



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MÉXICO

CENTRO DE NANOCIENCIAS Y
NANOTECNOLOGÍA

PLASMONES HIPERBÓLICOS EN SISTEMAS
BIDIMENSIONALES DE DIRAC

TESIS

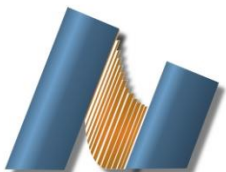
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
LICENCIADO EN NANOTECNOLOGÍA

P R E S E N T A:

LUIS FERNANDO MARTÍNEZ GÓMEZ

TUTOR DE TESIS

DR. JESÚS ALBERTO MAYTORENA CÓRDOBA



Ensenada Baja California a 05 de agosto 2021



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

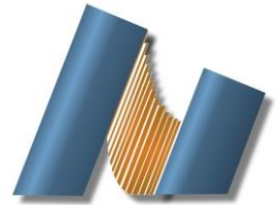
DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
CENTRO DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA



LICENCIATURA EN NANOTECNOLOGÍA
NANOESTRUCTURAS

PLASMONES HIPERBÓLICOS EN SISTEMAS BIDIMENSIONALES DE DIRAC

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL TÍTULO DE:
LICENCIADO EN NANOTECNOLOGÍA

PRESENTA:
LUIS FERNANDO MARTÍNEZ GÓMEZ

DIRECTOR DE TESIS
DR. JESUS ALBERTO MAYTORENA CÓRDOBA

ENSENADA, BAJA CALIFORNIA 05 DE AGOSTO 2021

Hago constar que el trabajo que presento es de mi autoría y que todas las ideas, citas textuales, datos, ilustraciones, gráficas, etc. sacados de cualquier obra o debidas al trabajo de terceros, han sido debidamente identificados y citados en el cuerpo del texto y en la bibliografía y acepto que en caso de no respetar lo anterior puedo ser sujeto de sanciones universitarias.

Afirmo que el material presentado no se encuentra protegido por derechos de autor y me hago responsable de cualquier reclamo relacionado con la violación de derechos de autor.

LUIS FERNANDO MARTINEZ GOMEZ

Resumen

El descubrimiento de los sistemas bidimensionales tipo Dirac ha impulsado a la plasmónica por sus novedosas propiedades. Entre ellos, la emergente clase de materiales anisotrópicos 2D tipo Dirac presentan fenómenos ópticos únicos con potenciales aplicaciones tecnológicas en la optoelectrónica y plasmónica. En el presente trabajo nos enfocamos en los modos normales de la respuesta óptica de los materiales 2D tipo Dirac. Partiendo del grafeno, se explican las principales propiedades de las estructuras de conos de Dirac a bajas energías. Posteriormente se discuten las principales características y aplicaciones de otros sistemas 2D análogos. Se calculó la relación de dispersión plasmónica para estos sistemas bidimensionales y se discutió el concepto de contornos de isofrecuencia para entender las propiedades de los modos plasmónicos en materiales anisótropos. A partir de este, se destacan las principales diferencias entre los plasmones en el grafeno y los sistemas clásicos conocidos (sistema de gas de electrones bidimensional, 2DEG). Así mismo, se discutieron las propiedades de los plasmones para materiales isotrópicos, anisotrópicos e hiperbólicos. Por último, se obtuvieron las expresiones explícitas del tensor de conductividad óptico del borofeno $8-Pmmn$ a través de la fórmula de Kubo a temperatura $T = 0$ como función de la frecuencia de luz incidente. A partir de esta respuesta óptica del borofeno $8-Pmmn$ se observó una región hiperbólica. Posteriormente, se analizaron los contornos de isofrecuencia de los plasmones para distintas frecuencias de luz incidente. Finalmente se analizó el amortiguamiento de los plasmones para modos tipo TE y TM, en donde estos últimos presentaron menor disipación de energía.

Agradecimientos

A mi asesor el Doctor Jesús Alberto Maytorena Córdova por haber sido un foco de inspiración durante mi carrera, por haber forjado mi camino hacia la ciencia e investigación, por su apoyo incondicional y por haber hecho este trabajo posible. A mi familia por ser mi soporte a lo largo de mi carrera, y en especial a mis padres por haberme acompañado en todo momento. A cada uno de los maestros que aportaron en mi formación y por haberme enseñado la belleza de la ciencia.

Índice general

Resumen	I
Agradecimientos	II
Índice General	III
Índice de figuras	V
Capítulo 1 Introducción	1
Capítulo 2 Sistemas de Dirac	5
2.1 Ecuación de Dirac en 2D	5
2.2 Grafeno	7
2.3 Materiales tipo Dirac	9
Capítulo 3 Modos Electromagneticos en materiales 2D	12
3.1 Relación de dispersión plasmónica en materiales 2D	12
3.2 Propagación de Plasmones en Materiales 2D	22
3.2.1 Plasmones en Grafeno	23
3.2.2 Plasmones Anisotrópicos	26
3.2.3 Plasmones Hiperbólicos	28
Capítulo 4 Plasmones en el Borofeno 8-<i>Pmmn</i>	32
4.1 Borofeno 8- <i>Pmmn</i>	33
4.2 Conductividad Óptica	35
4.2.1 Transiciones intrabanda	36
4.2.2 Transiciones interbanda	38
4.3 Plasmones en el borofeno 8- <i>Pmmn</i>	41
Capítulo 5 Conclusiones	46

Referencias	47
1 Apéndice A.....	51

Índice de figuras

- 2.1.A) Estructura de banda energética del grafeno. La relación de dispersión lineal cerca de las partes centrales de las bandas son resaltadas (Duplantier et al., 2017). B) Estructura de bandas del grafeno (Katsnelson, 2007). 7
- 3.1. Vectores de Onda de una onda electromagnética incidente sobre un material 2D (línea azul) entre dos medio dieléctricos. 14
- 3.2. Sistema de coordenadas rotados para describir la propagación en una dirección arbitraria, a un ángulo φ respecto al eje x . 21
- 3.3. Parte real (A) y parte imaginaria (B) del tensor de conductividad del grafeno para varios valores del nivel de Fermi: $E_F = 0,1$ eV (línea negra), $E_F = 0,15$ eV (línea azul), $E_F = 0,2$ eV (línea verde) y $E_F = 0,3$ eV (línea roja). Los parámetros son: $\tau = 0,34$ ps, $\sigma_0 = e^2/4\hbar$ (Nemilentsau et al., 2019). 24
- 3.4. Pérdida de energía de los plasmones del grafeno para varios valores de nivel de Fermi $E_F = 0,1$ eV (línea negra), $E_F = 0,15$ eV (línea azul), $E_F = 0,2$ eV (línea verde) y $E_F = 0,3$ eV (línea roja) (Nemilentsau et al., 2019). 25
- 3.5. Contornos plasmónicos en el espacio de los momentos para valores arbitrarios de la parte imaginaria del tensor de conductividad σ''_{ij} . El contorno rojo tiene valores del tensor de conductividad: $\sigma''_{xx} = 20,48\mu\text{S}$, $\sigma''_{yy} = 11,14\mu\text{S}$, $\sigma''_{xy} = 11,08\mu\text{S}$ y $\sigma''_{yx} = 65,44\mu\text{S}$. El contorno azul con valores $\sigma''_{xx} = 20,48\mu\text{S}$, $\sigma''_{yy} = 11,14\mu\text{S}$ y $\sigma''_{xy} = \sigma''_{yx} = 0$. Por último, el contorno morado con valores $\sigma''_{xx} = 20,48\mu\text{S}$, $\sigma''_{yy} = 11,14\mu\text{S}$, $\sigma''_{xy} = -\sigma''_{yx} = 11,08\mu\text{S}$. Las tres gráficas fueron calculadas con $\hbar\omega = 0,088$ eV. 27
- 3.6. Transiciones ópticas para sistemas 2D tipo Dirac. Los conos de la parte superior corresponden a la banda de conducción, mientras que los inferiores a la banda de valencia. A bajas frecuencias ($\hbar\omega_2 < E_F$), las transiciones electrónicas son intrabanda, mientras que para frecuencias altas ($\hbar\omega_1 > E_F$), las transiciones son interbanda. 29

- 3.7. Parte real (a) e imaginaria (b) del tensor de conductividad del material 2D. Los parámetros son: $m_x = 0,2m_0$, $m_y = m_0$, $\eta = 0,01$ eV, $\omega_x = 1$ eV, $s_x = 1,7s_0$, $\omega_y = 0,25$ eV, y $s_y = 3,7s_0$, donde $s_0 = e^2/4\hbar$ y m_0 es la masa del electrón libre. 29
- 4.1.a) Vista frontal y lateral del borofeno 8-*Pmmn*. Los cuadros representan la celda unitaria donde se ubican dos átomos no equivalentes: B_I y B_R (Lopez-Bezanilla and Littlewood, 2016). b) Bandas de energía $E - \mathbf{k}$ donde se muestran los conos anisotrópicos de Dirac inclinados (Verma et al., 2017). 33
- 4.2. Tensor de conductividad óptica $\text{Re } \sigma_{xx}$ y $\text{Re } \sigma_{yy}$ del borofeno 8-*Pmmn* en unidades de $\sigma_0 = \frac{e^2}{\pi\hbar}$. 40
- 4.3. Tensor de conductividad óptica $\text{Im } \sigma_{xx}$ y $\text{Im } \sigma_{yy}$ del borofeno 8-*Pmmn* en unidades de $\sigma_0 = \frac{e^2}{\pi\hbar}$. Se sombreó con verde las regiones en donde los plasmones son anisotrópicos ($\text{Im } \sigma_{xx} \cdot \text{Im } \sigma_{yy} > 0$) y con rojo las regiones para el régimen hiperbólico ($\text{Im } \sigma_{xx} \cdot \text{Im } \sigma_{yy} < 0$). 42
- 4.4. Plasmones de superficie en borofeno 8-*Pmmn* con distintas frecuencias de luz incidente. Los contornos de la relación de dispersión plasmónica fueron calculados a través de la ecuación (3.44) en donde se descartaron las partes reales del tensor de conductividad como ilustración. 43
- 4.5. Longitud de decaimiento de propagación (en unidades de longitud de onda del plasmón) del borofeno 8-*Pmmn* para modos A) TE y B) TM, de acuerdo con las ecuaciones (3.38) y (3.39), respectivamente, donde el fondo rojo corresponde a la región hiperbólica. 44

CAPÍTULO 1

Introducción

En las últimas décadas, los plasmones han surgido como una promesa a nuevos dispositivos tecnológicos debido a sus innovadoras propiedades. Los plasmones son excitaciones electrónicas que se forman debido a la interacción de luz (o radiación electromagnética) con los electrones libres de un medio. Se presentan como modos colectivos de oscilación de la densidad de carga inducida (el “quantum” de este campo recibe el nombre de “plasmón” o “polaritón plasmónico” si se desea destacar su carácter del producto de la interacción luz-materia). En superficies metal/dieléctrico representan ondas o campos propagantes superficiales, conocidos como Plasmones de Superficie (SP, por sus siglas en inglés), con carácter evanescente en la dirección perpendicular a la interface. Estos plasmones de superficie presentan propiedades muy importantes, como campos fuertemente localizados, una enorme sensibilidad a los cambios en el entorno local y la capacidad de localizar la energía en volúmenes diminutos no restringidos por la longitud de onda de la luz incidente. Dicho esto, el estudio de los fenómenos ópticos relacionados con la respuesta electromagnética de los metales se ha denominado plasmónica o nanoplasmónica. Este campo de las nanociencias y nano-óptica se ocupa del control de la localización y la propagación de la luz en escalas inferiores a la longitud de onda.

Por otra parte, el descubrimiento del grafeno y sus extraordinarias propiedades (Novoselov et al., 2004), de los aislantes topológicos (Moore, 2010), de los semimetales de Weyl (Xu et al., 2015) entre otros, han abierto todo un campo nuevo de investigación, el de “los sistemas de Dirac”. En tales sistemas, los electrones están gobernados por la versión 2D de la ecuación de Dirac, lo que permite ya vislumbrar su novedad. Esta clase única de nanomateriales 2D presentan propiedades innovadoras que prometen aplicaciones importantes en la tecnología; el descubrimiento del grafeno ha traído una nueva revolución científica y tecnológica. Más aún, el grafeno contiene propiedades ópticas únicas y de mayor potencial que las conocidas en los metales. Primero, la densidad de portadores

de carga puede ser modificada eléctricamente, químicamente y ópticamente. Esto permite modificar el rango de frecuencias en las que se puede excitar los SP y abarcar un mayor rango de frecuencias. Segundo, la baja densidad electrónica de estados y el débil acoplamiento electrón-fonón provee al grafeno de una alta densidad de corriente de portadores de carga. Tercero, a diferencia de las excitaciones plasmónicas de un gas electrónico bidimensional, los plasmones de superficie en el grafeno ofrecen una posibilidad única de observar modos con polarización tipo TE. Debido a este movimiento transversal de los portadores, la velocidad de los SPs con polarización tipo TE suelen estar cerca de la velocidad de la luz en la materia (Mikhailov and Ziegler, 2007). Sin embargo, la relación de dispersión de tales modos colectivos en esta clase de sistemas difiere de aquéllas que suelen aparecer en los llamados metamateriales

Los metamateriales son materiales compuestos creados artificialmente que obtienen sus propiedades de la microestructura interna, en lugar de la composición química de los materiales naturales. El concepto central de los metamateriales es elaborar materiales utilizando unidades estructurales diseñadas y fabricadas artificialmente para conseguir las propiedades y funcionalidades deseadas. Por otra parte, las metasuperficies ultrafinas, que comprenden una clase de metamateriales ópticos planares altamente anisotrópicos con unidades estructurales de sub-longitud de onda, han atraído mucha atención debido a su capacidad de controlar localmente la fase, la amplitud y la polarización de la luz en la interfaz entre dos materiales (Kildishev et al., 2013). La respuesta electromagnética de las metasuperficies puede ser modelada a través del tensor de conductividad óptico

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

donde los componentes pueden ser complejos. Esta anisotropía de las metasuperficies genera plasmones con distintos contornos en el espacio de los momentos (k_x, k_y) . Nótese que para el caso isotrópico ($\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, $\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0$), por ejemplo el grafeno, el contorno de las plasmones son circulares. Por el contrario, cuando un componente del tensor de conductividad predomina sobre el otro ($\sigma_{xx} \neq \sigma_{yy}$, $\text{Im } \sigma_{xx} \cdot \text{Im } \sigma_{yy} > 0$), entonces los plasmones de superficie toman contornos elípticos. Más aún, para las metasuperficies en donde sus componentes diagonales del tensor de conductividad difieren de signo ($\text{Im } \sigma_{xx} \cdot \text{Im } \sigma_{yy} < 0$), se observa un contorno hiperbólico en los plasmones.

Nemilentsau et al. (2016) propusieron la posibilidad de tener propagación de tipo hiperbólica con materiales “naturales” tales como los materiales de Dirac o sistemas basados en ellos. En este trabajo proponen un novedoso mecanismo físico, inherente a la naturaleza de los materiales, para crear plasmones hiperbólicos bidimensionales altamente sintonizables basados en los materiales 2D anisotrópicos en el rango de frecuencias del infrarrojo lejano y medio. Este mecanismo se basa en la interacción entre dos tipos de movimientos de electrones que definen la respuesta electromagnética de los semiconductores típicos: el movimiento de los electrones (huecos) dentro de la banda de conducción (valencia) del material (movimiento intrabanda), y las transiciones de electrones desde la banda de valencia a la de conducción del material (transiciones interbanda). Debido a esto, se logró demostrar que los materiales anisotrópicos 2D tipo Dirac pueden albergar plasmones hiperbólicos de superficie altamente sintonizables.

Debido a la forma de los contornos plasmónicos, los plasmones hiperbólicos se propagan en direcciones con densidades de estados grandes y de mayor confinamiento, posicionándolo como potenciador para aplicaciones en la nanofotónica. La posibilidad de tener índices de refracción negativos fue predicha por Veselago (1968), en donde se requiere que las permitividades y permeabilidades sean ambas menores a cero ($\epsilon < 0$ y $\mu < 0$). Dicha propiedad es inherente en la mayoría de los materiales anisotrópicos hiperbólicos, el cual añade un valor adicional a sus propiedades hiperbólicas (Luo et al., 2002). Esta refracción negativa, dependiente de la longitud de onda, puede utilizarse para dirigir señales ópticas con diferentes longitudes de onda (Takayama and Lavrinenko, 2019). Uno de los problemas actuales de la microscopía de alta resolución es recuperar los componentes evanescentes en campos lejanos (*Hyperlens*). Los plasmones hiperbólicos poseen campos evanescentes en la dirección perpendicular del material, lo que permite fuertes interacciones luz-materia al mismo tiempo que proporciona un alto confinamiento. Por otra parte, los plasmones hiperbólicos, debido a su alta anisotropía, poseen componentes con vectores de onda de gran magnitud sin depender de mecanismos resonantes (intrínsecamente limitados en frecuencia, y perjudiciales para la formación de imágenes debido a las pérdidas de absorción), lo cual los convierte en candidatos ideales para leer y escribir información a nanoescala (Ferrari et al., 2015). De igual manera, los plasmones hiperbólicos en materiales 2D se pueden aplicar a la ingeniería de transmisión de calor (Guo et al., 2012; Guo and Jacob, 2013), ingeniería de emisión espontánea (Roth et al., 2017; Lu et al., 2014), nanolitografía (Li et al., 2011; Ishii et al., 2013), por mencionar algunos más.

Dicho esto, la presente tesis tiene como objetivo estudiar las características de la propagación de modos electromagnéticos en materiales 2D de Dirac, tomando como ejemplos el grafeno, un modelo anisotrópico mínimo con plasmones hiperbólicos, y el borofeno $P\text{-}mmn$. Este se delimitará en estudiar los plasmones en sistemas 2D, así como el tensor de conductividad óptica del borofeno $8\text{-}Pmmn$. La presente tesis está organizada de la siguiente manera: En el Capítulo 2 se hablará de los Sistemas de Dirac, partiendo del Hamiltoniano de Dirac en el grafeno hasta extrapolarlo a materiales anisotrópicos 2D. En el Capítulo 3 se desarrollará a detalle la relación de dispersión plasmónica para un material 2D puesto en una interface entre dos dieléctricos. Además, se estudiarán las propiedades de los plasmones para el caso isotrópico, puramente anisotrópico e hiperbólico. En el Capítulo 4 se revisarán las propiedades más relevantes del borofeno $8\text{-}Pmmn$. Se calcularán las expresiones del tensor de conductividad a partir del formalismo de la fórmula de Kubo y se estudiarán las propiedades plasmónicas del borofeno $8\text{-}Pmmn$. Por último, en el Capítulo 5 se anexarán las conclusiones del presente trabajo así como los resultados más relevantes.

CAPÍTULO 2

Sistemas de Dirac

El descubrimiento del grafeno trajo consigo una revolución de ideas y avances tecnológicos debido a sus particulares propiedades. En particular, las estructuras de conos de Dirac provee al grafeno de electrones que se comportan como fermiones "sin masa", lo que le confiere al material notables propiedades. A bajas energías, la energía del electrón depende de manera lineal del vector de onda en sistemas tipo grafeno, y la ecuación que gobierna este comportamiento tiene la forma de la ecuación de Dirac en dos dimensiones. En este capítulo iniciaremos por recordar la celebre ecuación de Dirac (considerada en 2D), y a continuación presentaremos el grafeno, y luego comentamos sobre otros sistemas 2D análogos así como sus propiedades.

