



UNIVERSITATEA DIN BUCUREȘTI
Facultatea de Fizică
Școala Doctorală de Fizică



Claudiu CARAIANI

EXCITAȚII COLECTIVE ÎN HETEROSTRUCTURI
MULTISTRAT

TEZĂ DE DOCTORAT
REZUMAT

Conducător de doctorat
Prof. univ. dr. Virgil BĂRAN

București, 2024

Mulțumiri

Finalizarea cu succes a tezei de doctorat a fost posibilă datorită contribuției și sprijinului conducătorului de doctorat și al membrilor comisiei de îndrumare.

Aș dori să-mi exprim profunda recunoștință pentru îndrumarea excelentă, încurajarea continuă a conducătorului de doctorat Prof. univ. Dr. Virgil Baran. Sunt recunoscător Domnului Prof. univ. Dr. Virgil Baran pentru feedbackul său prețios și pentru numeroasele discuții care mi-au lărgit înțelegerea fizicii teoretice în timpul Programelor de Masterat și Doctorat, precum și pentru modul său de predare și ilustrarea similarităților în utilizarea tehnicilor many-body în fizica nucleară și materie condensată.

Totodată, aș dori să-mi exprim profunda recunoștință Domnului Prof. univ. dr. Lucian Ion pentru nenumăratele discuții de-a lungul anilor și pentru răbdare, îndrumare constantă, încurajare și transmitere a cunoștințelor necesare pentru a-mi realiza obiectivele de cercetare doctorală. Domnul Prof. univ. dr. Lucian Ion m-a ajutat să înțeleg mai profund tehnicile de many-body în fizica materiei condensate. Feedbackul neprețuit pe care l-am primit pe parcursul stagiului doctoral a influențat modul de gândire și înțelegere într-un mod calitativ superior al fizicii solidului.

Mulțumirile mele speciale se adresează și Doamnei Conf. univ. dr. Mădălina Boca și Lect. univ. dr. Roxana Zus, membri în comisia de îndrumare, pentru îndrumarea și sprijinul oferit, pentru comentariile și sugestiile practice, precum și pentru asistența lor în timpul Programelor de Masterat și Doctorat.

Aș dori să mulțumesc Domnului C.S.I Dragoș Anghel pentru răbdare și îndrumare în timpul Programului de Masterat. Domnul C.S.I Dragoș Anghel m-a învățat cum să înțeleg și să fiu pregătit pentru cercetare la nivel înalt și sunt recunoscător pentru contribuția exemplară a ideilor și discuțiilor care m-au modelat în acei doi ani de studii.

Aș dori să-mi exprim sincerele mulțumiri și profundă recunoștință Domnului Profesor John Peter Ralston de la Universitatea Kansas pentru marea sa răbdare, încurajare și îndrumare în timpul Programului de Licență. Fără sprijinul său, discuțiile și explicații nesfârșite despre fizică, probabil că nu aș fi pe această cale acum. Profesorul John Peter Ralston reprezintă un adevărat model de urmat în ceea ce privește gândirea critică în Fizică.

În cele din urmă, aș dori să le mulțumesc părinților mei pentru dragoste, înțelegere și sprijin de-a lungul anilor de cercetare științifică, fără de care, nimic din toate acestea nu ar fi fost posibil.

Contents

1	Introducere	1
1.1	Plasmonica în sisteme bidimensionale	1
2	Sisteme bidimensionale	3
2.1	Grafena	3
2.1.1	Structura cristalografică	3
2.1.2	Structura de bandă electronică	4
2.1.3	Derivarea Hamiltonianului Dirac-Weyl	5
2.2	Silicena	7
2.2.1	Structura cristalografică	7
2.2.2	Structura de bandă a silicenei	8
3	Interacțiunile Coulomb neecranate în sisteme cu câteva straturi	11
3.1	Interacțiunile Coulomb neecranate în sistemele cu două straturi . . .	12
3.2	Interacțiunile Coulomb neecranate în sistemele cu trei straturi	13
4	Plasmoni și funcția de atenuare într-o structură cu două straturi silicenă-grafenă la temperatura zero ¹	15
4.1	Motivație	15
4.2	Cadru teoretic	15
4.3	Rezultate	18
4.3.1	Cazul omogen	18
4.3.2	Cazul neomogen	22
5	Funcția de atenuare în structuri cu trei straturi: cazurile silicenei și grafenei.	27
5.1	Motivație	27
5.2	Cadru teoretic	27
5.3	Cazul silicenei ²	30
5.3.1	Cazul omogen	30
5.3.2	Cazul neomogen	33
5.4	Cazul grafenei ³	35

