

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

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**Propagación de plasmón de superficie en
grafeno bajo deformación uniforme**

Tesis que presenta

Luis Ángel Galeana Gómez

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

Mayo, 2023

Con mucho cariño a mi madre.

Agradecimientos

A mi asesor:

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento al Dr. Gerardo por brindarme todo su apoyo, dedicación y compromiso para sacar este proyecto adelante, así como también por su gran paciencia, sus enseñanzas y sus consejos, fue un privilegio trabajar con un gran investigador como usted.

A las instituciones:

Agradezco al Departamento de Física del CINVESTAV por la formación en el ámbito científico y académico y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el apoyo económico a través de la beca que se me otorgó (771604), ya que sin ella no hubiera sido posible realizar mi posgrado.

A mis familiares y seres queridos:

Madre, le dedico con mucho cariño esta tesis, quiero agradecerle por todo el amor, apoyo y comprensión que siempre me ha dado y también reconocerle todo el esfuerzo y sacrificio

que ha hecho para que salga adelante, la admiro, respeto y aprecio de todo corazón y quiero decirle que este logro también es de usted, la quiero mucho mamá.

Tía, a pesar de que ya no se encuentra con nosotros, deseo agradecerle por su apoyo desinteresado, sus consejos y por siempre motivarme a alcanzar mis metas, es un gran ejemplo a seguir y siempre la recordaré, muchas gracias por todo lo que hizo por mí.

Lily, te agradezco por tu amor incondicional, por creer en mí y por siempre estar a mi lado alentándome en todo, eres una persona maravillosa con un gran corazón y carisma, te amo mucho.

Iván, gracias por brindarme tu apoyo, socorrerme en todo momento y por tu cariño incondicional hacía mí.

A mis tíos, primos y amigos les agradezco su constante ánimo, apoyo y buenos deseos en todo momento, muchas gracias.

Índice general

1	Introducción	1
1.1	Alótropos de carbono.....	1
1.2	Generalidades del grafeno.....	4
1.3	Plasmónica de grafeno.....	7
1.4	Justificación.....	8
1.5	Objetivos.....	8
1.5.1	Objetivo general.....	8
1.5.2	Objetivos específicos.....	8
2	Grafeno no deformado	9
2.1	Estructura cristalina.....	9
2.2	Estructura electrónica.....	11
2.3	Hamiltoniano alrededor de un punto de Dirac.....	16
3	Grafeno deformado	19
3.1	Conductividad óptica del grafeno deformado.....	19

3.2	Polarizabilidad del grafeno.....	22
3.2.1	Polarizabilidad del grafeno deformado.....	22
3.2.2	Polarizabilidad en la RPA.....	25
3.3	Transiciones ópticas del grafeno.....	29
3.4	Región no retardada y retardada.....	29
3.5	Región de amortiguamiento de Landau.....	31

4 Plasmónica de grafeno 33

4.1	Plasmones polaritones de superficie (SPPs).....	33
4.2	Amortiguamiento de los SPPs.....	34
4.3	Relación de dispersión de una monocapa de grafeno.....	35
4.4	TM-SPP en una monocapa de grafeno deformado.....	41
4.4.1	Longitud de propagación y profundidad de penetración.....	41
4.4.2	Cálculo de q_1 y q_2	42

5 Resultados y conclusiones 47

5.1	Resultados.....	47
5.1.1	Conductividad óptica.....	47
5.1.2	Profundidad de penetración y longitud de propagación.....	52
5.2	Conclusiones.....	61

6 Referencias 63

Lista de abreviaturas

PZB. Acrónimo de *primera zona de Brillouin*.

CVD. Acrónimo del inglés *Chemical Vapor Deposition* (deposición química en fase de vapor).

RPA. Acrónimo del inglés *Random Phase Approximation* (aproximación de fase aleatoria).

RPA-RT. Acrónimo del inglés *Random Phase Approximation – Relaxation Time* (aproximación de fase aleatoria con tiempo de relajación).

SPE. Acrónimo del inglés *Single Particle Excitation* (excitación de una partícula).

SPs. Acrónimo del inglés *Surface Plasmons* (plasmones de superficie).

SPPs. Acrónimo del inglés *Surface Plasmons-Polaritons* (plasmones polaritones de superficie).

TE. Acrónimo de *transversal eléctrico*.

TM. Acrónimo de *transversal magnético*.

TE-SPPs. Acrónimo del inglés *Transverse Electric – Surface Plasmons-Polaritons* (plasmones polaritones de superficie TE).

TM-SPPs. Acrónimo del inglés *Transverse Magnetic – Surface Plasmons-Polaritons* (plasmones polaritones de superficie TM).

Resumen

En esta tesis se estudia teóricamente los efectos de deformación uniforme sobre la longitud de propagación y profundidad de penetración del campo eléctrico de los plasmones polaritones de superficie (SPPs) con polarización p (TM) en grafeno incrustado entre dos medios dieléctricos.

Usando la teoría de respuesta lineal y la conductividad óptica para grafeno deformado como función del tensor de deformación de la red hexagonal (*honeycomb lattice*), se obtiene la polarizabilidad para grafeno deformado en la *Random Phase Approximation – Relaxation Time* (RPA-RT).

A partir de la relación de dispersión en términos de la polarizabilidad deformada, se hallan los efectos de la deformación sobre los SPPs obteniendo una dependencia de la magnitud y dirección de la deformación aplicada, esta dependencia juega un papel importante en la manipulación de la longitud de propagación y profundidad de penetración de los SPPs con polarización TM en grafeno.

Abstract

In this thesis we study theoretically the effects of an applied uniform strain on the propagation length and electric field penetration depth of p -polarized (TM) Surface Plasmons-Polaritons (SPPs), on graphene embedded between two dielectric media.

Using the linear response theory and the optical conductivity of strained graphene as a function of the honeycomb lattice strain tensor, the strained graphene polarizability is obtained in the Random Phase Approximation – Relaxation Time (RPA-RT).

From the dispersion relation in terms of the strained polarizability, the effects of the strain on SPPs, depend of the magnitude and direction of the applied strain, this dependence plays an important role in the manipulation of the propagation length and penetration depth of TM-polarized graphene SPPs.

Introducción

En este capítulo se hace una breve revisión de las propiedades, los métodos de obtención, las aplicaciones potenciales y la plasmónica de grafeno, así como también se describen los objetivos de la presente tesis. Se comienza distinguiendo las diferentes estructuras moleculares que presenta el carbono (alótropos) y se identifica al grafeno como un alótropo del carbono. A continuación, se describen algunas de sus propiedades eléctricas, mecánicas, ópticas, térmicas y químicas, además de las posibles aplicaciones de este nanomaterial y de los métodos empleados para su fabricación entre los cuales se encuentran la exfoliación micromecánica, crecimiento epitaxial y deposición química en fase de vapor (CVD). Posteriormente se comenta sobre los plasmones polaritones de superficie (SPPs) en grafeno con y sin deformación destacando sus ventajas y aplicaciones frente a materiales plasmónicos convencionales en el intervalo de frecuencias del infrarrojo medio y los terahertz. Para terminar, se detallan los objetivos generales y específicos de esta tesis.

1.1 Alótropos de carbono.

El carbono, presenta una familia de hibridaciones entre los orbitales s y p de tipo sp , sp^2 y sp^3 Fig. 1.1. [40]. Esta propiedad da origen a una gran variedad de alótropos, entre los cuales se encuentran:

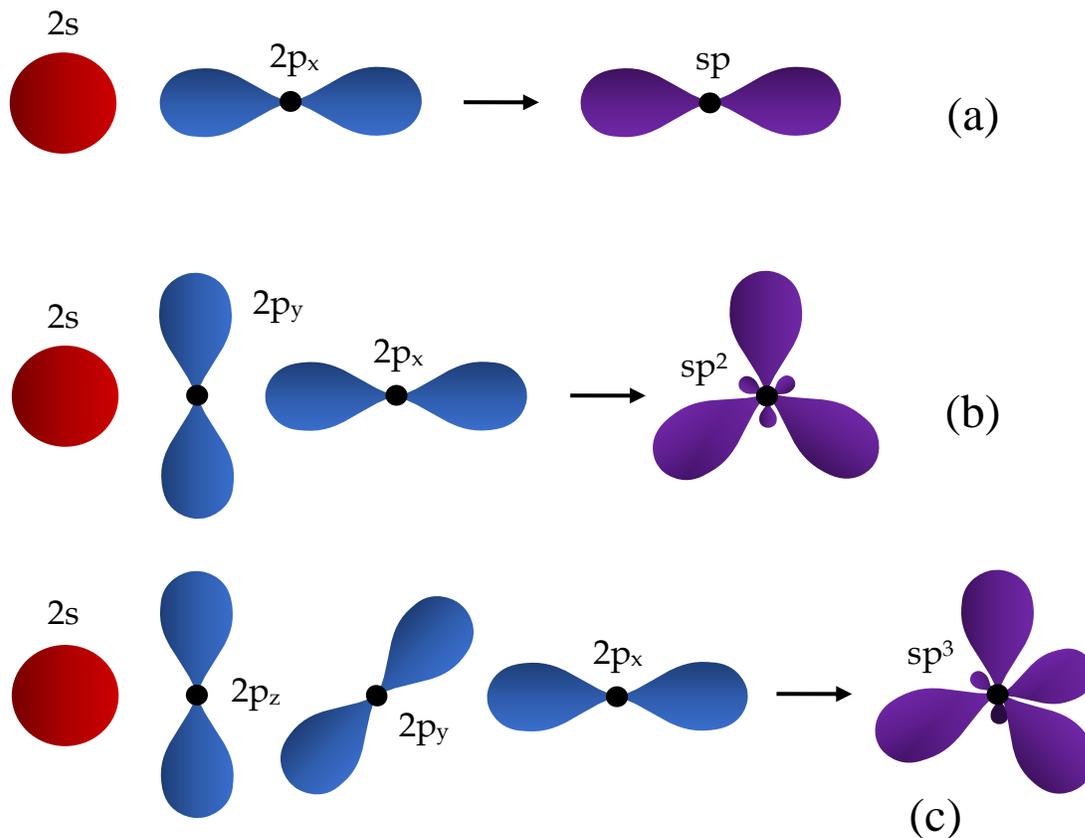
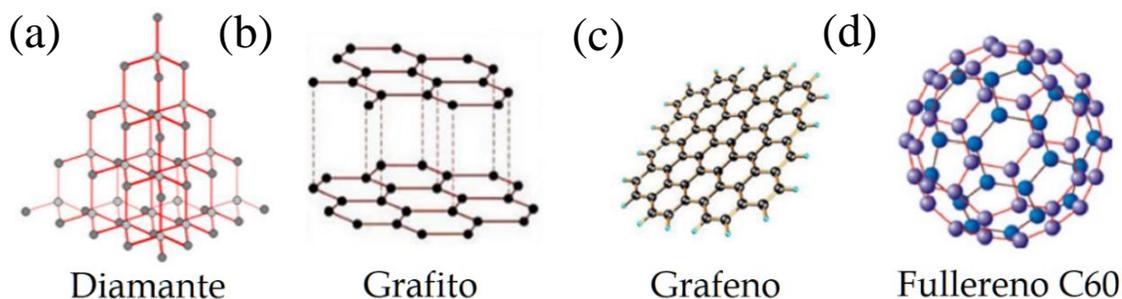


Figura 1.1

Orbitales híbridos del átomo de carbono. Adaptada de [66]. **(a)** Hibridación sp : Un orbital s (rojo) y un orbital p (azul) se hibridan para formar dos orbitales sp (púrpuras) con geometría lineal (180° de separación entre orbitales sp). **(b)** Hibridación sp^2 : Un orbital s (rojo) y dos orbitales p (azules) se hibridan para formar tres orbitales sp (púrpuras) con geometría triangular plana (120° de separación entre orbitales sp). **(c)** Hibridación sp^3 : Un orbital s (rojo) y tres orbitales p (azules) se hibridan para formar cuatro orbitales sp (púrpuras) con geometría tetraédrica (109.5° de separación entre orbitales sp).

- **Diamante** En el diamante los átomos de carbono tienen cuatro primeros vecinos enlazados covalentemente (enlace- σ). La estructura cristalina que posee el diamante

**Figura 1.2**

Algunos alótopos del carbono. (a) Diamante. (b) Grafito. (c) Grafeno. (d) Fullerenos C60. Tomada de [49].

es una variante de la estructura FCC Fig. 1.2 (a) y además presenta una hibridación sp^3 [17].

- **Grafito:** Consiste en varias monocapas de carbono separadas 0.335 nm y enlazadas débilmente por fuerzas de Van der Waals (enlace- π), cada capa constituye una red hexagonal de átomos de carbono unidos por enlaces covalentes (enlace- σ) Fig. 1.2 (b). La estructura cristalina del grafito presenta una hibridación sp^2 [8].
- **Grafeno:** Consiste en una monocapa bidimensional de átomos de carbono dispuestos en una red hexagonal o red de panal de abeja (en inglés *honeycomb lattice*) unidos por enlaces covalentemente (enlace- σ). Fig. 1.2 (c). La estructura cristalina de grafeno presenta una hibridación sp^2 [56].
- **Fullerenos:** Los fullerenos son átomos de carbono conectados por enlaces simples y dobles para formar una malla cerrada o parcialmente cerrada con elevada simetría, dando lugar a formaciones esféricas o elipsoidales Fig. 1.2 (d) [40].

1.2 Generalidades del grafeno.

El grafeno fue nombrado así por H.P. Boehm y su equipo en 1962 [6] y no fue hasta el 2004 cuando Andre Geim y Konstantin Novoselov, aislaron por primera vez una muestra de grafeno empleando un proceso de exfoliación de láminas a partir del grafito, dicho proceso consiste en remover las capas superficiales de un trozo de grafito usando cinta adhesiva repetidas veces hasta obtener láminas más y más delgadas de grafeno [19, 43], por esta contribución a la ciencia fueron galardonados con el Premio Nobel de Física en 2010, desde entonces ha habido un tremendo interés en el estudio de las propiedades del grafeno [56], los métodos de obtención [41] y sus aplicaciones potenciales [41, 65]. Hoy en día sabemos que el grafeno exhibe propiedades inusuales sorprendentes, algunas de las cuales son:

- **Propiedades electrónicas:** Los electrones bidimensionales en grafeno presentan una movilidad electrónica a temperatura ambiente de $\mu \sim 2 \times 10^5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, densidades electrónicas de $n \sim 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ para grafeno suspendido [7] y una elevada velocidad de Fermi de $v_F \sim 1 \times 10^6 \text{ m/s}$ [16].
- **Propiedades mecánicas:** Tiene un módulo de Young de $\sim 1 \text{ TPa}$ [42], también presenta una fractura por deformación de hasta $\sim 13 - 19\%$ y $\sim 20 - 26\%$ a lo largo de la dirección armchair y zigzag respectivamente [9, 81].
- **Propiedades ópticas:** Una monocapa de grafeno es capaz de absorber 2.3% de luz blanca [48], con el pico de máxima absorción alrededor de los 270 nm [56] y en el rango de los terahertz de 1.54 – 2.23 THz su capacidad de absorción es $\geq 90\%$ [27]. Para grafeno dopado también es posible alcanzar una absorción del 90% a 2.0 THz [34].
- **Propiedades térmicas:** Posee una conductividad térmica a temperatura ambiente de $\sim 4840 - 5300 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, mayor a la del diamante [3].

- **Propiedades químicas:** Las láminas de grafeno puro no suelen ser reactivas, pero la funcionalización de la superficie las hace más reactivas [56].

Uno de los mayores retos desde el descubrimiento del grafeno ha sido el desarrollo de métodos para su fabricación, algunos de estos métodos son:

- **Exfoliación micromecánica:** Fue el procedimiento que utilizaron Geim y Novoselov para producir grafeno, es un método impreciso que se usa comúnmente en el estudio de las propiedades ópticas y de transporte del grafeno y llegándose a fabricar láminas con áreas de hasta $\sim 1 \text{ mm}^2$ [45]. Consiste en desprender repetidamente láminas superficiales de un trozo de grafito usando cinta adhesiva, posteriormente para despegar el grafeno de la cinta, se pega a un sustrato determinado Si, SiO_2 [72], etc. para finalmente desprenderla de éste, dando como resultado láminas de grafeno de diferentes tamaños y grosores sobre diferentes sustratos Fig. 1.3 (a) [10, 41].
- **Crecimiento epitaxial sobre SiC:** Es un método que se emplea para producir áreas de grafeno de hasta $\sim 10 \times 5 \text{ mm}^2$ [38] con grosor uniforme y de alta calidad. Consiste en calentar hasta $\sim 1300^\circ \text{ C}$ [18] un sustrato de SiC que se encuentra en el interior de una cámara de vacío mediante un láser que ocasiona la sublimación del Si, dejando como resultado una superficie de grafeno Fig. 1.3 (b) [63].
- **CVD:** Es una técnica usada para producir grafeno de alta calidad a gran escala, llegándose a fabricar láminas de hasta $\sim 600 - 900 \text{ cm}^2$ [22, 79]. Este método involucra la combinación de un gas de hidrocarburo generalmente metano con un sustrato superficial Fe, Co, Ni, Cu, Pd [46], Si [47], SiO_2 [76], MgO, ZrO_2 [70] etc. que se calienta y alcanza temperaturas de $\sim 1000^\circ \text{ C}$ [64] dentro de una cámara a temperatura, presión y flujo de gas controlado. El gas y el sustrato reaccionan químicamente y por deposición crece una delgada capa de grafeno sobre el sustrato antes mencionado Fig. 1.3 (c) [41].

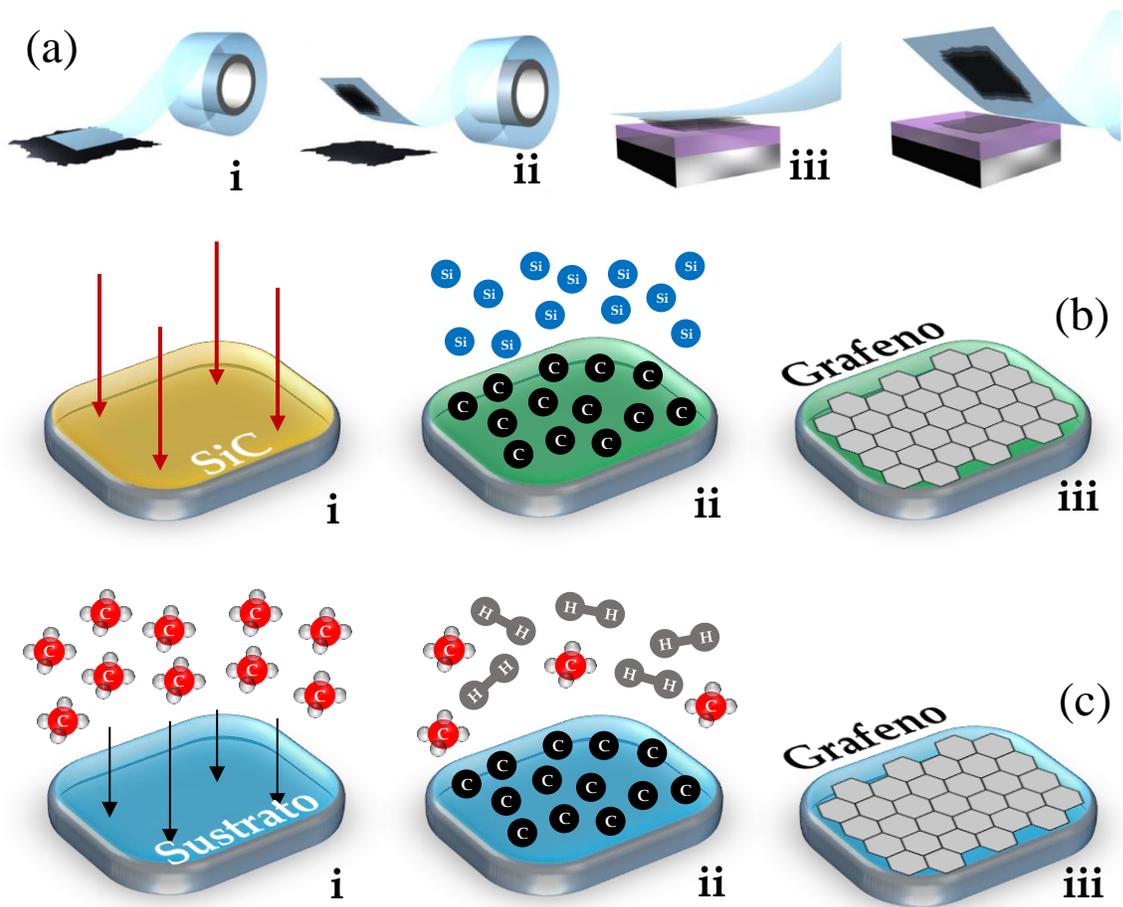


Figura 1.3

Algunos métodos para la fabricación de grafeno. **(a)** Exfoliación micromecánica. (i) Cinta adhesiva presionada contra grafito. (ii) Algunas capas se desprenden y quedan adheridas a la cinta. (iii) La cinta se presiona contra un sustrato previamente elegido. (iv) Al despegar la cinta las capas de grafeno quedan sobre el sustrato. Tomado de [50]. **(b)** Crecimiento epitaxial sobre SiC. (i) Calentamiento del sustrato de SiC empleando un láser. (ii) Sublimación de los átomos de Si del sustrato caliente. (iii) Los átomos de carbono sobre el sustrato se reorganizan para formar capas de grafeno bajo las condiciones apropiadas. Adaptada de [18] **(c)** CVD. (i) Reacción química del gas metano con el sustrato caliente. (ii) Deposición de los átomos de carbono sobre el sustrato. (iii) Reorganización de los átomos de carbono sobre el sustrato para formar capas de grafeno. Adaptada de [33].

El precio del grafeno depende de su calidad y volumen, es decir, dependerá del sector al que esté dirigido. A modo de ejemplo, actualmente varias capas de grafeno con un grosor aproximado de 3 – 10 nm tienen un precio de \$65 – \$90 dólares por kg para el grado de investigación y \$50 – \$75 dólares por kg para el grado industrial (este grado es más barato porque presenta un mayor número de capas y defectos), con el precio disminuyendo conforme incrementa el volumen [11]. Es importante destacar que gracias a las extraordinarias propiedades que presenta el grafeno, existe una gran variedad de aplicaciones en diversos campos, algunas de ellas son transistores [61], súper capacitores [15], baterías [68], celdas solares [13], pantallas de grafeno [2], desalinización del agua [24], biosensores [62], imagenología [78], terapia fototérmica [78] y tratamiento contra el cáncer [12].