2.1. Ecuación de Dirac en 2D

Paul Dirac desarrolló una ecuación considerada como una de las más bellas en la física, que permitió incorporar el momento magnético intrínseco de los electrones (espín). En dos dimensiones, la ecuación de Dirac para una partícula libre se escribe

$$(c(p_x\sigma_x + p_y\sigma_y) + mc^2\sigma_z) \Psi(x, y, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, y, t). \quad (2.1)$$

donde $\Psi(x, y, t)$ es la función de onda del electrón, σ_i son las matrices de Pauli¹, c es la velocidad de la luz en el vacío, \mathbf{p} es el operador de momento, m es la masa del electrón en reposo y \hbar es la

¹Las matrices de Pauli son matrices complejas que surgieron en el desarrollo de Wolfgang Pauli para explicar el espín del electrón sin efectos relativistas. Estas están definidas por:

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

constante de Planck reducida. La ecuación 2.1 permite explicar el comportamiento de un electrón con spín- $\frac{1}{2}$ en movimiento relativista.

Debido a las contribuciones de las matrices de 2×2 de Pauli, la función de onda $\Psi(x, y, t)$ puede ser considerada como una función de onda de dos componentes (espinores), o como un vector columna: $\Psi(x, y, t) = \begin{pmatrix} \Phi_A(x, y, t) \\ \Phi_B(x, y, t) \end{pmatrix}$. Considerando que podemos separar la dependencia temporal de la forma: $\Phi_{A,B}(x, y, t) = e^{-iEt/\hbar} \phi_{A,B}(x, y)$, donde la energía E es relativista $|E| \rightarrow \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2}$, entonces podemos representar la ecuación (2.1) en forma matricial:

$$\begin{pmatrix} -(E - mc^2) & c(\mathbf{p}_x - i\mathbf{p}_y) \\ c(\mathbf{p}_x + i\mathbf{p}_y) & -(E + mc^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_A(x, y) \\ \phi_B(x, y) \end{pmatrix} = 0. \quad (2.2)$$

Las soluciones de la ecuación (2.2) nos da un conjunto de soluciones desacopladas (ψ^1, ψ^2) para $E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} > 0$;

$$\psi^1(x, y) = N_- e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{c(k_x - ik_y)}{E - mc^2} \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

y para $E = -\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} < 0$;

$$\psi^2(x, y) = N_+ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{c(ik_y - k_x)}{mc^2 + E} \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

donde $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ es el momento de las partículas en las direcciones correspondientes, N_{\pm} es una constante de normalización dada por $N_{\pm} = \frac{(E \pm mc^2)}{\sqrt{|p|^2c^2 + (E \pm mc^2)^2}}$.

Nótese que para el caso de una partícula sin masa $m = 0$, la ecuación de Dirac se reescribe como

$$\begin{pmatrix} -E & c(\mathbf{p}_x - i\mathbf{p}_y) \\ c(\mathbf{p}_x + i\mathbf{p}_y) & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_A(x, y) \\ \phi_B(x, y) \end{pmatrix} = 0. \quad (2.5)$$

en donde las soluciones (2.3) y (2.4) se pueden reescribir como:

$$\psi^1(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad \psi^2(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

en donde $\phi = \arctan(k_y/k_x)$.

2.2. Grafeno

El grafeno es una monocapa de átomos de carbono dispuestos en una superficie uniforme, ligeramente ondulada, con una estructura semejante a la de un panal de abejas por su configuración atómica hexagonal. Esta estructura cristalina bidimensional (2D) contiene dos átomos por celda unidad (red bipartita). La relación de dispersión de los portadores de carga, en el espectro de bajas energías cerca de los puntos de carga neutra (Figura 2.1A), se comporta como la relación de dispersión "quasi-relativista". La estructura de bandas (Figura 2.1B) es una herramienta muy útil para la relación de dispersión energética de los electrones a temperatura cero. En este se puede observar que cerca de los puntos de simetría K ambas bandas se intersectan siguiendo una dispersión lineal.

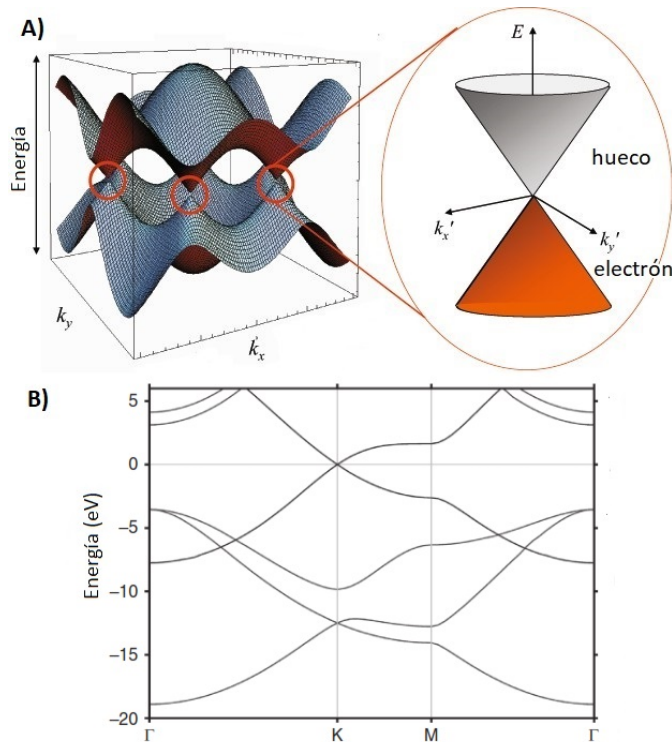


FIGURA 2.1: A) Estructura de banda energética del grafeno. La relación de dispersión lineal cerca de las partes centrales de las bandas son resaltadas (Duplantier et al., 2017). B) Estructura de bandas del grafeno (Katsnelson, 2007).

Estos puntos característicos de intersección forman una estructura tipo cono que es la que brinda al grafeno de propiedades electrónicas únicas. Considerando dos orbitales atómicos en cada

sitio de las dos subredes (A y B) cerca de los puntos de máxima simetría en la primera zona de Brillouin $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{K}$, el Hamiltoniano de Enlace Fuerte (*Tight-Binding*) puede expresarse como:

$$\hat{H}_{\mathbf{K}} = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q} = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

donde $\boldsymbol{\sigma}$ son las matrices de Pauli (σ_x, σ_y), $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{K}$ son los momentos relativos definidos por:

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} q_x \\ q_y \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

y

$$v_F = \frac{3|t|a}{2\hbar} \approx c/300, \quad (2.9)$$

es la velocidad de Fermi en los puntos canónicos o puntos de Fermi, en donde $a \approx 1,2\text{\AA}$ es la distancia entre los vecinos más cercanos y t es el parámetro de salto (Novoselov et al., 2005). Los eigenvalores de (2.7), i.e. la relación de dispersión energética, son funciones de la magnitud \mathbf{q} con dependencia lineal: $E = \hbar v_F |\mathbf{q}|$, con respecto a los puntos \mathbf{K} . Además, podemos observar que estos eigenvalores corresponden a la ecuación de Dirac sin masa (2.6). Debido a que hay 2 átomos por celda unidad, cada uno dona un electrón a la banda de valencia, por lo que la primera zona de Brillouin está completamente llena (a primeras aproximaciones), de tal forma que la energía de Fermi es zero en estos puntos.

La ecuación (2.7) es un análogo a la ecuación de Dirac sin masa, en donde la velocidad de la luz c es reemplazada por la velocidad de Fermi $v_F \approx 10^6 \text{ms}^{-1}$. El grado de libertad interno, que es el espín en la ecuación de Dirac, son los índices (A, B) de las subredes del grafeno. Estos “espinores de Dirac” consisten en dos componentes que describen la distribución electrónica en las subredes A y B . Estos números cuánticos son mejor conocidos como *pseudoespín*, donde el pseudoespín “up” corresponde a la subred A y el pseudoespín “down” a la subred B .

Si incorporamos componentes diagonales $\Delta\epsilon$ al Hamiltoniano (2.7) de tal forma que este quede expresado como:

$$\hat{H}_{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} \Delta\epsilon & \hbar v_F (q_x - iq_y) \\ \hbar v_F (q_x + iq_y) & \Delta\epsilon \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

se observa que la relación de dispersión energética es

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) = \Delta\epsilon \pm \sqrt{\hbar^2 v_F^2 |\mathbf{q}|^2}. \quad (2.11)$$

A partir de la expresión matricial del Hamiltoniano (2.10) podemos interpretar que este término adicional $\Delta\epsilon$ eleva el nivel de Fermi. Esto puede ser causado cuando se modifican la concentración de portadores de carga en el material.

Debido a la presencia de estos conos de Dirac, el grafeno presenta propiedades únicas de efectos Hall cuánticos fraccionarios (Bolotin et al., 2009), fractales (Ponomarenko et al., 2013) y semienteros (Zhang et al., 2005); alta movilidad de portadores de carga (Bolotin et al., 2008), así como otras propiedades ópticas (Nair et al., 2008) y fenómenos novedosos (Castro Neto et al., 2009).

2.3. Materiales tipo Dirac

Los materiales tipo Dirac son materiales que presentan conos de Dirac de baja energía en su estructura de bandas dentro de la primera zona de Brillouin. Los electrones normales, que se pueden encontrar en los metales, obedecen a la ecuación de Schrödinger, mientras que las energías de los electrones tipo Dirac son lineales con el momento y obedecen a la ecuación de Dirac. Sin embargo, a diferencia de otras partículas sin masa, como los neutrinos, los electrones tipo Dirac tienen carga. Como resultado, los electrones de los materiales de Dirac se comportan como partículas sin masa cargadas que pueden ser fácilmente influenciadas por un campo electromagnético externo. Para estructuras 2D, el Hamiltoniano de Dirac tiene la forma de:

$$H_D = (v_x q_x \sigma_x + v_y q_y \sigma_y) + \Delta\epsilon \sigma_0, \quad (2.12)$$

donde $\sigma_{x,y}$ son las matrices de Pauli, σ_0 es la matriz identidad de 2×2 , v_F es la velocidad de Fermi, $v_{x,y}$ son las velocidades relativas de los portadores de carga en cada una de las direcciones y $q_{x,y}$ son los operadores de momento. Nótese que el último término del lado derecho de la ecuación (2.12) incrementa el nivel de Fermi $\Delta\epsilon$, por lo que este término produce una brecha entre la banda de conducción y de valencia. Existen materiales altamente anisotrópicos en donde las velocidades en cada una de las direcciones son distintas, $v_x \neq v_y$, en donde la relación de dispersión energética de

los materiales 2D tipo Dirac está dado por

$$E_{\pm}(q_x, q_y) = \Delta\epsilon \pm \sqrt{v_x^2 q_x^2 + v_y^2 q_y^2}. \quad (2.13)$$

Hasta ahora, se han encontrado cientos de materiales 2D, incluyendo compuestos de los grupos IV-VI, sistemas binarios de elementos del grupo III-V, metales calcogenuros, óxidos complejos, entre otros. Entre la gran variedad de los materiales 2D, solamente el grafeno, siliceno (Feng et al., 2016), germaneno (Dávila and Le Lay, 2016), fosforeno (Liu et al., 2014), algunos grafinos (alótropos $sp - sp^2$ del carbón) (Huang et al., 2013) y borofeno (Lopez-Bezanilla and Littlewood, 2016) exhiben teóricamente los conos de Dirac. Además, solamente se han demostrado experimentalmente los conos de Dirac en el grafeno (Pletikosić et al., 2009).

Dentro de esta gamma de materiales 2D pertenecientes a los elementos de los grupos IV-VI, los dicalcogenuros de metales de transición (DCMT) (e.g., MoS_2 , MoSe , WS_2 y WSe_2) son de grande importancia. Estos tienen propiedades novedosas, como el acoplamiento de espín-valle interacción fuerte de muchos cuerpos y transición de banda prohibida indirecta a directa en el límite de la monocapa. Además, sus absorciones ópticas están dentro del visible. Por otra parte, Cahangirov et al. (2009), a través de cálculos de primeros principios, predijeron la estabilidad en forma de panal de abejas del Silicio (Siliceno) y el Germanio (Germaneno), ambos pertenecientes del grupo IVA. Estos son semimetales con conos de Dirac con velocidad de Fermi $\approx 10^6 m/s$, parecidas a las del grafeno. Sus longitudes de enlace, ligeramente mayores que las del grafeno, debilitan las interacciones $\pi - \pi$ y causan un acoplamiento distinto de σ y enlaces π para formar estructuras pandeadas. Estas estructuras pandeadas afectan de gran manera las propiedades electrónicas de los materiales 2D más allá del las propiedades del grafeno.

Recientemente, los materiales 2D con anisotropía intrínseca de banda en el plano han atraído una atención significativa. Las propiedades de transporte anisotrópico de los materiales 2D con baja simetría son típicamente el resultado de la diferente estructura de bandas de energía a lo largo de las diferentes direcciones en el plano de la red cristalina de capas, lo que lleva a una masa efectiva del portador drásticamente diferente a lo largo de las diferentes direcciones del cristal (Zhao et al., 2020). Por lo tanto, el estudio de las propiedades magnéticas y de transporte de los materiales 2D anisotrópicos pueden ofrecer la vía para investigar nuevos fenómenos físicos, como la localización

débil anisotrópica, la superconducción anisotrópica y la resistencia magnética no lineal anisotrópica, que proporcionan una comprensión más completa de sus propiedades físicas y de sus posibles aplicaciones (Barraza-Lopez et al., 2020).

En la búsqueda de estos nuevos materiales anisotrópicos 2D, varios estudios computacionales han predicho una larga gamma de estructuras de borofeno (estructuras cristalinas 2D de Boro) con distintas configuraciones y propiedades (Wu et al., 2012). El polimorfismo del borofeno con un cono Dirac inclinado y anisotrópico (llamado borofeno 8-*Pmmn*) fue predicho por Zhou et al. (2014) y ha sido confirmado experimentalmente por Mannix et al. (2015) así como sus estructuras hidrogenadas (Borofanos) (Li et al., 2021). Posteriormente se predijo la existencia de plasmones anisotrópicos (Sadhukhan and Agarwal, 2017). Se han estudiado las propiedades electrónicas del borofeno 8-*Pmmn* utilizando cálculos de primeros principios y se han mostrado los conos de Dirac que surgen de los orbitales de una de las dos subredes no equivalentes (Lopez-Bezanilla and Littlewood, 2016). Posteriormente se propuso un Hamiltoniano efectivo de baja energía en el límite del continuo (Zabolotskiy and Lozovik, 2016).

Modos Electromagneticos en materiales 2D

Los plasmón polaritones de superficie (SPPs, por sus siglas en inglés) son excitaciones electromagnéticas que se propagan en la interfaz entre un dieléctrico y un conductor, evanescentemente confinadas en la dirección perpendicular. Estas ondas electromagnéticas de superficie surgen a través del acoplamiento entre los campos electromagnéticos y las oscilaciones del plasma de electrones del conductor (Maier, 2007). Partiendo de la ecuación de onda, en la primera sección del presente capítulo se desarrolla la relación de dispersión de los SPPs para un material bidimensional inmerso en dos dieléctricos homogéneos. En la siguiente sección se estudiarán las propiedades del modelo de gas de electrones libres en dos dimensiones. Posteriormente se explicarán las propiedades de los plasmones isotrópicos, elípticos e hiperbólicos en estructuras 2D.

3.1. Relación de dispersión plasmónica en materiales 2D

Consideramos un material 2D dentro de una interface que separa a dos medios dieléctricos homogéneos con constantes dieléctricas ϵ_1, ϵ_2 y permeabilidades μ_1, μ_2 . El esquema de la estructura propuesta se muestra en la Figura 3.1. Así pues, tomamos como punto de partida las ecuaciones de Maxwell macroscópicas en los dos medios que rodean al material 2D:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (3.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (3.1b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (3.1c)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_{ext} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (3.1d)$$

donde \mathbf{D} es el vector de desplazamiento, \mathbf{E} es el campo eléctrico, \mathbf{H} el campo magnético, \mathbf{B} la densidad de flujo magnético con densidades de carga externa y densidad de corriente ρ y \mathbf{J}_{ext} , respectivamente.

Si limitamos nuestro estudio al caso lineal, isotrópico y no magnético, entonces encontramos las relaciones constitutivas:

$$\begin{aligned}\mathbf{D} &= \epsilon_0 \epsilon \mathbf{E}, \\ \mathbf{B} &= \mu_0 \mu \mathbf{H},\end{aligned}\tag{3.2}$$

donde ϵ es la constante dieléctrica o permitividad relativa y μ es la permeabilidad magnética relativa. En casos en donde los medios son lineales e isotrópicos con respuesta instantánea a los cambios del campo eléctrico, la permitividad relativa es un escalar: $\epsilon(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') \rightarrow \epsilon$. Los medios anisotrópicos pueden ser considerados a través de la forma tensorial de ϵ y μ . Conociendo estas relaciones, podemos combinar las ecuaciones de Faraday (3.1c) y Ampere (3.1d) de las ecuaciones de Maxwell para obtener:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \mu \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t},\tag{3.3}$$

y posteriormente llegar a la ecuación de onda¹:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{\epsilon \mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0,\tag{3.4}$$

donde $c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}}$ es la velocidad de la luz. Esta ecuación diferencial parcial de segundo orden permite soluciones armónicas en la dependencia temporal del tipo: $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$, donde ω es la frecuencia angular. Introduciendo esto en la ecuación de onda (3.4) obtenemos:

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k_0^2 \epsilon \mu \mathbf{E} = 0,\tag{3.5}$$

¹Utilizando la identidad

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E},$$

en donde hay ausencia de fuentes ($\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$), entonces podemos escribir el lado izquierdo de la ecuación (3.3) se puede escribir como

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = -\nabla^2 \mathbf{E}.$$

donde $k_0 = \frac{\omega}{c}$ es la amplitud del vector onda en el vacío. La ecuación (3.5) es conocida como la ecuación de Helmholtz y el mismo procedimiento se puede aplicar al campo magnético \mathbf{H} . Al conjunto de soluciones que satisfacen (3.4) se les llaman ondas planas.

Consideremos una onda plana que incide sobre un material bidimensional en una interface separado por dos medios, como se muestra en la Figura 3.1. El campo eléctrico \mathbf{E} y el campo magnético \mathbf{H} están dados por las expresiones

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{H}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}\end{aligned}\quad (3.6)$$

donde los vectores \mathbf{E}_0 y \mathbf{H}_0 representan la amplitud de los campos eléctricos y magnéticos, respectivamente. Además, por la teoría de electromagnetismo sabemos que estos campos son ortogonales.

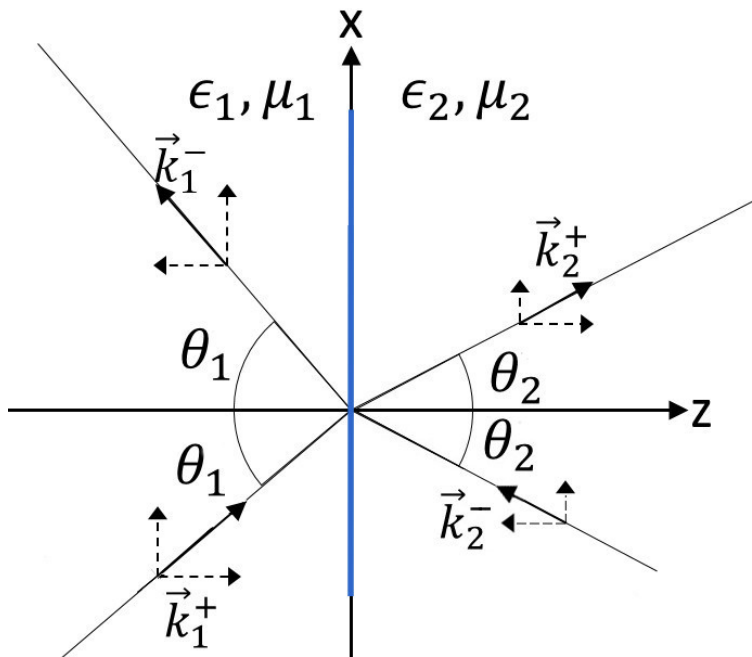


FIGURA 3.1: Vectores de Onda de una onda electromagnética incidente sobre un material 2D (línea azul) entre dos medio dieléctricos.

