Cambridge University Press, 2019.
- [33] H. G. W, "Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene," *J. Appl. Phys.*, vol. 103, no. 064302, 2008.
- [34] S. S. G. a. C. J. P. Gusynin V P, "Sum rules for the optical and Hall conductivity in graphene," *Phys. Rev. B*, vol. 75, no. 165407, 2007.
- [35] F. L. A. a. V. A, "A Space-time dispersion of graphene conductivity," *Eur. Phys. J. B*, vol. 56, p. 281–284, 2007.
- [36] WL Mochán, "Plasmons," *Encyclopedia of Condensed Matter Physics*, pp. 310-317, 2005.
- [37] L. A. T. Fuentes, *Acoplamiento de Plasmones de Superficie entre capas de Grafeno Distribuidas Cuasiperiodicamente*, Puebla, Pue, 2016.
- [38] S. A. Maier, *Plasmonics: Fundamentals and Applications*, New York, NY : Springer, 2007.
- [39] Z. G. a. M. M. G. Abbas Ghasempour Ardakania, "A new transfer matrix for investigation of surface plasmon modes in multilayer structures containing anisotropic graphene layers," *Eur. Phys. J. Plus*, vol. 132, p. 206, 2017.
- [40] X. S. Y. D. X. L. a. J. Z. Tianrong Zhan, "Transfer matrix method for optics in graphene layers," *J. Physics: Condens. Matter.*, vol. 25, no. 215301, 2013.
- [41] R. K. H. N. a. M. K. Yasumasa Hasegawa, "Zero modes of tight-binding electrons on the honeycomb lattice," *PHYSICAL REVIEW B*, vol. 74, 2006.
- [42] M. S. a. M. A. H. V. F. de Juan, "Space Dependent Fermi," *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, vol. 108, no. 227205, 2012.
- [43] S. S. S. J. G. P. C. M. R. F. S. M. G. V. D. a. C. Y. Dawlaty J M, "Measurement of the optical absorption spectra of epitaxial graphene from terahertz to visible," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 93, no. 131905, 2008.
- [44] F. M. M. L. A. W. F. a. Z. Y. Basov D N, "Colloquium: Graphene spectroscopy," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 86, p. 959–94, 2014.
- [45] X. W. J. W. K. a. J. H. C. Lee, "Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene," *Science*, vol. 321, p. 385, 2008.
- [46] M. I. K. a. A. F. K. V. Zakharchenko, "Finite Temperature Lattice Properties of Graphene beyond the Quasiharmonic Approximation," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, no. 046808, 2009.

- [47] Z. H. N. e. al., "Uniaxial Strain on Graphene: Raman Spectroscopy Study and Band-Gap Opening," *ACS Nano*, vol. 2, no. 2301, 2008.
- [48] N. C. S. 2. Vahed H., "Ultra-sensitive surface plasmon resonance biosensor based on MoS<sub>2</sub>-graphene hybrid nanostructure with silver metal layer," *Opt. Quantum Electronics*, vol. 51, p. 20, 2019.
- [49] e. a. J. Tuček, "Emerging chemical strategies for imprinting magnetism in graphene and related 2D materials for spintronic and biomedical applications," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 47, no. 11, 2018.
- [50] L. L. L. W. Gao Yang, "Structure of graphene and its disorders: a review," *Sci. Technol. Adv.*, vol. 19:1, no. 613-648, 2018.
- [51] C. C. W. A. y. R. R. P. Pasquale Pavone, "Graphene: from the Ground State to Excitations," *exciting oxygen*.
- [52] V. A. M. S. G. S. a. I. A. S. V. P. Gusynin, "Edge states in quantum Hall effect in graphene (Review Article)," *Low Temp. Phys.*, vol. 34, no. 778, 2008.