¹**C. Caraiani**, Plasmons and loss function in a double-layer silicene-graphene heterostructure at zero-temperature, Physics Letters A 522, 129792 (2024) doi.org/10.1016/j.physleta.2024.129792

²**C. Caraiani**, L. Ion , Loss function in a three layer silicene structure at zero temperature, accepted in Romanian Journal of Physics (2024)

³**C. Caraiani**, L. Ion , Loss function in a three layer graphene structure at zero temperature, Presented at Bucharest University Faculty of Physics 2024 Meeting

5.4.1	Cazul omogen	35
5.4.2	Cazul neomogen	38
6	Temperatura de crossover în schimbul de căldură electron-fonon în nanostructuri cu mai multe straturi ⁴	41
6.1	Motivație	41
6.2	Cadru teoretic	42
6.3	Rezultate	45
7	Concluzii generale	47
8	Lista contribuțiilor proprii	57
8.1	Lucrări publicate în reviste	57
8.1.1	Reviste indexate ISI	57
8.2	Lucrări prezentate la conferințe	57
8.2.1	Conferințe internaționale	57
8.2.2	Conferințe naționale	57

⁴D.V Anghel, C. Caraiani, Y. Galperin, Crossover temperature in the electron-phonon heat exchange in layered nanostructures, Phys. Scr. 94, 105704 (2019) doi.org/10.1016/j.physleta.2024.129792

Introducere

1.1 Plasmonica în sisteme bidimensionale

După izolarea grafenei [1, 2], comunitatea științifică a început un program pentru a explora semiconductoare bidimensionale dincolo de grafenă, în lumina aplicațiilor lor potențiale [3]. În ultimii 20 de ani, au apărut diferite clase de semiconductoare bidimensionale: silicena și germanena [6], semiconductoarele IV-VI [7], metalele de tranziție dicalcogene [4] etc.

Fizica materiei condensate își concentrează mare parte din atenție asupra înțelegerii proprietăților colective ale materiei, cum ar fi supraconductibilitatea, feromagnetismul, excitațiile plasmonice și efectul Hall cuantic. Un mare interes se acordă excitațiilor plasmonice în materiale monostrat și multistrat datorită proprietăților lor unice și potențialului pentru aplicații în plasmonică, fonică, optoelectronică, tehnologia THZ, optică liniară și non-liniară și multe altele [46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53]. Într-un cristal, excitațiile plasmonice sunt generate de un câmp electromagnetic [8]. Domeniul plasmonicii se ocupă cu generarea, propagarea și detectarea excitațiilor plasmonice.

În contextul fizicii many-body, plasmonii sunt oscilații colective ale densității de sarcină care apar în prezența interacțiunilor Coulomb și apar matematic ca polii funcției de corelație densitate-densitate cu interacție sau ca polii funcției de atenuare $S(\mathbf{q}, \omega) \sim 1/\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$. Cele mai multe calcule se realizează în aproximația fazelor aleatoare (RPA), unde funcția dielectrică este $\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - v(\mathbf{q})\Pi^{0,R}(\mathbf{q}, \omega)$, $v(\mathbf{q})$ fiind transformata Fourier a interacțiunii Coulomb și $\Pi^{0,R}(\mathbf{q}, \omega)$ fiind funcția de răspuns densitate-densitate fără interacții. Folosim noția $|\mathbf{q}| = q$. În sistemele bidimensionale $v(\mathbf{q}) \sim 1/q$ pentru interacțiunea Coulomb necranată, iar în limita $q \rightarrow 0$, funcția de corelație densitate-densitate fără interacții se comportă ca $\Pi^{0,R}(\mathbf{q}, \omega) \approx q^2/\omega^2$. Aceste lucruri conduc la faptul că plasmonii, zerourile funcției dielectrice $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$, se comportă ca $\omega_{pl}(q \rightarrow 0) \sim \sqrt{q}$ în limita menționată. Acest lucru este în general satisfăcut de toate materialele studiate [13]. Pentru sistemele cu două straturi formate din două sisteme monostrat separate printr-un spacer dielectric, avem o ramură plasmonică acustică $\omega_{ac}(q)$ și o ramură plasmonică optică $\omega_{op}(q)$. Aceste ramuri prezintă următoarea dependență de q în limita lungimilor de undă lungi: $\omega_{ac}(q \rightarrow 0) \sim q$ și $\omega_{op}(q \rightarrow 0) \sim \sqrt{q}$ [68, 69, 74].