Se elige un sistema coordinado en donde el plano de la interfase es paralelo al plano $x - y$ como se muestra en la Figura 3.1 y de tal forma que el vector de onda solo tenga dos componentes:

$$\mathbf{k} = (k_x, 0, k_z). \quad (3.7)$$

Los dos medios con permitividades ϵ_1, ϵ_2 y permeabilidades μ_1, μ_2 definen las propiedades de las ondas electromagnéticas que pueden ser expresadas como una superposición de ondas TE (Transversal Eléctrico) y TM (Transversal Magnético). Para la polarización tipo TM, el campo eléctrico y magnético se expresan como:

$$\mathbf{E} = (E_x, 0, E_z), \quad \mathbf{H} = (0, H_y, 0), \quad (3.8)$$

mientras que la polarización tipo TE se expresa como:

$$\mathbf{E} = (0, E_x, 0) \quad \mathbf{H} = (H_x, 0, H_z), \quad (3.9)$$

para una configuración como se muestra en la Figura 3.1. De esta forma, se pueden expresar los campos eléctricos en cada una de las regiones como:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_1^+(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}_1^-(\mathbf{r}, t) & z \leq 0, \\ &= \begin{pmatrix} E_{x1}^+ \\ E_{y1}^+ \\ E_{z1}^+ \end{pmatrix} e^{i(k_{x1}^+ x + k_{z1}^+ z - \omega_1^+ t)} + \begin{pmatrix} E_{x1}^- \\ E_{y1}^- \\ E_{z1}^- \end{pmatrix} e^{i(k_{x1}^- x + k_{z1}^- z - \omega_1^- t)}, \\ \mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_2^+(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}_2^-(\mathbf{r}, t) & z \geq 0, \\ &= \begin{pmatrix} E_{x2}^+ \\ E_{y2}^+ \\ E_{z2}^+ \end{pmatrix} e^{i(k_{x2}^+ x + k_{z2}^+ z - \omega_2^+ t)} + \begin{pmatrix} E_{x2}^- \\ E_{y2}^- \\ E_{z2}^- \end{pmatrix} e^{i(k_{x2}^- x + k_{z2}^- z - \omega_2^- t)}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

donde los subíndices representan el medio en donde las ondas electromagnéticas viajan. Similarmente, los campos magnéticos se pueden expresar como las ecuaciones (3.10). Estos campos electromagnéticos deben satisfacer las condiciones a la frontera en la interface ($z = 0$):

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) \Big|_{z=0} = \rho_s, \quad (3.11a)$$

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) \Big|_{z=0} = 0, \quad (3.11b)$$

$$\hat{\mathbf{n}} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) \Big|_{z=0} = 0, \quad (3.11c)$$

$$\hat{\mathbf{n}} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) \Big|_{z=0} = \mathbf{J}_s, \quad (3.11d)$$

donde $\hat{\mathbf{n}}$ es el vector normal a la superficie de la interfase (en dirección de $+z$), ρ_s es la densidad de carga superficial de la interface y \mathbf{J}_s es la densidad de corriente que puede ser expresada como

$$\mathbf{J}_s = \bar{\bar{\sigma}} \mathbf{E} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

A partir de la segunda condición a la frontera (3.11a) sabemos que el componente paralelo a la interface de \mathbf{B} (\mathbf{H}) es continuo en la interface, mientras que la tercera condición (3.11b) nos dicen que el componente tangencial de \mathbf{E} (\mathbf{D}) es continuo en la interface. Al aplicar la ley de Faraday y Ampere, a las ecuaciones de ondas planas obtenemos

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E} = \mu_0 \mu \omega \mathbf{H}, \quad \mathbf{k} \times \mathbf{H} = -\epsilon_0 \epsilon \omega \mathbf{E}, \quad (3.13)$$

suponiendo la ausencia de densidades de corriente \mathbf{J}_{ext} en cada medio y recordando que \mathbf{k} es el vector de onda definido en (3.7). Nótese que la ecuación (3.13) nos ayuda a relacionar los campos eléctricos y magnéticos en cada uno de los medios.

Si aplicamos la ecuación (3.11c) al campo eléctrico en $z = 0$, entonces obtenemos

$$\begin{aligned} E_{x1}^+ e^{i(k_{x1}^+ x - \omega_1^+ t)} + E_{x1}^- e^{i(k_{x1}^- x - \omega_1^- t)} &= E_{x2}^+ e^{i(k_{x2}^+ x - \omega_2^+ t)} + E_{x2}^- e^{i(k_{x2}^- x - \omega_2^- t)}, \\ E_{y1}^+ e^{i(k_{x1}^+ x - \omega_1^+ t)} + E_{y1}^- e^{i(k_{x1}^- x - \omega_1^- t)} &= E_{y2}^+ e^{i(k_{x2}^+ x - \omega_2^+ t)} + E_{y2}^- e^{i(k_{x2}^- x - \omega_2^- t)}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Para que esto se cumpla en cualquier tiempo t y para todos los puntos $(x, 0)$ en la interface, entonces

$$\omega_1^+ = \omega_1^- = \omega_2^+ = \omega_2^- = \omega, \quad (3.15)$$

de tal forma que no hay cambio en la frecuencia en la interface. Además, debido a las ecuaciones (3.14) encontramos

$$k_{x1}^+ = k_{x1}^- = k_{x2}^+ = k_{x2}^- = q. \quad (3.16)$$

Así mismo, recordando la relación de dispersión de la ecuación de Helmholtz (3.5) y debido a (3.16), entonces encontramos que

$$\begin{aligned} k_{x1} &= k_{x2}, \\ k_1 \sin \theta_1 &= k_2 \sin \theta_2, \\ n_1 \sin \theta_1 &= n_2 \sin \theta_2, \end{aligned} \quad (3.17)$$

en donde $n_i = \sqrt{\epsilon_i \mu_i}$. La ecuación (3.17) es mejor conocida como la ley refracción descubierta experimentalmente por Snell en 1621. Para que se satisfaga la ecuación de Helmholtz (3.5) y la condición (3.16), entonces el componente normal del vector de onda a la interface cumple con $k_{z1}^+ = -k_{z1}^-$ para el medio 1 y $k_{z2}^+ = -k_{z2}^-$ para el medio 2. A partir de esto reescribimos las ecuaciones (3.10) como

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_1^+(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}_1^-(\mathbf{r}, t) & z \leq 0, \\ &= \begin{pmatrix} E_{x1}^+ \\ E_{y1}^+ \\ E_{z1}^+ \end{pmatrix} e^{i(qx+k_{z1}z-\omega t)} + \begin{pmatrix} E_{x1}^- \\ E_{y1}^- \\ E_{z1}^- \end{pmatrix} e^{i(qx-k_{z1}z-\omega t)}, \\ \mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_2^+(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}_2^-(\mathbf{r}, t) & z \geq 0, \\ &= \begin{pmatrix} E_{x2}^+ \\ E_{y2}^+ \\ E_{z2}^+ \end{pmatrix} e^{i(qx+k_{z2}z-\omega t)} + \begin{pmatrix} E_{x2}^- \\ E_{y2}^- \\ E_{z2}^- \end{pmatrix} e^{i(qx-k_{z2}z-\omega t)}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

El desarrollo de las ecuaciones (3.18) con las condiciones a la frontera (3.11) y las relaciones de (3.13) se pueden encontrar en el Apéndice A para llegar a las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned}
E_{y2}^+ + E_{y2}^- &= E_{y1}^+ + E_{y1}^-, \\
E_{y2}^+ - E_{y2}^- &= \frac{\mu_2}{k_{z2}} \left(\frac{k_{z1}}{\mu_1} - \omega\mu_0\sigma_{yy} \right) E_{y1}^+ - \frac{\mu_2}{k_{z2}} \left(\frac{k_{z1}}{\mu_1} + \omega\mu_0\sigma_{yy} \right) E_{y1}^- - \frac{\mu_0\mu_2}{\epsilon_0\epsilon_1} \frac{k_{z1}}{k_{z2}} \sigma_{yx} (H_{y1}^+ - H_{y1}^-), \\
H_{y2}^+ - H_{y2}^- &= \frac{\epsilon_2 k_{z1}}{\epsilon_1 k_{z2}} (H_{y1}^+ - H_{y1}^-), \\
H_{y2}^+ + H_{y2}^- &= \left(1 - \frac{k_{z1}\sigma_{xx}}{\omega\epsilon_0\epsilon_1} \right) H_{y1}^+ + \left(1 + \frac{k_{z1}\sigma_{xx}}{\omega\epsilon_0\epsilon_1} \right) H_{y1}^- - \sigma_{xy} (E_{y1}^+ + E_{y1}^-).
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Podemos representar el cambio en las ondas electromagnéticas en un sistema no homogéneo a través de la matriz de transferencia. La matriz de transferencia es una herramienta muy poderosa para analizar la luz a través de la propagación en un medio no homogéneo (Born et al., 1999). La idea central de esta es poder conectar los campos eléctricos y magnéticos entre ambos medios a través de la matriz de transferencia ²:

$$\begin{pmatrix} E_{y2}^+ \\ E_{y2}^- \\ H_{y2}^+ \\ H_{y2}^- \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} E_{y1}^+ \\ E_{y1}^- \\ H_{y1}^+ \\ H_{y1}^- \end{pmatrix}. \tag{3.20}$$

Si acomodamos el sistema de ecuaciones lineales (3.19) de modo que puedan ser expresadas en la forma matricial (3.20) entonces obtenemos

$$A \begin{pmatrix} E_{y2}^+ \\ E_{y2}^- \\ H_{y2}^+ \\ H_{y2}^- \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} E_{y1}^+ \\ E_{y1}^- \\ H_{y1}^+ \\ H_{y1}^- \end{pmatrix}, \tag{3.21}$$

²La matriz de transferencia (3.20) incluye una onda incidente de la interfase 1|2 proveniente del medio 2. Esta se entiende como un caso más general en donde el espacio no homogéneo pueda incluir más de una interface. Sin embargo, para el presente trabajo, las amplitudes E_{y2}^- y H_{y2}^- son cero.

en donde

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.22)$$

y

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{\mu_2}{k_{z2}} \left(\frac{k_{z1}}{\mu_1} - \omega \mu_0 \sigma_{yy} \right) & -\frac{\mu_2}{k_{z2}} \left(\frac{k_{z1}}{\mu_1} + \omega \mu_0 \sigma_{yy} \right) & -\frac{\mu_0 \mu_2}{\epsilon_0 \epsilon_1} \frac{k_{z1}}{k_{z2}} \sigma_{yx} & \frac{\mu_0 \mu_2}{\epsilon_0 \epsilon_1} \frac{k_{z1}}{k_{z2}} \sigma_{yx} \\ 0 & 0 & \frac{\epsilon_2 k_{z1}}{\epsilon_1 k_{z2}} & -\frac{\epsilon_2 k_{z1}}{\epsilon_1 k_{z2}} \\ -\sigma_{xy} & -\sigma_{xy} & \left(1 - \frac{k_{z1}}{\omega \epsilon_0 \epsilon_1} \sigma_{xx} \right) & \left(1 + \frac{k_{z1}}{\omega \epsilon_0 \epsilon_1} \sigma_{xx} \right) \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Finalmente, la matriz de transferencia queda expresada como el producto matricial $M = A^{-1}B$:

$M =$

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\mu_2}{k_{z2}} \left(\frac{k_{z1}}{\mu_1} - \omega \mu_0 \sigma_{yy} \right) & 1 - \frac{\mu_2}{k_{z2}} \left(\frac{k_{z1}}{\mu_1} + \omega \mu_0 \sigma_{yy} \right) & -\frac{\mu_0 \mu_1 k_{z1}}{\epsilon_0 \epsilon_1 k_{z2}} \sigma_{yx} & \frac{\mu_0 \mu_2 k_{z1}}{\epsilon_0 \epsilon_1 k_{z2}} \sigma_{yx} \\ 1 - \frac{\mu_2}{k_{z2}} \left(\frac{k_{z1}}{\mu_1} - \omega \mu_0 \sigma_{yy} \right) & 1 + \frac{\mu_2}{k_{z2}} \left(\frac{k_{z1}}{\mu_1} + \omega \mu_0 \sigma_{yy} \right) & \frac{\mu_0 \mu_1 k_{z1}}{\epsilon_0 \epsilon_1 k_{z2}} \sigma_{yx} & -\frac{\mu_0 \mu_2 k_{z1}}{\epsilon_0 \epsilon_1 k_{z2}} \sigma_{yx} \\ -\sigma_{xy} & -\sigma_{xy} & 1 + \frac{k_{z1}}{\epsilon_1} \left(\frac{\epsilon_2}{k_{z2}} - \frac{\sigma_{xx}}{\omega \epsilon_0} \right) & 1 - \frac{k_{z1}}{\epsilon_1} \left(\frac{\epsilon_2}{k_{z2}} - \frac{\sigma_{xx}}{\omega \epsilon_0} \right) \\ -\sigma_{xy} & -\sigma_{xy} & 1 - \frac{k_{z1}}{\epsilon_1} \left(\frac{\epsilon_2}{k_{z2}} + \frac{\sigma_{xx}}{\omega \epsilon_0} \right) & 1 + \frac{k_{z1}}{\epsilon_1} \left(\frac{\epsilon_2}{k_{z2}} + \frac{\sigma_{xx}}{\omega \epsilon_0} \right) \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Los plasmones pueden ser vistos como un efecto de resonancia en donde se observa un incremento de la amplitud-respuesta debido a una frecuencia incidente específica. Si hacemos incidir campos electromagnéticos infinitesimalmente pequeños a nuestro material 2D, de tal forma que la respuesta del material es distinta a cero, entonces encontramos las frecuencias de resonancia de los portadores de carga en la interfase. Si consideramos solamente ondas que viajen de la interfase hacia los medios, de modo que las ondas incidentes sean cero (Zhan et al., 2013), entonces la ecuación (3.20) se puede reescribir como:

$$\begin{pmatrix} E_{y2}^+ \\ 0 \\ H_{y2}^+ \\ 0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 0 \\ E_{y1}^- \\ 0 \\ H_{y1}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} & m_{14} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} & m_{34} \\ m_{41} & m_{42} & m_{43} & m_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ E_{y1}^- \\ 0 \\ H_{y1}^- \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

A partir del sistema de ecuaciones (3.25) encontramos las dos siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} m_{22}E_{y1}^- + m_{24}H_{y1}^- &= 0, \\ m_{42}E_{y1}^- + m_{44}H_{y1}^- &= 0. \end{aligned} \quad (3.26)$$

que sostienen las condiciones de resonancia del sistema. Por tales motivos, las soluciones no triviales del sistema de ecuaciones (3.26) definen la relación de dispersión de los plasmones polaritones de superficie:

$$m_{22}m_{44} - m_{24}m_{42} = 0, \quad (3.27)$$

que corresponden a los elementos de la matriz (3.24):

$$\left[\frac{k_{z2}}{\mu_2} + \frac{k_{z1}}{\mu_1} + Z_0 k_0 \sigma_{yy} \right] \left[\epsilon_1 k_{z2} + \epsilon_2 k_{z1} + \frac{Z_0 k_{z1} k_{z2} \sigma_{xx}}{k_0} \right] = \sigma_{xy} \sigma_{yx} Z_0^2 k_{z2} k_{z1}, \quad (3.28)$$

donde $Z_0 = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0} \approx 377\Omega$ es la impedancia en el vacío. Nótese que si imponemos las condiciones (3.25) en las ecuaciones (3.19), entonces obtenemos

$$\left(\frac{k_{z2}}{\mu_2} + \frac{k_{z1}}{\mu_1} + Z_0 k_0 \sigma_{yy} \right) E_{y1}^- = \frac{k_{z1} \mu_0 \sigma_{yx}}{\omega \epsilon_0 \epsilon_1} H_{y1}^-, \quad (3.29a)$$

$$\left(\epsilon_1 k_{z2} + \epsilon_2 k_{z1} + \frac{k_{z1} k_{z2} \sigma_{xx}}{\omega \epsilon_0 \epsilon_1} \right) H_{y1}^- = \epsilon_1 k_{z2} \sigma_{xy} E_{y1}^-. \quad (3.29b)$$

Si se proponen soluciones evanescentes a lo largo de la dirección z en donde $\text{Re}\{q\} > \sqrt{\epsilon_i \mu_i} \frac{\omega}{c}$ para tener ondas localizadas en nuestro material 2D, de tal forma que $k_{z1} = i\kappa_1$, $k_{z2} = i\kappa_2$,

$$\kappa_1 = \sqrt{q^2 - \epsilon_1 \mu_1 k_0^2}, \quad \kappa_2 = \sqrt{q^2 - \epsilon_2 \mu_2 k_0^2}, \quad (3.30)$$

entonces,

$$\left[\frac{\kappa_2}{\mu_2} + \frac{\kappa_1}{\mu_1} - i Z_0 k_0 \sigma_{yy} \right] \left[\epsilon_1 \kappa_2 + \epsilon_2 \kappa_1 + i \frac{Z_0 \kappa_1 \kappa_2}{k_0} \sigma_{xx} \right] = \sigma_{xy} \sigma_{yx} Z_0^2 \kappa_2 \kappa_1. \quad (3.31)$$

La relación de dispersión (3.31) para plasmones de superficie en materiales 2D se puede encontrar en la literatura (Melo, 2015; Nakayama, 1974).

Es importante aclarar que la relación de dispersión (3.31) se refiera a la propagación en x exclusivamente. De tal manera, si queremos hacer una rotación sobre el eje z del tensor de conductividad de tal forma que el plano de incidencia de la luz corresponda a una dirección de

propagación arbitraria en un ángulo φ , como se muestra en la Figura 3.2, entonces el tensor de conductividad σ_{ij} está dado por:

$$\sigma'_{ij} = R_{ji}\sigma_{xy}R_{ij}, \quad (3.32)$$

en donde la matriz de rotación está dada por:

$$R_{ij} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} = \frac{1}{q} \begin{pmatrix} q_x & -q_y \\ q_y & q_x \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

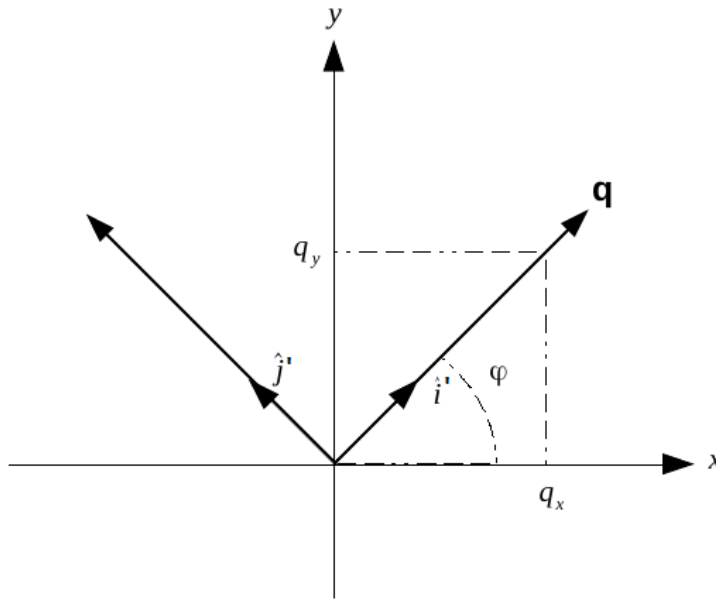


FIGURA 3.2: Sistema de coordenadas rotados para describir la propagación en una dirección arbitraria, a un ángulo φ respecto al eje x .