1.3 Plasmónica de grafeno.

La electrónica tiene como objeto de estudio a los electrones, análogamente la plasmónica estudia los plasmones, los SPPs son ondas electromagnéticas evanescentes acopladas a las oscilaciones de la densidad de carga en la superficie de un metal, que se propagan a lo largo de la interfaz de un dieléctrico y un metal [5, 59]. Los SPPs son generados en grafeno en el rango de frecuencias del infrarrojo medio de 4 – 15 μm (20 – 75 THz) [77] y los terahertz de 1 – 10 THz [28], lo cual no es posible usando materiales plasmónicos convencionales tales como Au, Ag y Al [51], además pueden ser excitados mediante el acoplamiento de un prisma usando configuraciones tipo Otto [58] o Kretschmann [80]. Dentro de sus características los SPPs en grafeno exhiben, un fuerte confinamiento, una longitud de propagación relativamente más larga que en metales y la existencia de SPPs con polarización TE y TM (polarización *s* y *p* respectivamente) [59, 75], estas características extraordinarias abren una variedad de aplicaciones potenciales como biosensores [60], fotodetectores [14], guías de ondas superficiales [74] y moduladores [69]. Sobre la deformación de grafeno se ha encontrado que, al ser sometido a una tensión uniforme, la variación de la magnitud de deformación y orientación de la tensión aplicada influyen en la modificación de la conductividad óptica, la cual juega un papel importante en la relación de dispersión y las propiedades de los SPPs. [30, 35, 59].

1.4 Justificación.

Los metales convencionales son usados ampliamente en el campo de la plasmónica, sin embargo, el grafeno posee propiedades mecánicas, ópticas, térmicas y eléctricas extraordinarias que lo convierten en un material plasmónico alternativo a estos. Estudiar los efectos de deformación en grafeno permite un mayor entendimiento de la plasmónica del grafeno y el desarrollo de dispositivos fotónicos mucho más rápidos, con pocas pérdidas y tamaños más compactos en diferentes rangos de frecuencia (principalmente de los terahertz al infrarrojo medio).

1.5 Objetivos.

1.5.1 Objetivo general.

El objetivo general de la presente tesis es estudiar teóricamente los efectos de una deformación uniforme sobre la longitud de propagación y profundidad de penetración del campo eléctrico de los SPPs con polarización TM en grafeno incrustado entre dos medios dieléctricos.

1.5.2 Objetivos específicos.

- Encontrar una expresión analítica para la parte real e imaginaria del número de onda de los TM-SPPs en grafeno deformado uniformemente.
- Realizar un análisis gráfico de la propagación y penetración del campo eléctrico de los TM-SPPs en grafeno deformado uniformemente y comparar los efectos con y sin deformación.
- Concluir si es posible optimizar los TM-SPPs en grafeno al modificar la magnitud y orientación de la deformación aplicada.

Grafeno sin deformación

En este capítulo se revisa la estructura cristalina y electrónica de una monocapa de grafeno sin deformación. Se inicia con un breve análisis de la red hexagonal, donde se calculan los vectores primitivos tanto en el espacio real como en el recíproco, las posiciones de los primeros vecinos y la primera zona de Brillouin (PZB), cuyas esquinas son conocidas como los puntos de Dirac. Se continúa con la estructura electrónica donde se revisan los enlaces y orbitales híbridos que presenta el grafeno sin deformación, así como también la estructura de bandas que se ha calculado mediante el método de *tight-binding*. Finalmente se obtiene el hamiltoniano efectivo haciendo un desarrollo alrededor de los puntos de Dirac en la región conocida como los conos de Dirac.

2.1 Estructura cristalina.

El grafeno es una estructura bidimensional de átomos de carbono dispuestos en una red hexagonal o red de panal de abeja (en inglés *honeycomb lattice*) con una separación de átomos de carbono con sus primeros vecinos de $a \approx 0.142$ nm Fig. 2.1 (a). Una manera de definir los vectores primitivos sería [37]

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}\hat{x} + 3\hat{y}) \quad \text{y} \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}\hat{x} + 3\hat{y}), \quad (2.1)$$

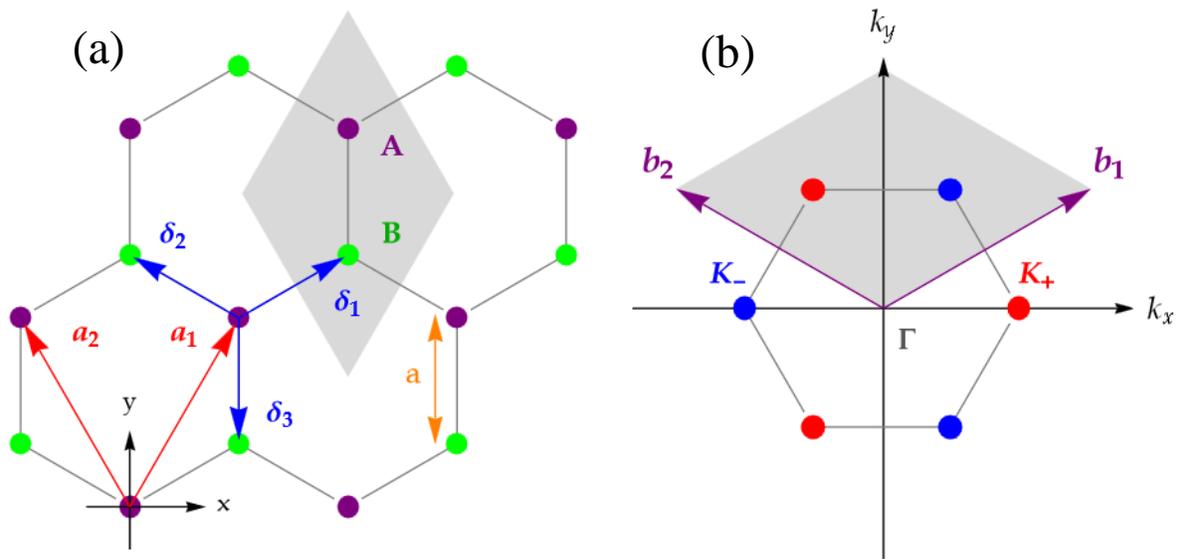


Figura 2.1

(a) Red cristalina de grafeno sin deformación en el espacio real. Adaptada de [37]. La red consta de dos subredes de Bravais A (puntos púrpuras) y B (puntos verdes) con dos átomos por celda unitaria, los vectores primitivos son \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 (rojos) y la celda primitiva está representada por el área sombreada (gris). Los vectores desde un átomo de la subred A hasta sus primeros vecinos de la subred B son δ_1 , δ_2 y δ_3 (azules) y su separación es $a \approx 0.142$ nm (naranja). (b) Red cristalina de grafeno sin deformación en el espacio recíproco y PZB. Los vectores primitivos de la red recíproca son \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 (púrpura) y la celda recíproca está representada por el área sombreada (gris). El área hexagonal es la PZB y los vértices son los puntos de Dirac \mathbf{K}_+ (rojos) y \mathbf{K}_- (azules).

donde, la constante de red es $a_0 = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a\sqrt{3} \approx 0.246$ nm. Cabe señalar que la red cristalina del grafeno no es una red de Bravais, pues los átomos de carbono no pueden ser generados usando el vector de traslación $\mathbf{R} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$ siendo m y n enteros, por esta razón la estructura del grafeno consiste de dos subredes (A y B) y la red primitiva contendrá dos átomos de carbono con la característica de que sólo los átomos de la subred A son generados por el vector \mathbf{R} y equivalentemente para la subred B Fig. 2.1 (a). Dicho esto, para

la subred A los vectores que conectan un átomo de carbono con sus primeros vecinos son [37, 52]

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y}), \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y}) \quad \text{y} \quad \boldsymbol{\delta}_3 = -a\hat{y}. \quad (2.2)$$

Ahora bien, la red recíproca como se muestra en la Fig. 2.1 (b) también es una red hexagonal, pero con una rotación de 90° respecto a la red en el espacio real. Los vectores primitivos de la red recíproca pueden obtenerse usando la condición $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ y quedan definimos como

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y}) \quad \text{y} \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(-\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y}). \quad (2.3)$$

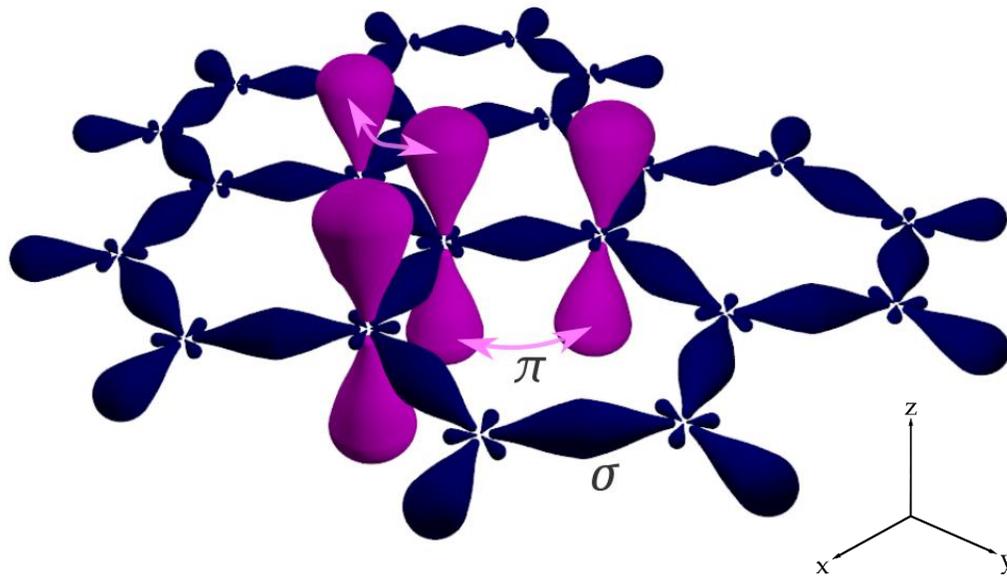
La PZB se encuentra usando (2.3) y la celda de Wigner-Seitz Fig. 2.1 (b). Los seis puntos en las esquinas de la PZB son conocidos como puntos de Dirac y pueden ser clasificados en dos grupos, si se elige el punto K_+ como un punto del primer grupo y K_- como un punto del segundo grupo, sus vectores son [52]

$$\mathbf{K}_+ = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\hat{x} \quad \text{y} \quad \mathbf{K}_- = -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\hat{x}, \quad (2.4)$$

los demás puntos se obtienen sumando (2.3) y (2.4).

2.2 Estructura electrónica.

El átomo de carbono cuenta con seis electrones, cuya configuración electrónica es $1s^2 2s^2 2p^2$ donde, los dos electrones del orbital $1s$ son internos y los cuatro electrones de los orbitales $2s$, $2p_x$ y $2p_y$ son de valencia. Cuando los átomos de carbono se juntan uno con otro, un electrón del orbital $2s$ es promovido al orbital $2p_z$ para formar un orbital híbrido.

**Figura 2.2**

Enlaces covalentes σ (azules) y π (púrpuras) en grafeno. Los enlaces σ son el resultado del traslape de los orbitales sp^2 , mientras que los enlaces π son el resultado de la hibridación de dos orbitales $2p_z$ lateralmente. Tomada de [73].

En grafeno los orbitales $2s$, $2p_x$ y $2p_y$ se combinan para formar tres orbitales híbridos sp^2 que se encuentran en el plano XY y un orbital $2p_z$ sobre el eje Z , el traslape de los orbitales híbridos sp^2 entre dos átomos de carbono adyacentes crea un enlace σ , por lo que cada átomo de carbono se enlaza con tres vecinos formando una estructura plana, mientras que la interacción de los orbitales $2p_z$ entre átomos vecinos crea enlaces π , siendo los electrones que se encuentra en este orbital (llamados electrones π) los responsables de las propiedades eléctricas y ópticas del grafeno Fig. 2.2. La estructura electrónica de bandas en grafeno puede ser obtenida usando el modelo de enlace fuerte (en inglés *tight-binding model*) considerando sólo la contribución a primeros vecinos, pues hay un solo electrón en el orbital $2p_z$ y está fuertemente enlazado al átomo. El hamiltoniano de enlace fuerte \hat{H} que satisface la ecuación de Schrödinger es

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

y la función de onda $\psi(\mathbf{r})$ está definida como una superposición de dos funciones de Bloch ψ_a y ψ_b que son funciones de onda de las subredes A y B respectivamente [37]

$$\psi(\mathbf{r}) = c_a\psi_a(\mathbf{r}) + c_b\psi_b(\mathbf{r}), \quad (2.6)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{c_a}{\sqrt{N}} \sum_a e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_a} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_a) + \frac{c_b}{\sqrt{N}} \sum_b e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_b} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_b), \quad (2.7)$$

donde, N es el número de celdas unitarias, a y b son índices sobre todos los átomos de carbono de las subredes A y B respectivamente, c_a y c_b representan las amplitudes de las funciones de onda en los sitios de red de los átomos de carbono de las subredes A y B respectivamente, \mathbf{k} es el vector de onda, $\phi_l = \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)$ es el estado base del electrón π de un átomo de carbono aislado y localizado en \mathbf{R}_l , donde $l = a$ corresponde a la subred A y $l = b$ a la subred B . Las funciones de onda ψ_a y ψ_b están normalizadas y el traslape entre ellas está prohibido, esto es

$$\langle \psi_i(\mathbf{r}) | \psi_j(\mathbf{r}) \rangle = \delta_{ij}, \quad (2.8)$$

multiplicando ambos lados de (2.7) por ψ_a^* y ψ_b^* se obtiene

$$c_a \langle \psi_a | \hat{H} | \psi_a \rangle + c_b \langle \psi_a | \hat{H} | \psi_b \rangle = c_a E, \quad (2.9)$$

$$c_a \langle \psi_b | \hat{H} | \psi_a \rangle + c_b \langle \psi_b | \hat{H} | \psi_b \rangle = c_b E.$$

Para evadir la dificultad que supone encontrar las eigenenergías en (2.9), se considera únicamente la interacción de cada átomo de carbono con sus tres primeros vecinos Fig. 2.1 (a) y se asume que las interacciones más allá de los primeros vecinos son despreciables. Tomando en cuenta esta aproximación y considerando como primer caso que el electrón π

salta de un átomo de la subred A a la B y como segundo caso cuando salta de la B a la A se obtiene respectivamente

$$c_a \langle \phi_a | \hat{H} | \phi_a \rangle + c_b \langle \phi_a | \hat{H} | \phi_b \rangle \sum_{n=1}^3 e^{-ik \cdot \delta_n} = c_a E, \quad (2.10)$$

$$c_a \langle \phi_b | \hat{H} | \phi_a \rangle \sum_{n=1}^3 e^{ik \cdot \delta_n} + c_b \langle \phi_b | \hat{H} | \phi_b \rangle = c_b E,$$

$$\begin{pmatrix} \xi & -t \sum_{n=1}^3 e^{-ik \cdot \delta_n} \\ -t \sum_{n=1}^3 e^{ik \cdot \delta_n} & \xi \end{pmatrix} \begin{bmatrix} c_a \\ c_b \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} c_a \\ c_b \end{bmatrix}, \quad (2.11)$$

el sistema de ecuaciones (2.10) se puede escribir en forma matricial como se muestra en (2.11), definiendo los parámetros ξ y t como

$$\xi = \langle \phi_a | \hat{H} | \phi_a \rangle = \langle \phi_b | \hat{H} | \phi_b \rangle, \quad (2.12)$$

$$t = -\langle \phi_a | \hat{H} | \phi_b \rangle = -\langle \phi_b | \hat{H} | \phi_a \rangle,$$

donde ξ es la energía de autointeracción y t es la energía de salto a primeros vecinos (en inglés *nearest-neighbor hopping energy*) cuyo valor aproximado es $t \approx 2.5 - 3.0$ eV [32]. Las eigenenergías E se obtienen al encontrar los autovalores de (2.11), luego de hacer una simplificación se llega a [37]

$$E(\mathbf{k}) = \xi \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3} k_x a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_x a\right) \cos\left(\frac{3}{2} k_y a\right)}. \quad (2.13)$$

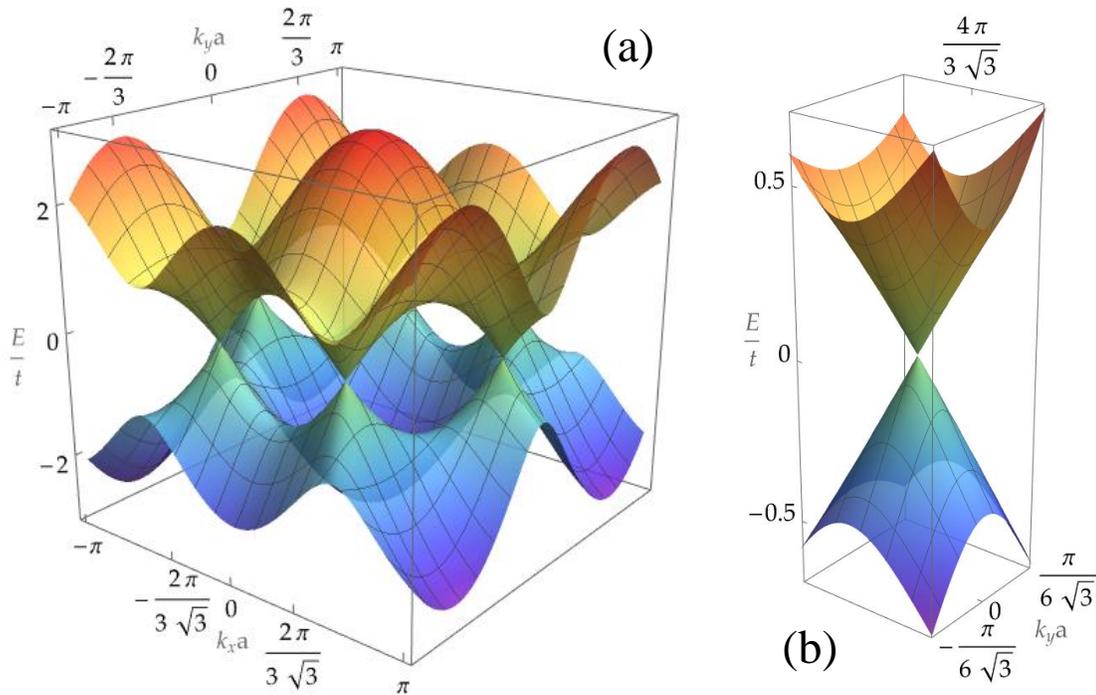


Figura 2.3

(a) Estructura de las bandas π de grafeno obtenidas a partir de (2.13), por simplicidad se tomó $\xi = 0$. La banda superior corresponde a la de conducción y la inferior a la de valencia, ambas bandas se tocan en cada uno de los seis puntos de Dirac que se encuentran en las esquinas de la PZB. Adaptada de [20]. (b) Ampliación alrededor de los puntos de Dirac, región conocida como los conos de Dirac. Adaptada de [20].

La estructura de bandas queda descrita por (2.13), donde el signo positivo corresponde a la banda de conducción porque tiene la mayor energía, mientras que el signo menos corresponde a la banda de valencia porque tiene la menor energía. A ambas bandas se les conoce también como bandas π y su gráfica se muestra en la Fig. 2.3 (a), donde aprovechando que las bandas π se tocan en $E = \xi$, se ha tomado $\xi = 0$ y por simplicidad. Los puntos donde se tocan las bandas π , esto es $E(\mathbf{k}) = 0$ se conocen como puntos de Dirac (2.4) llamados así porque la estructura de bandas del grafeno puede ser descrita por la ecuación bidimensional de Dirac para fermiones sin masa en la vecindad de estos puntos.

Para grafeno sin deformación la energía de Fermi se localiza al nivel de la energía de los puntos de Dirac, donde la banda de valencia está completamente llena y la de conducción completamente vacía, cuando se consideran las interacciones más allá de los primeros vecinos las bandas π no son simétricas. Si se desarrolla (2.13) alrededor de un punto de Dirac haciendo la sustitución $\mathbf{k} = \mathbf{q} + \mathbf{K}_+$ o $\mathbf{k} = \mathbf{q} + \mathbf{K}_-$ con $q_x a \ll 1$ y $q_y a \ll 1$, para $\xi = 0$ y quedándose con los primeros términos, las eigenenergías E pueden expresarse como

$$E(\mathbf{q}) \approx \pm t \sqrt{\frac{9}{4} q_x^2 a^2 + \frac{9}{4} q_y^2 a^2} = \pm \frac{3}{2} at |\mathbf{q}| = \pm \hbar v_F q, \quad (2.14)$$

donde, v_F es la velocidad de Fermi en grafeno con valor aproximado de

$$v_F = \frac{3at}{2\hbar} \approx 10^6 \text{ m/s}. \quad (2.15)$$

La ecuación (2.14) indica que existe una región alrededor de los puntos de Dirac, donde la energía de los portadores de carga será linealmente proporcional al número de onda medido respecto del punto de Dirac escogido. A esta región se le conoce como cono de Dirac y se muestra en la Fig. 2.3 (b).

2.3 Hamiltoniano alrededor de un punto de Dirac.

El hamiltoniano efectivo que describe el comportamiento electrónico de los portadores de carga se obtiene desarrollando la matriz hamiltoniana en (2.11) alrededor de los puntos de Dirac tal como se hizo con (2.13). Este procedimiento es válido, pues en condiciones normales de dopaje la energía de Fermi en grafeno se aproxima al punto de contacto de los conos de Dirac. Para la sustitución $\mathbf{k} = \mathbf{q} + \mathbf{K}_+$ con $qa \ll 1$ y $\xi = 0$ en la matriz hamiltoniana de (2.11) se obtiene [52]

$$\hat{H}_{K_+} = \begin{pmatrix} 0 & -t\varphi(\mathbf{q}) \\ -t\varphi^*(\mathbf{q}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

$$\varphi(\mathbf{q}) = \sum_{n=1}^3 e^{-i(\mathbf{q}+\mathbf{K}_+)\cdot\delta_n} \approx -i\mathbf{q} \cdot (\delta_1 e^{-2\pi i/3} + \delta_2 e^{2\pi i/3} + \delta_3), \quad (2.17)$$

$$\varphi(\mathbf{q}) \approx \frac{3a}{2}(-q_x + iq_y). \quad (2.18)$$

Entonces el hamiltoniano alrededor de un punto de Dirac $\hat{H}_{K_{\pm}}$ puede ser expresado usando (2.15) y (2.18) como [37]

$$\hat{H}_{K_{\pm}} = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \pm q_x - iq_y \\ \pm q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F (\pm \bar{\sigma}_x q_x + \bar{\sigma}_y q_y), \quad (2.19)$$

donde $\bar{\sigma}_x$ y $\bar{\sigma}_y$ son las matrices de Pauli y $\boldsymbol{\sigma}$ su vector¹. Definiendo $\mathbf{q} = \hat{x}q_x + \hat{y}q_y$, el hamiltoniano (2.16) se puede reescribir como

$$\hat{H}_{K_+} = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q}, \quad (2.20)$$

$$\hat{H}_{K_-} = -\hbar v_F \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{q}. \quad (2.21)$$

Nótese que la cantidad de movimiento es $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{q} = \hbar(\hat{x}q_x + \hat{y}q_y)$ y que $q_z = 0$, esto indica que los electrones π únicamente se mueven en el plano xy de una monocapa de grafeno. Además, para grafeno $\boldsymbol{\sigma}$ no representa el spin electrónico sino un pseudospin que indica la subred en la que se encuentra el electrón. Explícitamente las eigenfunciones de (2.20) y (2.21) son [37]

¹ Las matrices de Pauli están definidas como

$$\boldsymbol{\sigma} = \hat{x}\bar{\sigma}_x + \hat{y}\bar{\sigma}_y + \hat{z}\bar{\sigma}_z = \hat{x} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \hat{y} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \hat{z} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

$$|\psi_{K_+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\theta_q} \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

$$|\psi_{K_-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{-i\theta_q} \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

donde, $\tan^{-1} \theta_q = q_y/q_x$ y cuyas eigenenergías son $E(\mathbf{q}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{q}|$, que concuerdan con (2.14).