Un avantaj major al semiconductoarelor bidimensionale este dat de faptul că acestea permit reglarea prin câmpuri electrice externe a duratei de viață a plasmonilor, ceea ce este benefic pentru potențiale aplicații tehnologice. În termeni generali, în RPA, sub presupunerea unei atenuări slabe, plasmonii sunt neamorti-

zati în regiunea unde $\text{Im } \epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 0$ și dobândesc o mică atenuare în regiunea unde $\text{Im } \epsilon(\mathbf{q}, \omega) \neq 0$. În modele mai realiste, atenuarea este influențată și de prezența impurităților, fononilor etc. Atenuarea plasmonilor, în semiconductoarele bidimensionale cu un band gap mare, la momente mari se datorează excitațiilor intra-bandă. Unele exemple ar putea include fosforul negru monolstrat [16] și MoS₂ monostrat [15]. În materialele cu un band gap mic, cum ar fi silicena și germanena, sau în sistemele fără gap, cum ar fi grafena, plasmonii se descompun în perechi particulă-gol prin tranziții inter-bandă [17].

Sisteme bidimensionale

2.1 Grafena

2.1.1 Structura cristalografică

Rețeaua hexagonală a grafenei, formată din atomi de carbon, nu este o rețea Bravais. Motivul pentru care nu este o rețea Bravais este că doi atomi ce sunt vecini nu sunt echivalenți cristalografic. Prin urmare, rețeaua cu geometrie hexagonală a grafenei poate fi văzută ca fiind formată din două subrețele trigonale: A (cercul negru) și B (cercul alb), așa cum este ilustrat în Fig. 2.1(a)-(b)

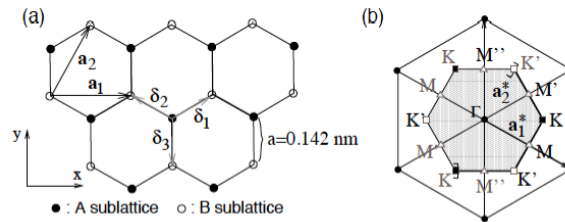


Figure 2.1: (a) Geometria hexagonală a grafenei (b) Prima zonă Brillouin a grafenei cu marele puncte de simetrie. Adaptat din Ref. [20].

Distanța dintre atomii de carbon vecini este $a_0 = 0.142 \text{ nm}$. Urmând notația lui Goerbig [20], fiecare punct de pe subrețeaua A este conectat la trei puncte vecine de pe subrețeaua B prin intermediul vectorilor

$$\delta_1 = \frac{a_0}{2} (\sqrt{3}\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) \quad (2.1a)$$

$$\delta_2 = \frac{a_0}{2} (-\sqrt{3}\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) \quad (2.1b)$$

$$\delta_3 = -a_0\mathbf{e}_y \quad (2.1c)$$

Rețeaua Bravais triunghiulară este apoi generată de vectorii de bază.

$$\mathbf{a}_1 = \sqrt{3}a_0\mathbf{e}_x \quad (2.2a)$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{\sqrt{3}a_0}{2} (\mathbf{e}_x + \sqrt{3}\mathbf{e}_y) \quad (2.2b)$$

Modulul vectorilor de bază determină distanța dintre subrețele, adică $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = \sqrt{3}a_0 = 0.246 \text{ nm}$. Celula unitate primitivă conține doi atomi de carbon la pozițiile

$$\boldsymbol{\tau}_A = 0 \quad (2.3a)$$

$$\boldsymbol{\tau}_A = \frac{1}{3}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) \quad (2.3b)$$