Si consideramos el caso en donde las permitividades de los materiales están igualados a la unidad $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$, al igual que las permeabilidades $\mu_1 = \mu_2 = 1$, entonces podemos expandir la ecuación (3.31) y reescribirla como:

$$q^2 \sigma'_{xx} - k_0^2 \text{Tr}\{\sigma'\} = i2 \frac{k_0 \kappa}{Z_0} \left[1 + \frac{Z_0^2}{4} \det\{\sigma'\} \right], \quad (3.34)$$

donde $\kappa_1 = \kappa_2 = \kappa$, $\text{Tr}\{\sigma'\} = \sigma'_{xx} + \sigma'_{yy}$ es la traza de la conductividad eléctrica y $\det\{\sigma'\} = \sigma'_{xx}\sigma'_{yy} - \sigma'_{xy}\sigma'_{yx}$ es el determinante de la conductividad eléctrica. Una de las propiedades de la traza y el determinante de una matriz es que se mantienen invariantes ante rotaciones. Por tal motivo,

solamente el primer término del lado izquierdo de la ecuación (3.34) se verá afectada:

$$\sigma'_{xx} = R_{xi}\sigma_{xi}R_{ix} = \frac{1}{q^2} [\sigma_{xx}q_x^2 + \sigma_{yy}q_y^2 + q_xq_y(\sigma_{xy} + \sigma_{yx})]. \quad (3.35)$$

Finalmente, introduciendo el término (3.35) en la ecuación (3.34) obtenemos la relación de dispersión plasmónica:

$$q_xq_y(\sigma_{xy} + \sigma_{yx}) + (q_x^2 - k_0^2)\sigma_{xx} + (q_y^2 - k_0^2)\sigma_{yy} = i2\frac{k_0\kappa}{Z_0} \left[1 + \frac{Z_0^2}{4}(\sigma_{xx}\sigma_{yy} - \sigma_{xy}\sigma_{yx}) \right]. \quad (3.36)$$

La solución de la ecuación (3.36) define la relación de dispersión plasmónica, $\omega(\mathbf{q})$, para un material 2D anisotrópico (Hanson, 2008).

3.2. Propagación de Plasmones en Materiales 2D

Las soluciones $\omega(q_x, q_y)$ de la ecuación (3.36) definidas en el espacio de los momentos determinan los contornos del plasmón de superficie. Nos interesa conocer la forma de estos contornos debido a que la velocidad de grupo $\mathbf{v}_g = \nabla_{\mathbf{q}}\omega(\mathbf{q})$ es la que define la dirección de propagación de la energía de los plasmones (Kong, 1986). El análisis computacional de la velocidad de grupo requiere la forma explícita de $\omega(\mathbf{q})$ la cual es complicada de obtener. En lugar de esto, se utilizan los contornos en el espacio de los momentos: $\omega(q_x, q_y) = \text{const}$. Entonces, la velocidad de grupo y la dirección del flujo de energía son ortogonales a estos contornos.

Si consideramos el caso más sencillo para un metal 2D tipo Drude, es decir, un gas de electrones bidimensional o 2DEG (por sus siglas en inglés), en donde las bandas son parabólicas y solo se dan las transiciones intrabanda (en el límite de longitud de onda larga $\mathbf{q} \rightarrow 0$), entonces el tensor de conductividad es escrito como

$$\sigma_{ij} = i\sigma''(\omega) = \frac{e^2N_s}{m^*\omega}, \quad (3.37)$$

donde e es la carga del electrón, N_s es la densidad de portadores de carga libre y m^* es la masa efectiva. Entonces, la ecuación (3.31) se reduce a dos ecuaciones independientes

$$\epsilon_1\kappa_2 + \epsilon_2\kappa_1 - \frac{Z_0\kappa_1\kappa_2}{k_0}\sigma''(\omega) = 0, \quad (3.38)$$

$$\frac{\kappa_2}{\mu_2} + \frac{\kappa_1}{\mu_1} + Z_0 k_0 \sigma''(\omega) = 0. \quad (3.39)$$

Sustituyendo (3.38) en (3.29b) obtenemos $E_{y1}^- = E_{y2}^+ = 0$, lo que indica que la ecuación (3.38) corresponde a modos plasmónicos tipo TM. Similarmente, la ecuación (3.39) indica que $H_{y1}^- = H_{y2}^+ = 0$, y por lo tanto, describe a plasmones tipo TE.

Para este tipo de casos, en donde $\sigma'' > 0$, las ecuaciones (3.38) y (3.39) solamente aceptan soluciones para ondas incidentes con polarización tipo TM. De otro modo, no existen soluciones reales para las ondas incidentes con polarización tipo TE. Además, es posible modificar el rango de frecuencias de los plasmones de superficie a partir de la densidad de portadores de carga libre (N_s).

El tensor de conductividad en materiales 2D tipo Dirac es un poco más complejo, en donde se tienen que considerar las transiciones interbanda e intrabanda y los tensores de conductividad son complejas $\sigma_{ij} = \sigma'_{ij} + i\sigma''_{ij}$. A continuación se explicarán las propiedades de los plasmones en materiales 2D tipo Dirac para conductividades isotrópicos, anisotrópicos e hiperbólicos.

3.2.1. Plasmones en Grafeno

En esta subsección se describirán los modos plasmónicos del grafeno para ilustrar el comportamiento de los modos superficiales en estructuras isotrópicas bidimensionales. El tensor de conductividad del grafeno a bajas temperaturas $k_B T \ll E_F$, calculada a través de la formula de Kubo (Falkovsky and Varlamov, 2007), puede ser separada en transiciones interbanda e intrabanda

$$\sigma_g(\omega) = \sigma_g^{intra}(\omega) + \sigma_g^{inter}(\omega), \quad (3.40)$$

en donde

$$\sigma_g^{intra}(\omega) = \frac{ie^2 E_F}{\pi \hbar^2 (\omega i / \tau)}, \quad \sigma_g^{inter}(\omega) = \frac{ie^2}{4\pi \hbar} \log \left(\left| \frac{2E_F - (\omega + i/\tau)\hbar}{2E_F + (\omega + i\tau)\hbar} \right| \right), \quad (3.41)$$

donde E_F es la energía de Fermi, e es la carga del electrón, \hbar es la constante de Planck, y τ es el tiempo de relajación de los electrones. Las transiciones interbanda son el movimiento de los electrones (huecos) dentro de la banda conducción (valencia) del material, mientras que las transiciones intrabanda son el movimiento de los electrones de la banda de valencia a la banda de conducción. Nótese en la Figura 3.3 que a frecuencias $\omega_0 = 2E_F/\hbar$ se produce un escalón, la cual

corresponde a las transiciones interbanda del grafeno. Así mismo, como se puede observar en la Figura 3.3, hay un cambio de signo de $\text{Im}(\sigma)$ al variar la frecuencia. Debido a esto, la respuesta óptica del grafeno puede ser separada basado en el signo de la parte imaginaria del tensor de conductividad. A bajas frecuencias, cuando la frecuencia y los valores de dopaje son tales que $\hbar\omega < 1,667E_F$, la conductividad del grafeno es tipo Drude en donde la relación de dispersión (3.31) admite ondas superficiales con polarización TM debido a que $\text{Im} \sigma_g > 0$. Por otro lado, para frecuencias cercanas a la región de transición espectral $1,667E_F < \hbar\omega < 2E_F$ (Li et al., 2017), las transiciones interbanda dominan sobre las intrabanda, permitiendo que la conductividad $\text{Im} \sigma_g$ del grafeno cambie de signo positivo (metálico a bajas frecuencias) a signo negativo (dieléctrico a altas frecuencias). A estas frecuencias, los materiales 2D tipo Dirac permiten plasmones con polarización tipo TE (Melo, 2015), siendo esta una diferencia notable al gas de electrones libres en dos dimensiones.

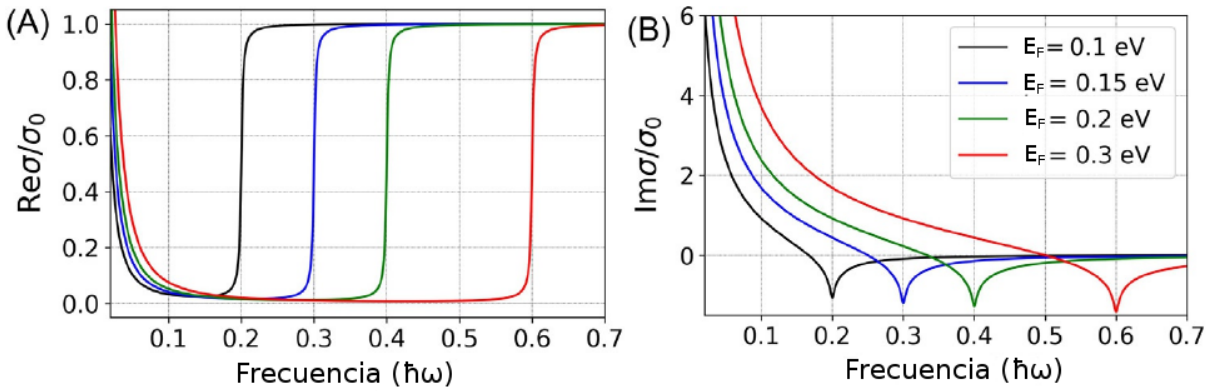


FIGURA 3.3: Parte real (A) y parte imaginaria (B) del tensor de conductividad del grafeno para varios valores del nivel de Fermi: $E_F = 0,1$ eV (línea negra), $E_F = 0,15$ eV (línea azul), $E_F = 0,2$ eV (línea verde) y $E_F = 0,3$ eV (línea roja). Los parámetros son: $\tau = 0,34$ ps, $\sigma_0 = e^2/4\hbar$ (Nemilentsau et al., 2019).

Para tomar en consideración el amortiguamiento de los plasmones de superficie (disipación de energía) es necesario tomar el tensor de conductividad complejo, de tal manera que se considere la parte Real (σ') e Imaginaria (σ'') de la conductividad del grafeno en las relaciones de dispersión plasmónica para ondas con polarización tipo TE (3.38) y tipo TM (3.39). Entonces, la pérdida o amortiguamiento de los plasmones de superficie a lo largo de la dirección de propagación se definen como el inverso de $\text{Re} q / \text{Im} q$, recordando que $q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$ es el número de onda del

plasmón que viaja por la superficie. Esta pérdida en los plasmones de superficie es dependiente de la frecuencia, y pueden ser controlados a través del potencial químico (Energía de Fermi) del grafeno. De esta manera, a medida que incrementa la parte real del tensor de conductividad, incrementa el amortiguamiento de los plasmones de superficie (Nemilentsau et al., 2019). En la Figura 3.4 se muestra la pérdida de energía de los plasmones en el Grafeno para modos TM inmerso en dos dieléctricos con permeabilidades $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$. En esta se puede observar que para frecuencias cercanas a ω_0 la energía se disipa en forma de transiciones interbanda (Boriskina et al., 2017). Por otra parte, para frecuencias debajo de $2E_F/\hbar$ la disipación de energía de los plasmones es menor, en donde los picos en la gráfica representan las frecuencias de menor disipación de energía de los plasmones de superficie.

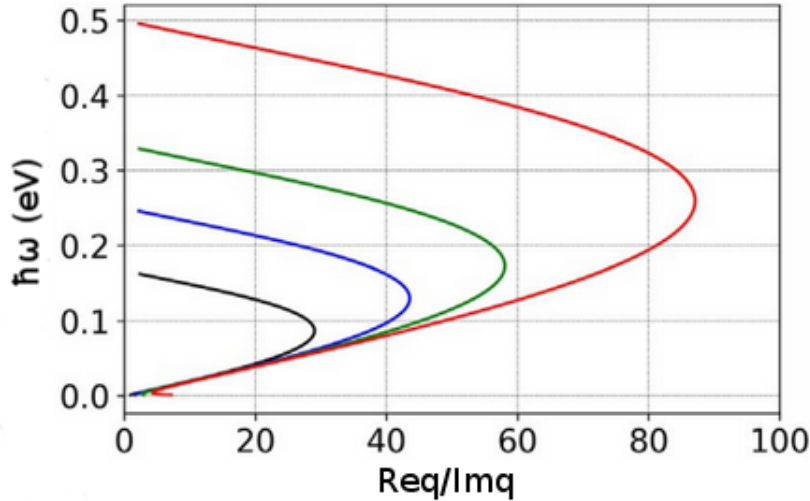


FIGURA 3.4: Pérdida de energía de los plasmones del grafeno para varios valores de nivel de Fermi $E_F = 0,1$ eV (línea negra), $E_F = 0,15$ eV (línea azul), $E_F = 0,2$ eV (línea verde) y $E_F = 0,3$ eV (línea roja) (Nemilentsau et al., 2019).

Si queremos determinar la forma de propagación de los modos plasmónicos, consideramos el caso en donde $q_x, q_y \gg k_0$, de tal forma que la ecuación (3.36) se puede expresar como:

$$q_x^2 \sigma(\omega) + q_y^2 \sigma(\omega) = 2q\omega\sigma(\omega) \left[\frac{\epsilon_0}{\sigma^2(\omega)} - \frac{\mu_0}{4} \right], \quad (3.42)$$

en donde $q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$. A pesar de que el lado derecho depende explícitamente de q , la variación de esta es menor que la del lado izquierdo, por lo que podemos aproximar que el lado derecho se mantiene constante respecto al vector de onda. Por lo tanto, la relación de dispersión plasmónica para el grafeno (3.42) describe aproximadamente la ecuación de una circunferencia. Cabe mencionar que la ecuación (3.42) es válida para materiales con conductividades isotrópicas y puramente imaginarias. Para conductividades complejas $\sigma = \sigma' + i\sigma''$, se debe en tomar en consideración el amortiguamiento de los plasmones de superficies definido por el inverso de $\text{Re } q / \text{Im } q$.

3.2.2. Plasmones Anisotrópicos

En esta subsección se describirán los modos plasmónicos superficiales para materiales anisotrópico 2D. Primeramente consideremos el caso de un material 2D en una región de frecuencias tal que el tensor de conductividad eléctrica, con razonable aproximación, toma la forma

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} i\sigma''_{xx} & 0 \\ 0 & i\sigma''_{yy} \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

A diferencia de la relación de dispersión (3.42) para materiales 2D isotrópicos, la ecuación (3.36) toma la forma

$$\left(\frac{q_x^2}{\sigma''_{xx}} + \frac{q_y^2}{\sigma''_{yy}} \right) = 2q\omega \left[\frac{\epsilon_0}{\sigma''_{xx}\sigma''_{yy}} - \frac{\mu_0}{4} \right], \quad (3.44)$$

en donde se eligió $q_x, q_y \gg k_0$ por conveniencia. Para el caso puramente anisotrópico ($\sigma''_{xx} > 0, \sigma''_{yy} > 0$), la forma que adoptan los contornos de las soluciones de la ecuación (3.44) representan una elipse, en donde su eje principal está a lo largo de la dirección con conductividad mayor. La energía del plasmón, por el contrario, se transmite preferentemente a lo largo del otro eje. Esto se debe a que la velocidad de grupo (v_g) apunta mayormente hacia el eje menor debido al alargamiento a lo largo del eje mayor. Nótese que para el caso en donde las componentes diagonales son diferentes a cero ($\sigma''_{xy}, \sigma''_{yx} \neq 0$), entonces la ecuación (3.36) describe la forma general de las secciones cónicas³. Al considerar estos componentes no diagonales en el tensor de conductividad implica curvas rotadas sobre los ejes (q_x, q_y). En la Figura 3.5 se pueden observar las gráficas de los contornos plasmónicos

³La fórmula general de las secciones cónicas en coordenadas cartesianas es

$$Ax^2 + By^2 + Cxy + Dx + Ey + F = 0,$$

en donde en nuestro caso están definidas en el espacio de los momentos.

puramente anisotrópicos. Estos fueron graficados a través de las relaciones de dispersión (3.44) y (3.36), según corresponda. Los parámetros elegidos fueron los siguientes: para el contorno rojo los valores del tensor de conductividad son $\sigma''_{xx} = 20,48\mu\text{S}$, $\sigma''_{yy} = 11,14\mu\text{S}$, $\sigma''_{xy} = 11,08\mu\text{S}$ y $\sigma''_{yx} = 65,44\mu\text{S}$. El contorno azul tiene valores $\sigma''_{xx} = 20,48\mu\text{S}$, $\sigma''_{yy} = 11,14\mu\text{S}$ y $\sigma''_{xy} = \sigma_{yx} = 0$. Por último, el contorno morado tiene valores $\sigma''_{xx} = 20,48\mu\text{S}$, $\sigma''_{yy} = 11,14\mu\text{S}$ y $\sigma''_{xy} = -\sigma''_{yx} = 11,08\mu\text{S}$. Las tres gráficas fueron calculadas con $\hbar\omega = 0,088$ eV por propósitos de ilustración.

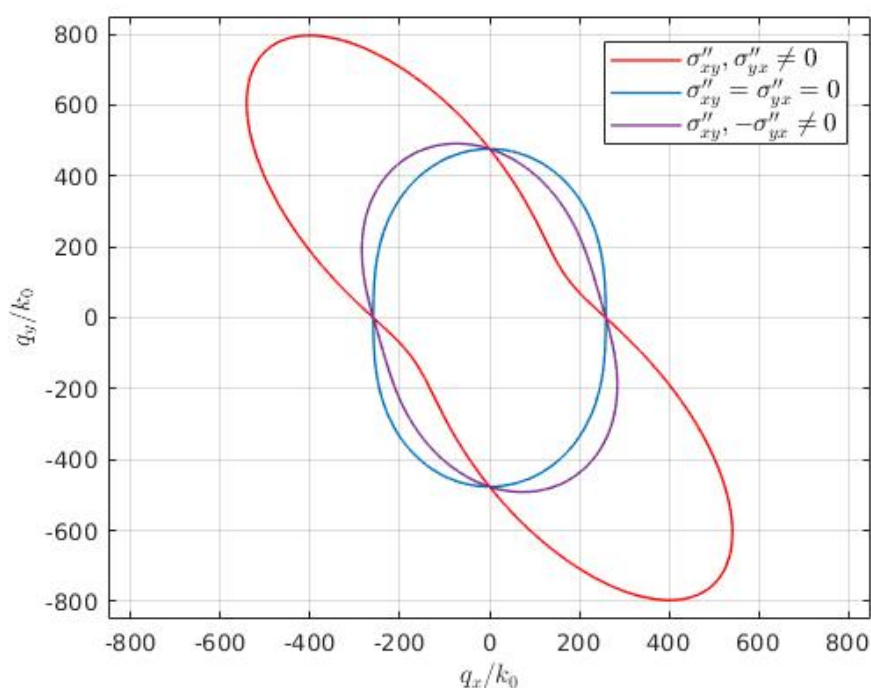


FIGURA 3.5: Contornos plasmónicos en el espacio de los momentos para valores arbitrarios de la parte imaginaria del tensor de conductividad σ''_{ij} . El contorno rojo tiene valores del tensor de conductividad: $\sigma''_{xx} = 20,48\mu\text{S}$, $\sigma''_{yy} = 11,14\mu\text{S}$, $\sigma''_{xy} = 11,08\mu\text{S}$ y $\sigma''_{yx} = 65,44\mu\text{S}$. El contorno azul con valores $\sigma''_{xx} = 20,48\mu\text{S}$, $\sigma''_{yy} = 11,14\mu\text{S}$ y $\sigma''_{xy} = \sigma_{yx} = 0$. Por último, el contorno morado con valores $\sigma''_{xx} = 20,48\mu\text{S}$, $\sigma''_{yy} = 11,14\mu\text{S}$, $\sigma''_{xy} = -\sigma''_{yx} = 11,08\mu\text{S}$. Las tres gráficas fueron calculadas con $\hbar\omega = 0,088$ eV.