Grafeno deformado

En este capítulo se obtendrá la polarizabilidad bidimensional del grafeno deformado uniformemente. Se inicia presentando la conductividad óptica del grafeno deformado en términos del tensor de deformación de la red hexagonal. A continuación, se emplea la teoría de respuesta lineal para hallar la polarizabilidad deformada. Como punto final, se comenta brevemente sobre las transiciones ópticas, las regiones de energías y las regiones de amortiguamiento de Landau.

3.1 Conductividad óptica del grafeno deformado.

Existen varias técnicas para deformar materiales bidimensionales (conocidas en inglés como *strain engineering techniques*), una técnica para deformar mecánicamente grafeno de forma homogénea y uniaxial consiste en transferir el grafeno a un sustrato flexible (PMMA, PC, PDMS, etc.) y doblarlo por los extremos, como consecuencia la cara inferior se comprime y la cara superior donde se encuentra el grafeno se tensiona, dando como resultado deformaciones uniformes de hasta 0.5 – 3.8% [54]. Otras técnicas involucran enrollar [71] o estirar [23, 54] el sustrato flexible.

Para estudiar los efectos de la deformación en grafeno es de suma importancia conocer como se ve afectada la conductividad óptica por ésta. Oliva-Leyva y Naumis [52] proponen

una expresión para la conductividad óptica del grafeno deformado, considerando la deformación como una pequeña perturbación en las energías de salto a primeros vecinos y empleando un modelo de enlace fuerte anisotrópico (en inglés *anisotropic tight-binding model*), donde las energías de salto a primeros vecinos se asumen como dependientes de la dirección. Posteriormente, derivan el hamiltoniano efectivo haciendo un desarrollo de la matriz hamiltoniana alrededor de los puntos de Dirac y usando ese resultado y el operador de corriente, dan la siguiente expresión para la conductividad óptica del grafeno

$$\bar{\sigma}(\omega) = \begin{pmatrix} \sigma_{xx}(\omega)_D & \sigma_{xy}(\omega)_D \\ \sigma_{yx}(\omega)_D & \sigma_{yy}(\omega)_D \end{pmatrix} \approx \sigma_0(\omega)(\bar{\mathbf{I}} - 2\beta\bar{\epsilon} + \beta\text{Tr}\{\bar{\epsilon}\}\bar{\mathbf{I}}), \quad (3.1)$$

donde, $\bar{\mathbf{I}}$ es la matriz identidad, $\bar{\epsilon}$ es el tensor de deformación de la red hexagonal definido por (3.2), $\beta \approx 2.37$ es el coeficiente de decaimiento exponencial de las energías de salto a primeros vecinos [39] y $\sigma_0(\omega)$ es la conductividad óptica del grafeno no deformado. Cabe mencionar que la anisotropía del grafeno causa que los conos de Dirac sufran un corrimiento (ya no están en las esquinas de la PZB) [55] y que desaparezcan y se forme una banda prohibida si la deformación es muy grande, lo que invalida (3.1). Oliva-Leyva garantiza la existencia de los conos de Dirac (que no haya banda prohibida) cuando la magnitud de deformación es $\epsilon < 0.22$. Por otra parte, el tensor de deformación para la red hexagonal sometida a una tensión mecánica, uniaxial y uniforme que forma un ángulo θ con la dirección *zigzag* Fig.3.1 está definido como [53]

$$\bar{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_{yy} \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} \cos^2 \theta - \nu \sin^2 \theta & (1 + \nu)\cos \theta \sin \theta \\ (1 + \nu)\cos \theta \sin \theta & \sin^2 \theta - \nu \cos^2 \theta \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

donde, ϵ es la magnitud de deformación y ν es el coeficiente de Poisson del grafeno con valor aproximado de $\nu \approx 0.14 - 0.19$, de acuerdo con estimaciones teóricas y experimentales [30, 36, 39, 57]. Una expresión analítica para la conductividad dinámica del grafeno σ_0 puede ser obtenida a través de la teoría de respuesta lineal y la fórmula de Kubo [20]

$$\sigma_0(\omega) = \sigma_{\text{intra}}(\omega) + \sigma_{\text{inter}}(\omega), \quad (3.3)$$

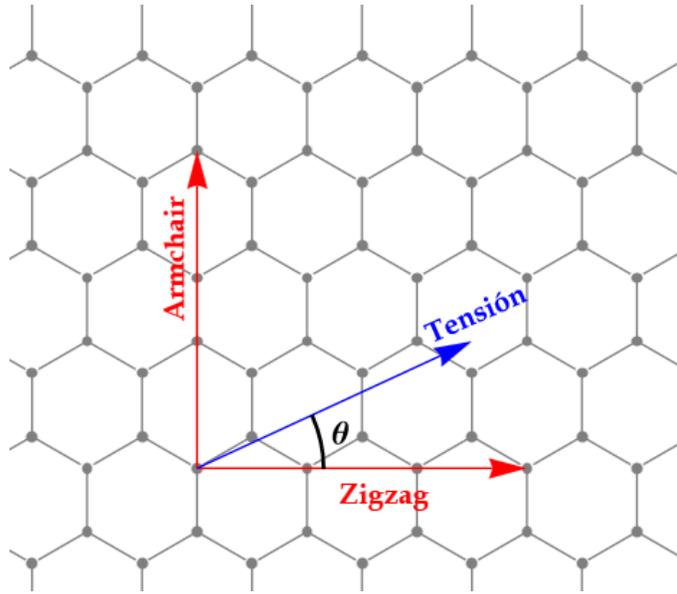


Figura 3.1

Grafeno sometido a una tensión uniforme y sus direcciones *zigzag* y *armchair*. El ángulo θ se mide respecto de la dirección *zigzag* y la tensión. La tensión provoca que la red cristalina del grafeno se deforme, en la imagen no está representada esta deformación. Adaptada de [59].

$$\sigma_{\text{intra}}(\omega) = \frac{\sigma_0}{\pi} \frac{4}{\hbar\gamma - i\hbar\omega} [E_F + 2k_B T \ln(1 + e^{-E_F/k_B T})], \quad (3.4)$$

$$\sigma_{\text{inter}}(\omega) = \sigma_0 \left[G\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right) + i \frac{4\hbar\omega}{\pi} \int_0^\infty d\xi \frac{G(\xi) - G(\hbar\omega/2)}{(\hbar\omega)^2 - 4\xi^2} \right], \quad (3.5)$$

$$G(u) = \frac{\sinh\left(\frac{u}{k_B T}\right)}{\cosh\left(\frac{E_F}{k_B T}\right) + \cosh\left(\frac{u}{k_B T}\right)}, \quad (3.6)$$

donde, E_F es la energía de Fermi del grafeno, T es la temperatura, k_B es la constante de Boltzmann y γ es el parámetro de amortiguamiento (ver Sección 4.2). Cabe señalar que la

conductividad óptica tiene dos contribuciones: La intrabanda $\sigma_{\text{intra}}(\omega)$ (transiciones en la misma banda, donde la cantidad de movimiento no se conserva) y la interbanda $\sigma_{\text{inter}}(\omega)$ (transiciones verticales a diferentes bandas, donde la cantidad de movimiento se conserva).

3.2 Polarizabilidad del grafeno.

3.2.1 Polarizabilidad del grafeno deformado.

La función de polarizabilidad, función de respuesta lineal o simplemente polarizabilidad $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$ es una función que depende del vector de onda \mathbf{q} y la frecuencia ω , sirve para cuantificar la respuesta de un material a un campo que varía espacial y temporalmente, siendo la “respuesta de un material” la razón de la densidad electrónica inducida entre la energía potencial eléctrica total, dicho de otra manera, la polarizabilidad determina la tendencia de las cargas en un material a ser polarizadas por un campo eléctrico. Tanto la conductividad óptica como la susceptibilidad eléctrica pueden ser encontradas en términos de la polarizabilidad. Ya que el estudio del grafeno consiste en un modelo bidimensional, la polarizabilidad será superficial y como el plano de grafeno es isotrópico la conductividad óptica es longitudinal. En este trabajo, la perturbación del sistema será debido a la variación de un campo eléctrico externo $\mathbf{E}_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t)$, el cual causa que los portadores de carga libres en el grafeno se redistribuyan creando una densidad de carga inducida $\rho_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t)$ y su correspondiente campo eléctrico inducido $\mathbf{E}_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t)$ en respuesta al campo externo. Por la teoría electrostática, el potencial escalar complejo $\varphi(\mathbf{r}, t)$ con dependencia $e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}$ está relacionado con el campo eléctrico total $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t)$ como [37]

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla\varphi(\mathbf{r}, t), \quad (3.7)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -i\mathbf{q}\varphi(\mathbf{r}, t), \quad (3.8)$$

obteniendo la transformada de Fourier de (3.8) se llega a

$$\mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega) = -i\mathbf{q}\varphi(\mathbf{q}, \omega), \quad (3.9)$$

de la ecuación de continuidad, la densidad de carga inducida $\rho_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t)$ y la densidad de corriente inducida $\mathbf{J}_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t)$ ambas con dependencia $e^{i(\mathbf{q}\mathbf{r}-\omega t)}$, tienen la relación

$$\frac{\partial \rho_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (3.10)$$

obteniendo la transformada de Fourier de (3.10) y desarrollando las derivadas se llega a

$$-i\omega\rho_{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega) + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{J}_{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega) = 0, \quad (3.11)$$

usando la relación $\mathbf{J}_{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega) = \bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{q}, \omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega)$ y sustituyendo (3.9) en el resultado se obtiene

$$-i\omega\rho_{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega) + i\mathbf{q} \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{q}, \omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega) = 0, \quad (3.12)$$

$$-i\omega\rho_{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega) + (\mathbf{q} \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{q}, \omega) \cdot \mathbf{q})\varphi(\mathbf{q}, \omega) = 0, \quad (3.13)$$

la función de polarizabilidad se define como [37]

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{n_{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega)}{V(\mathbf{q}, \omega)} = \frac{\rho_{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega)}{e^2\varphi(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (3.14)$$

donde, $n_{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega) = \rho_{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega)/(-e)$ es la densidad electrónica inducida y $V(\mathbf{q}, \omega) = -e\varphi(\mathbf{q}, \omega)$ es la energía potencial total. Sustituyendo (3.14) en (3.13) y simplificando se llega a

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\mathbf{q} \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{q}, \omega) \cdot \mathbf{q}}{i\omega e^2}, \quad (3.15)$$

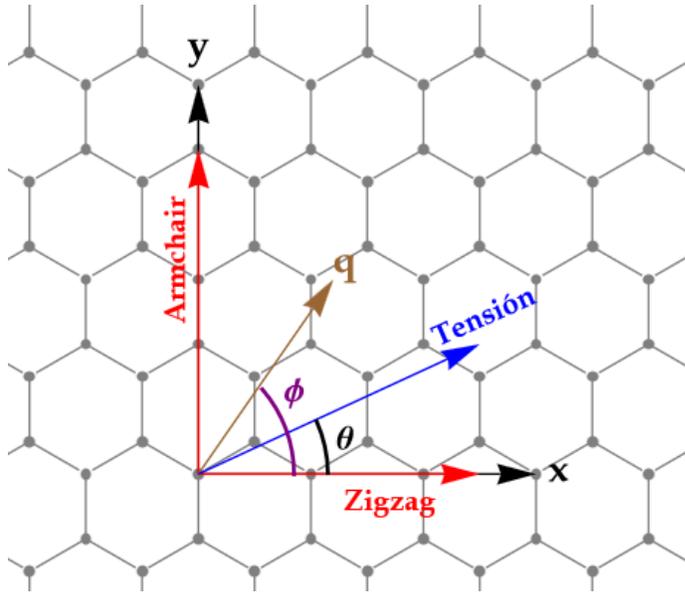


Figura 3.2

Grafeno sometido a una tensión uniforme y sus ángulos θ y ϕ . Se han elegido por conveniencia los ejes x y y paralelos a los ejes *zigzag* y *armchair* respectivamente. El ángulo θ se mide respecto de la dirección *zigzag* y la tensión, mientras que el ángulo ϕ se mide respecto de la dirección x y el vector de onda \mathbf{q} . Adaptada de [59].

al sustituir (3.1) se obtiene

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\sigma_0(\omega)[\mathbf{q} \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\beta\bar{\epsilon} + \beta\text{Tr}\{\bar{\epsilon}\}\bar{\mathbf{I}}) \cdot \mathbf{q}]}{i\omega e^2}. \quad (3.16)$$

Siguiendo los pasos anteriores y usando la relación $\mathbf{J}_{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega) = \sigma_0(\mathbf{q}, \omega)\mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega)$ se puede hallar la siguiente expresión para $\sigma_0(\omega)$ en términos de $\Pi_0(\mathbf{q}, \omega)$ [37]

$$\sigma_0(\omega) = \frac{i\omega e^2}{q^2} \Pi_0(\mathbf{q}, \omega), \quad (3.17)$$

sustituyendo (3.17) en (3.16) se llega a

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\Pi_0(\mathbf{q}, \omega)[\mathbf{q} \cdot (\bar{\mathbf{I}} - 2\beta\bar{\epsilon} + \beta\text{Tr}\{\bar{\epsilon}\}\bar{\mathbf{I}}) \cdot \mathbf{q}]}{q^2}, \quad (3.18)$$

empleando el tensor de deformación $\bar{\epsilon}$ definido por (3.2) y el vector de onda $\mathbf{q} = q(\cos \phi, \sin \phi)$ Fig. 3.2 se obtiene

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\Pi_0(\mathbf{q}, \omega)}{q^2} \left[\mathbf{q} \cdot \beta\epsilon \begin{pmatrix} 1 - (1 + \nu) \cos 2\theta & -(1 + \nu) \sin 2\theta \\ -(1 + \nu) \sin 2\theta & 1 + (1 + \nu) \cos 2\theta \end{pmatrix} \cdot \mathbf{q} \right], \quad (3.19)$$

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \Pi_0(\mathbf{q}, \omega)[1 - \beta\epsilon(1 + \nu) \cos[2(\theta - \phi)]]. \quad (3.20)$$

Finalmente, de (3.20) se identifica a $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$ como la polarizabilidad bidimensional del grafeno deformado mecánicamente, uniaxial y uniforme la cual está en función de la polarizabilidad bidimensional del grafeno sin deformación $\Pi_0(\mathbf{q}, \omega)$ multiplicado por una constante que se reconoce como el factor de deformación. Nótese, que si la magnitud de deformación ϵ es cero en (3.20) no hay deformación y la polarizabilidad corresponde a la del grafeno sin deformación.

3.2.2 Polarizabilidad en la RPA.

Encontrar una expresión para la polarizabilidad del grafeno sin deformación es una labor bastante difícil, pues involucra resolver la función de polarizabilidad considerando la respuesta de cada electrón al campo eléctrico, además de tomar en cuenta la interacción entre electrones. Estas dificultades pueden evadirse al considerar las siguientes aproximaciones [37]

- La magnitud del campo externo se asume lo suficientemente pequeña tal que únicamente la respuesta lineal a $\varphi(\mathbf{q}, \omega)$ es importante. Asumiendo esta aproximación, la polarizabilidad del grafeno sin deformación puede expresarse como en (3.14) y las respuestas no lineales de orden mayor son ignoradas.
- Se ignora la interacción electrón-electrón. Esta aproximación se justifica con el hecho de que la interacción electrón-electrón es considerada en parte por el efecto de apantallamiento y el hecho de que esta última es mucho más débil que la simple interacción Coulombiana.
- Sólo se considera la respuesta en fase de los electrones a la perturbación externa, por lo tanto, la diferencia de fase entre el campo externo y el campo inducido es independiente de la posición de los electrones. Por el contrario, la respuesta fuera de fase de los electrones se considera en promedio cero debido a la posición aleatoria de los electrones en una gran área.

Por lo anterior a esta aproximación se le conoce como aproximación de fase aleatoria (en inglés *random phase approximation, RPA*). Hwang y Das Sarma [25] calcularon analíticamente la polarizabilidad bidimensional del grafeno sin deformación en la RPA para una temperatura $\sim 0 - 300$ K y cuya expresión es

$$\Pi(q, \omega) = -\Pi^+(q, \omega) - \Pi^-(q, \omega), \quad (3.21)$$

donde, al introducir las cantidades adimensionales $x = q/k_F$, $v = \omega/E_F$ y la sustitución $\tilde{\Pi}(q, \omega) = \Pi(q, \omega)/D_0$ siendo $k_F = (\pi n)^{1/2}$ el número de onda de Fermi del grafeno con n como la densidad de portadores de carga superficial, $E_F = \Gamma k_F$ la energía de Fermi del grafeno con $\Gamma = \hbar v_F$, v_F la rapidez de Fermi y $D_0 = (4n/\pi)^{1/2}/\Gamma$ la densidad de estados a la energía de Fermi. La polarizabilidad (3.22) se puede escribir entonces como

$$\tilde{\Pi}(x, v) = -\tilde{\Pi}^+(x, v) - \tilde{\Pi}^-(x, v), \quad (3.22)$$

con

$$\tilde{\Pi}^+(x, v) = \tilde{\Pi}_1^+(x, v)\theta(v - x) + \tilde{\Pi}_2^+(x, v)\theta(x - v), \quad (3.23)$$

$$\tilde{\Pi}^-(x, v) = \frac{\pi x^2 \theta(x - v)}{8\sqrt{x^2 - v^2}} + i \frac{\pi x^2 \theta(v - x)}{8\sqrt{v^2 - x^2}}, \quad (3.24)$$

siendo

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}\tilde{\Pi}_1^+(x, v) &= 1 - \frac{1}{8\sqrt{v^2 - x^2}} \{f_1(x, v)\theta(|2 + v| - x) \\ &\quad + \operatorname{sgn}(v - 2 + x)f_1(x, -v)\theta(|2 - v| - x) \\ &\quad + f_2(x, v)[\theta(x + 2 - v) + \theta(2 - x - v)]\}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

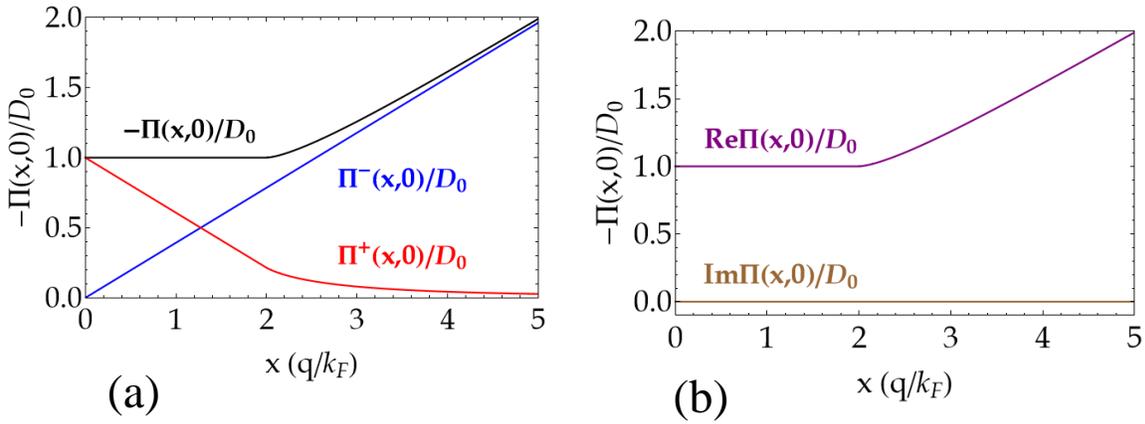
$$\begin{aligned} \operatorname{Re}\tilde{\Pi}_2^+(x, v) &= 1 - \frac{1}{8\sqrt{x^2 - v^2}} \{f_3(x, v)\theta(x - |v + 2|) \\ &\quad + f_3(x, -v)\theta(x - |v - 2|) \\ &\quad + \frac{\pi x^2}{2} [\theta(|v + 2| - x) + \theta(|v - 2| - x)]\}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Im}\tilde{\Pi}_1^+(x, v) &= \frac{-1}{8\sqrt{v^2 - x^2}} \{f_3(x, -v)\theta(x - |v - 2|) \\ &\quad + \frac{\pi x^2}{2} [\theta(x + 2 - v) + \theta(2 - x - v)]\}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Im}\tilde{\Pi}_2^+(x, v) &= \frac{\theta(v - x + 2)}{8\sqrt{x^2 - v^2}} \{f_4(x, v) \\ &\quad - f_4(x, -v)\theta(2 - x - v)\}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

con

$$\begin{aligned} f_1(x, v) &= (2 + v)\sqrt{(2 + v)^2 - x^2} \\ &\quad - x^2 \ln\left(\frac{\sqrt{(2 + v)^2 - x^2} + (2 + v)}{|\sqrt{v^2 - x^2} + v|}\right), \end{aligned} \quad (3.29)$$


Figura 3.3

Polarizabilidad del grafeno bidimensional (3.22) obtenida numéricamente en unidades de D_0 . **(a)** Gráficas de $\tilde{\Pi}^-(x, 0)/D_0$ (contribución de transiciones interbanda), $\tilde{\Pi}^+(x, 0)/D_0$ (contribución de transiciones intrabanda) y $\tilde{\Pi}(x, 0)/D_0 = -\tilde{\Pi}^+(x, 0)/D_0 - \tilde{\Pi}^-(x, 0)/D_0$ (contribución total). Adaptada de [25]. **(b)** Gráficas de la parte real e imaginaria de $-\tilde{\Pi}(x, 0)/D_0$. Nótese que $\text{Im}\tilde{\Pi}(x, 0)/D_0 = 0$ Inspirada de [25].

$$f_2(x, v) = x^2 \ln \left(\frac{v - \sqrt{v^2 - x^2}}{x} \right), \quad (3.30)$$

$$f_3(x, v) = (2 + v) \sqrt{x^2 - (2 + v)^2} + x^2 \text{sen}^{-1} \left(\frac{2 + v}{x} \right), \quad (3.31)$$

$$f_4(x, v) = (2 + v) \sqrt{(2 + v)^2 - x^2} - x^2 \ln \left(\frac{\sqrt{(2 + v)^2 - x^2} + (2 + v)}{x} \right), \quad (3.32)$$

donde, $\theta(u)$ es la función de Heaviside y $\text{sgn}(u)$ la función signo definidas como

$$\theta(u) = \begin{cases} 0 & \text{si } u < 0 \\ 1 & \text{si } u > 0, \end{cases} \quad (3.33)$$

$$\text{sgn}(u) = \begin{cases} -1 & \text{si } u < 0 \\ 0 & \text{si } u = 0 \\ 1 & \text{si } u > 0. \end{cases} \quad (3.34)$$

En la Fig. 3.3 se muestra la gráfica de (3.22) para $\omega = 0$. En lo que resta de la presente tesis, la polarizabilidad del grafeno sin deformación será aproximada por las ecuaciones (3.21) – (3.32).