Rețeaua reciprocă este generată de vectorii de bază reciproci

$$\mathbf{a}_1^* = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a_0} \left(\mathbf{e}_x - \frac{\mathbf{e}_y}{\sqrt{3}} \right) \quad (2.4a)$$

$$\mathbf{a}_2^* = \frac{4\pi}{3a_0} \mathbf{e}_y \quad (2.4b)$$

Prima zonă Brillouin (FBZ) a rețelei reciproce corespunzătoare are de asemenea o formă hexagonală, așa cum este arătat în Fig. 2.1(b). În FBZ vom întâlni punctele de mare simetrie Γ , M , K și K' , așa cum este indicat în Fig. 2.1(b). Centrul FBZ este numit punctul Γ , iar excitațiile cu lungimi de undă lungi se află aproape de acest punct. Colțurile FBZ sunt numite punctele K și K' . Cele șase colțuri ale FBZ au doar două puncte ce nu sunt echivalente, deoarece celelalte sunt conectate prin vectorii de bază reciproci din ecuațiile (2.4a)-(2.4b). Astfel, avem

$$K = \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}, 0 \right) \quad (2.6a)$$

$$K' = \left(-\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}, 0 \right) \quad (2.6b)$$

2.1.2 Structura de bandă electronică

În cadrul aproximației nearest neighbour pentru hamiltonianul tight-binding, problema generalizată a valorilor proprii este dată de

$$\begin{pmatrix} E_0 & \gamma_0 g(\mathbf{k}) \\ \gamma_0 g^*(\mathbf{k}) & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{nk}^A \\ C_{nk}^B \end{pmatrix} = E_{nk} \begin{pmatrix} 1 & s_0 g(\mathbf{k}) \\ s_0 g^*(\mathbf{k}) & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{nk}^A \\ C_{nk}^B \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

unde γ_0 și s_0 vor fi tratați ca parametri empirici de ajustare și vor fi determinați prin comparație cu experimentele sau calculele *ab-initio*. Această ecuație oferă două soluții λ_n cu $n \in \{c, v\}$, unde c reprezintă banda de conducție și v reprezintă banda de valență. Prima soluție este o stare de tip bonding ($\lambda_c = +1$), în timp ce a doua soluție este o stare de tip anti-bonding ($\lambda_v = -1$).

Pentru simplitate, vom presupune că orbitalii atomici ai vecinilor nu se supra-pun, adică setăm $s = 0$ și $E_0 = 0$, iar scala de energie a benzilor energetice este stabilită de amplitudinea de hopping γ_0 , obținută prin ajustarea ecuației (2.8a) la măsurătorile spectroscopice [21, 22, 23]. Amplitudinea de hopping a fost găsită a fi

$\gamma_0 = 2.8$ eV. Astfel, avem

$$E_{n\mathbf{k}} = \lambda_n \gamma_0 |g(\mathbf{k})|$$

$$= \lambda_n \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos^2 \left(k_x \frac{\sqrt{3}a_0}{2} \right) + 4 \cos \left(k_x \frac{\sqrt{3}a_0}{2} \right) \cos \left(\frac{3}{2} k_y a_0 \right)} \quad (2.8a)$$

$$C_{n\mathbf{k}}^A = A_{n\mathbf{k}} \quad (2.8b)$$

$$C_{n\mathbf{k}}^B = A_{n\mathbf{k}} B_{n\mathbf{k}} \quad (2.8c)$$

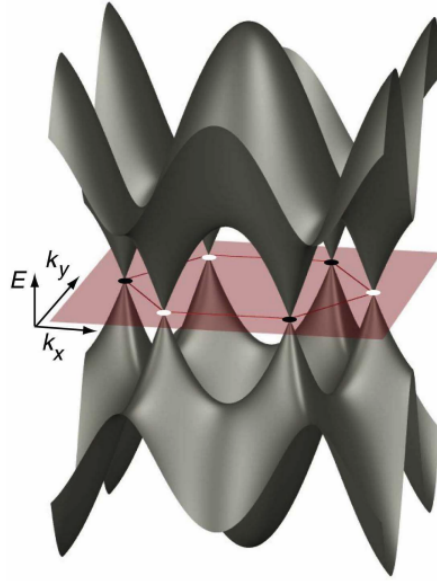


Figure 2.2: Spectrul tight-binding al grafenei, FBZ este ilustrată ca un hexagon. Ramura de sus este banda de conducție $E_{c\mathbf{k}}$ iar ramura de jos este banda de valență $E_{v\mathbf{k}}$. Adaptat din Ref. [24].