Como se puede observar en la Figura 3.5, los contornos elípticos de los plasmones no cambian al agregar componentes fuera de la diagonal σ''_{xy} , σ''_{yx} . Nótese que el signo de estos componentes modifica la dirección de las curvas, mas no la "topología" de la curva cerrada, caso contrario a los

componentes principales $\sigma''_{xx}, \sigma''_{yy}$. En la siguiente subsección se explicará el caso en donde estos componentes principales difieren de signo.

3.2.3. Plasmones Hiperbólicos

Los materiales hiperbólicos 2D son una clase de materiales que se definen a partir del tensor de conductividad con la condición de que sus componentes imaginarios tienen signos contrarios ($\text{Im } \sigma_{xx} \cdot \text{Im } \sigma_{yy} < 0$). Motivados por el desarrollo de estos nuevos materiales anisotrópicos bidimensionales, Nemilentsau et al. (2016) propusieron un nuevo modelo que permite describir la respuesta de los materiales 2D altamente anisotrópicos con los modos electromagnéticos dentro del rango de las frecuencias del infrarrojo. Este se basa en las contribuciones interbanda e intrabanda de los electrones ante un campo electromagnético, como se muestra en la Figura 3.6, y e donde el tensor de conductividad puede ser escrito como:

$$\sigma_{ii}(\omega) = \sigma_{ii}^{(intra)}(\omega) + \sigma_{ii}^{(inter)}(\omega) \quad (3.45)$$

donde

$$\sigma_{ii}^{(intra)} = \frac{ie^2 n}{\omega + i\eta m_i}, \quad \sigma_{ii}^{(inter)} = s_i \left[\Theta(\omega - \omega_i) + \frac{i}{\pi} \log \left| \frac{\omega - \omega_i}{\omega + \omega_i} \right| \right], \quad (3.46)$$

con $i = (x, y)$, donde n es la concentración de electrones, m_i es la masa efectiva de los electrones a lo largo de la dirección i , η es la frecuencia de relajación, ω_j es la frecuencia umbral de las transiciones interbanda del componente i de la conductividad, s_i es el componente de fuerza de las transiciones interbanda y $\Theta(x)$ es la función escalón.

El modelo descrito por la ecuación (3.46) fue propuesto fenomenológicamente y modela materiales bidimensionales altamente anisotrópicos. Los parámetros de (3.46) deben ser medidos experimentalmente o calculados teóricamente, a través de la fórmula de Kubo. Cabe mencionar que la ecuación (3.45) también describe al grafeno para parámetros de (3.46) isotrópicos. En la Figura 3.7 se puede observar los valores del tensor de conductividad real e imaginario del material 2D, en donde los parámetros fueron elegidos para pura demostración.

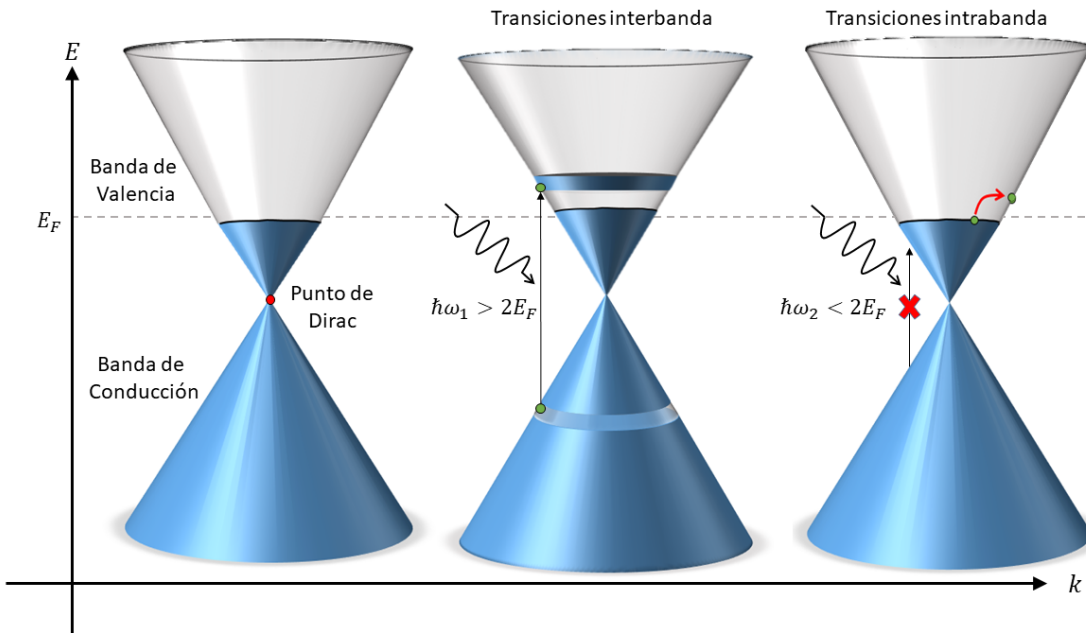


FIGURA 3.6: Transiciones ópticas para sistemas 2D tipo Dirac. Los conos de la parte superior corresponden a la banda de conducción, mientras que los inferiores a la banda de valencia. A bajas frecuencias ($\hbar\omega_2 < E_F$), las transiciones electrónicas son intrabanda, mientras que para frecuencias altas ($\hbar\omega_1 > E_F$), las transiciones son interbanda.

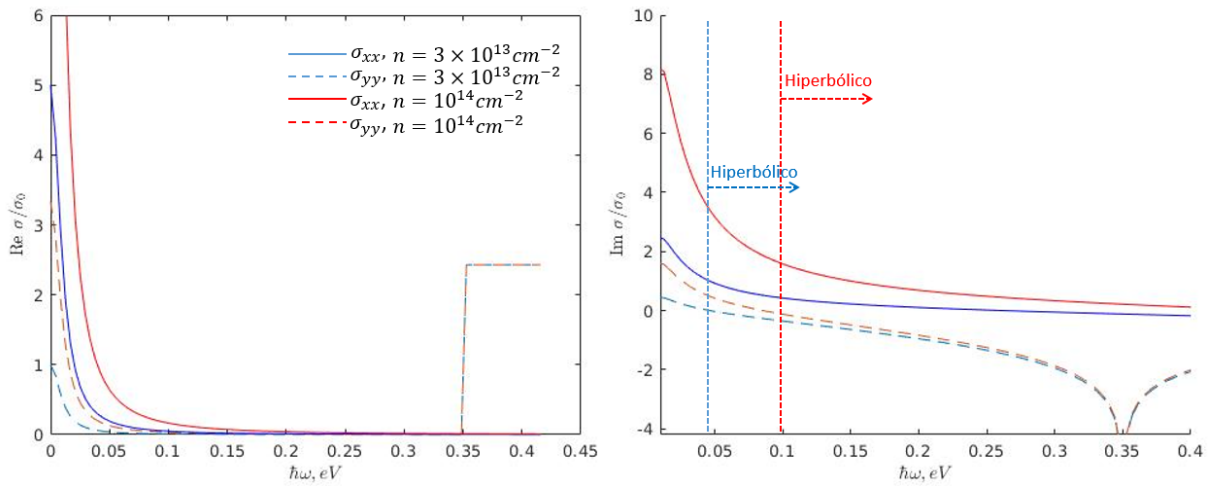


FIGURA 3.7: Parte real (a) e imaginaria (b) del tensor de conductividad del material 2D. Los parámetros son: $m_x = 0,2m_0$, $m_y = m_0$, $\eta = 0,01 \text{ eV}$, $\omega_x = 1 \text{ eV}$, $s_x = 1,7s_0$, $\omega_y = 0,25 \text{ eV}$, y $s_y = 3,7s_0$, donde $s_0 = e^2/4\hbar$ y m_0 es la masa del electrón libre.

Este modelo propone materiales hiperbólicos basados en la anisotropía de la estructura cristalina de los materiales 2D. Previo a este trabajo, solo se habían observado materiales hiperbólicos creados artificialmente (Metamateriales Hiperbólicos), resumidos por Poddubny et al. (2013) y Ferrari et al. (2015), y algunos materiales hiperbólicos naturales en bulto (Korzeb et al., 2015).

A partir de la Figura 3.7 podemos observar que si nos encontramos en un rango de frecuencias por encima de las líneas puntiagudas, observamos que las contribuciones de las transiciones electrónicas interbanda aumentan y la parte imaginaria de la conductividad se hace menor a cero. Dicha región corresponde al régimen hiperbólico ya que la anisotropía del material permite que $\text{Im}\{\sigma_{xx}\}$ y $\text{Im}\{\sigma_{yy}\}$ sean negativas a distintas frecuencias. Similarmente al caso puramente anisotrópico, las contribuciones reales del tensor de conductividad son cercanas a cero para frecuencias menores a ω_j , por lo que estas se desprecian en la relación de dispersión (3.44) y da lugar a soluciones de q reales. Entonces, podemos despreciar el lado derecho de la ecuación (3.44) y obtener la siguiente ecuación para las asíntotas de la hipérbola:

$$q_y = \pm q_x \sqrt{\left| \frac{\text{Im} \sigma_{xx}}{\text{Im} \sigma_{yy}} \right|}. \quad (3.47)$$

Los componentes normales a las asíntotas y la velocidad de grupo de los plasmones hiperbólicos siempre apuntan en una misma dirección definida por:

$$y = \pm |x| \sqrt{\left| \frac{\text{Im} \sigma_{yy}}{\text{Im} \sigma_{xx}} \right|}. \quad (3.48)$$

Así, los rayos hiperbólicos transportan energía en forma de rayos estrechos subdifraccionados a lo largo de las direcciones especificadas por la ecuación (3.48). Debido a esto, los rayos son significativamente más localizados que el caso puramente anisotrópicos. Además, es posible modificar el ángulo de dirección de los rayos modificando los valores de $\text{Im} \sigma_{yy}$ y σ_{xx} a través dopajes, potenciando los materiales hiperbólicos 2D para futuras aplicaciones tecnológicas.

En conclusión, las propiedades de los plasmones en sistemas 2D tipo Dirac presentan diferencias notables en comparación con los sistemas de gas de electrones en dos dimensiones. Estas

propiedades se deben principalmente a las contribuciones intrabanda e interbanda. Además, para materiales anisotrópicos 2D pueden observarse una topología elíptica alargada en la propagación de los plasmones. Esto hace que los plasmones anisotrópicos se propaguen en forma de rayos altamente direccionales orientados a lo largo de los ejes ópticos del material. Más aún, para materiales suficientemente anisotrópicos puede darse una transición "topológica" en la forma de propagación en un intervalo restringido de energías, en donde estos plasmones se propagan como haces fuertemente enfocados en las direcciones ortogonales a las asíntotas de la hipérbola. La dirección de propagación del plasmón hiperbólico puede controlarse cambiando la densidad de portadores en el material bidimensional, siendo esta característica un factor importante para futuras aplicaciones tecnológicas.

CAPÍTULO 4

Plasmones en el Borofeno 8-*Pmmn*

En el presente capítulo consideraremos otro sistema anisotrópico de interés reciente, el borofeno 8-*Pmmn*. Este sistema 2D posee fermiones de Dirac con una característica distintiva: tiene dos puntos de Dirac (dos valles) no equivalentes en los que los conos están inclinados. Así mismo, se explorará si este tipo de sistema es capaz de albergar la propagación de plasmones con relación de dispersión hiperbólica.

El borofeno es una monocapa atómica y anisotrópica de boro que aparece en varios polimorfos con diferentes propiedades electrónicas. De los diversos alótropos del boro predichos teóricamente, sólo se espera que unos pocos sean estables. Dos de las fases más estables predichas del borofeno poseen una simetría cristalina tal que pertenecen al grupo espacial *Pmmn* y son generalmente etiquetadas como 2-*Pmmn* y 8-*Pmmn*, dependiendo del número de átomos en la celda unitaria. De ellos, el borofeno 8-*Pmmn* es un semimetal de Dirac anisotrópico y el 2-*Pmmn* es metálico en la naturaleza (Tomar et al., 2018). El borofeno ortorrómbico 8-*Pmmn* posee conos de Dirac anisotrópicos inclinados y es un semiconductor de brecha cero (Wang et al., 2019). En la primera sección se dará una breve introducción al material, así como sus propiedades electrónicas más relevantes. En la sección 2 se calcula el tensor de conductividad a partir de las transiciones interbanda e intrabanda a través de la fórmula de Kubo. Por último, en la sección 3 se explorará la posibilidad de tener plasmones hiperbólicos en el borofeno 8-*Pmmn*.

4.1. Borofeno 8-*Pmmn*

El Hamiltoniano de Dirac "sin masa" del borofeno 8-*Pmmn* en la vecindad de uno de los puntos de Dirac esta dado por (Zabolotskiy and Lozovik, 2016):

$$H = v_x \sigma_x p_x + v_y \sigma_y p_y + v_t \sigma_0 p_y \quad (4.1)$$

donde p_i son los operadores de momento y σ_i son las matrices de Pauli. La anisotropía de la estructura cristalina, ver Figura 4.1, hace que la velocidad de los portadores de carga sea distinta en cada una de las direcciones del plano (x, y): $v_x = 0,86v_F$, $v_y = 0,69v_F$ y $v_t = 0,32v_F$, con $v_F = 10^6 m/s$. A (4.1) le corresponde una estructura de bandas formado por un par de conos inclinados (i.e. se rompe la simetría electrón-hueco) cuyos contornos de energía constante son elipses que no tienen el punto de Dirac como su centro. A su vez, existe otro punto de Dirac cuyos conos están de nuevo inclinados, pero de forma que, en conjunto, el hamiltoniano completo satisface la simetría de inversión temporal.

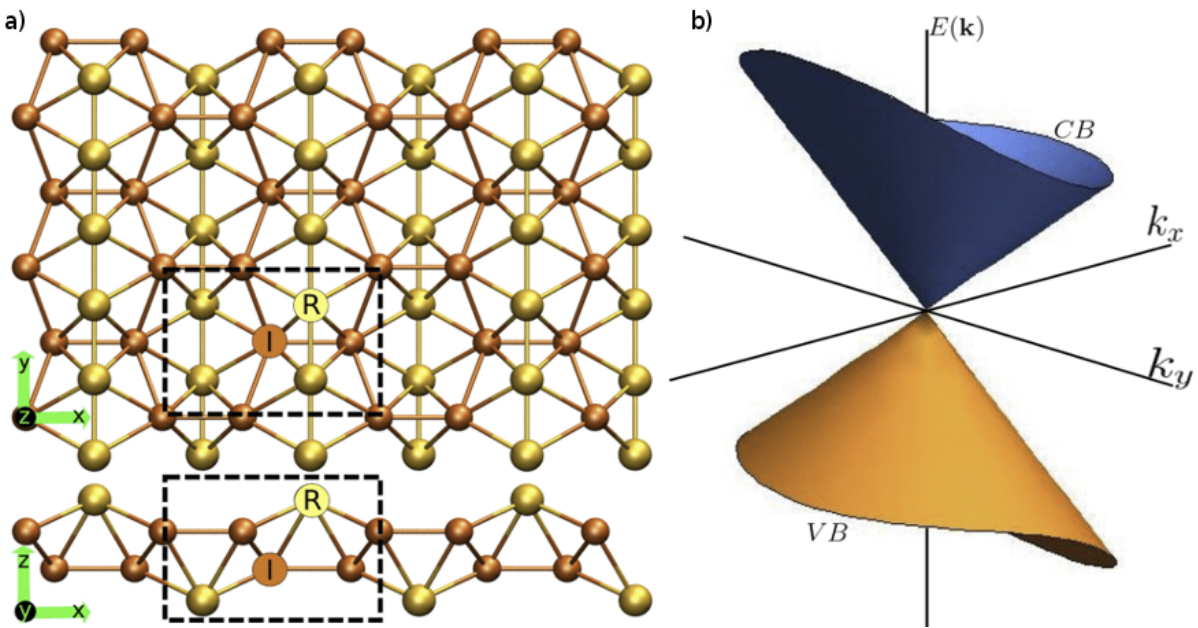


FIGURA 4.1: a) Vista frontal y lateral del borofeno 8-*Pmmn*. Los cuadros representan la celda unitaria donde se ubican dos átomos no equivalentes: B_I y B_R (Lopez-Bezanilla and Littlewood, 2016). b) Bandas de energía $E - \mathbf{k}$ donde se muestran los conos anisotrópicos de Dirac inclinados (Verma et al., 2017).

Nótese que a diferencia de la relación de dispersión energética para sistemas isotrópicos (2.10), el término $v_t p_y$ en el Hamiltoniano (4.1) inclina los conos de Dirac, cuya función de energía está dada por $E(\mathbf{p}) = p_y v_t \pm \sqrt{p_x^2 v_x^2 + p_y^2 v_y^2}$. Dadas las transformaciones $\theta = \tan^{-1}(k_x/k_y)$ y $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ (radio polar) se puede expresar la ecuación de dispersión energética en coordenadas polares dados los parámetros de (4.1):

$$E_\lambda(k, \theta) = k \xi_\lambda(\theta), \quad (4.2)$$

donde $\xi_\lambda(\theta) = \hbar[v_t \sin \theta + \lambda \Delta(\theta)] > 0$, $\Delta^2(\theta) = v_x^2 \cos^2 \theta + v_y^2 \sin^2 \theta$ describe la anisotropía del espectro y $\lambda = \pm$ denota la banda de conducción y de valencia, respectivamente. Nótese que para el caso en donde $\Delta(\theta) = 1$ cuando $v_x = v_y = v_F$, y además el parámetro de inclinación es $v_t = 0$, el Hamiltoniano (4.1) se reduce al Hamiltoniano del grafeno cerca de los puntos de Dirac. Así mismo, las correspondientes funciones de onda para la banda de conducción ($\lambda = +$) y la banda de valencia ($\lambda = -$) pueden ser escritas como:

$$\psi_{\mathbf{k}}^\lambda(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

donde $\phi = \tan^{-1}(v_y k_y / v_x k_x)$. A partir de (4.2) se puede observar la anisotropía de los conos de Dirac, ya que la diferencia de energía en las bandas está dado por:

$$E_+(k, \theta) - E_-(k, \theta) = E_g(k, \theta) = 2\hbar k \Delta(\theta). \quad (4.4)$$

Para el caso isotrópico, esta diferencia de energía ($E_g(k, \theta)$) entre la banda de conducción (E_+) y banda de valencia (E_-) solamente depende de la magnitud del momento k de los electrones, mientras que este depende de los componentes (k_x, k_y) para el caso anisotrópico.

Por último, para una densidad de portadores n_c la energía de Fermi es

$$E_F = \hbar \pi v_F \sqrt{2n_c / N_0}, \quad (4.5)$$

donde $N_0 = 15,2263$ es una constante (Verma et al., 2017).