3.3 Transiciones ópticas del grafeno.

Es importante distinguir entre dos tipos de procesos de absorción óptica que toman lugar en grafeno, los intrabanda y los interbanda. Cuando un fotón incide en una lámina de grafeno, existe una probabilidad de que éste transfiera su energía y cantidad de movimiento a un electrón causando una transición a un estado de mayor energía. Para los procesos de absorción intrabanda los estados inicial y final del electrón antes y después de la absorción de un fotón son en la misma banda, mientras que para los procesos de absorción interbanda los estados inicial y final son en diferentes bandas [37] Fig. 3.4.

3.4 Región no retardada y retardada.

Los SPPs en grafeno suelen clasificarse en dos regiones de energía: La región no retardada (en inglés *non-retarded region*) y la región retardada (en inglés *retarded region*) [37, 67]. La región no retardada está definida por $q \gg \omega/c$, en esta región el SPP se desacopla esencialmente del fotón y pasa a ser un SP [37], además la velocidad de grupo v_g del SP es mucho menor que la rapidez de la luz c , esto es, $v_g = \partial\omega/\partial q \ll c$, por lo que la interacción Coulombiana es instantánea y el tiempo de retardo puede ignorarse.

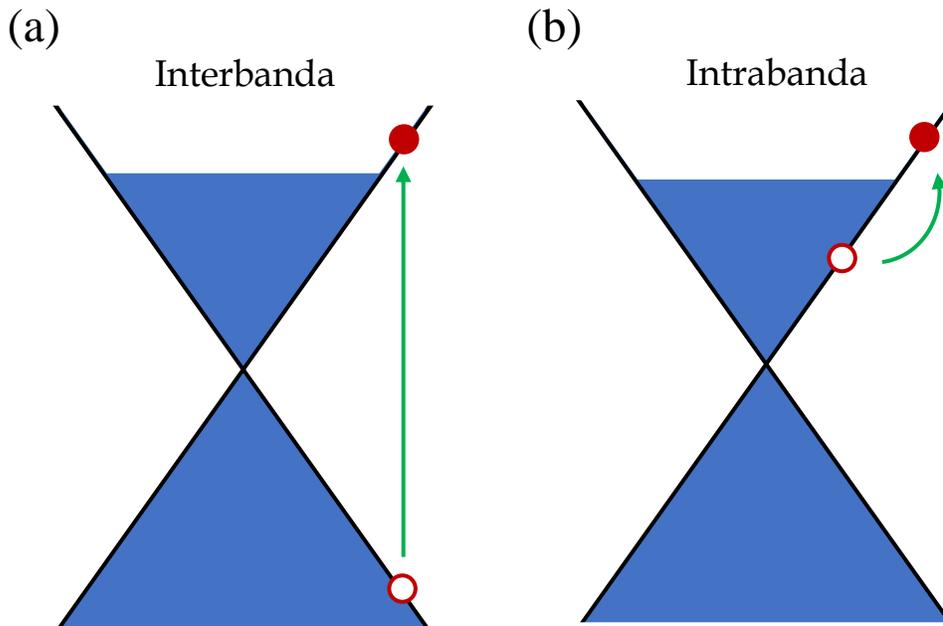
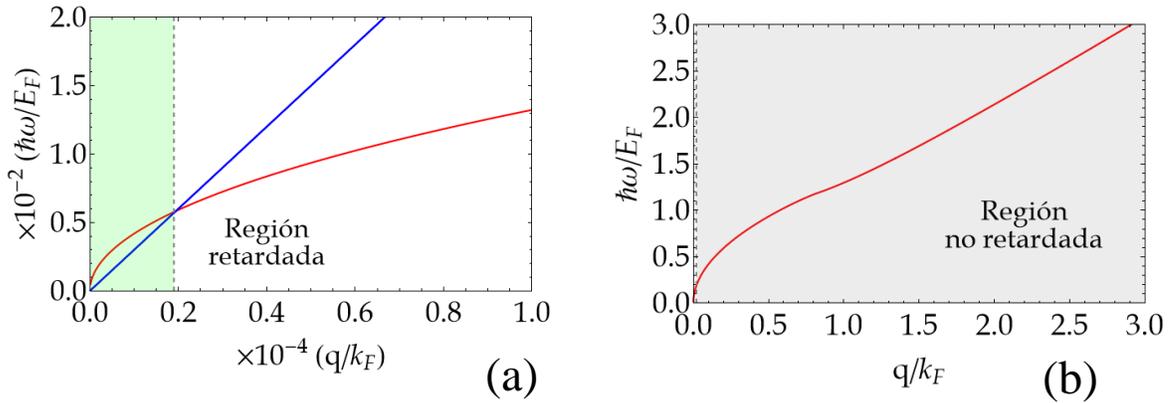


Figura 3.4

Transiciones ópticas de un electrón en grafeno. **(a)** En las transiciones interbanda no es necesaria la asistencia de ningún proceso de dispersión para la conservación de la cantidad de movimiento, por esta razón las transiciones interbanda son representadas usualmente por una línea que conecta el estado en la banda de valencia con el estado en la banda de conducción. Adaptada de [37]. **(b)** En las transiciones intrabanda es necesaria la asistencia de procesos de dispersión como la dispersión por fonones o la dispersión por impurezas para proporcionar el cambio de la cantidad de movimiento necesario, por ello las transiciones intrabanda se representan usualmente por líneas curvas. Adaptada de [37].

La región retardada está definida por $q \lesssim \omega/c$, en esta región la velocidad de grupo v_g del SPP es comparable con la rapidez de la luz c , esto es, $v_g = \partial\omega/\partial q \approx c$, por lo que la interacción Coulombiana no es instantánea y debe considerarse un tiempo de retardo. Es importante hacer notar que la polarizabilidad en la RPA discutida en la Sección 3.2.2 no incluye el tiempo de retardo.


Figura 3.5

Regiones de energía para los SPPs en grafeno sin deformación (curva roja) usando (3.20) y (4.38) para $\epsilon = 0$, $\epsilon_1 = 1$ (vacío) y $\epsilon_2 = 4$ (SiO_2). Adaptada de [67]. **(a)** La región retardada corresponde al área sombreada (verde) definida por $q \lesssim \omega/c$. Cuando la línea de luz en el vacío (línea azul) interseca al SPP (curva roja) se satisface $q = \omega/c$. **(b)** La región no retardada es el área sombreada (gris) definida por $q \gg \omega/c$. Nótese que la región retardada es diminuta en comparación a la región no retardada.

En la Fig. 3.5 se muestran las gráficas para ambas regiones de energía obtenidas a partir de la polarizabilidad en la RPA y la relación de dispersión para el grafeno sin deformación (4.22) en la región no retardada (4.23). Estos conceptos se ven con más detalle en el Capítulo 4.

3.5 Región de amortiguamiento de Landau.

El amortiguamiento de Landau ocurre cuando el plasmón produce una excitación de una partícula (en inglés *single particle excitation*, *SPE*), donde la “excitación de una partícula” hace referencia a la excitación del par electrón-hueco [1], pudiendo ser transiciones intrabanda ($\text{SPE}_{\text{intra}}$) o interbanda ($\text{SPE}_{\text{inter}}$) Fig. 3.4.

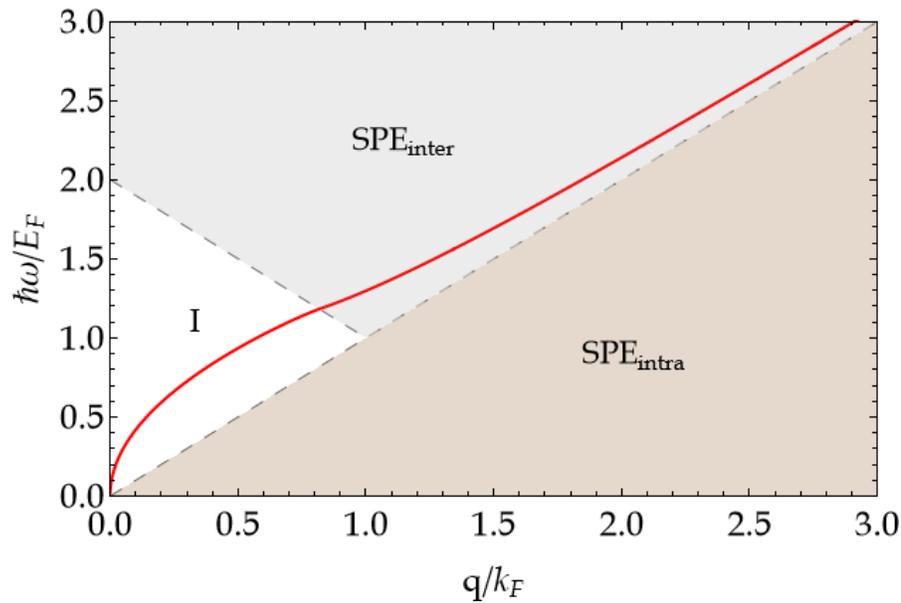


Figura 3.6

Regiones de energía para los SPPs en grafeno sin deformación (curva roja) usando (3.21) y (4.38) para $\epsilon = 0$, $\epsilon_1 = 1$ (vacío) y $\epsilon_2 = 4$ (SiO_2). En la región I (área sin sombreada) el plasmón no sufre amortiguamiento por lo que $\text{Im}\Pi(q, \omega) = 0$. Las regiones sombreadas SPE_{intra} (área café) y SPE_{inter} (área gris) corresponden al amortiguamiento de Landau donde el plasmón se amortigua por lo que $\text{Im}\Pi(q, \omega) \neq 0$. Nótese que el SPP únicamente es amortiguado por las transiciones interbanda SPE_{inter}. Adaptada de [25].

Estrictamente hablando el amortiguamiento de Landau es un proceso reversible que ocurre cuando la velocidad de fase de una onda electromagnética (para este caso un SPP) es ligeramente mayor que la de un electrón libre, los electrones al moverse más lentos que la onda son acelerados y como consecuencia extraen energía de ésta, dicho de otra manera, los SPPs pierden energía para crear un par electrón-hueco [20]. En la Fig. 3.6 se muestran las regiones de amortiguamiento de Landau (SPE_{intra} y SPE_{inter}) y la región I donde la parte imaginaria de la polarizabilidad es cero y el amortiguamiento de Landau no ocurre, es importante señalar que otras maneras de amortiguamiento son dominantes en la región I, como puede ser el amortiguamiento por excitación de fonones ópticos [20, 67].

Plasmónica de grafeno

En este capítulo se calculará la longitud de propagación y profundidad de penetración para una monocapa de grafeno deformada uniformemente. Se comienza por definir a los plasmones polaritones de superficie (SPPs) y los procesos que causan su amortiguamiento. A continuación, se encuentra la relación de dispersión y finalmente se hallan las expresiones analíticas para la longitud de propagación y profundidad de penetración del campo a partir de la relación de dispersión.

4.1 Plasmones polaritones de superficie (SPPs).

Los plasmones son oscilaciones colectivas de los portadores de carga libre que existen en la superficie o en el bulto (en inglés *bulk*) de un material conductor tridimensional y se propagan en la dirección del vector de onda del campo electromagnético al que están asociados [37, 67]. El término “oscilaciones colectivas” se refiere a que las cargas libres en el metal oscilan en la misma dirección y fase, lo que tiene como consecuencia la reducción de la repulsión Coulombiana entre electrones. Los plasmones de superficie (en inglés *surface plasmons*, *SPs*) se definen como las oscilaciones de la densidad de carga que se propagan en la superficie de un metal. Cuando los plasmones de superficie se acoplan con la polarización eléctrica de un medio dieléctrico circundante se les conoce como plasmones polaritones de superficie (en inglés *surface plasmons polaritons*, *SPPs*) [67].

El grafeno tiene la capacidad de soportar TE-SPPs y TM-SPPs (modos con polarización s y p respectivamente), además la frecuencia de los SPPs se verá reducida a la región de los terahertz entre 1 – 75 THz [28, 77] en comparación con las típicas frecuencias en la región del infrarrojo o la luz visible [4, 29] que presentan los SPPs si la interfaz fuera oro o plata [67]. Esta tesis se centra en el estudio de los TM-SPPs dejando de lado los TE-SPPs, ya que estos últimos son amortiguados fuertemente, existen en una región muy pequeña del espectro de luz y presentan un confinamiento muy pobre en comparación a los TM-SPPs [37, 74].

4.2 Amortiguamiento de los SPPs.

El amortiguamiento de los SPPs involucra todos los procesos que hacen decaer el SPP, éstos pueden ser intrínsecos o extrínsecos. Los intrínsecos son mecanismos de dispersión que no pueden ser eliminados por ningún método ya que son inherentes al grafeno, involucran la dispersión por fonones ópticos y acústicos de los modos fonónicos del grafeno y el llamado amortiguamiento de Landau (en inglés *Landau damping*) que consiste en la excitación interbanda o intrabanda de un par electrón-hueco, donde dicha excitación es causada por el SPP [26, 67]. Los extrínsecos son mecanismos de dispersión que pueden ser reducidos ya que no son inherentes al grafeno, corresponden a la dispersión por impurezas o defectos de la red del grafeno o la dispersión por fonones ópticos de la red del sustrato donde se deposita el grafeno [20, 37, 67]. Para considerar los procesos extrínsecos en los cálculos hechos hasta ahora se empleará la formulación de Mermin [44], quien usando la RPA introdujo a la polarizabilidad un parámetro fenomenológico $\gamma = 1/\tau$ llamado tasa de dispersión (en inglés *scattering rate*) o parámetro de amortiguamiento (en inglés *damping*), siendo τ el tiempo de relajación de los electrones cuyo valor para grafeno es $\tau \sim 10^{-13}$ s [21, 31, 26, 37]. El resultado de esta aproximación conocida como aproximación de fase aleatoria con tiempo de relajación (en inglés *random phase approximation – relaxation time, RPA-RT*) es una polarizabilidad de la forma [44, 20]

$$\Pi_\gamma(q, \omega) = \frac{\left(1 + \frac{i\gamma}{\omega}\right) \Pi(q, \omega + i\gamma)}{1 + \frac{i\gamma}{\omega} \frac{\Pi(q, \omega + i\gamma)}{\Pi(q, 0)}}, \quad (4.1)$$

donde, $\Pi_\gamma(q, \omega)$ es la polarizabilidad que toma en cuenta los procesos de amortiguamiento del plasmón y $\Pi(q, \omega)$ está dada por (3.20).

4.3 Relación de dispersión de una monocapa de grafeno.

Antes de hallar la relación de dispersión de una monocapa de grafeno, primero se encontrará el plasmón que se propaga en un medio, posteriormente el SP y por último el SPP. Para un plasmón que se propaga en un medio, se considera un modo monocromático plano de frecuencia ω que satisfaga las ecuaciones de Maxwell para un medio no magnético ($\mu = \mu_0$)

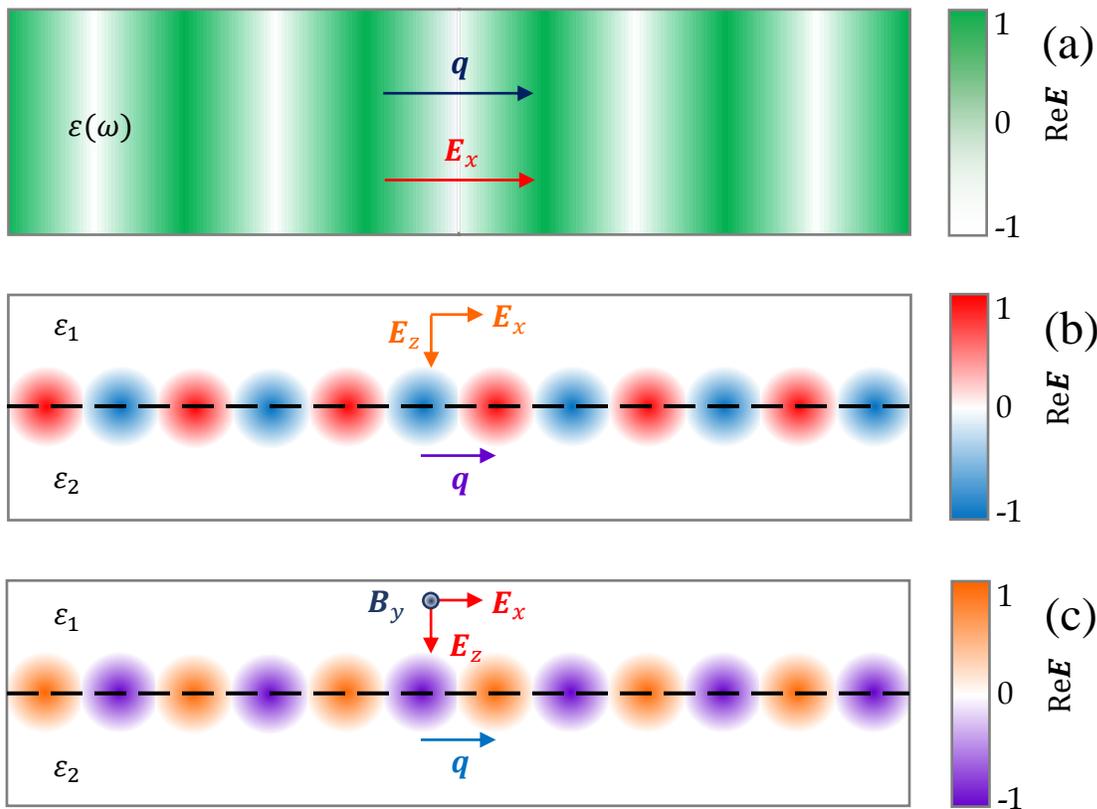
$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (4.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{\varepsilon(\omega)}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (4.3)$$

donde, $\varepsilon(\omega)$ es la función dieléctrica y c la rapidez de la luz en el vacío. Usando la identidad $\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E}$ en (4.2) y sustituyendo (4.3) en el resultado, se obtiene la ecuación general de onda

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \mu_0 \varepsilon(\omega) \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0, \quad (4.4)$$

hay dos tipos de modos que satisfacen (4.4), el longitudinal que está polarizado en la dirección de propagación de la onda y el transversal que está polarizado en dirección perpendicular a la dirección de propagación de la onda. Si se considera que la propagación

**Figura 4.1**

Representación esquemática de los plasmones, donde la línea discontinua (negra) representa una monocapa de grafeno y el campo B_y apunta hacia afuera de la página. El campo se muestra cualitativamente con fines ilustrativos. Adaptada de [37]. (a) Plasmón de volumen. (b) Plasmón de superficie (SP). (c) Plasmón polaritón de superficie TM (TM-SPP).

es en la dirección x con amplitud E_x y número de onda q , el modo polarizado longitudinal es Fig. 4.1 (a) [37]

$$\mathbf{E} = \hat{x}E_x e^{i(qx - \omega t)}, \quad (4.5)$$

el modo longitudinal (4.5) se conoce como plasmón de volumen y se caracteriza por la oscilación colectiva longitudinal de los portadores de carga. Nótese que al sustituir (4.5) en (4.4) sólo se anulan los dos primeros términos, por lo que para que se satisfaga (4.4) es necesario que $\varepsilon(\omega) = 0$ (los ceros de la función dieléctrica es una condición para hallar la relación de dispersión de los plasmones). Los plasmones de superficie (SP) son plasmones confinados en la superficie de un metal, es decir, son ondas evanescentes que se propagan en la superficie entre un metal y un medio dieléctrico. Para describir los SP en grafeno, se considera un sistema conformado por una monocapa de grafeno incrustada entre dos medios dieléctricos semi infinitos con constantes dieléctricas ε_1 y ε_2 . Si se coloca la monocapa de grafeno en el plano $z = 0$, se ocupa la mitad del espacio ($z < 0$) por el medio dieléctrico semi infinito ε_1 , la otra mitad ($z > 0$) es ocupada por el medio dieléctrico semi infinito ε_2 , se asume que el SP se propaga en la dirección x con amplitud $E_{j,x}$ y número de onda q y se atenúa en la dirección z con amplitud $E_{j,z}$ y número de onda k_j Fig. 4.1 (b). El modo superficial es por (4.5) [20]

$$\mathbf{E}_j = (E_{j,x}\hat{\mathbf{x}} + E_{j,z}\hat{\mathbf{z}})e^{-k_j|z|}e^{i(qx-\omega t)}, \quad (4.6)$$

donde, $j = 1,2$ se refiere a los medios dieléctricos ε_1 y ε_2 respectivamente. Cuando los SP del grafeno se acoplan con el campo óptico transversal magnético (TM) es lo que se conoce como TM-SPP Fig. 4.1 (c). Usando (4.6) el modo superficial TM tiene la forma

$$\mathbf{E}_j = (E_{j,x}\hat{\mathbf{x}} + E_{j,z}\hat{\mathbf{z}})e^{-k_j|z|}e^{i(qx-\omega t)}, \quad (4.7)$$

$$\mathbf{B}_j = \hat{\mathbf{y}}B_{j,y}e^{-k_j|z|}e^{i(qx-\omega t)},$$

nuevamente, $j = 1,2$ se refiere a los medios dieléctricos ε_1 y ε_2 respectivamente y $B_{j,y}$ es la magnitud del modo TM. Por las ecuaciones de Maxwell y considerando medios no magnéticos ($\mu_j = \mu_0$)

$$\nabla \times \mathbf{E}_j = -\frac{\partial \mathbf{B}_j}{\partial t}, \quad (4.8)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}_j = \frac{\varepsilon_j}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}_j}{\partial t}, \quad (4.9)$$

sustituyendo (4.7) en (4.8) y (4.9), después de simplificar e igualar componentes se llega a

$$-\text{sgn}(z)k_j E_{j,x} - iq E_{j,z} = i\omega B_{j,y} \quad , \quad z \neq 0, \quad (4.10)$$

$$\text{sgn}(z)k_j B_{j,y} = -\left(\frac{i\omega\varepsilon_j}{c^2}\right) E_{j,x} \quad , \quad z \neq 0, \quad (4.11)$$

$$iq B_{j,y} = -\left(\frac{i\varepsilon_j\omega}{c^2}\right) E_{j,z}, \quad (4.12)$$

donde, se usó (3.34) para definir

$$\frac{d|z|}{dz} = \begin{cases} -1 & \text{si } z < 0 \\ 1 & \text{si } z > 0, \end{cases} \quad (4.13)$$

$$\frac{d|z|}{dz} = \text{sgn}(z) \quad , \quad z \neq 0, \quad (4.14)$$

sustituyendo (4.11) y (4.12) en (4.10) obtenemos la relación entre k_j y q definida por

$$k_j^2 = q^2 - \frac{\varepsilon_j\omega^2}{c^2}, \quad (4.15)$$

por las condiciones de frontera (en $z = 0$) siendo $\hat{\mathbf{n}}$ el vector unitario normal a la superficie del grafeno que apunta del medio 2 al medio 1, esto es, $\hat{\mathbf{n}} = -\hat{\mathbf{z}}$ y \mathbf{J} la densidad de corriente superficial del grafeno que apunta en la dirección x Fig. 4.2 se tiene que