Unde $A_{n\mathbf{k}}$ și $B_{n\mathbf{k}}$ sunt

$$A_{n\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (2.9a)$$

$$B_{n\mathbf{k}} = \lambda_n \frac{g^*(\mathbf{k})}{|g(\mathbf{k})|} \quad (2.9b)$$

Fig. (2.2) arată energia benzii de valență $E_{v\mathbf{k}}$ și energia benzii de conducție $E_{c\mathbf{k}}$.

2.1.3 Derivarea Hamiltonianului Dirac-Weyl

Excitațiile de energie joasă sunt importante pentru proprietățile de transport, prin urmare suntem interesați de regiunea energetică din jurul energiei Fermi, adică $|E_{n\mathbf{k}}| \ll 1$ eV. Benzile de energie din jurul punctelor $K(K')$ satisfac aceste cerințe, așa că aproximăm matricea Hamiltonian în jurul acestor puncte în primul ordin al expansiunii Taylor. Știm din Ec. (2.6a) că $K = \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}, 0 \right)$ și din Ec. (2.6b) că

$K' = \left(-\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}, 0\right)$. Matricea Hamiltonian pentru un vector de undă fixat \mathbf{k} este

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_0 g(\mathbf{k}) \\ \gamma_0 g^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

Fie $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}}$. Din expansiunea Taylor de prim ordin avem

$$g(\mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}}) \approx \frac{3a_0}{2} \left(-\tilde{k}_x - i\tilde{k}_y\right) \quad (2.11)$$

Prin urmare, energia din jurul punctului \mathbf{K} este

$$E_{n\mathbf{K}+\tilde{\mathbf{k}}} = \lambda_n \hbar v_F^g \sqrt{\tilde{k}_x^2 + \tilde{k}_y^2} \quad (2.12)$$

Viteza Fermi este $v_F^g = \frac{\gamma_0 3a_0}{2\hbar} \approx 10^6$ m/s. Matricea Hamiltonian rezultată este

$$\mathcal{H}_{\mathbf{K}+\tilde{\mathbf{k}}} = \hbar v_F^g \begin{pmatrix} 0 & -\tilde{k}_x - i\tilde{k}_y \\ -\tilde{k}_x + i\tilde{k}_y & 0 \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

O analiză similară în jurul punctului \mathbf{K}' duce la energia

$$E_{n\mathbf{K}'+\tilde{\mathbf{k}}} = \lambda_n \hbar v_F^g \sqrt{\tilde{k}_x^2 + \tilde{k}_y^2} \quad (2.14)$$

și o matrice Hamiltonian de forma

$$\mathcal{H}_{\mathbf{K}'+\tilde{\mathbf{k}}} = \hbar v_F^g \begin{pmatrix} 0 & \tilde{k}_x - i\tilde{k}_y \\ \tilde{k}_x + i\tilde{k}_y & 0 \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

Expansiunea Taylor în prim ordin presupune că $|\tilde{\mathbf{k}}| \ll |\mathbf{K}| = |\mathbf{K}'| \approx 1/a_0$ și aceasta este numită limita continuă [20].

2.2 Silicena

2.2.1 Structura cristalografică

Silicene are structură cristalografică echivalentă cu a grafenei dar formată din atomi de siliciu. Ca și grafena, silicena are subrețele A și B, dar cu o deformare în afara planului. Subrețelele A și B sunt aranjate în două planuri verticale, separate printr-o distanță $d \approx 0.46 \text{ \AA}$ [42, 43]. Silicena este, de asemenea, interesantă datorită faptului că prezintă o interacțiune spin-orbită puternică. Acest cuplaj puternic spin-orbită, împreună cu geometria deformabilă a silicenei, induce în structura de benzi un gap nenul $2\Delta_{SO}$. Dacă se aplică un câmp electric extern în direcția verticală E_z , va apărea o diferență de potențial la nivelul site-urilor datorită asimetriei dintre cele două subrețele. Acest lucru duce la ajustabilitatea gap-ului de bandă al silicenei, permițând astfel distingerea între diferite faze, cum ar fi izolatorul topologic, metalul polarizat valley-spin sau izolatorul de bandă. Acest lucru face din silicena un candidat puternic pentru proiectarea tranzistorilor FET care funcționează la temperatura camerei [44, 45].