4.2. Conductividad Óptica

La fórmula de Kubo (Kubo, 1957), es una ecuación que expresa la respuesta lineal de una cantidad observable a una perturbación externa. La respuesta lineal significa que la señal es directamente proporcional a la intensidad de la perturbación exterior. Usualmente la respuesta lineal se asume que es válida para bajas magnitudes de los campos externos. Entre sus aplicaciones, la fórmula de Kubo ayuda a calcular el tensor de conductividad. Este surge a partir de un promedio cuántico y termoestadístico (Mahan, 2000).

El tensor de conductividad es expresado como la suma de dos término:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{i}{\tilde{\omega}} [\Pi_{\alpha\beta}(\omega) - \Pi_{\alpha\beta}(0)] \quad (4.6)$$

en donde $(\alpha, \beta) = (x, y)$, $\tilde{\omega} \rightarrow \omega + i\eta^+$, $\Pi_{\alpha\beta}(0)$ es una constante y $\Pi_{\alpha\beta}(\omega)$ es la función de correlación de corriente-corriente. Dado un Hamiltoniano $H(\mathbf{k})$ para un sistema 2D con $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ entonces (Verma et al., 2017),

$$\Pi_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt e^{it(\omega + i\eta^+)} \sum_{m,n} [f(E_n) - f(E_m)] e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} \langle n | \hat{j}_\alpha | m \rangle \langle m | \hat{j}_\beta | n \rangle, \quad (4.7)$$

$$\Pi_{\alpha\beta}(0) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt \sum_{m,n} [f(E_n) - f(E_m)] e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} \langle n | \hat{j}_\alpha | m \rangle \langle m | \hat{j}_\beta | n \rangle, \quad (4.8)$$

en donde $\hat{j}_{\alpha,\beta}$ es el operador de corriente, $(n, m) = \pm$ son los niveles de energía discretos del sistema, $\langle n | \hat{j}_{\alpha,\beta} | m \rangle$ son los elementos (n, m) del operador de la matriz de densidad-corriente, E_n es la energía asociado al nivel n y $f(E)$ es la distribución de Fermi-Dirac. La suma de la ecuación (4.7) toma en consideración los estados disponibles para realizar las transiciones mientras que el producto matricial del operador densidad-corriente pesa la contribución de cada transición.

Evaluando la integral temporal e integrando sobre todo el espacio d^2k , entonces las ecuaciones (4.7) y (4.8) se reescriben como

$$\Pi_{\alpha\beta}(\omega) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{m,n} [f(E_n) - f(E_m)] \frac{\langle n | \hat{j}_\alpha | m \rangle \langle m | \hat{j}_\beta | n \rangle}{\hbar\tilde{\omega} + E_n - E_m}, \quad (4.9)$$

$$\Pi_{\alpha\beta}(0) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{m,n} [f(E_n) - f(E_m)] \frac{\langle n | \hat{j}_\alpha | m \rangle \langle m | \hat{j}_\beta | n \rangle}{E_n - E_m}. \quad (4.10)$$

Finalmente, juntando las ecuaciones (4.9) y (4.10) considerando que $\langle n | \hat{j}_\alpha | m \rangle = \langle n | e\hat{v}_\alpha | m \rangle$, donde e es la carga del electrón y \hat{v} es el operador de la matriz de velocidad, entonces tenemos que el tensor de conductividad es:

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}(\omega) &= \frac{ie^2}{\hbar\tilde{\omega}} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{m,n} [f(E_n) - f(E_m)] \langle n | \hat{v}_\alpha | m \rangle \langle m | \hat{v}_\beta | n \rangle \left(\frac{1}{\hbar\tilde{\omega} + E_n - E_m} - \frac{1}{E_n - E_m} \right), \\ &= \frac{ie^2}{\hbar\tilde{\omega}} (-\hbar\tilde{\omega}) \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{\sum_{m,n} [f(E_n) - f(E_m)] \langle n | \hat{v}_\alpha | m \rangle \langle m | \hat{v}_\beta | n \rangle}{E_n - E_m \hbar\tilde{\omega} + E_n - E_m}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Las matrices de los operadores de velocidad están dados por $\hat{v}_x = v_x\sigma_x$ y $\hat{v}_y = v_t\sigma_0 + v_y\sigma_y$, en donde $v_{x,y}$ son las velocidades relativas en las direcciones correspondientes y $\sigma_{x,y,0}$ son las matrices de Pauli. De esta forma, el valor de expectación de cada una está dado por:

$$\hat{v}_x^{nm} = \frac{v_x}{\Delta(\theta)} \begin{pmatrix} v_x \cos \theta & -iv_y \sin \theta \\ iv_y \sin \theta & v_x \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \hat{v}_y^{nm} = \begin{pmatrix} v_t + \frac{v_y^2 \sin \theta}{\Delta(\theta)} & iv_y v_x \frac{\cos \theta}{\Delta(\theta)} \\ -iv_y v_x \frac{\cos \theta}{\Delta(\theta)} & v_t - \frac{v_y^2 \sin \theta}{\Delta(\theta)} \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

en donde el valor de expectación \hat{v}_i^{nm} es la observable $\langle n | \hat{v}_i | m \rangle$, dada la función de onda (4.3) definida en la sección 4.1.

En las siguientes subsecciones se calcularán las contribuciones interbanda e intrabanda del tensor de conductividad (4.11) a $T = 0K$ de tal forma que $\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \sigma_{\alpha\beta}^{(intra)}(\omega) + \sigma_{\alpha\beta}^{(inter)}(\omega)$.

4.2.1. Transiciones intrabanda

Las transiciones intrabanda son las transiciones que ocurren entre estados electrónicos dentro de la misma banda. Estos se pueden ejemplificar dentro de nuestra ecuación (4.11) para estados donde $m = n$. Si se considera el caso en donde $\lim_{m \rightarrow n} E_m - E_n = \lim_{\Delta E \rightarrow 0} \Delta E$, donde $\Delta E = E_m - E_n$ de tal forma que la ecuación (4.11) se puede escribir como

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}^{(intra)}(\omega) &= \lim_{\Delta E \rightarrow 0} -ie^2 \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(\frac{f(E_n) - f(E_n + \Delta E)}{-\Delta E} \right) \frac{\langle n | \hat{v}_\alpha | m \rangle \langle m | \hat{v}_\beta | n \rangle}{\hbar\tilde{\omega} - \Delta E}, \\ &= i \frac{\sigma_0}{4\pi\hbar\tilde{\omega}} \int d^2k \left(-\frac{\partial f(E_n)}{\partial E_n} \right) \langle n | \hat{v}_\alpha | n \rangle \langle n | \hat{v}_\beta | n \rangle, \end{aligned} \quad (4.13)$$

en donde se utilizó la definición de la derivada y $\sigma_0 = \frac{e^2}{\pi\hbar}$ el quantum de conductancia. La derivada de la distribución de Fermi-Dirac $f(E_n)$ es la función delta de Dirac centrada en la Energía de Fermi E_F . Realizando un cambio a coordenadas polares y evaluando la derivada, podemos encontrar que la parte intrabanda de la conductividad está dada por

$$\sigma_{\alpha\beta}^{(intra)}(\omega) = i \frac{\sigma_0}{4\pi\hbar\omega} \int_0^{2\pi} d\theta \int dk k \delta(E_+(k, \theta) - E_F) \langle n | \hat{v}_\alpha | n \rangle \langle n | \hat{v}_\beta | n \rangle, \quad (4.14)$$

en donde $\delta(E_+(k, \theta) - E_F) = \frac{1}{|\xi_+(\theta)|} \delta(k - \frac{E_F}{\xi_+(\theta)})$. Evaluando la integral sobre k y reemplazando los valores de las matrices (4.12) obtenemos explícitamente:

$$\sigma_{xx}^{(intra)}(\omega) = i \frac{\sigma_0 E_F v_x^4}{4\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta \cos^2 \theta}{\xi^2(\theta) \Delta^2(\theta)} \left(\frac{\hbar\omega - i\hbar\eta^+}{(\hbar\omega)^2 + (\hbar\eta^+)^2} \right), \quad (4.15)$$

$$\sigma_{yy}^{(intra)}(\omega) = i \frac{\sigma_0 E_F}{4\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta (v_t \Delta(\theta) + v_y^2 \sin^2 \theta)^2}{\xi^2(\theta) \Delta^2(\theta)} \left(\frac{\hbar\omega - i\hbar\eta^+}{(\hbar\omega)^2 + (\hbar\eta^+)^2} \right), \quad (4.16)$$

$$\sigma_{xy}^{(intra)}(\omega) = \sigma_{yx}^{(intra)}(\omega) = i \frac{\sigma_0 E_F v_x^2}{4\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta \cos \theta (v_t \Delta(\theta) + v_y^2 \sin^2 \theta)^2}{\xi^2(\theta) \Delta^2(\theta)} \left(\frac{\hbar\omega - i\hbar\eta^+}{(\hbar\omega)^2 + (\hbar\eta^+)^2} \right) = 0. \quad (4.17)$$

A partir de las ecuaciones (4.15)-(4.17) observamos que las contribuciones intrabanda del tensor de conductividad son anisotrópicas: $\sigma_{xx}^{(intra)} \neq \sigma_{yy}^{(intra)}$ y que solo tienen componentes en su diagonal principal: $\sigma_{\alpha\beta}^{(intra)} = \delta_{\alpha\alpha} \sigma_{\alpha\alpha}^{(intra)}$. Utilizando la siguiente relación

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{a \rightarrow 0} \frac{a}{x^2 - a^2}, \quad (4.18)$$

podemos separar las contribuciones intrabanda en parte real e imaginaria

$$\sigma_{\alpha\alpha}^{(intra)}(\omega) = D_{\alpha\alpha} \delta(\omega) + i \text{Im} \sigma_{\alpha\alpha}^{(intra)}(\omega), \quad (4.19)$$

en donde los componentes imaginarios están dados por:

$$\text{Im} \sigma_{xx}^{(intra)}(\omega) = \frac{\sigma_0 E_F}{4\pi \hbar\omega} v_x^4 \int_0^{2\pi} \frac{d\theta \cos^2 \theta}{\xi^2(\theta) \Delta^2(\theta)}, \quad (4.20)$$

$$\text{Im} \sigma_{yy}^{(intra)}(\omega) = \frac{\sigma_0 E_F}{4\pi \hbar\omega} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta (v_t \Delta(\theta) + v_y^2 \sin^2 \theta)^2}{\xi^2(\theta) \Delta^2(\theta)}, \quad (4.21)$$

y D es el peso de Drude dinámico debido a transiciones intrabanda. Este corresponde a la parte real de las ecuaciones (4.15) y (4.16):

$$D_{\alpha\alpha} = \pi \lim_{\omega \rightarrow 0} [\omega \text{Im} \sigma_{\alpha\alpha}^{(intra)}]. \quad (4.22)$$

4.2.2. Transiciones interbanda

Las transiciones interbanda suceden cuando electrones de la banda de valencia ocupan sitios desocupados en la banda de conducción. A diferencia de las transiciones intrabanda, se considera el caso para $n \neq m$ en la ecuación (4.11). Las contribuciones interbanda del tensor de conductividad puede ser expresada como:

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}^{(inter)}(\omega) &= -ie^2 \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left[\frac{f(E_+) - f(E_-)}{E_+ - E_-} \frac{\langle + | \hat{v}_\alpha | - \rangle \langle - | \hat{v}_\beta | + \rangle}{\hbar\tilde{\omega} + E_+ - E_-} + \frac{f(E_-) - f(E_+)}{E_- - E_+} \frac{\langle - | \hat{v}_\alpha | + \rangle \langle + | \hat{v}_\beta | - \rangle}{\hbar\tilde{\omega} + E_- - E_+} \right] \\ &= -ie^2 (2\hbar\tilde{\omega}) \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left[\frac{f(E_+) - f(E_-)}{E_g(k, \theta)} \right] \frac{\langle + | \hat{v}_\alpha | - \rangle \langle - | \hat{v}_\beta | + \rangle}{(\hbar\tilde{\omega})^2 - E_g^2(k, \theta)}, \end{aligned} \quad (4.23)$$

en donde $E_g(k, \theta)$ corresponde a la diferencia energética entre las dos bandas (4.4). Recordando que $\tilde{\omega} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \omega + \eta^+$, entonces podemos reescribir la dependencia de la frecuencia de (4.23) como

$$\begin{aligned} \frac{\hbar\tilde{\omega}}{(\hbar\tilde{\omega})^2 - E_g^2(k, \theta)} &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\hbar\tilde{\omega} + E_g(k, \theta)} + \frac{1}{\hbar\tilde{\omega} - E_g(k, \theta)} \right), \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar\omega + E_g(k, \theta) - i\hbar\eta^+}{(\hbar\omega + E_g(k, \theta))^2 + (\hbar\eta^+)^2} + \frac{\hbar\omega - E_g(k, \theta) - i\hbar\eta^+}{(\hbar\omega - E_g(k, \theta))^2 + (\hbar\eta^+)^2} \right). \end{aligned} \quad (4.24)$$

Evaluando el límite y utilizando la relación (4.18) encontramos que

$$\frac{\hbar\tilde{\omega}}{(\hbar\tilde{\omega})^2 - E_g^2(k, \theta)} = \frac{\hbar\omega}{(\hbar\omega)^2 - E_g^2(k, \theta)} - \frac{i\pi}{2} [\delta(\hbar\omega + E_g(k, \theta)) + \delta(\hbar\omega - E_g(k, \theta))]. \quad (4.25)$$

Considerando solamente absorciones $\omega > 0$, el segundo término del lado derecho de (4.25) es cero. Finalmente, podemos separar las transiciones interbanda en parte real y parte imaginaria:

$$\text{Re} \sigma_{\alpha\beta}^{(inter)}(\omega) = -\frac{\sigma_0}{4\hbar\omega} \int d^2k [f(E_+) - f(E_-)] \langle + | \hat{v}_\alpha | - \rangle \langle - | \hat{v}_\beta | + \rangle \delta(\hbar\omega - E_g(k, \theta)), \quad (4.26)$$

$$\text{Im} \sigma_{\alpha\beta}^{(inter)}(\omega) = -\frac{\sigma_0}{2\pi} \hbar\omega \int d^2k \left[\frac{f(E_+) - f(E_-)}{E_g(k, \theta)} \right] \frac{\langle + | \hat{v}_\alpha | - \rangle \langle - | \hat{v}_\beta | + \rangle}{(\hbar\omega)^2 - E_g^2(k, \theta)}, \quad (4.27)$$

en donde se hizo el cambio de $E_g(k, \theta) \rightarrow \hbar\omega$ en (4.26) debido a las propiedades de la función Delta.

Utilizando las matrices (4.12) encontramos que la expresión para el valor esperado del operador de velocidad puede ser escrito como

$$\langle + | \hat{v}_\alpha | - \rangle \langle - | \hat{v}_\beta | + \rangle = \frac{v_x^2 v_y^2}{\Delta^2(\theta)} [\delta_{\alpha x} \sin^2 \theta + \delta_{\alpha y} \cos^2 \theta - (1 - \delta_{\alpha\beta}) \sin \theta \cos \theta]. \quad (4.28)$$

La parte real del tensor de conductividad (4.26) fue presentado primeramente por Verma et al. (2017) a partir del mismo formalismo de la fórmula de Kubo. Resolviendo (4.26) mediante (4.28) y bajo la condición de $f(E_+) - f(E_-) \neq 0$, lo cual implica que $k \geq k_F(\theta)$ ¹, entonces la expresión final para la parte real del tensor de conductividad óptico es:

$$\text{Re } \sigma_{xx}^{(inter)}(\omega) = \frac{\sigma_0}{16} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{v_x^2 v_y^2 \sin^2 \theta}{\Delta^4(\theta)} \Theta(\hbar\omega - E_g(k_F(\theta))), \quad (4.29)$$

$$\text{Re } \sigma_{yy}^{(inter)}(\omega) = \frac{\sigma_0}{16} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{v_x^2 v_y^2 \cos^2 \theta}{\Delta^4(\theta)} \Theta(\hbar\omega - E_g(k_F(\theta))), \quad (4.30)$$

$$\text{Re } \sigma_{xy}^{(inter)}(\omega) = \text{Re } \sigma_{yx}^{(inter)}(\omega) = -\frac{\sigma_0}{16} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{v_x^2 v_y^2 \sin \theta \cos \theta}{\Delta^4(\theta)} \Theta(\hbar\omega - E_g(k_F(\theta))) = 0, \quad (4.31)$$

donde $E_g(k_F(\theta)) = 2\hbar E_F \Delta(\theta) / \xi(\theta)$ es la energía de corte de las transiciones interbanda y $\Theta(x)$ es la función escalón.

En la Figura 4.2 podemos observar la solución numérica de la parte real del tensor de conductividad del borofeno $8-Pmmn$ como función de $\hbar\omega$ considerando una concentración de portadores de carga de $n_c = 1 \times 10^{16} m^{-2}$ a $T = 0$. En este se puede observar que para frecuencias bajas $\omega \rightarrow 0$ el comportamiento del material es tipo Drude (transiciones intrabanda). Las transiciones de la banda de valencia a la banda de conducción empiezan para frecuencias $\hbar\omega^- = E_+(k_F(\pi/2)) = 2E_F v_y / (v_y + v_t)$. Por otra parte, se observa que la conductividad óptica real alcanza un valor máximo para valores mayores o iguales a $\hbar\omega^+ = E_+(k_F(3\pi/2)) = 2E_F v_y / (v_y - v_t)$. Las soluciones exactas del tensor de conductividad óptico para este último caso son:

$$\text{Re } \sigma_{\alpha\beta}^{(inter)}(\omega > \omega^+) = \delta_{\alpha\beta} \left(\frac{\sigma_0}{16} \right) \frac{v_\alpha v_\alpha}{v_x v_y}. \quad (4.32)$$

¹El vector de onda de Fermi $k_F(\theta)$ corresponden a las curvas definidas por $E_\lambda(k_F^\lambda, \theta) = E_F$, que equivale a

$$k_F^\pm(\theta) = \frac{E_F}{\xi_\pm(\theta)}.$$

Nótese que el tensor de conductividad real para este último caso es independiente de la frecuencia $\hbar\omega$, de la densidad de portadores de carga n_c y del parámetro de inclinación v_t . Más aún, el producto de las dos conductividades en su valor máximo $\text{Re } \sigma_{xx} \cdot \text{Re } \sigma_{yy} = \left(\frac{e^2}{4\pi}\right)^2$ es universal.

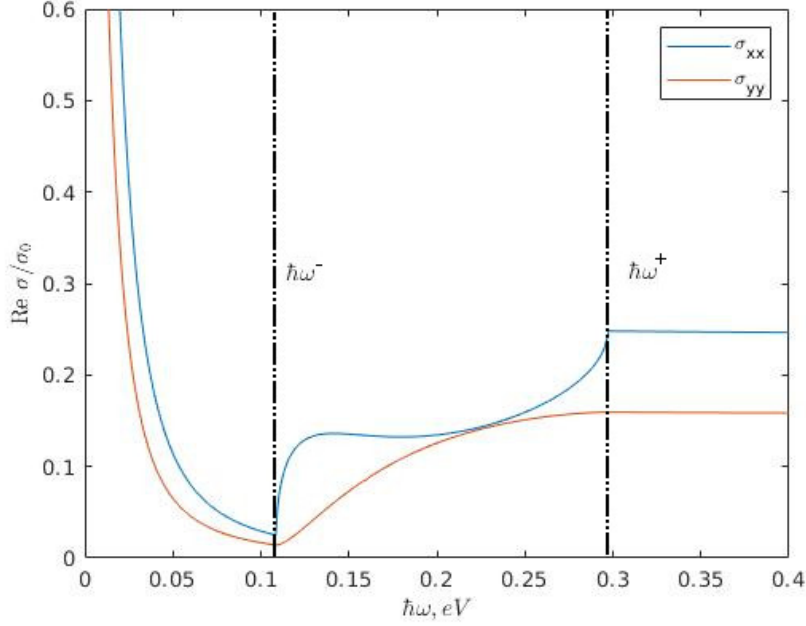


FIGURA 4.2: Tensor de conductividad óptica $\text{Re } \sigma_{xx}$ y $\text{Re } \sigma_{yy}$ del borofeno 8-*Pmmn* en unidades de $\sigma_0 = \frac{e^2}{\pi\hbar}$.