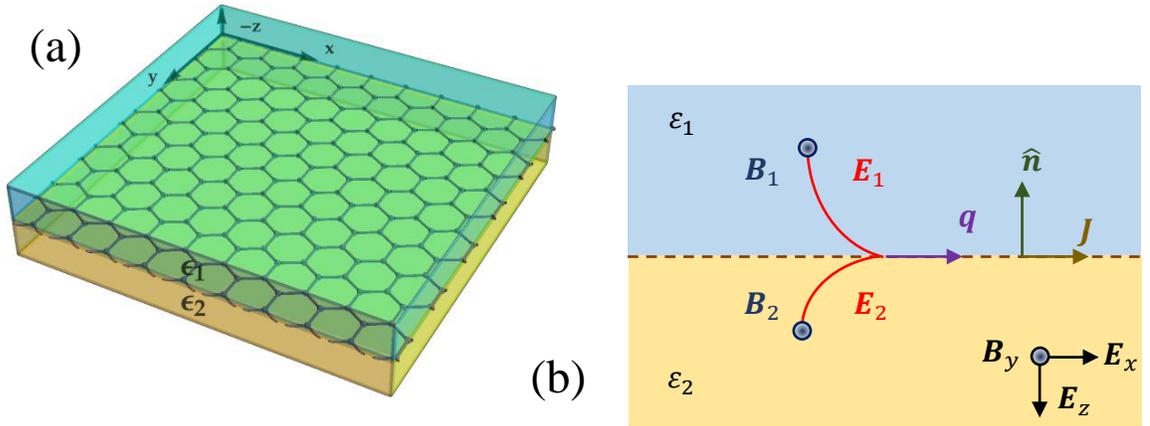


Figura 4.2

Representación esquemática de un plasmón polaritón de superficie TM (TM-SPP) en una monocapa de grafeno entre dos medios dieléctricos constantes ϵ_1 y ϵ_2 . El perfil del campo se muestra cualitativamente con fines ilustrativos. Adaptada de [20]. **(a)** Representación tridimensional. **(b)** Corte transversal.

$$\hat{\mathbf{n}} \times (\mathbf{E}_1 - \mathbf{E}_2)|_{z=0} = \mathbf{0},$$

$$\hat{\mathbf{n}} \times (\mathbf{B}_1 - \mathbf{B}_2)|_{z=0} = \mu_0 \mathbf{J}|_{z=0}, \tag{4.16}$$

tomando $\mathbf{J} = \sigma(\omega)\mathbf{E}_2$ y sustituyéndolo en (4.16) se obtiene

$$E_{1,x} - E_{2,x} = 0, \tag{4.17}$$

$$B_{1,y} - B_{2,y} - \mu_0 \sigma(\omega) E_{2,x} = 0,$$

usando (4.11) y (3.34) para $j = 1$ ($z < 0$) y $j = 2$ ($z > 0$) se encuentra

$$B_{1,y} = \left(\frac{i\varepsilon_1\omega}{c^2 k_1} \right) E_{1,x}, \quad (4.18)$$

$$B_{2,y} = - \left(\frac{i\varepsilon_2\omega}{c^2 k_2} \right) E_{2,x},$$

sustituyendo (4.18) en (4.17)

$$E_{1,x} - E_{2,x} = 0, \quad (4.19)$$

$$\left(\frac{\varepsilon_1}{k_1} \right) E_{1,x} + \left[\frac{\varepsilon_2}{k_2} - \frac{\mu_0 c^2 \sigma(\omega)}{i\omega} \right] E_{2,x} = 0,$$

el sistema de ecuaciones (4.19) es lineal y homogéneo, la solución no trivial se encuentra igualando el determinante del sistema con cero

$$\begin{vmatrix} 1 & -1 \\ \frac{\varepsilon_1}{k_1} & \frac{\varepsilon_2}{k_2} - \frac{\mu_0 c^2 \sigma(\omega)}{i\omega} \end{vmatrix} = 0, \quad (4.20)$$

$$\frac{\varepsilon_1}{k_1} + \frac{\varepsilon_2}{k_2} - \frac{\mu_0 c^2 \sigma(\omega)}{i\omega} = 0, \quad (4.21)$$

usando $c^2 = 1/\varepsilon_0\mu_0$ y sustituyendo (3.17) y (4.15) en (4.21) se obtiene la relación de dispersión de una monocapa de grafeno para un TM-SPP en unidades MKS

$$\frac{\varepsilon_1}{\sqrt{q^2 - \frac{\varepsilon_1\omega^2}{c^2}}} + \frac{\varepsilon_2}{\sqrt{q^2 - \frac{\varepsilon_2\omega^2}{c^2}}} - \frac{e^2}{\varepsilon_0 q^2} \Pi(q, \omega) = 0. \quad (4.22)$$

4.4 TM-SPP en una monocapa de grafeno deformado.

4.4.1 Longitud de propagación y profundidad de penetración.

Con el fin de obtener expresiones analíticas de la longitud de propagación L y la profundidad de penetración δ para los TM-SPPs en una monocapa de grafeno en la región de los terahertz, se trabajará en la región no retardada Fig. 3.5 (b) donde (4.15) es

$$k_j \approx q, \quad (4.23)$$

tanto L como δ están definidas por el valor complejo de q como se verá más adelante, de momento escribiendo q en forma compleja se obtiene

$$q = q_1 + iq_2, \quad (4.24)$$

donde, q_1 es la parte real y q_2 la parte imaginaria de q . Al sustituir (4.23) y (4.24) en (4.7) se llega a

$$e^{i(qx-\omega t)} = e^{i[(q_1+iq_2)x-\omega t]} = e^{-q_2x} e^{i(q_1x-\omega t)}, \quad (4.25)$$

$$e^{-k_j|z|} = e^{-(q_1+iq_2)|z|} = e^{-q_1|z|} e^{-iq_2|z|}, \quad (4.26)$$

de (4.25) y (4.26) se puede ver que q_2 y q_1 son factores que determinan la atenuación en la dirección x (dirección de propagación) y en la dirección z (dirección de penetración) respectivamente de los TM-SPPs. Con esto, se puede definir L y δ como [20, 67]

$$L = \frac{1}{q_2}, \quad (4.27)$$

$$\delta = \frac{1}{q_1}, \quad (4.28)$$

donde, L es la longitud que viajará el TM-SPP hasta que su intensidad decaiga por un factor de $1/e$, por su parte δ es la longitud que penetrará el TM-SPP en los medios dieléctricos hasta que su intensidad decaiga por $1/e$. A continuación, se encontrarán los valores de q_1 y q_2 .

4.4.2 Cálculo de q_1 y q_2 .

En la región no retardada ($k_j \approx q = q_1 + iq_2$), por la polarizabilidad de Mermin (4.1) y la polarizabilidad para el grafeno deformado (3.20) la relación de dispersión (4.22) se expresa como

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \frac{e^2}{\varepsilon_0(q_1 + iq_2)} \Pi_T(q_1 + iq_2, \omega + i\gamma) = 0, \quad (4.29)$$

$$\Pi_T(q_1 + iq_2, \omega + i\gamma) = \mathcal{D} \Pi_\gamma(q_1 + iq_2, \omega), \quad (4.30)$$

$$\Pi_\gamma(q_1 + iq_2, \omega) = \frac{\left(1 + \frac{i\gamma}{\omega}\right) \Pi(q_1 + iq_2, \omega + i\gamma)}{1 + \frac{i\gamma}{\omega} \frac{\Pi(q_1 + iq_2, \omega + i\gamma)}{\Pi(q_1 + iq_2, 0)}}, \quad (4.31)$$

donde, $\mathcal{D} = 1 - \beta\varepsilon(1 + \nu) \cos[2(\theta - \phi)]$ es el factor de deformación de la monocapa de grafeno y $\Pi(q, \omega)$ corresponde a la polarizabilidad (3.21). Al desarrollar (4.29) se obtiene

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \frac{e^2 \mathcal{D}}{\varepsilon_0 q_1} \left(1 + \frac{iq_2}{q_1}\right)^{-1} \left(1 + \frac{i\gamma}{\omega} \frac{\Pi(q_1 + iq_2, \omega + i\gamma)}{\Pi(q_1 + iq_2, 0)}\right)^{-1} \\ \times \left(1 + \frac{i\gamma}{\omega}\right) \Pi(q_1 + iq_2, \omega + i\gamma) = 0. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Haciendo la sustitución $u = q_1 + iq_2$ y $v = \omega + i\gamma$, para desarrollar en serie de Taylor a primer orden en q_1 y ω las cantidades $\Pi(u, v)$ y $\Pi(u, 0)$ alrededor de los puntos $P_\omega = (q_1, \omega)$ y $P_0 = (q_1, 0)$, se llega a

$$\Pi(u, v) \approx \Pi(q_1, \omega) + \left. \frac{\partial \Pi(u, v)}{\partial u} \right|_{P_\omega} (u - q_1) + \left. \frac{\partial \Pi(u, v)}{\partial v} \right|_{P_\omega} (v - \omega), \quad (4.33)$$

$$\Pi(u, 0) \approx \Pi(q_1, 0) + \left. \frac{\partial \Pi(u, 0)}{\partial u} \right|_{P_0} (u - q_1),$$

usando la regla de la cadena y sustituyendo $u = q_1 + iq_2$ y $v = \omega + i\gamma$, las expresiones en (4.33) se pueden reescribir como

$$\Pi(q_1 + iq_2, \omega + i\gamma) \approx \Pi(q_1, \omega) + iq_2 \frac{\partial \Pi(q_1, \omega)}{\partial q_1} + i\gamma \frac{\partial \Pi(q_1, \omega)}{\partial \omega}, \quad (4.34)$$

$$\Pi(q_1 + iq_2, 0) \approx \Pi(q_1, 0) + iq_2 \frac{\partial \Pi(q_1, 0)}{\partial q_1},$$

como la polarizabilidad (3.21) es compleja se escribirá de la siguiente manera

$$\Pi(q_1, \omega) = \text{Re}\Pi(q_1, \omega) + i\text{Im}\Pi(q_1, \omega), \quad (4.35)$$

$$\Pi(q_1, 0) = \text{Re}\Pi(q_1, 0) + i\text{Im}\Pi(q_1, 0),$$

al sustituir (4.34) y (4.35) en (4.32) y hacer un desarrollo en serie a primer orden en q_2/q_1 y γ/ω con $q_2/q_1 \ll 1$ y $\gamma/\omega \ll 1$, la relación de dispersión puede expresarse en una parte real y una imaginaria. Estas aproximaciones tendrán implicaciones especialmente en la región de baja frecuencia, donde la suposición $\omega \gg \gamma$ ya no es válida y en la región de alta frecuencia donde la suposición $q_1 \gg q_2$ deja de ser verdadera. Como el estudio de la longitud de propagación y profundidad de penetración estará centrado en la región de excitación de

plasmones de larga duración (región I) Fig. 3.6, estas aproximaciones no afectarán significativamente los resultados

$$\begin{aligned}
\text{Parte Real: } \varepsilon_1 + \varepsilon_2 &- \frac{e^2 q_2 \mathcal{D} \operatorname{Im}\Pi(q_1, \omega)}{\varepsilon_0 q_1^2} + \frac{e^2 \gamma \mathcal{D} \operatorname{Im}\Pi(q_1, \omega)}{\varepsilon_0 \omega q_1} \\
&+ \frac{e^2 \gamma \mathcal{D} \operatorname{Im}\Pi^{(0,1)}(q_1, \omega)}{\varepsilon_0 q_1} + \frac{e^2 q_2 \mathcal{D} \operatorname{Im}\Pi^{(1,0)}(q_1, \omega)}{\varepsilon_0 q_1} \\
&- \frac{e^2 \mathcal{D} \operatorname{Re}\Pi(q_1, \omega)}{\varepsilon_0 q_1} - \frac{e^2 \gamma \mathcal{D} [\operatorname{Im}\Pi(q_1, \omega)]^2 \operatorname{Im}\Pi(q_1, 0)}{\varepsilon_0 \omega q_1 |\Pi(q_1, 0)|^2} \\
&- \frac{2e^2 \gamma \mathcal{D} \operatorname{Re}\Pi(q_1, \omega) \operatorname{Im}\Pi(q_1, \omega) \operatorname{Re}\Pi(q_1, 0)}{\varepsilon_0 \omega q_1 |\Pi(q_1, 0)|^2} \\
&+ \frac{e^2 \gamma \mathcal{D} [\operatorname{Re}\Pi(q_1, \omega)]^2 \operatorname{Im}\Pi(q_1, 0)}{\varepsilon_0 \omega q_1 |\Pi(q_1, 0)|^2}, \dots
\end{aligned} \tag{4.36}$$

$$\begin{aligned}
\text{Parte Imaginaria: } &- \frac{e^2 \mathcal{D} \operatorname{Im}\Pi(q_1, \omega)}{\varepsilon_0 q_1} + \frac{e^2 q_2 \mathcal{D} \operatorname{Re}\Pi(q_1, \omega)}{\varepsilon_0 q_1^2} \\
&- \frac{e^2 \gamma \mathcal{D} \operatorname{Re}\Pi(q_1, \omega)}{\varepsilon_0 \omega q_1} + \frac{e^2 \gamma \mathcal{D} \operatorname{Re}\Pi^{(0,1)}(q_1, \omega)}{\varepsilon_0 q_1} \\
&- \frac{e^2 q_2 \mathcal{D} \operatorname{Re}\Pi^{(1,0)}(q_1, \omega)}{\varepsilon_0 q_1} \\
&- \frac{e^2 \gamma \mathcal{D} [\operatorname{Im}\Pi(q_1, \omega)]^2 \operatorname{Re}\Pi(q_1, 0)}{\varepsilon_0 \omega q_1 |\Pi(q_1, 0)|^2} \\
&+ \frac{2e^2 \gamma \mathcal{D} \operatorname{Im}\Pi(q_1, \omega) \operatorname{Re}\Pi(q_1, \omega) \operatorname{Im}\Pi(q_1, 0)}{\varepsilon_0 \omega q_1 |\Pi(q_1, 0)|^2}
\end{aligned} \tag{4.37}$$

$$+ \frac{e^2 \gamma \mathcal{D} [\text{Re}\Pi(q_1, \omega)]^2 \text{Re}\Pi(q_1, 0)}{\varepsilon_0 \omega q_1 |\Pi(q_1, 0)|^2},$$

donde, $\Pi^{(1,0)}(q_1, \omega) = \partial\Pi(q_1, \omega)/\partial q_1$ y $\Pi^{(0,1)}(q_1, \omega) = \partial\Pi(q_1, \omega)/\partial\omega$. Dado que la relación de dispersión está igualada a cero, tanto la parte real e imaginaria son cero. Para obtener q_1 , nótese que $\text{Im}\Pi(q_1, 0) = 0$ Fig. 3.3 (b) y considerando únicamente la región de excitación de plasmones de larga duración (región I) donde $\text{Im}\Pi(q_1, \omega) = 0$ Fig. 3.6, se puede hallar al igualar (4.36) con cero la siguiente expresión para q_1

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \frac{e^2 [1 - \beta \varepsilon (1 + \nu) \cos[2(\theta - \phi)]] \text{Re}\Pi(q_1, \omega)}{\varepsilon_0 q_1} = 0, \quad (4.38)$$

la expresión (4.38) es una ecuación implícita de q_1 , lo que significa que debe resolverse numéricamente para hallar los valores de q_1 , nótese también que (4.38) es independiente de q_2 , por lo que q_1 no está asociado con el amortiguamiento del plasmón al propagarse. Para obtener q_2 , basta con igualar (4.37) con cero y despejar q_2 para obtener

$$q_2 = \frac{\text{Im}\Pi(q_1, \omega) + \gamma \text{Re}\Pi^{(0,1)}(q_1, \omega) + \frac{\gamma}{\omega} \text{Re} \left[\Pi(q_1, \omega) \left(1 - \frac{\Pi(q_1, \omega)}{\Pi(q_1, 0)} \right) \right]}{\frac{\text{Re}\Pi(q_1, \omega)}{q_1} - \text{Re}\Pi^{(1,0)}(q_1, \omega)}, \quad (4.39)$$

donde, se empleó la factorización

$$\begin{aligned} \text{Re} \left[\Pi(q_1, \omega) \left(1 - \frac{\Pi(q_1, \omega)}{\Pi(q_1, 0)} \right) \right] &= \text{Re}\Pi(q_1, \omega) + \frac{[\text{Im}\Pi(q_1, \omega)]^2 \text{Re}\Pi(q_1, 0)}{|\Pi(q_1, 0)|^2} \\ &- \frac{2 \text{Im}\Pi(q_1, \omega) \text{Re}\Pi(q_1, \omega) \text{Im}\Pi(q_1, 0)}{|\Pi(q_1, 0)|^2} - \frac{[\text{Re}\Pi(q_1, \omega)]^2 \text{Re}\Pi(q_1, 0)}{|\Pi(q_1, 0)|^2}. \end{aligned} \quad (4.40)$$

La expresión (4.39) es una ecuación explícita de q_2 y como se puede apreciar, tanto γ (procesos extrínsecos) como $\text{Im}\Pi(q_1, \omega)$ (procesos intrínsecos) contribuyen al

amortiguamiento del TM-SPP, donde $\text{Im}\Pi(q_1, \omega)$ manifiesta las dispersiones interbanda [37]. Nótese, que q_2 es independiente del factor de deformación \mathcal{D} , pero si se ve afectado por este ya que depende de q_1 . Por último q_1 al igual que q_2 concuerdan con los resultados obtenidos por [26] para el caso sin deformación ($\epsilon = 0$).

Resultados y conclusiones

En este capítulo se emplearán los resultados obtenidos previamente, para estudiar los efectos que causa la deformación del grafeno en la conductividad óptica, la penetración y la propagación del plasmón polaritón de superficie transversal magnético (TM-SPP). Finalmente se demostrará que la magnitud y orientación de la deformación, juega un papel importante en la optimización de las cantidades físicas previamente mencionadas.

5.1 Resultados.

5.1.1 Conductividad óptica.

La conductividad óptica tiene un papel importante en la óptica y plasmónica del grafeno, pues contiene toda la información que gobierna la interacción electromagnética entre el grafeno y el campo externo dependiente del tiempo. Al aplicar una deformación a la monocapa de grafeno se espera que los cambios en la conductividad óptica afecten la dispersión del TM-SPP. Para examinar esto, se inicia calculando en la región de los terahertz, la parte real de la conductividad óptica deformada σ_{xxD} y σ_{yyD} (3.1), de una monocapa de grafeno como interfaz de dos medios dieléctricos constantes semi infinitos Fig. 4.2 en unidades de $\sigma_0 = e^2/(4\hbar)$ y como función de la frecuencia $\omega/(2\pi)$.

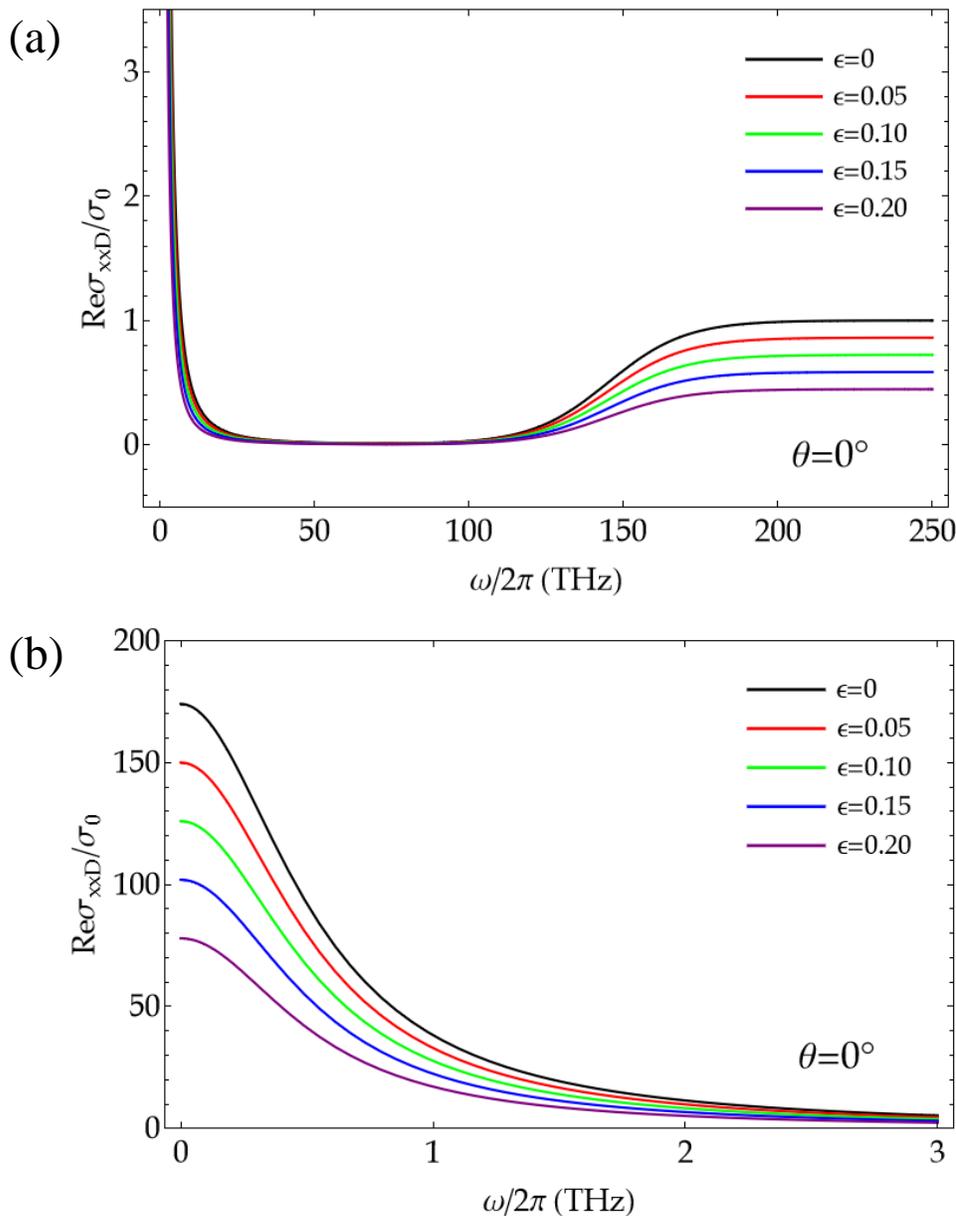


Figura 5.1

Parte real de la conductividad óptica del grafeno deformado $\text{Re}\sigma_{xxD}$ como función de $\omega/(2\pi)$ en unidades de $\sigma_0 = e^2/(4\hbar)$ y en la dirección *zigzag* ($\theta = 0^\circ$). **(a)** Se observa que al incrementar la magnitud de deformación ϵ en la dirección x ($\theta = 0^\circ$), la conductividad óptica disminuye. **(b)** Gráfica a pocos terahertz (región de excitación de plasmones en grafeno de larga duración). Inspirada de [39, 59].