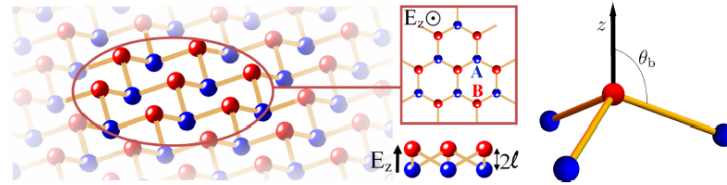


Figure 2.3: Stânga: Structura rețelei hexagonale deformate a silicenei. Atomii roșii constituie subrețeaua B, iar atomii albaștri constituie subrețeaua A. Dreapta: Unghiul de deformare θ_b care măsoară unghiul dintre axa z și legătura A-B. Adaptat din Ref. [26].

Celula unitate are vectorii primitivi [27]

$$\mathbf{a}_1 = a_0 \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (2.16a)$$

$$\mathbf{a}_2 = a_0 \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (2.16b)$$

Vectorii corespunzători ai rețelei reciproce sunt

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a_0} \left(1, \frac{\sqrt{3}}{3} \right) \quad (2.17a)$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a_0} \left(-1, \frac{\sqrt{3}}{3} \right) \quad (2.17b)$$

Vectorii care conectează vecinii cei mai apropiați sunt dați de

$$\mathbf{d}_1 = \frac{a_0}{\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, \cot \theta_b \right) \quad (2.18a)$$

$$\mathbf{d}_2 = \frac{a_0}{\sqrt{3}} \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, \cot \theta_b \right) \quad (2.18b)$$

$$\mathbf{d}_3 = \frac{a_0}{\sqrt{3}} (0, -1, \cot \theta_b) \quad (2.18c)$$

unde θ_b este unghiul dintre legătura Si-Si și direcția z normală la plan. De asemenea, a_0 este constanta de rețea, care este de 0.386 nm, conform calculelor first principles [29]. Datorită faptului că silicena are o rețea hexagonală, se pot defini în spațiul reciproc punctele Dirac K și K' de asemenea.

$$\mathbf{K} = \frac{1}{3}(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2) = \left(\frac{4\pi}{3a_0}, 0 \right) \quad (2.19a)$$

$$\mathbf{K}' = -\frac{1}{3}(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2) = \left(-\frac{4\pi}{3a_0}, 0 \right) \quad (2.19b)$$

2.2.2 Structura de bandă a silicenei

Orbitalii din stratul exterior ai siliciului sunt $3s, 3p_x, 3p_y, 3p_z$. Prin urmare, pentru a studia proprietățile de energie joasă ale silicenei [27] trebuie să ne bazăm pe baza ortogonalizată Löwdin $\{p_z^A, p_z^B, p_y^A, p_y^B, p_x^A, p_x^B, s^A, p_y^B, p_y^A, s^B\}$ unde A și B sunt două site-uri distincte în celula unitate deformabilă a silicenei. După o serie de transformări unitare, vectorii proprii din apropierea energiei Fermi sunt

$$\phi_1 = u_{11}p_z^A + u_{21}s^A + u_{31} \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(p_x^B - ip_y^B) \right] \quad (2.20a)$$

$$\phi_4 = u_{11}p_z^B - u_{21}s^B + u_{31} \left[-\frac{1}{\sqrt{2}}(p_x^A + ip_y^A) \right] \quad (2.20b)$$

Aproape de valea K , în baza $\{\phi_1, \phi_2\} \otimes \{\uparrow, \downarrow\} \equiv \{\phi_{1\uparrow}, \phi_{1\downarrow}, \phi_{4\uparrow}, \phi_{4\downarrow}\}$, Hamiltonianul este

$$H_{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} \Delta_\sigma & \hbar v_F^s(k_x - ik_y) & ia_0\lambda_{R2}(k_x - ik_y) & 0 \\ \hbar v_F^s(k_x + ik_y) & \Delta_\sigma & i\lambda_{R1} & -ia_0\lambda_{R2}(k_x - ik_y) \\ -ia_0\lambda_{R2}(k_x + ik_y) & -i\lambda_{R1} & -\Delta_\sigma & \hbar v_F^s(k_x - ik_y) \\ 0 & ia_0\lambda_{R2}(k_x + ik_y) & \hbar v_F^s(k_x + ik_y) & -\Delta_\sigma \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