Retomando la parte imaginaria del tensor de conductividad óptico (4.27) obtenemos explícitamente:

$$\text{Im } \sigma_{xx}^{(inter)}(\omega) = -\frac{\sigma_0 v_x^2 v_y^2}{4\pi} \hbar\omega \int_0^{2\pi} \int_{k_F(\theta)}^{k_c} \frac{d\theta}{\hbar\Delta^3(\theta)} \frac{\sin^2 \theta dk}{(\hbar\omega)^2 - (2\hbar k \Delta(\theta))^2}, \quad (4.33)$$

$$\text{Im } \sigma_{yy}^{(inter)}(\omega) = -\frac{\sigma_0 v_x^2 v_y^2}{4\pi} \hbar\omega \int_0^{2\pi} \int_{k_F(\theta)}^{k_c} \frac{d\theta}{\hbar\Delta^3(\theta)} \frac{\cos^2 \theta dk}{(\hbar\omega)^2 - (2\hbar k \Delta(\theta))^2}, \quad (4.34)$$

$$\text{Im } \sigma_{xy}^{(inter)}(\omega) = \frac{\sigma_0 v_x^2 v_y^2}{4\pi} \hbar\omega \int_0^{2\pi} \int_{k_F(\theta)}^{k_c} \frac{d\theta}{\hbar\Delta^3(\theta)} \frac{\sin \theta \cos \theta dk}{(\hbar\omega)^2 - (2\hbar k \Delta(\theta))^2}, \quad (4.35)$$

en donde k_c es el vector de onda de corte. Integrando sobre k y considerando que $k_c \rightarrow \infty$ obtenemos:

$$\text{Im } \sigma_{xx}^{(inter)}(\omega) = -\frac{\sigma_0 v_x^2 v_y^2}{16\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\cos^2 \theta d\theta}{\Delta^4(\theta)} \log \left| \frac{\hbar\omega - E_g(k_F(\theta))}{\hbar\omega + E_g(k_F(\theta))} \right|, \quad (4.36)$$

$$\text{Im } \sigma_{yy}^{(inter)}(\omega) = -\frac{\sigma_0 v_x^2 v_y^2}{16\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\sin^2 \theta d\theta}{\Delta^4(\theta)} \log \left| \frac{\hbar\omega - E_g(k_F(\theta))}{\hbar\omega + E_g(k_F(\theta))} \right|, \quad (4.37)$$

$$\text{Im } \sigma_{xy}^{(inter)}(\omega) = \text{Im } \sigma_{xy}^{(inter)}(\omega) = 0, \quad (4.38)$$

en donde el término $\log \left| \frac{\hbar\omega + E_g(k_c)}{\hbar\omega - E_g(k_c)} \right| \approx 0$ para valores suficientemente grandes de k_c . Finalmente, obtenemos el tensor óptico completo $\bar{\sigma}$ del borofeno 8-*Pmmn*:

$$\text{Re } \sigma_{\alpha\alpha}(\omega) = D_{\alpha\alpha} \delta(\omega) + \text{Re } \sigma_{\alpha\alpha}^{(inter)}(\omega), \quad (4.39)$$

$$\text{Im } \sigma_{\alpha\alpha}(\omega) = \text{Im } \sigma_{\alpha\alpha}^{(intra)}(\omega) + \text{Im } \sigma_{\alpha\alpha}^{(inter)}(\omega).$$

Como se puede observar en la ecuación (4.39), el tensor de conductividad tiene diferencias significativas al modelo propuesto por Nemilentsau et al. (2016), descritos en la ecuación (3.46). La discrepancia entre el modelo del tensor de conductividad propuesto por Nemilentsau et al. (2016) y el del borofeno 8-*Pmmn* es la anisotropía de los conos de Dirac, por lo que la frecuencia de inicio de las transiciones interbanda ω_i , definido en el borofeno 8-*Pmmn* como $E_g(k, \theta)$, es ahora una función de las coordenadas (k, θ) .

En la Figura 4.3 se puede observar la alta anisotropía de las partes imaginarias del tensor de conductividad óptico del borofeno 8-*Pmmn*. Las soluciones numéricas de la parte imaginaria de la ecuación (4.39) presentan claramente las singularidades de van Hove para las frecuencias $\hbar\omega^-$ y $\hbar\omega^+$, que corresponden a los ángulo $\theta^- = 3\pi/2$ y $\theta^+ = \pi/2$, respectivamente. Así mismo, para frecuencias cercanas a cero observamos que las transiciones intrabanda son las que predominan; mientras que para frecuencias grandes la parte imaginaria del tensor de conductividad óptico se hace cero.

4.3. Plasmones en el borofeno 8-*Pmmn*

Como se puede observar en la Figura 4.4, el tensor de conductividad imaginario del borofeno 8-*Pmmn* cuenta con las tres condiciones para los tipos de plasmones discutidos previamente: isotrópicos, puramente anisotrópicos e hiperbólicos. Para las frecuencias $\hbar\omega = 113\text{meV}$, 132meV y 238meV podemos encontrar que los plasmones son isotrópicos i.e. su contorno es circular. Es

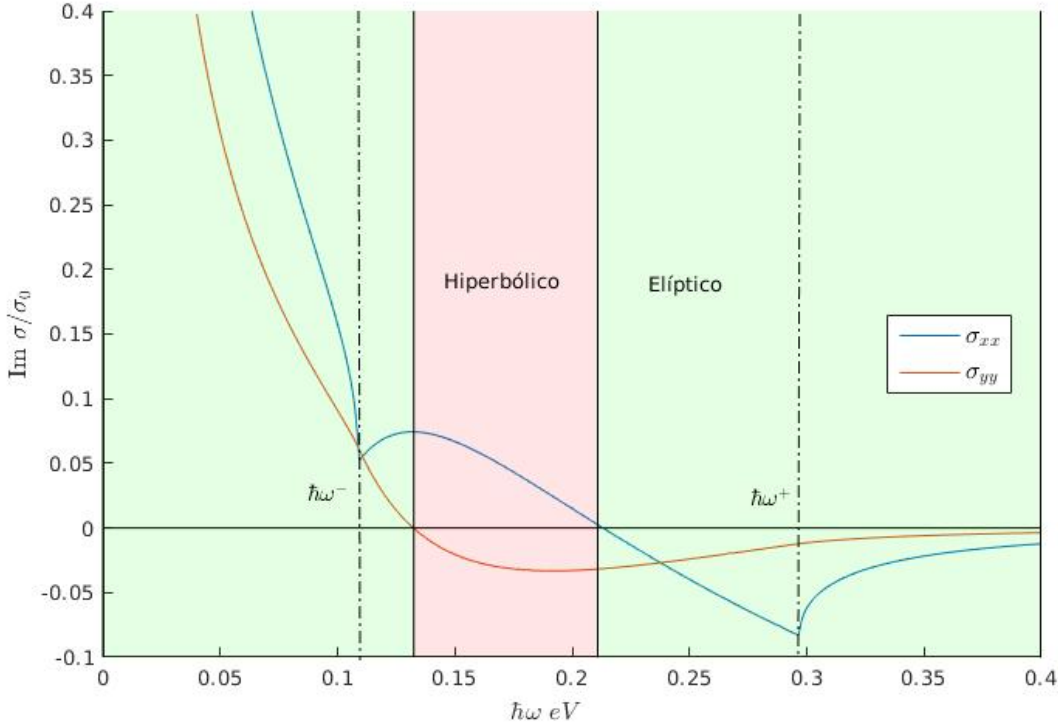


FIGURA 4.3: Tensor de conductividad óptica $\text{Im } \sigma_{xx}$ y $\text{Im } \sigma_{yy}$ del borofeno 8-*Pmmn* en unidades de $\sigma_0 = \frac{e^2}{\pi h}$. Se sombrió con verde las regiones en donde los plasmones son anisotrópicos ($\text{Im } \sigma_{xx} \cdot \text{Im } \sigma_{yy} > 0$) y con rojo las regiones para el régimen hiperbólico ($\text{Im } \sigma_{xx} \cdot \text{Im } \sigma_{yy} < 0$).

importante destacar que para las primeras dos frecuencias, los valores del tensor conductividad son positivas, mientras que la tercera son negativas. Nótese que al igual que el grafeno, el borofeno 8-*Pmmn* permite modos plasmónicos tipo TE. Por otro lado, para frecuencias $\hbar\omega < 132\text{meV}$ y $\hbar\omega > 210\text{meV}$ el contorno de isofrecuencia de los plasmones es elíptico. Es interesante destacar que la dirección de los rayos de los plasmones están dirigidos preferentemente a lo largo de la dirección y para frecuencias $\hbar\omega < 238\text{meV}$ y a lo largo del eje x para frecuencias $\hbar\omega > 238\text{meV}$. Finalmente, como se mencionó en el capítulo 3, la condición para la existencia de plasmones hiperbólicos es que $\text{Im } \sigma_{xx} \cdot \text{Im } \sigma_{yy} < 0$. Como se observa en la Figura 4.3 existe una brecha en la que la conductividad óptica imaginaria del borofeno 8-*Pmmn* cumple con dicha condición. Podemos observar que para el rango comprendido entre $132\text{meV} < \hbar\omega < 210\text{meV}$ existe un régimen plasmónico hiperbólico ($\text{Im } \sigma_{xx} \cdot \text{Re } \sigma_{yy} < 0$), sombreado con color rojo. Como se mencionó anteriormente, los plasmones en el régimen hiperbólico se propagan como un haz localizado a lo largo de la dirección definida por

el cociente de las partes imaginarias de las conductividades ($\sqrt{\text{Im } \sigma_{xx} / \text{Im } \sigma_{yy}}$). Como se observa en la Figura 4.3, esta dirección de propagación del haz puede ser sintonizable con la frecuencia de luz incidente dentro del régimen hiperbólico.

A diferencia del grafeno (ver Figura 3.3) y el modelo propuesto por Nemilentsau et al. (2016), la parte real del tensor de conductividad no puede ser despreciado. De tal manera, los contornos de isofrecuencia i.e. los modos plasmónicos no están bien establecidos debido a la parte real de la ecuación (3.36). Como ilustración, se anexa la Figura 4.4 en donde se graficaron los contornos de frecuencia constante, definidos por la relación de dispersión (3.44) (en donde se consideró $\text{Re } \sigma_{ij} = 0$) para el borofeno 8-*Pmmn* para valores arbitrarios del tensor de conductividad imaginario (4.39).

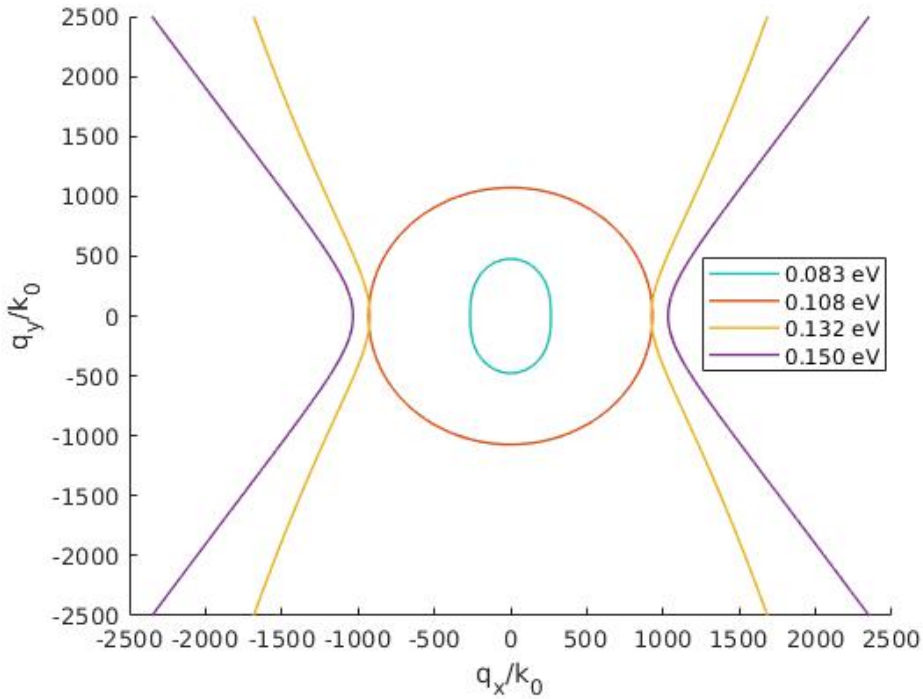


FIGURA 4.4: Plasmones de superficie en borofeno 8-*Pmmn* con distintas frecuencias de luz incidente. Los contornos de la relación de dispersión plasmónica fueron calculados a través de la ecuación (3.44) en donde se descartaron las partes reales del tensor de conductividad como ilustración.

Debido a que el rango de frecuencias para el régimen hiperbólico se encuentra dentro de las transiciones interbanda $\hbar\omega > \hbar\omega^-$ los plasmones se encuentran amortiguados debido a la absorción

de las transiciones interbanda. Para un valor arbitrario de $\hbar\omega_a = 0,15\text{eV}$ encontramos que el tensor de conductividad es de $\text{Re } \sigma_{xx} = 11,60\mu\text{S}$, $\text{Im } \sigma_{xx} = 5,11\mu\text{S}$, $\text{Re } \sigma_{yy} = 7,28\mu\text{S}$ y $\text{Im } \sigma_{yy} = -1,63\mu\text{S}$. Para determinar el efecto de la parte real del tensor de conductividad en la propagación de los plasmones en sistemas 2D es conveniente determinar el amortiguamiento de los plasmones. En la Figura 4.5 se anexa el amortiguamiento de los plasmones en el borofeno 8- $Pmmn$ para modos TE y TM.

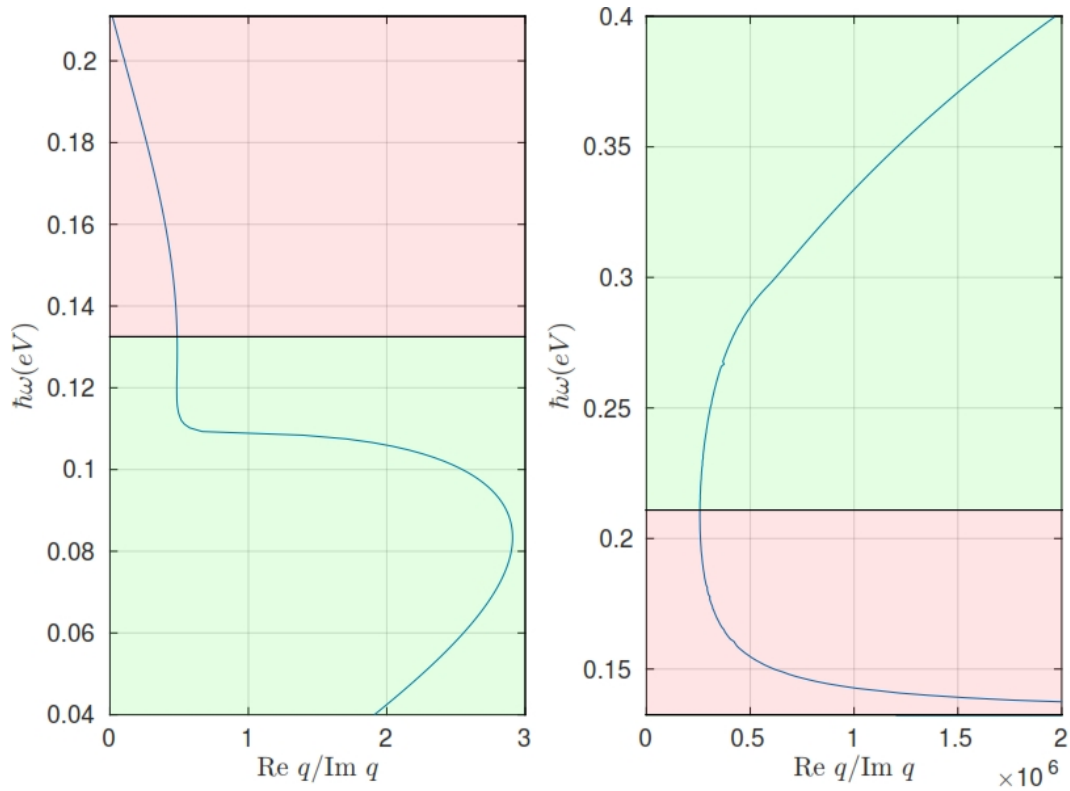


FIGURA 4.5: Longitud de decaimiento de propagación (en unidades de longitud de onda del plasmón) del borofeno 8- $Pmmn$ para modos A) TE y B) TM, de acuerdo con las ecuaciones (3.38) y (3.39), respectivamente, donde el fondo rojo corresponde a la región hiperbólica.

Como se puede observar en la Figura 4.5, el amortiguamiento para los modos plasmónicos TE es relativamente grande en comparación con el grafeno. Más aún, dentro de la región hiperbólica (fondo rojo), el amortiguamiento de los plasmones es aún mayor. Por el contrario, los modos plasmónicos tipo TM están ligeramente amortiguados. Si bien el amortiguamiento dentro de la región

hiperbólica es mayor que la del resto de las frecuencias, este es muy significativo. Debido a que las disipaciones de energía de los modos plasmónicos tipo TM es muy poca en la región del hiperbólico, es posible modificar la dirección de los rayos plasmónicos a partir de la frecuencia ω . Esto propone al borofeno 8-*Pmmn* para futuras aplicaciones tecnológicas ya que se puede elegir la dirección de propagación como función de la frecuencia de la luz incidente.

Finalmente, podemos concluir que existe una región hiperbólica en el borofeno 8-*Pmmn* debido a sus propiedades ópticas altamente anisotrópicas. De igual manera, el borofeno 8-*Pmmn* alberga plasmones isotrópicos tipo TE y TM, así como anisotrópicos de contornos de isofrecuencia elípticos. A su vez, existe un amortiguamiento en los plasmones debido a que la región hiperbólica se encuentra dentro de las frecuencias de las transiciones interbanda. Este amortiguamiento a lo largo de la superficie de los plasmones (proporcional al inverso de $\text{Re } q / \text{Im } q$) en la región del hiperbólico es mayor para modos plasmónicos tipo TE. Por último, los modos plasmónicos TM del borofeno 8-*Pmmn* tienen baja disipación de energía a lo largo de toda la región del hiperbólico comparado con el amortiguamiento de los plasmones en el grafeno, lo cual lo posiciona como un referente para futuras aplicaciones tecnológicas.

CAPÍTULO 5

Conclusiones

El presente trabajo ha tenido como objetivo estudiar las propiedades de los plasmones hiperbólicos en sistemas de Dirac 2D. Se derivó la relación de dispersión de los modos electromagnéticos de superficie de un material 2D en una interface entre dos dieléctricos caracterizado por un tensor de conductividad eléctrica arbitrario. En particular, se estudiaron los sistemas de 2DEG, el grafeno, y el modelo propuesto por Nemilentsau et al. (2016). Se hicieron estudios teóricos detallados de la conductividad óptica del borofeno 8- $Pmmn$. Finalmente, se estudiaron los modos normales de la respuesta óptica en el borofeno 8- $Pmmn$.