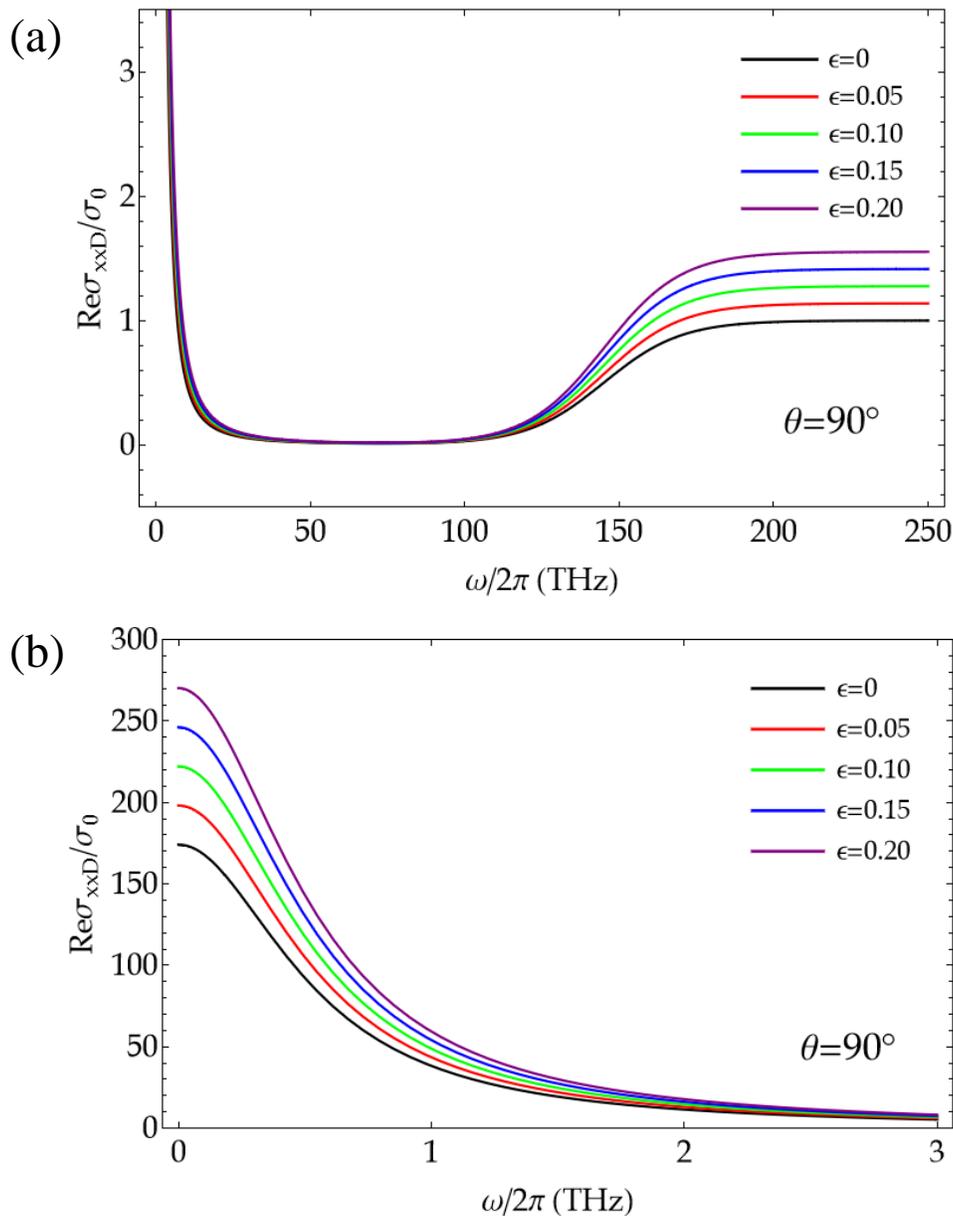


Figura 5.2

Parte real de la conductividad óptica del grafeno deformado $\text{Re}\sigma_{xxD}$ como función de $\omega/(2\pi)$ en unidades de $\sigma_0 = e^2/(4\hbar)$ y en la dirección *armchair* ($\theta = 90^\circ$). **(a)** Se observa que al incrementar la magnitud de deformación ϵ en la dirección *y* ($\theta = 90^\circ$), la conductividad óptica aumenta. **(b)** Gráfica a pocos terahertz (región de excitación de plasmones en grafeno de larga duración). Inspirada de [39, 59].

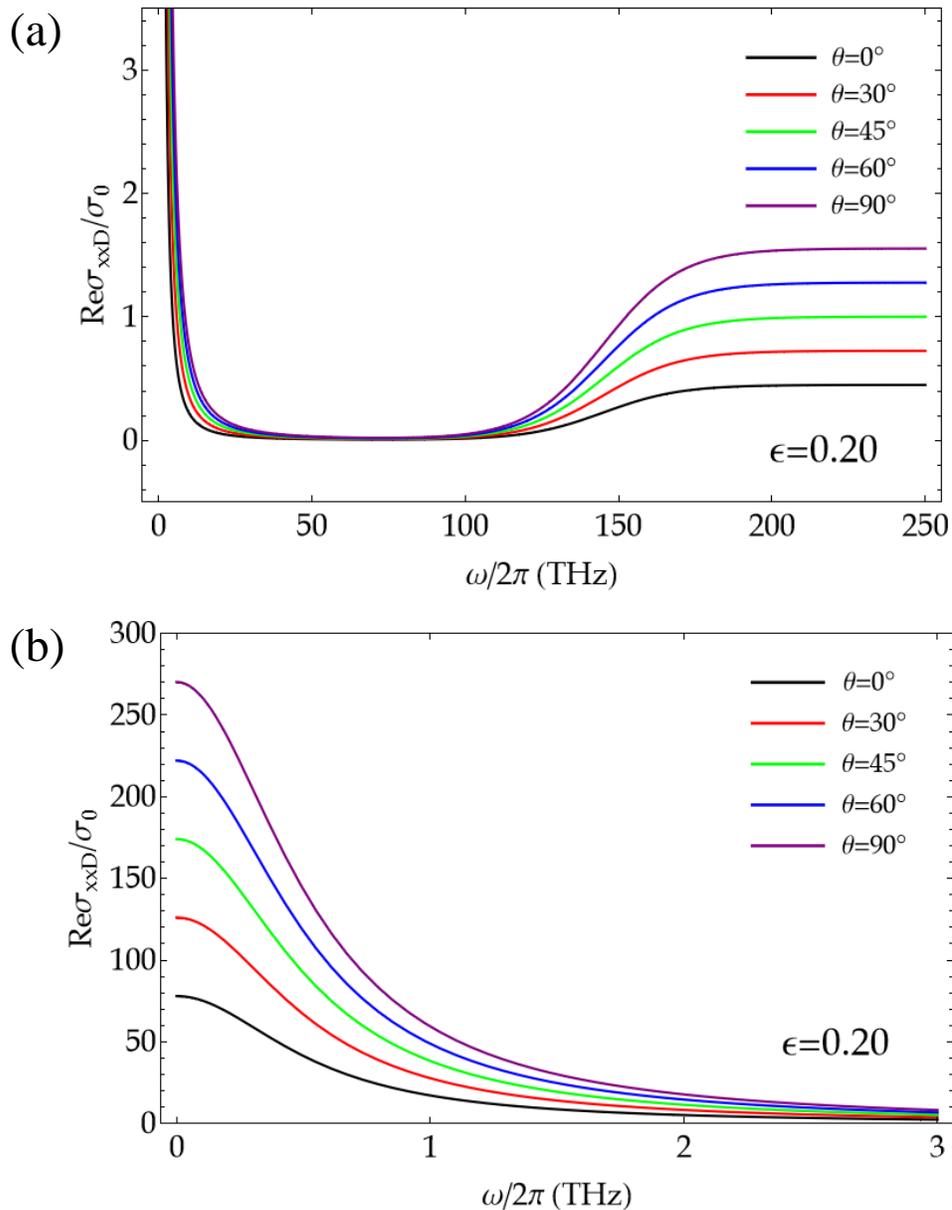


Figura 5.3

Parte real de la conductividad óptica del grafeno deformado $\text{Re}\sigma_{xxD}$ como función de $\omega/(2\pi)$ en unidades de $\sigma_0 = e^2/(4\hbar)$ para $\epsilon = 0.20$. **(a)** Se observa un incremento de la conductividad óptica al aumentar θ , alcanzando un valor máximo en la dirección y ($\theta = 90^\circ$) y un valor mínimo en la dirección x ($\theta = 0^\circ$). **(b)** Gráfica a pocos terahertz (región de excitación de plasmones en grafeno de larga duración). Inspirada de [39, 59].

Empleando (3.1) y (3.3) para valores de $\epsilon = 0$ a 0.20 (valores para los cuales no hay banda prohibida ya que $\epsilon < 0.223$), $\theta = 0^\circ$ a 90° , fijando la energía de Fermi $E_F = 0.3$ eV, la temperatura $T = 300$ K, la movilidad electrónica del grafeno $\mu = 10^4$ cm²/V·s, la velocidad de Fermi $v_F \approx c/300$, el tiempo de relajación $\tau = \mu E_F / e v_F^2$, el coeficiente de Poisson del grafeno $\nu = 0.165$ y $\beta = 2.37$. Se encuentra que la parte real de la conductividad óptica $\text{Re}\sigma_{xxD}$ disminuye si la deformación del grafeno es en la dirección *zigzag* (en la dirección x Fig. 3.2) cuando $\theta = 0^\circ$ Fig. 5.1, pero aumenta si la deformación es en la dirección *armchair* (en la dirección y Fig. 3.2) cuando $\theta = 90^\circ$ Fig. 5.2. En la Fig. 5.3 se puede apreciar que $\text{Re}\sigma_{xxD}$ alcanza un valor mínimo cuando $\theta = 0^\circ$ y un valor máximo cuando $\theta = 90^\circ$.

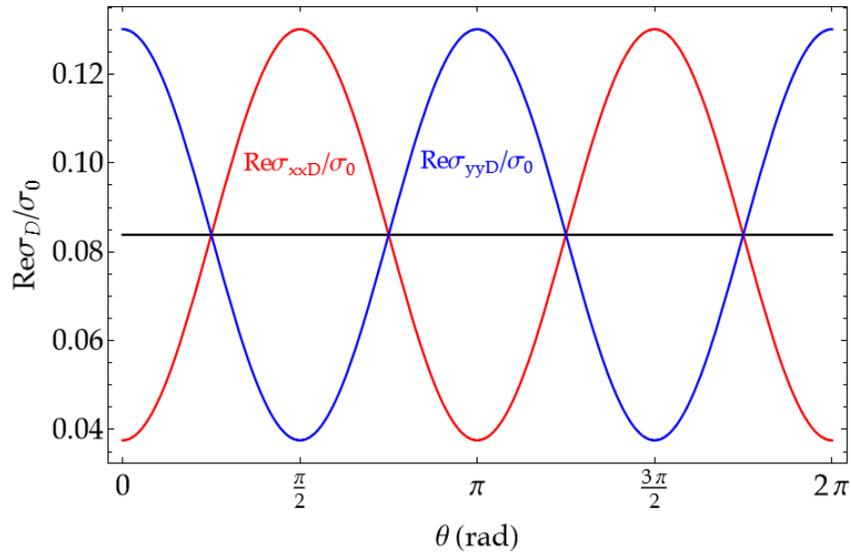


Figura 5.4

Parte real de la conductividad óptica del grafeno deformado como función de θ en unidades de $\sigma_0 = e^2/(4\hbar)$ para $\hbar\omega = 0.1$ eV. La línea negra corresponde a $\epsilon = 0$ con $\text{Re}\sigma_{xx} = \text{Re}\sigma_{yy}$, las líneas roja y azul corresponden a $\epsilon = 0.2$ con $\text{Re}\sigma_{xxD}$ (roja) y $\text{Re}\sigma_{yyD}$ (azul). Se observa como los valores de la conductividad óptica $\text{Re}\sigma_{xxD}$ y $\text{Re}\sigma_{yyD}$ oscilan periódicamente al variar θ , alcanzando valores máximos y mínimos en las direcciones *zigzag* ($\theta = 0^\circ$) y *armchair* ($\theta = 90^\circ$).

En la Fig. 5.4 se gráfica la parte real de la conductividad óptica deformada $\text{Re}\sigma_{xxD}$ y $\text{Re}\sigma_{yyD}$ como función de θ y se compara con la parte real de la conductividad óptica no deformada $\text{Re}\sigma_{xx}$ y $\text{Re}\sigma_{yy}$, sin pérdida de generalidad se ha tomado $\hbar\omega = 0.1$ eV y $\epsilon = 0.2$. Se observa, que la parte real de la conductividad óptica sin deformación tiene un valor constante, además de que $\text{Re}\sigma_{xx} = \text{Re}\sigma_{yy}$, por su parte la parte real de la conductividad óptica deformada $\text{Re}\sigma_{xxD}$ y $\text{Re}\sigma_{yyD}$ se alternan periódicamente conforme varía θ , alcanzando valores máximos y mínimos cuando la dirección de deformación es en la dirección *zigzag* ($\theta = 0^\circ$) y *armchair* ($\theta = 90^\circ$). De lo anterior es posible concluir que $\text{Re}\sigma_{xxD}$ tomará un valor máximo si la deformación se aplica en la dirección *y* y un valor mínimo si se aplica en la dirección *x*, en contraparte a $\text{Re}\sigma_{yyD}$ que tomará un valor máximo si la deformación se aplica en la dirección *x* y un valor mínimo si se aplica en la dirección *y*.

5.1.2 Profundidad de penetración y longitud de propagación.

Es de esperarse que la variación de la conductividad óptica del grafeno repercuta en la profundidad de penetración δ y la longitud de propagación L del TM-SPP. Para estudiar esto, se calcularon numéricamente los valores de q_1 (4.38) y q_2 (4.39) como función de la frecuencia $\omega/(2\pi)$ en la región de los terahertz, para valores de $\epsilon = 0$ a 0.20 (valores para los cuales no hay banda prohibida ya que $\epsilon < 0.223$), $\theta = 0^\circ$ a 90° y fijando el vector de onda del plasmón en la dirección *zigzag*, esto es $\phi = 0^\circ$ Fig. 3.2. También se ha fijado la energía de Fermi a $E_F = 0.5$ eV, las constantes dieléctricas $\epsilon_1 = 2.25$ (prisma) y $\epsilon_2 = 3.8$ (SiO_2), la movilidad electrónica $\mu = 10^4$ $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, la velocidad de Fermi $v_F \approx c/300$, el tiempo de relajación $\tau = \mu E_F / e v_F^2$, el coeficiente de Poisson del grafeno $\nu = 0.165$ y $\beta = 2.37$. En la Fig. 5.5 se graficó q_1/k_F contra $\hbar\omega/E_F$ para diferentes ϵ , cómo se observa para un determinado valor de q_1 , al incrementar la magnitud de deformación el TM-SPP presenta una disminución de la energía si la tensión es paralela a la dirección de propagación del plasmón Fig. 5.5 (a) y un aumento en la energía si la tensión es perpendicular a la dirección de propagación del plasmón Fig. 5.5 (b), además como era de suponerse para ambos casos, el plasmón sufre amortiguamiento de Landau únicamente por las transiciones interbanda.

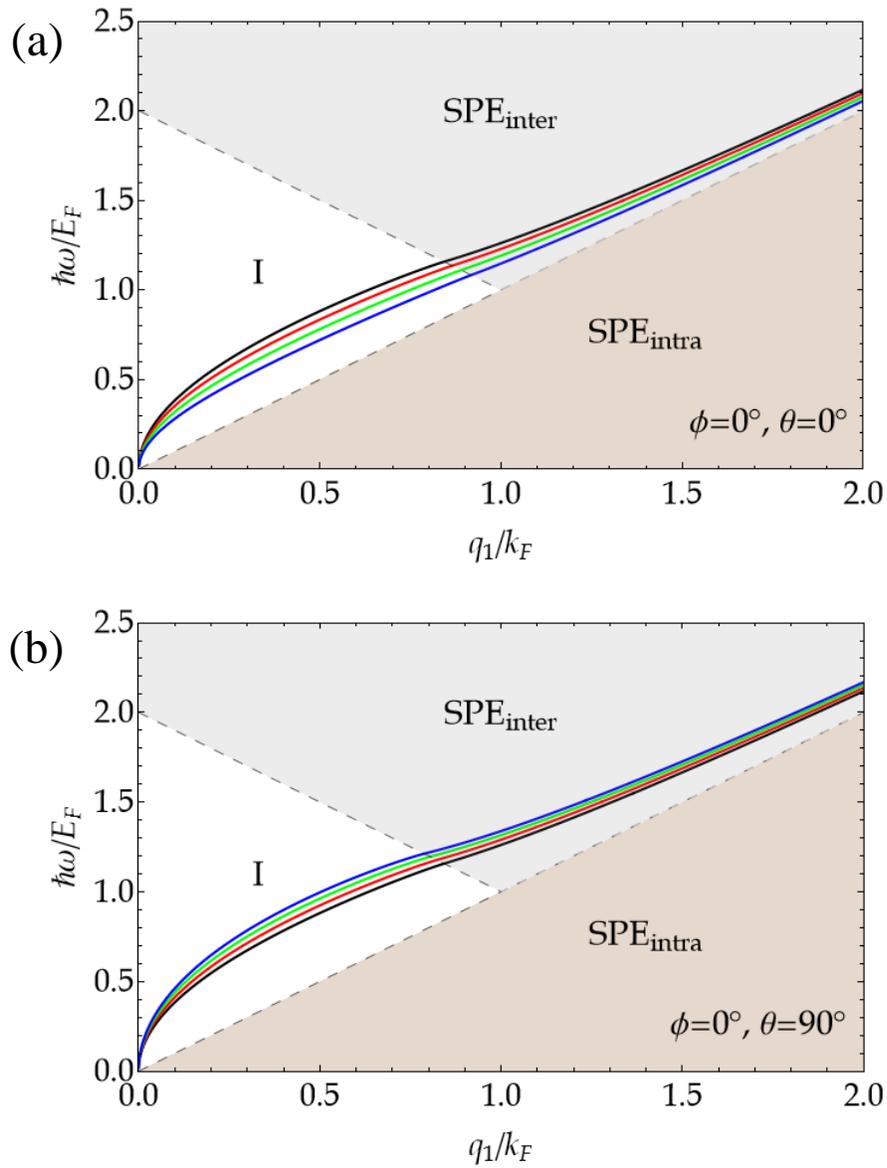
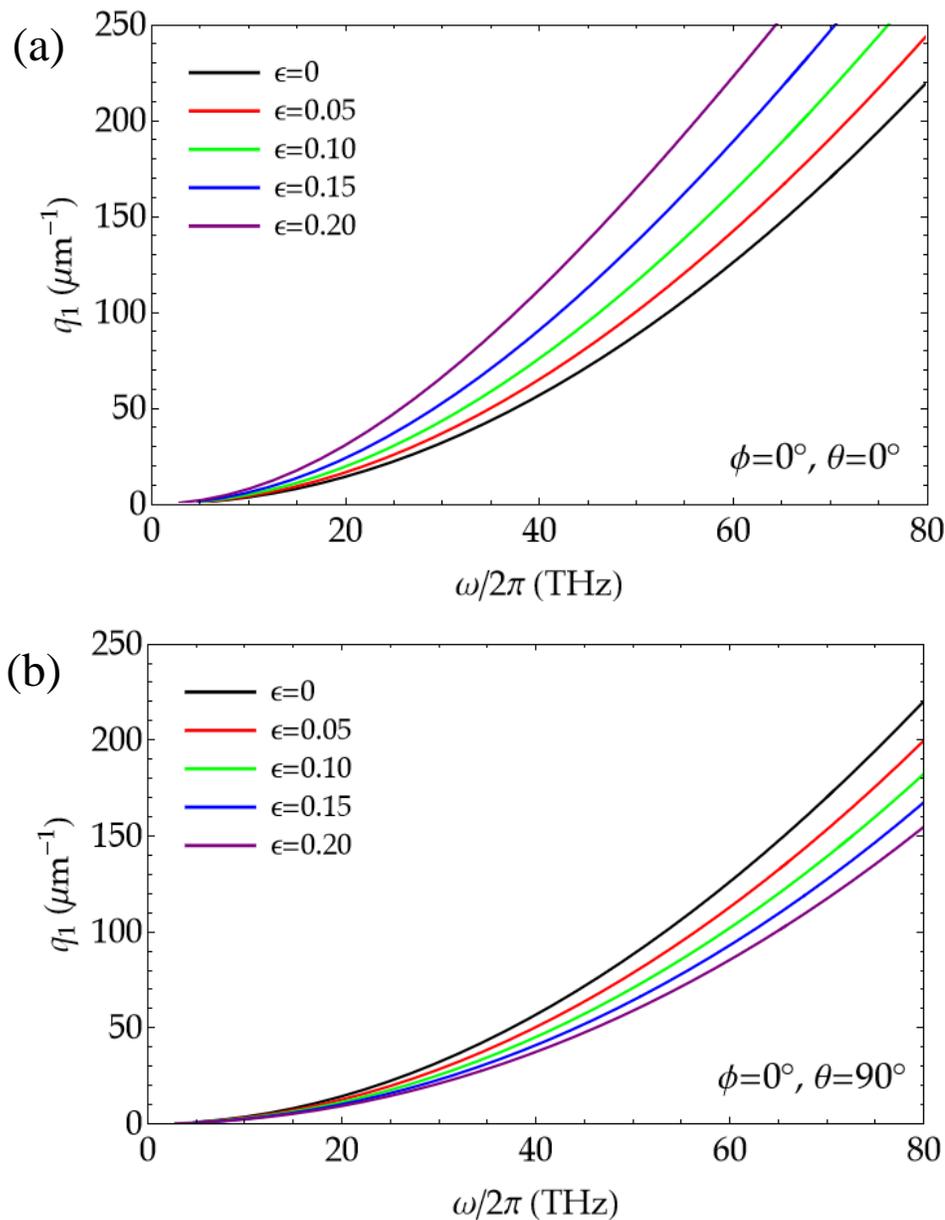
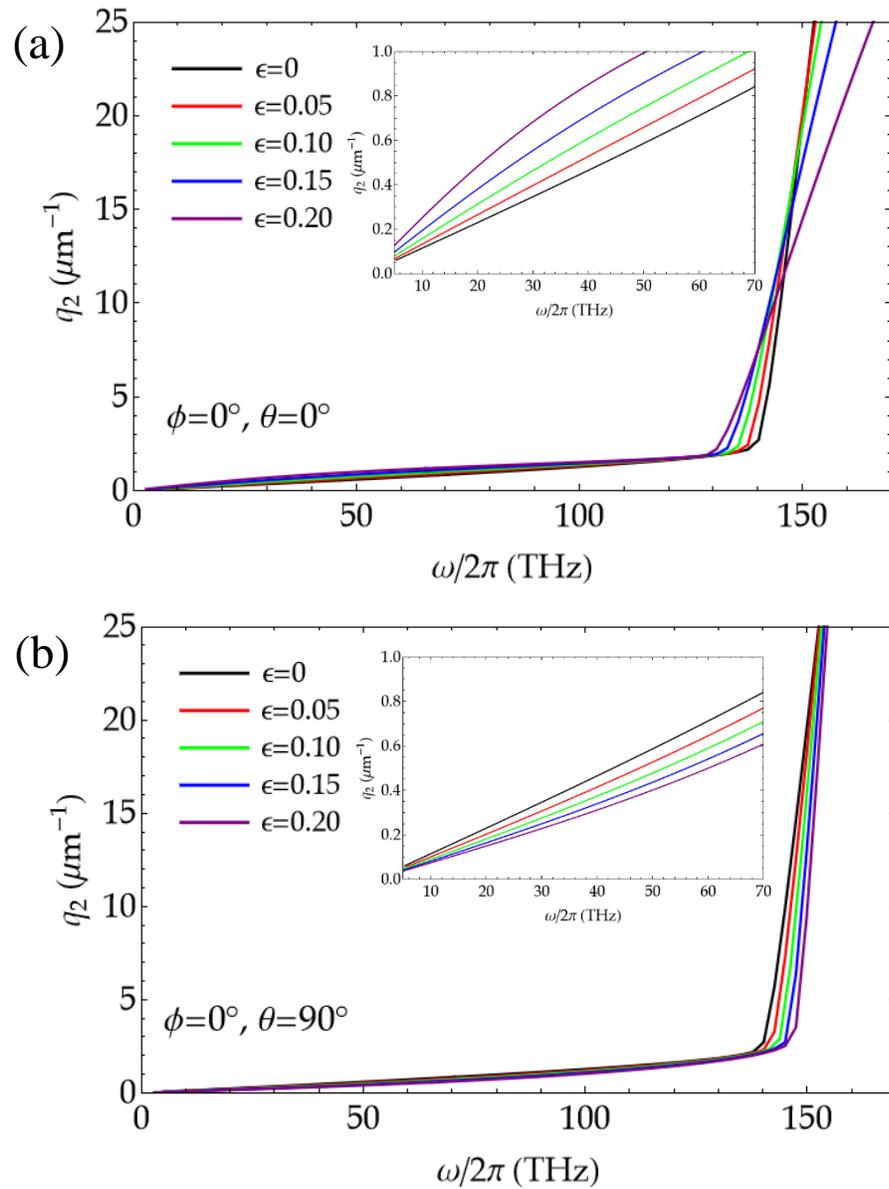


Figura 5.5

Regiones de energía de los TM-SPPs para $\epsilon = 0$ (curva negra), $\epsilon = 0.06$ (curva roja), $\epsilon = 0.12$ (curva verde), $\epsilon = 0.18$ (curva azul), $\epsilon_1 = 2.25$ (prisma) y $\epsilon_2 = 3.8$ (SiO_2). Nótese que el TM-SPP sufre amortiguamiento de Landau únicamente por las transiciones interbanda. Inspirada de [25]. **(a)** Al incrementar ϵ , la energía del plasmón disminuye si la tensión es paralela a la dirección de propagación. **(b)** Al incrementar ϵ la energía del plasmón aumenta si la tensión es perpendicular a la dirección de propagación.

**Figura 5.6**

Gráficas de q_1 contra $\omega/(2\pi)$ para diferentes magnitudes de deformación ϵ en la dirección *zigzag* ($\theta = 0^\circ$) y *armchair* ($\theta = 90^\circ$). Inspirada de [59]. **(a)** Si la tensión es paralela a la dirección de propagación del plasmón, q_1 incrementa al deformar la monocapa de grafeno. **(b)** Si la tensión es perpendicular a la dirección de propagación del plasmón, q_1 disminuye al deformar la monocapa de grafeno.

**Figura 5.7**

Gráficas de q_2 contra $\omega/(2\pi)$ para diferentes magnitudes de deformación ϵ en la dirección *zigzag* ($\theta = 0^\circ$) y *armchair* ($\theta = 90^\circ$). Las curvas con pendiente ~ 0 corresponden a la región I y con pendiente $\sim \infty$ corresponden a la región $\text{SPE}_{\text{inter}}$ Fig. 5.4. Inspirada de [67]. (a) Si la tensión es paralela a la dirección de propagación en la región I, q_2 incrementa al deformar la monocapa de grafeno. (b) Si la tensión es perpendicular a la dirección de propagación en la región I, q_2 disminuye al deformar la monocapa de grafeno.

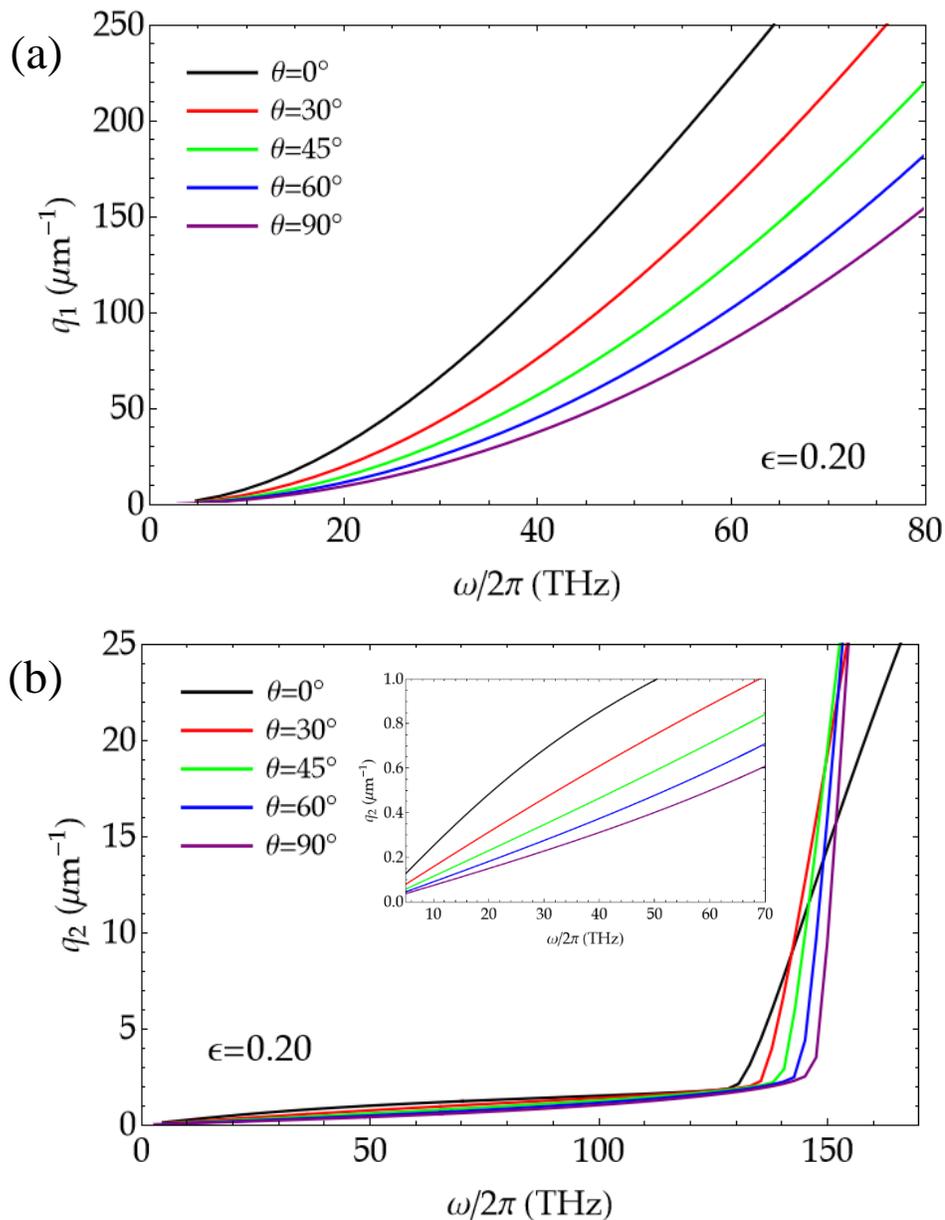
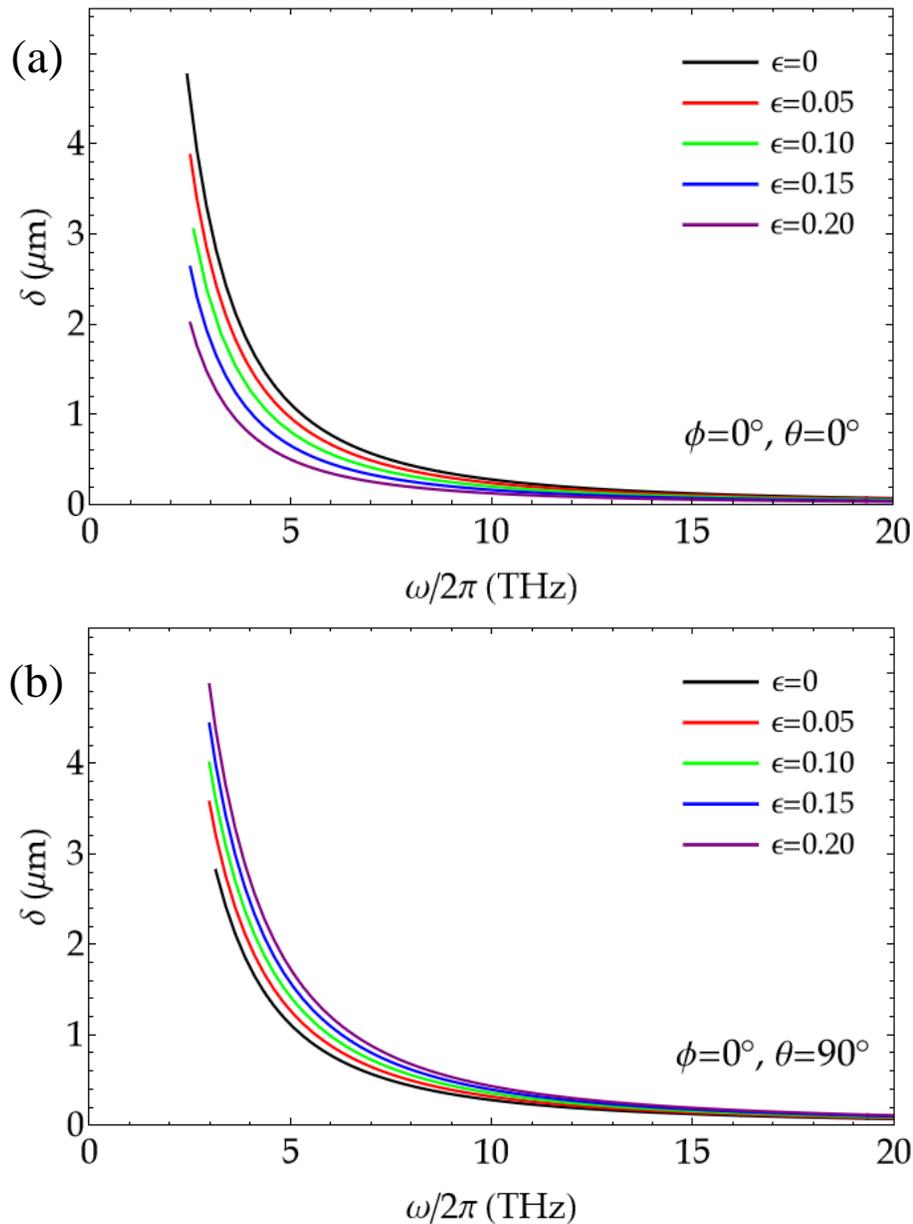


Figura 5.8

Gráficas de q_1 y q_2 contra $\omega/(2\pi)$ para diferentes ángulos de deformación θ tomando $\epsilon = 0.20$. (a) Se observa una disminución de q_1 al aumentar θ , llegando a un valor mínimo en $\theta = 90^\circ$ (*armchair*) y máximo en $\theta = 0^\circ$ (*zigzag*). Inspirada de [59]. (b) Se observa una disminución de q_2 al aumentar θ en la región I, llegando a un valor mínimo en $\theta = 90^\circ$ (*armchair*) y máximo en $\theta = 0^\circ$ (*zigzag*). Inspirada de [67].

En la Fig. 5.6 se graficó q_1 contra $\omega/(2\pi)$ tomando diferentes valores de ϵ en la dirección *zigzag* ($\theta = 0^\circ$) y *armchair* ($\theta = 90^\circ$). Se observa como q_1 va incrementando al aumentar ϵ si la tensión es paralela a la dirección de propagación del plasmón Fig. 5.6 (a), pero q_1 disminuye si la tensión es perpendicular a la dirección de propagación del plasmón Fig. 5.6 (b). En la Fig. 5.7 se graficó q_2 contra $\omega/(2\pi)$ para diferentes ϵ en la dirección *zigzag* ($\theta = 0^\circ$) y *armchair* ($\theta = 90^\circ$). Las curvas que presentan una pendiente ~ 0 corresponde a la región de excitación de plasmones de larga duración (región I), es decir, la región donde el plasmón es amortiguado débilmente y las curvas con pendiente $\sim \infty$ corresponden a la región de amortiguamiento de Landau (SPE_{inter}) Fig. 5.4, esto es, la región donde el plasmón es fuertemente amortiguado. De la Fig. 5.7 también se puede apreciar como q_2 incrementa al aumentar ϵ en la región I, si la tensión es paralela a la dirección de propagación del plasmón Fig. 5.7 (a), mientras que q_2 disminuye en la región I, si la tensión es perpendicular a la dirección de propagación del plasmón Fig. 5.7 (b). En la Fig. 5.8 se graficó q_1 y q_2 contra $\omega/(2\pi)$ para diferentes θ , sin pérdida de generalidad se tomó $\epsilon = 0.20$. Se deduce que tanto q_1 como q_2 (en la región I) disminuyen al aumentar θ , alcanzando un valor mínimo si la tensión se aplica en la dirección *armchair* ($\theta = 90^\circ$) y un valor máximo si se aplica en la dirección *zigzag* ($\theta = 0^\circ$). En la Fig. 5.9 se graficó δ contra $\omega/(2\pi)$ para diferentes valores de ϵ en la dirección *zigzag* ($\theta = 0^\circ$) y *armchair* ($\theta = 90^\circ$), se concluye que, al incrementar la deformación de la monocapa de grafeno, la profundidad de penetración δ disminuirá si la tensión es paralela a la dirección de propagación del plasmón Fig. 5.9 (a) y aumentará si la tensión es perpendicular a la dirección de propagación del plasmón Fig. 5.9 (b). En la Fig. 5.10 se graficó L contra $\omega/(2\pi)$ para diferentes valores de ϵ en la dirección *zigzag* ($\theta = 0^\circ$) y *armchair* ($\theta = 90^\circ$), se concluye que, al incrementar la deformación de la monocapa de grafeno, la longitud de propagación L disminuirá si la tensión es paralela a la dirección de propagación del plasmón Fig. 5.10 (a) y aumentará si la tensión es perpendicular a la dirección de propagación del plasmón Fig. 5.10 (b). En la Fig. 5.11 se graficó δ y L contra $\omega/(2\pi)$ para diferentes θ , sin pérdida de generalidad se tomó $\epsilon = 0.20$. Se observa que, al aumentar θ tanto δ como L incrementan y presentan un valor máximo si la tensión se aplica en la dirección *armchair* ($\theta = 90^\circ$) y un valor mínimo si se aplica en la dirección *zigzag* ($\theta = 0^\circ$).

**Figura 5.9**

Profundidad de penetración δ contra $\omega/(2\pi)$ para diferentes magnitudes de deformación ϵ en la dirección *zigzag* ($\theta = 0^\circ$) y *armchair* ($\theta = 90^\circ$). Inspirada de [39, 67]. (a) Si la tensión es paralela a la dirección de propagación del plasmón, δ disminuye al deformar la monocapa de grafeno. (b) Si la tensión es perpendicular a la dirección de propagación del plasmón, δ incrementa al deformar la monocapa de grafeno.

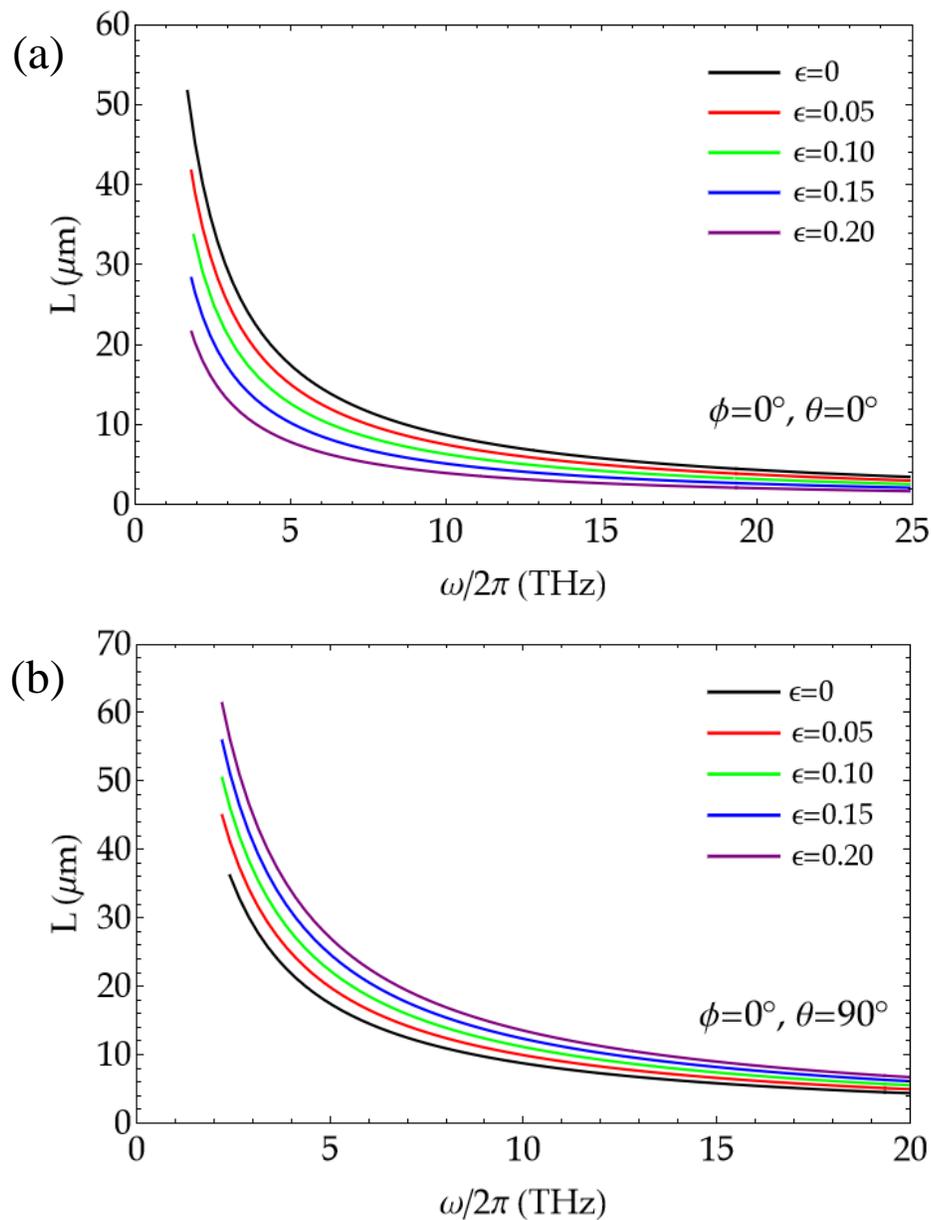
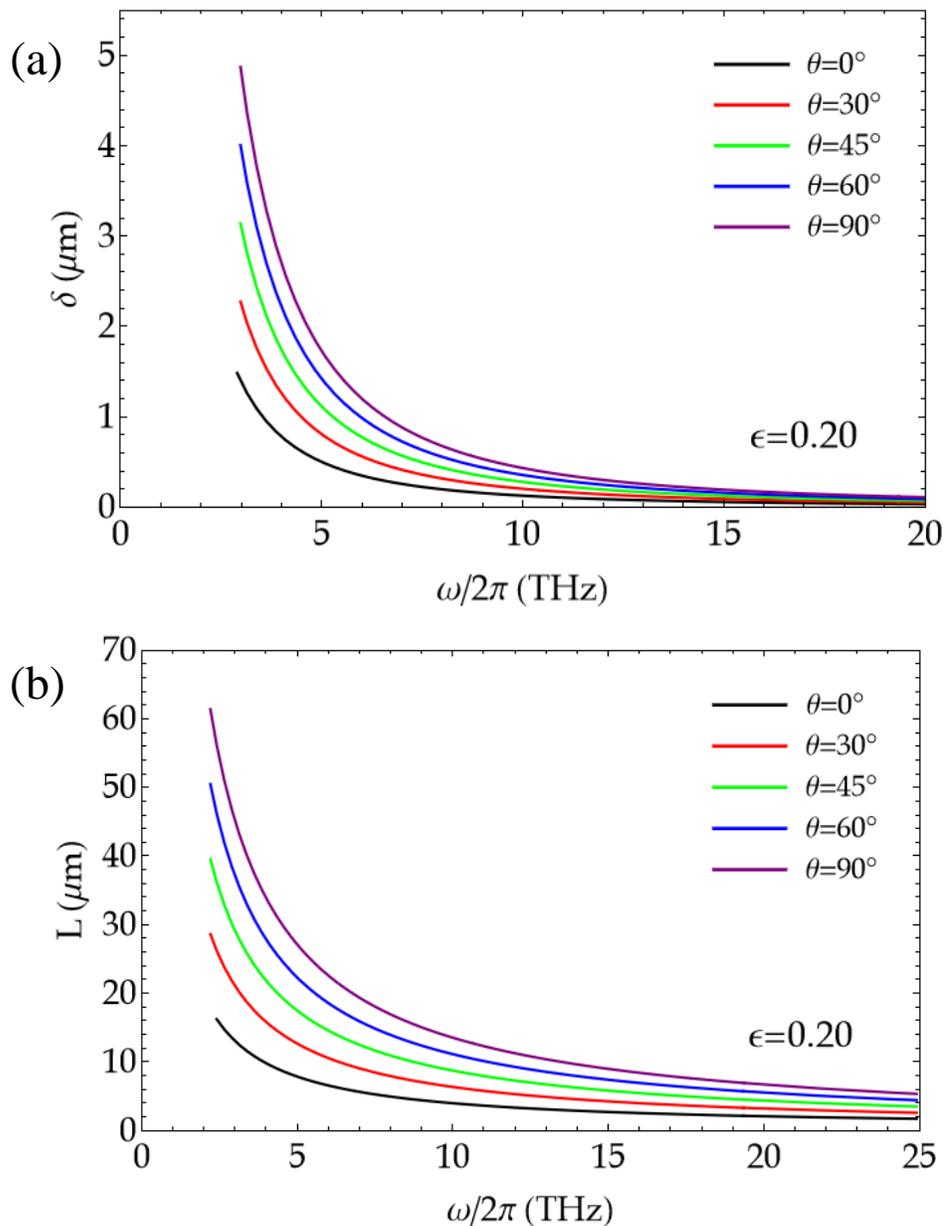