Se calcularon las expresiones para las contribuciones interbanda e intrabanda del tensor de conductividad del borofeno 8- $Pmmn$ a partir del formalismo de la fórmula de Kubo a $T = 0$. Además, se proporcionan las expresiones analíticas del peso de Drude y la energía de transiciones interbanda. A partir de esto, se encontró que el borofeno 8- $Pmmn$ alberga los tres tipos de plasmones mencionados anteriormente: isotrópico, puramente anisotrópicos e hiperbólicos. Se determinó que para frecuencias comprendidas entre $0,132\text{eV} < \hbar\omega < 0,210\text{eV}$ existen plasmones hiperbólicos en el borofeno 8- $Pmmn$ con una concentración de portadores de carga de $n_c = 1 \times 10^{16} m^{-2}$. Sin embargo, se encontró que la oscilación plasmónica no está bien establecida debido a la disipación de energía a causa de las transiciones interbanda. Se encontró que el amortiguamiento de los plasmones en la región hiperbólica para modos con polarización tipo TM es menor que para modos tipo TE. Además, la dirección de propagación del haz de plasmones es dependiente de la frecuencia ω de la luz incidente. Esta propiedad de sintonización de la dirección de propagación de energía de los plasmones abre nuevas oportunidades para las aplicaciones tecnológicas a futuro. Dicho esto, el presente trabajo es un antecedente a futuros estudios de materiales hiperbólicos.

Referencias

- Barraza-Lopez, S., Xia, F., Zhu, W., and Wang, H. (2020). Beyond graphene: Low-symmetry and anisotropic 2d materials. *Journal of Applied Physics*, 128(14):140401.
- Bolotin, K., Sikes, K., Jiang, Z., Klima, M., Fudenberg, G., Hone, J., Kim, P., and Stormer, H. (2008). Ultrahigh electron mobility in suspended graphene. *Solid State Communications*, 146(9-10):351–355.
- Bolotin, K. I., Ghahari, F., Shulman, M. D., Stormer, H. L., and Kim, P. (2009). Observation of the fractional quantum hall effect in graphene. *Nature*, 462(7270):196–199.
- Boriskina, S. V., Cooper, T. A., Zeng, L., Ni, G., Tong, J. K., Tsurimaki, Y., Huang, Y., Meroueh, L., Mahan, G., and Chen, G. (2017). Losses in plasmonics: from mitigating energy dissipation to embracing loss-enabled functionalities. *Adv. Opt. Photon.*, 9(4):775–827.
- Born, M., Wolf, E., Bhatia, A. B., Clemmow, P. C., Gabor, D., Stokes, A. R., Taylor, A. M., Wayman, P. A., and Wilcock, W. L. (1999). *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*. Cambridge University Press, 7 edition.
- Cahangirov, S., Topsakal, M., Aktürk, E., Şahin, H., and Ciraci, S. (2009). Two- and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium. *Phys. Rev. Lett.*, 102:236804.
- Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., and Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81:109–162.
- Dávila, M. E. and Le Lay, G. (2016). Few layer epitaxial germanene: a novel two-dimensional dirac material. *Scientific reports*, 6:20714.
- Duplantier, B., Rivasseau, V., and Fuchs, J.-N., editors (2017). *Dirac Matter*. Springer International Publishing.
- Falkovsky, L. A. and Varlamov, A. A. (2007). Space-time dispersion of graphene conductivity. *The European Physical Journal B*, 56(4):281–284.
- Feng, Y., Liu, D., Feng, B., Liu, X., Zhao, L., Xie, Z., Liu, Y., Liang, A., Hu, C., Hu, Y., et al. (2016). Direct evidence of interaction-induced dirac cones in a monolayer silicene/ag (111) system.

- Proceedings of the National Academy of Sciences*, 113(51):14656–14661.
- Ferrari, L., Wu, C., Lepage, D., Zhang, X., and Liu, Z. (2015). Hyperbolic metamaterials and their applications. *Progress in Quantum Electronics*, 40:1 – 40.
- Guo, Y., Cortes, C. L., Molesky, S., and Jacob, Z. (2012). Broadband super-planckian thermal emission from hyperbolic metamaterials. *Applied Physics Letters*, 101(13):131106.
- Guo, Y. and Jacob, Z. (2013). Thermal hyperbolic metamaterials. *Opt. Express*, 21(12):15014–15019.
- Hanson, G. W. (2008). Dyadic green’s functions for an anisotropic, non-local model of biased graphene. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 56(3):747–757.
- Huang, H., Duan, W., and Liu, Z. (2013). The existence/absence of dirac cones in graphynes. *New Journal of Physics*, 15(2):023004.
- Ishii, S., Kildishev, A. V., Narimanov, E., Shalaev, V. M., and Drachev, V. P. (2013). Sub-wavelength interference pattern from volume plasmon polaritons in a hyperbolic medium. *Laser & Photonics Reviews*, 7(2):265–271.
- Katsnelson, M. I. (2007). Graphene: carbon in two dimensions. *Materials Today*, 10(1):20–27.
- Kildishev, A. V., Boltasseva, A., and Shalaev, V. M. (2013). Planar photonics with metasurfaces. *Science*, 339(6125).
- Kong, J. A. (1986). *Electromagnetic Wave Theory*. EMW.
- Korzeb, K., Gajc, M., and Pawlak, D. A. (2015). Compendium of natural hyperbolic materials. *Optics Express*, 23(20):25406.
- Kubo, R. (1957). Statistical-mechanical theory of irreversible processes. i. general theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *Journal of the Physical Society of Japan*, 12(6):570–586.
- Li, G., Li, J., and Cheah, K. W. (2011). Subwavelength focusing using a hyperbolic medium with a single slit. *Appl. Opt.*, 50(31):G27–G30.
- Li, Q., Kolluru, V. S. C., Rahn, M. S., Schwenker, E., Li, S., Hennig, R. G., Darancet, P., Chan, M. K. Y., and Hersam, M. C. (2021). Synthesis of borophane polymorphs through hydrogenation of borophene. *Science*, 371(6534):1143–1148.
- Li, Y., Li, Z., Chi, C., Shan, H., Zheng, L., and Fang, Z. (2017). Plasmonics of 2d nanomaterials: Properties and applications. *Advanced Science*, 4(8):1600430.

- Liu, H., Neal, A. T., Zhu, Z., Luo, Z., Xu, X., Tománek, D., and Ye, P. D. (2014). Phosphorene: An unexplored 2d semiconductor with a high hole mobility. *ACS Nano*, 8(4):4033–4041. PMID: 24655084.
- Lopez-Bezanilla, A. and Littlewood, P. B. (2016). Electronic properties of 8- pmmn borophene. *Physical Review B*, 93(24):241405.
- Lu, D., Kan, J. J., Fullerton, E. E., and Liu, Z. (2014). Enhancing spontaneous emission rates of molecules using nanopatterned multilayer hyperbolic metamaterials. *Nature Nanotechnology*, 9(1):48–53.
- Luo, C., Johnson, S. G., Joannopoulos, J. D., and Pendry, J. B. (2002). All-angle negative refraction without negative effective index. *Phys. Rev. B*, 65:201104.
- Mahan, G. D. (2000). *Many-Particle Physics (Physics of Solids and Liquids)*. Springer.
- Maier, S. A. (2007). *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. Springer.
- Mannix, A. J., Zhou, X.-F., Kiraly, B., Wood, J. D., Alducin, D., Myers, B. D., Liu, X., Fisher, B. L., Santiago, U., Guest, J. R., Yacaman, M. J., Ponce, A., Oganov, A. R., Hersam, M. C., and Guisinger, N. P. (2015). Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs. *Science*, 350(6267):1513–1516.
- Melo, L. G. C. (2015). Theory of magnetically controlled low-terahertz surface plasmon-polariton modes in graphene–dielectric structures. *Journal of the Optical Society of America B*, 32(12):2467.
- Mikhailov, S. A. and Ziegler, K. (2007). New electromagnetic mode in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 99:016803.
- Moore, J. E. (2010). The birth of topological insulators. *Nature*, 464(7286):194–198.
- Nair, R. R., Blake, P., Grigorenko, A. N., Novoselov, K. S., Booth, T. J., Stauber, T., Peres, N. M. R., and Geim, A. K. (2008). Fine structure constant defines visual transparency of graphene. *Science*, 320(5881):1308–1308.
- Nakayama, M. (1974). Theory of surface waves coupled to surface carriers. *Journal of the Physical Society of Japan*, 36(2):393–398.
- Nemilentsau, A., Low, T., and Hanson, G. (2016). Anisotropic 2d materials for tunable hyperbolic plasmonics. *Phys. Rev. Lett.*, 116:066804.
- Nemilentsau, A., Low, T., and Hanson, G. (2019). Chapter 5 - chiral and hyperbolic plasmons in novel 2-d materials. In Maffucci, A., Maksimenko, S., and Svirko, Y., editors, *Carbon-Based*

- Nanoelectromagnetics*, Nanophotonics, pages 119–138. Elsevier.
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Katsnelson, M. I., Grigorieva, I. V., Dubonos, S. V., and Firsov, A. A. (2005). Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *Nature*, 438(7065):197–200.
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., and Firsov, A. A. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306(5696):666–669.
- Pletikosić, I., Kralj, M., Pervan, P., Brako, R., Coraux, J., N'diaye, A., Busse, C., and Michely, T. (2009). Dirac cones and minigaps for graphene on ir (111). *Physical review letters*, 102(5):056808.
- Poddubny, A., Iorsh, I., Belov, P., and Kivshar, Y. (2013). Hyperbolic metamaterials. *Nature photonics*, 7(12):948.
- Ponomarenko, L. A., Gorbachev, R. V., Yu, G. L., Elias, D. C., Jalil, R., Patel, A. A., Mishchenko, A., Mayorov, A. S., Woods, C. R., Wallbank, J. R., Mucha-Kruczynski, M., Piot, B. A., Potemski, M., Grigorieva, I. V., Novoselov, K. S., Guinea, F., Fal'ko, V. I., and Geim, A. K. (2013). Cloning of dirac fermions in graphene superlattices. *Nature*, 497(7451):594–597.
- Roth, D. J., Krasavin, A. V., Wade, A., Dickson, W., Murphy, A., Kéna-Cohen, S., Pollard, R., Wurtz, G. A., Richards, D., Maier, S. A., and Zayats, A. V. (2017). Spontaneous emission inside a hyperbolic metamaterial waveguide. *ACS Photonics*, 4(10):2513–2521.
- Sadhukhan, K. and Agarwal, A. (2017). Anisotropic plasmons, friedel oscillations, and screening in 8-*pmmn* borophene. *Phys. Rev. B*, 96:035410.
- Takayama, O. and Lavrinenko, A. V. (2019). Optics with hyperbolic materials. *J. Opt. Soc. Am. B*, 36(8):F38–F48.
- Tomar, S., Rastogi, P., Bhadoria, B. S., Bhowmick, S., Chauhan, Y. S., and Agarwal, A. (2018). Adsorption of magnetic transition metals on borophene: an ab initio study. *The European Physical Journal B*, 91(3).
- Verma, S., Mawrie, A., and Ghosh, T. K. (2017). Effect of electron-hole asymmetry on optical conductivity in 8 - *pmmn* borophene. *Phys. Rev. B*, 96:155418.
- Veselago, V. G. (1968). The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of ϵ . *Soviet Physics Uspekhi*, 10(4):509–514.

- Wang, Z.-Q., Lü, T.-Y., Wang, H.-Q., Feng, Y. P., and Zheng, J.-C. (2019). Band gap opening in 8-pmmn borophene by hydrogenation. *ACS Applied Electronic Materials*, 1(5):667–674.
- Wu, X., Dai, J., Zhao, Y., Zhuo, Z., Yang, J., and Zeng, X. C. (2012). Two-dimensional boron monolayer sheets. *ACS Nano*, 6(8):7443–7453.
- Xu, S.-Y., Belopolski, I., Alidoust, N., Neupane, M., Bian, G., Zhang, C., Sankar, R., Chang, G., Yuan, Z., Lee, C.-C., Huang, S.-M., Zheng, H., Ma, J., Sanchez, D. S., Wang, B., Bansil, A., Chou, F., Shibaev, P. P., Lin, H., Jia, S., and Hasan, M. Z. (2015). Discovery of a weyl fermion semimetal and topological fermi arcs. *Science*, 349(6248):613–617.
- Zabolotskiy, A. D. and Lozovik, Y. E. (2016). Strain-induced pseudomagnetic field in the dirac semimetal borophene. *Phys. Rev. B*, 94:165403.
- Zhan, T., Shi, X., Dai, Y., Liu, X., and Zi, J. (2013). Transfer matrix method for optics in graphene layers. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 25(21):215301.
- Zhang, Y., Tan, Y.-W., Stormer, H. L., and Kim, P. (2005). Experimental observation of the quantum hall effect and berry's phase in graphene. *Nature*, 438(7065):201–204.
- Zhao, S., Dong, B., Wang, H., Wang, H., Zhang, Y., Han, Z. V., and Zhang, H. (2020). In-plane anisotropic electronics based on low-symmetry 2d materials: progress and prospects. *Nanoscale Adv.*, 2:109–139.
- Zhou, X.-F., Dong, X., Oganov, A. R., Zhu, Q., Tian, Y., and Wang, H.-T. (2014). Semimetallic two-dimensional boron allotrope with massless dirac fermions. *Phys. Rev. Lett.*, 112:085502.

1. Apéndice A

A partir de las ecuaciones (3.13) podemos relacionar los campos eléctricos y magnéticos en cada uno de los medios. Si representamos las ondas como una combinación lineal de ondas con polarización tipo TM (3.8) y TE (3.9), de tal forma que las ondas con polarización tipo TM en cada una de las regiones puede expresadas como:

$$\begin{aligned}
 E_{1,TM}^{\pm} &= \left(\pm \frac{k_{z1}}{\omega \epsilon_0 \epsilon_1} H_{y1}^{\pm}, 0, -\frac{q}{\omega \epsilon_0 \epsilon_1} H_{y1}^{\pm} \right), & E_{2,TM}^{\pm} &= \left(\pm \frac{k_{z2}}{\omega \epsilon_0 \epsilon_2} H_{y2}^{\pm}, 0, -\frac{q}{\omega \epsilon_0 \epsilon_2} H_{y2}^{\pm} \right), \\
 H_{1,TM}^{\pm} &= (0, H_{y1}^{\pm}, 0), & H_{2,TM}^{\pm} &= (0, H_{y2}^{\pm}, 0),
 \end{aligned} \tag{1}$$

y las ondas con polarización tipo TE como:

$$\begin{aligned} H_{1,TE}^{\pm} &= \left(\mp \frac{k_{z1}}{\omega\mu_0\mu_1} E_{y1}^{\pm}, 0, \frac{q}{\omega_0\omega_1} E_{y1}^{\pm} \right), & H_{2,TE}^{\pm} &= \left(\mp \frac{k_{z2}}{\omega\mu_0\mu_2} E_{y2}^{\pm}, 0, \frac{q}{\omega_0\omega_2} E_{y2}^{\pm} \right), \\ E_{1,TE}^{\pm} &= (0, E_{y1}^{\pm}, 0), & E_{2,TE}^{\pm} &= (0, E_{y2}^{\pm}, 0). \end{aligned} \quad (.2)$$

Utilizando solamente las últimas dos ecuaciones de las condiciones a la frontera (3.11) en las funciones de onda (3.18) obtenemos en $z=0$:

$$\begin{aligned} E_{y2}^+ + E_{y2}^- &= E_{y1}^+ + E_{y1}^-, \\ E_{x2}^+ + E_{x2}^- &= E_{x1}^+ + E_{x1}^-, \\ H_{y2}^+ + H_{y2}^- &= H_{y1}^+ + H_{y1}^- - [\sigma_{xx}E_x + \sigma_{xy}E_y], \\ H_{x2}^+ + H_{x2}^- &= H_{x1}^+ + H_{x1}^- + [\sigma_{yx}E_x + \sigma_{yy}E_y], \end{aligned} \quad (.3)$$

en donde E_x y E_y son los campos eléctricos transversales en la interface. A partir de la tercera condición a la frontera recordamos que el campo eléctrico tangencial debe ser continuo en la interface, de tal forma que elegimos $E_x = E_{x1}^+ + E_{x1}^-$ y $E_y = E_{y1}^+ + E_{y1}^-$. Reemplazando estos valores en (.3) obtenemos:

$$\begin{aligned} E_{y2}^+ + E_{y2}^- &= E_{y1}^+ + E_{y1}^-, \\ E_{x2}^+ + E_{x2}^- &= E_{x1}^+ + E_{x1}^-, \\ H_{y2}^+ + H_{y2}^- &= H_{y1}^+ + H_{y1}^- - [\sigma_{xx}(E_{x1}^+ + E_{x1}^-) + \sigma_{xy}(E_{y1}^+ + E_{y1}^-)], \\ H_{x2}^+ + H_{x2}^- &= H_{x1}^+ + H_{x1}^- + [\sigma_{yx}(E_{x1}^+ + E_{x1}^-) + \sigma_{yy}(E_{y1}^+ + E_{y1}^-)]. \end{aligned} \quad (.4)$$

Si expresamos cada amplitud de los campos eléctricos (magnéticos) en términos de los componentes transversales E_{yi} (H_{yi}) a través de las relaciones (.1-.2) entonces obtenemos finalmente

$$\begin{aligned} \frac{k_{z2}}{\omega\epsilon_0\epsilon_2} (H_{y2}^+ - H_{y2}^-) &= \frac{k_{z1}}{\omega\epsilon_0\epsilon_1} (H_{y1}^+ - H_{y1}^-), \\ E_{y2}^+ + E_{y2}^- &= E_{y1}^+ + E_{y1}^-, \\ H_{y2}^+ + H_{y2}^- &= H_{y1}^+ + H_{y1}^- - \left[\frac{k_{z1}\sigma_{xx}}{\omega\epsilon_0\epsilon_1} (H_{y1}^+ - H_{y1}^-) + \sigma_{xy} (E_{y1}^+ + E_{y1}^-) \right], \\ \frac{k_{z2}}{\omega\mu_0\mu_2} (E_{y2}^- - E_{y2}^+) &= \frac{k_{z1}}{\omega\mu_0\mu_1} (E_{y1}^- - E_{y1}^+) + \left[\frac{k_{z1}\sigma_{yx}}{\omega\epsilon_0\epsilon_1} (H_{y1}^+ - H_{y1}^-) + \sigma_{yy} (E_{y1}^+ + E_{y1}^-) \right], \end{aligned} \quad (.5)$$

que pueden ser reorganizadas para obtener (3.19).

Nótese que si se utilizan las primeras dos condiciones a la frontera (3.11), en donde la densidad de carga superficial inducida $\rho(x, y, t) = \rho_s(\omega)e^{i(k_x x - \omega t)}$ es determinada a través de la ecuación de continuidad $\nabla \cdot \mathbf{J}_s + \frac{\partial \rho_s}{\partial t} = 0$, lo cual implica que $qJ_{s,x} = \omega\rho_s(\omega)$. A partir de esto escribimos explícitamente las primeras dos condiciones a la frontera como:

$$\begin{aligned} \epsilon_0\epsilon_2(E_{z2}^+ + E_{z2}^-) - \epsilon_0\epsilon_1(E_{z1}^+ + E_{z1}^-) &= \frac{q}{\omega}J_{s,x}, \\ (B_{z2}^+ + B_{z2}^-) - (B_{z2}^+ + B_{z2}^-) &= 0. \end{aligned} \tag{.6}$$

Si utilizamos las relaciones (.1) en la primera ecuación y la ley de Faraday en la segunda, podemos observar que estas corresponden a las ecuaciones uno y cuatro de (3.19).