Figura 5.10

Longitud de propagación L contra $\omega/(2\pi)$ para diferentes magnitudes de deformación ϵ en la dirección *zigzag* ($\theta = 0^\circ$) y *armchair* ($\theta = 90^\circ$). Inspirada de [39, 67]. **(a)** Si la tensión es paralela a la dirección de propagación del plasmón, L disminuye al deformar la monocapa de grafeno. **(b)** Si la tensión es perpendicular a la dirección de propagación del plasmón, L incrementa al deformar la monocapa de grafeno.

**Figura 5.11**

Gráficas de δ y L contra $\omega/(2\pi)$ para diferentes ángulos de deformación θ tomando $\epsilon = 0.20$. Inspirada de [39, 67]. (a) Se observa un incremento de δ al aumentar θ , llegando a un valor máximo en $\theta = 90^\circ$ (*armchair*) y mínimo en $\theta = 0^\circ$ (*zigzag*). (b) Se observa un incremento de L al aumentar θ , llegando a un valor máximo en $\theta = 90^\circ$ (*armchair*) y mínimo en $\theta = 0^\circ$ (*zigzag*).

5.2 Conclusiones.

Se concluye que, tomando únicamente ventaja de la deformación mecánica del grafeno, se demuestra teóricamente que la longitud de propagación L y profundidad de penetración δ de un TM-SPP en una monocapa de grafeno deformada mecánicamente, uniaxial y uniforme que se halla incrustada entre dos medios dieléctricos constantes semi infinitos, puede ser optimizada modificando la magnitud de deformación ϵ y orientación de la tensión aplicada θ . Los resultados indican que una mayor longitud de propagación del TM-SPP se obtiene cuando la magnitud de deformación se maximiza ($\epsilon = 0.20$) y la tensión es perpendicular a la dirección de propagación del plasmón, con un incremento en la propagación del orden de decenas de micras para una frecuencia de $\sim 2 - 10$ THz (con mayor propagación a menor frecuencia. En contraparte, una menor profundidad de penetración ocurre cuando la magnitud de deformación se maximiza ($\epsilon = 0.20$) y la tensión es paralela a la dirección de propagación del plasmón, con una disminución de la penetración del orden de micras para una frecuencia de $\sim 2 - 5$ THz (con menor penetración a mayor frecuencia). Por lo tanto, estos estudios pueden servir como guía en el ámbito experimental o la optimización de dispositivos fotónico.

Referencias

- [1] Allen, P.B. (1996). *Single particle versus collective electronic excitations*. From Quantum Mechanics to Technology. Springer.
- [2] Anagnostopoulos, G., Pappas, P.-N., Li, Z., Kinloch, I. A., Young, R. J., Novoselov, K. S., ... Papagelis, K. (2016). *Mechanical Stability of Flexible Graphene-Based Displays*. ACS Applied Materials & Interfaces, 8(34), 22605–22614.
- [3] Balandin, A. A., Ghosh, S., Bao, W., Calizo, I., Teweldebrhan, D., Miao, F., & Lau, C. N. (2008). *Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene*. Nano Letters, 8(3), 902–907.
- [4] Beane, G., Yu, K., Devkota, T., Johns, P., Brown, B., Wang, G. P., & Hartland, G. (2017). *Surface Plasmon Polariton Interference in Gold Nanoplates*. The Journal of Physical Chemistry Letters, 8(19), 4935–4941.
- [5] Bludov, Y. V., Ferreira, A., Peres, N. M. R., & Vasilevskiy, M. I. (2013). *A primer on surface plasmon-polaritons in graphene*. International Journal of Modern Physics B, 27(10), 1341001.

- [6] Boehm, H. P., Clauss, A., Fischer, G. O., & Hofmann, U. (1962). *Das Adsorptionsverhalten sehr dünner Kohlenstoff-Folien*. Zeitschrift Für Anorganische Und Allgemeine Chemie, 316(3-4), 119–127.
- [7] Bolotin, K. I., Sikes, K. J., Jiang, Z., Klima, M., Fudenberg, G., Hone, J., ... Stormer, H. L. (2008). *Ultra-high electron mobility in suspended graphene*. Solid State Communications, 146(9-10), 351–355.
- [8] Burchell, T. D. (2012). *Graphite: Properties and Characteristics*. Comprehensive Nuclear Materials, 285–305.
- [9] Cao, K., Feng, S., Han, Y., Gao, L., Hue Ly, T., Xu, Z., & Lu, Y. (2020). *Elastic straining of free-standing monolayer graphene*. Nature Communications, 11(1).
- [10] Casiraghi, C., Hartschuh, A., Lidorikis, E., Qian, H., Harutyunyan, H., Gokus, T., ... Ferrari, A. C. (2007). *Rayleigh Imaging of Graphene and Graphene Layers*. Nano Letters, 7(9), 2711–2717.
- [11] CTI Materials. (2022). *Graphene Nanoplatelets*. <https://www.ctimaterials.com/product-category/graphene-nanoplatelets/>.
- [12] Cui, G., Wu, J., Lin, J. et al. (2021). *Graphene-based nanomaterials for breast cancer treatment: promising therapeutic strategies*. J Nanobiotechnol 19, 211.
- [13] Czerniak-Reczulska, M., Niedzielska, A., & Jędrzejczak, A. (2015). *Graphene as a Material for Solar Cells Applications*. Advances in Materials Science, 15(4), 67–81.

- [14] Echtermeyer, T. J., Milana, S., Sassi, U., Eiden, A., Wu, M., Lidorikis, E., & Ferrari, A. C. (2015). *Surface Plasmon Polariton Graphene Photodetectors*. *Nano Letters*, 16(1), 8–20.
- [15] El-Kady, M. F., Shao, Y., & Kaner, R. B. (2016). *Graphene for batteries, supercapacitors and beyond*. *Nature Reviews Materials*, 1(7).
- [16] Elias, D. C., Gorbachev, R. V., Mayorov, A. S., Morozov, S. V., Zhukov, A. A., Blake, P., ... Geim, A. K. (2011). *Dirac cones reshaped by interaction effects in suspended graphene*. *Nature Physics*, 7(9), 701–704.
- [17] Field, J. E. (2012). *The mechanical and strength properties of diamond*. *Reports on Progress in Physics*, 75(12), 126505.
- [18] Freire-Soler V. M. (2014). *Fabrication and Characterization of Macroscopic Graphene Layers on Metallic Substrates*. Universitat de Barcelona.
- [19] Geim, A. K., & Novoselov, K. S. (2007). *The rise of graphene*. *Nature Materials*, 6(3), 183–191.
- [20] Gonçalves, P. A. D., & Peres N. M. R. (2016). *An Introduction to Graphene Plasmonics*. University of Minho.
- [21] Hajian, H., Serebryannikov, A. E., Ghobadi, A., Demirag, Y., Butun, B., Vandenbosch, G. A. E., & Ozbay, E. (2018). *Tailoring far-infrared surface plasmon polaritons of a single-layer graphene using plasmon-phonon hybridization in graphene-LiF heterostructures*. *Scientific Reports*, 8(1).

- [22] He, S.-M., Lin, Z.-L., Lin, W.-J., Xu, K.-X., Chen, Y.-H., Chen, J.-C., & Su, C.-Y. (2021). *Toward large-scale CVD graphene growth by enhancing reaction kinetics via an efficient interdiffusion mediator and mechanism study utilizing CFD simulations*. Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers.
- [23] He, X., Tang, N., Sun, X., Gan, L., Ke, F., Wang, T., ... Shen, B. (2015). *Tuning the graphene work function by uniaxial strain*. Applied Physics Letters, 106(4), 043106.
- [24] Homaeigohar, S., & Elbahri, M. (2017). *Graphene membranes for water desalination*. NPG Asia Materials, 9(8), e427.
- [25] Hwang, E. H., & Das Sarma, S. (2007). *Dielectric function, screening, and plasmons in two-dimensional graphene*. Physical Review B, 75(20).
- [26] Jablan, M., Buljan, H., & Soljačić, M. (2009). *Plasmonics in graphene at infrared frequencies*. Physical Review B, 80(24).
- [27] Jiang, Y., Zhang, H. D., Wang, J., Gao, C. N., Wang, J., & Cao, W. P. (2018). *Design and performance of a terahertz absorber based on patterned graphene*. Optics Letters, 43(17).
- [28] Ju, L., Geng, B., Horng, J., Girit, C., Martin, M., Hao, Z., ... Wang, F. (2011). *Graphene plasmonics for tunable terahertz metamaterials*. Nature Nanotechnology, 6(10), 630–634.
- [29] Kalachyova, Y., Mares, D., Lyutakov, O., Kostejn, M., Lapcak, L., & Švorčík, V. (2015). *Surface Plasmon Polaritons on Silver Gratings for Optimal SERS Response*. The Journal of Physical Chemistry C, 119(17), 9506–9512.

- [30] Khalandi, G., Namdar, A., & Entezar, S. R. (2017). *Tension induced surface plasmon-polaritons at graphene-based structure*. *Superlattices and Microstructures*, 102, 490–497.
- [31] Koppens, F. H. L., Chang, D. E., & García de Abajo, F. J. (2011). *Graphene Plasmonics: A Platform for Strong Light–Matter Interactions*. *Nano Letters*, 11(8), 3370–3377.
- [32] Kundu, R. (2009). *Tight binding parameters for graphene*. *Modern Physics Letters B*, 25(03), 163-173.
- [33] Lavin-Lopez, M. P., Sanchez-Silva, L., Valverde, J. L., & Romero, A. (2017). *CVD-graphene growth on different polycrystalline transition metals*. *AIMS Materials Science*, 4(1): 194-208.
- [34] Li, Q., Bi, K., Niu, Y., Zhou, S., Tan, L., Mu, J., ... Chou, X. (2022). *Modulation of graphene THz absorption based on H₂AuCl₄ doping method*. *Opt. Express* 30, 40482-40490.
- [35] Li, Y., Jiang, X., Liu, Z., & Liu, Z. (2010). *Strain effects in graphene and graphene nanoribbons: The underlying mechanism*. *Nano Research*, 3(8), 545–556.
- [36] Liu, F., Ming, P., & Li, J. (2007). *Ab initio calculation of ideal strength and phonon instability of graphene under tension*. *Physical Review B*, 76(6).
- [37] Liu, J., & Lin, I. (2018). *Graphene Photonics*. Cambridge: Cambridge University Press.

- [38] Liu, Z., Xu, Q., Zhang, C., Sun, Q., Wang, C., Dong, M., ... Zhang, S. (2020). *Laser-Induced Growth of Large-Area Epitaxial Graphene with Low Sheet Resistance on 4H-SiC(0001)*. Applied Surface Science, 145938.
- [39] Ma, Z., Chen, Z., Zhang, L., Lu X., Yang, G., Xu, X., & Wang, R. (2022). *Directional control of propagating graphene plasmons by strain engineering*. Opt. Mater. Express 12, 622-633.
- [40] Martín, N. (2011). *Sobre Fullerenos, Nanotubos de Carbono y Grafenos*. Arbor, 187(Extra_1), 115–131.
- [41] Mbayachi, V. B., Ndayiragije, E., Sammani, T., Taj, S., Mbuta, E. R., & Khan, A. ullah. (2021). *Graphene synthesis, characterization and its applications: A review*. Results in Chemistry, 3, 100163.
- [42] Memarian, F., Fereidoon, A., & Darvish Ganji, M. (2015). *Graphene Young's modulus: Molecular mechanics and DFT treatments*. Superlattices and Microstructures, 85, 348–356.
- [43] Méndez-Rojas, M. Á., & Enciso Barros, A. E. (2011). *El grafeno: entre serendipia, cinta adhesiva y emigrantes*. Educación Química, 22(1), 72–74.
- [44] Mermin, N. D. (1970). *Lindhard Dielectric Function in the Relaxation-Time Approximation*. Physical Review B, 1(5), 2362–2363.
- [45] Moon, J.-Y., Kim, M., Kim, S.-I., Xu, S., Choi, J.-H., Whang, D., ... Lee, J.-H. (2020). *Layer-engineered large-area exfoliation of graphene*. Science Advances, 6(44), eabc6601.
- [46] Moosa, A. & Abed, M. (2021). *Graphene preparation and graphite exfoliation*. Turkish Journal of Chemistry: Vol. 45: No. 3, Article 1.

- [47] Muñoz, R., Martínez, L., López-Elvira, E., Munuera, C., Huttel, Y., & García-Hernández, M. (2018). *Direct synthesis of graphene on silicon oxide by low temperature plasma enhanced chemical vapor deposition*. *Nanoscale*, 10(26), 12779–12787.
- [48] Nair, R. R., Blake, P., Grigorenko, A. N., Novoselov, K. S., Booth, T. J., Stauber, T., ... Geim, A. K. (2008). *Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene*. *Science*, 320(5881), 1308–1308.
- [49] Negri, V., Pacheco-Torres, J., Calle, D., & López-Larrubia, P. (2020). *Carbon Nanotubes in Biomedicine*. *Topics in Current Chemistry*, 378(1).
- [50] Novoselov, K. S., & Castro Neto, A. H. (2012). *Two-dimensional crystals-based heterostructures: materials with tailored properties*. *Physica Scripta*, T146, 014006.
- [51] Ogawa, S., Fukushima, S., & Shimatani, M. (2020). *Graphene Plasmonics in Sensor Applications: A Review*. *Sensors*, 20(12), 3563.
- [52] Oliva-Leyva, M., & Naumis, G. G. (2016). *Effective Dirac Hamiltonian for anisotropic honeycomb lattices: Optical properties*. *Physical Review B*, 93(3).
- [53] Oliva-Leyva, M., & Wang, C. (2017). *Low-energy theory for strained graphene: an approach up to second-order in the strain tensor*. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29(16), 165301.
- [54] Peng, Z., Chen, X., Fan, Y., Srolovitz, D. J., & Lei, D. (2020). *Strain engineering of 2D semiconductors and graphene: from strain fields to band-structure tuning and photonic applications*. *Light: Science & Applications*, 9(1).

- [55] Pereira, V. M., Castro Neto, A. H., & Peres, N. M. R. (2009). *Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene*. *Physical Review B*, 80(4).
- [56] Phiri, J., Gane, P., & Maloney, T. C. (2017). *General overview of graphene: Production, properties and application in polymer composites*. *Materials Science and Engineering: B*, 215, 9–28.
- [57] Politano, A., & Chiarello, G. (2015). *Probing the Young's modulus and Poisson's ratio in graphene/metal interfaces and graphite: a comparative study*. *Nano Research*, 8(6), 1847–1856.
- [58] Ren Y., Guo X., Zhang G., Balakin A. V., Shkurinov A. P., Yu A., & Zhu Y. (2020). *Excitation of graphene surface plasmons polaritons by guided-mode resonances with high efficiency*. *Opt Express*. 2020 Apr 27;28(9):13224-13233.
- [59] Roshan-Entezar S, Khalandi G. (2020) *Effect of strain on surface plasmon polaritons of a graphene cladded one-dimensional photonic crystal*. *Appl Opt*. 2020 Mar 1;59(7):2149-2156.
- [60] Salihoglu, O., Balci, S., & Kocabas, C. (2012). *Plasmon-polaritons on graphene-metal surface and their use in biosensors*. *Applied Physics Letters*, 100(21), 213110.
- [61] Schwierz, F. (2010). *Graphene transistors*. *Nature Nanotechnology*, 5(7), 487–496.
- [62] Shahdeo, D., Roberts, A., Abbineni, N., & Gandhi, S. (2020). *Graphene based sensors*. *Comprehensive Analytical Chemistry*, 175–199.

- [63] Sumba-Lusero, C. H. (2018). *Obtención de grafeno mediante exfoliación electroquímica de grafito para fabricar sensores de presión usando esponjas de poliuretano*. Escuela Politécnica Nacional.
- [64] Sun, L., Yuan, G., Gao, L., Yang, J., Chhowalla, M., Gharahcheshmeh, M. H., ... Liu, Z. (2021). *Chemical vapour deposition*. *Nature Reviews Methods Primers*, 1(1).
- [65] Tiwari, S. K., Sahoo, S., NannanWang, & Huczko, A. (2020). *Graphene Research and their Outputs: Status and Prospect*. *Journal of Science: Advanced Materials and Devices*.
- [66] Tuček, J., Błoński, P., Ugolotti, J., Swain, A. K., Enoki, T., & Zbořil, R. (2018). *Emerging chemical strategies for imprinting magnetism in graphene and related 2D materials for spintronic and biomedical applications*. *Chemical Society Reviews*, 47(11), 3899–3990.
- [67] Ukhtary, M. S., & Saito, R. (2020). *Surface plasmons in graphene and carbon nanotubes*. *Carbon*, 167, 455–474.
- [68] Wang, G., Wang, B., Wang, X., Park, J., Dou, S., Ahn, H., & Kim, K. (2009). *Sn/graphene nanocomposite with 3D architecture for enhanced reversible lithium storage in lithium ion batteries*. *Journal of Materials Chemistry*, 19(44), 8378.
- [69] Wang, H., Zhao, H., Hu, G., Li, S., Su, H., & Zhang, J. (2015). *Graphene Based Surface Plasmon Polariton Modulator Controlled by Ferroelectric Domains in Lithium Niobate*. *Scientific Reports*, 5(1).

- [70] Wang, J., Ren, Z., Hou, Y., Yan, X., Liu, P., Zhang, H., ... Guo, J. (2020). *A review of graphene synthesis at low temperatures by CVD methods*. *New Carbon Materials*, 35(3), 193–208.
- [71] Wang, L., Tian, Z., Zhang, B., Xu, B., Wang, T., Wang, Y., ... Mei, Y. (2019). *On-Chip Rolling Design for Controllable Strain Engineering and Enhanced Photon–Phonon Interaction in Graphene*. *Small*, 1805477.
- [72] Whitener, K. E., & Sheehan, P. E. (2014). *Graphene synthesis*. *Diamond and Related Materials*, 46, 25–34.
- [73] Wikipedia, The free encyclopedia. (2017). *Electronic properties of graphene*. Última modificación 26 de agosto de 2022. https://en.wikipedia.org/wiki/Electronic_properties_of_graphene.
- [74] Xiao Y. H., & Rui L., (2014). *Comparison of Graphene-Based Transverse Magnetic and Electric Surface Plasmon Modes*. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 20(1), 62–67.
- [75] Xiao, S., Zhu, X., Li, B.-H., & Mortensen, N. A. (2016). *Graphene-plasmon polaritons: From fundamental properties to potential applications*. *Frontiers of Physics*, 11(2).
- [76] Xu, S. C., Man, B. Y., Jiang, S. Z., Chen, C. S., Yang, C., Liu, M., ... Zhang, C. (2013). *Direct synthesis of graphene on SiO₂ substrates by chemical vapor deposition*. *CrystEngComm*, 15(10), 1840.
- [77] Yan, H., Low, T., Zhu, W., Wu, Y., Freitag, M., Li, X., ... Xia, F. (2013). *Damping pathways of mid-infrared plasmons in graphene nanostructures*. *Nature Photonics*, 7(5), 394–399.

- [78] Yang, K., Feng, L., & Liu, Z. (2016). *Stimuli responsive drug delivery systems based on nano-graphene for cancer therapy*. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 105, 228–241.
- [79] Yang, Q., Zhang, Z., Zhu, W., & Wang, G. (2019). *Growth of Large-Area High-Quality Graphene on Different Types of Copper Foil Preannealed under Positive Pressure H₂ Ambience*. *ACS Omega*, 4(3), 5165–5171.
- [80] Zhang, J., Zhang, L., & Xu, W. (2012). *Surface plasmon polaritons: physics and applications*. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 45(11), 113001.
- [81] Zhao, H., Min, K., & Aluru, N. R. (2009). *Size and Chirality Dependent Elastic Properties of Graphene Nanoribbons under Uniaxial Tension*. *Nano Letters*, 9(8), 3012–3015.