unde $\Delta_\sigma = \sigma\lambda_{SO} - eE_z$. Următoarea transformare unitară

$$\psi_1 = \frac{\hbar v_F^s\phi_{4\uparrow} + ia_0\lambda_{R2}\phi_{1\downarrow}}{\hbar v_F^{s'}} \quad (2.22a)$$

$$\psi_2 = \frac{\hbar v_F^s\phi_{1\downarrow} + ia_0\lambda_{R2}\phi_{4\uparrow}}{\hbar v_F^{s'}} \quad (2.22b)$$

cu $\hbar v_F^{s'} = \hbar v_F^s (1 + \eta^2)^{\frac{1}{2}}$ și $\eta = a_0 \lambda_{R2} / \hbar v_F^s \approx 0.5 \times 10^{-3}$. Definim o nouă bază $\Psi_\sigma = \{\phi_{1\uparrow}, \psi_1, \psi_2, \phi_{4\downarrow}\}$ care transformă Hamiltonianul din Ec. (2.21) astfel

$$H_{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} \Delta_\sigma & \hbar v_F^{s'}(k_x - ik_y) & 0 & 0 \\ \hbar v_F^{s'}(k_x + ik_y) & \Delta_\sigma - 2(elE_x)^2 & -2ielE_x c & 0 \\ 0 & 2ielE_x c & -\Delta_\sigma - 2(elE_x)^2 & 0 \\ 0 & 0 & \hbar v_F^{s'}(k_x + ik_y) & -\Delta_\sigma \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

unde $c = \eta / (1 + \eta^2)^{1/2}$. Datorită transformărilor efectuate mai sus, cele două stări de spin au fost decuplate. Electronii din silicenă pot fi descriși ca particule ce au un gap dependent de spin și vale. Folosind baza $\Psi_{\xi\sigma} = \{\psi_{1,\xi\sigma}, \psi_{2,\xi\sigma}\}$ Hamiltonianul devine

$$H_{\xi\sigma} = \begin{pmatrix} \Delta_{\xi\sigma} & \hbar v_F^s \xi(k_x - ik_y) \\ \hbar v_F^s \xi(k_x + ik_y) & \Delta_{\xi\sigma} \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

unde $\sigma = \pm 1$ este spinul. Gapul este

$$2|\Delta_{\xi\sigma}| = 2|\xi\sigma\lambda_{SO} - elE_z| \quad (2.25)$$

Astfel, spectrul de energie obținut este

$$E_{\xi\sigma}^\lambda(\mathbf{k}) = \lambda \sqrt{(\hbar v_F^s)^2 |\mathbf{k}| + \Delta_{\xi\sigma}^2} \quad (2.26)$$

Interacțiunile Coulomb neecranate în sisteme cu câteva straturi

Ecuția Poisson pentru o sarcină punctiformă fixă, cu sarcina $-e$ și locația $\mathbf{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ [32] este

$$\nabla \cdot \kappa(z) \nabla \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = \frac{e}{\epsilon_0} \delta(x - x_1) \delta(y - y_1) \delta(z - z_1) \quad (3.1)$$

unde $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_{\parallel}, z)$. Aici, $\kappa(z)$ este funcția dielectrică. Presupunem o invarianță translatională de-a lungul planului $\mathbf{r}_{\parallel} = (x, y)$ și $\Phi(\mathbf{r}_{\parallel}, z \rightarrow \pm\infty, \mathbf{r}_1) = 0$. Prin urmare, soluția ia forma

$$\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}_{1,\parallel})} \phi(\mathbf{q}; z, z_1) \quad (3.2)$$

cu $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$. Substituind Ec. (3.2) în Ec. (3.1) și aplicând transformata Fourier în planul \mathbf{r}_{\parallel} , obținem

$$\frac{d}{dz} \left[\kappa(z) \frac{d\phi(\mathbf{q}; z, z_1)}{dz} \right] - q^2 \kappa(z) \phi(\mathbf{q}; z, z_1) = \frac{e}{\epsilon_0} \delta(z - z_1) \quad (3.3)$$

unde $q = |\mathbf{q}|$. Avem pentru un sistem cu două straturi

$$\phi(\mathbf{q}, z, 0) = \begin{cases} A_1^l e^{qz}, & -\infty < z < 0 \\ A_2^l e^{qz} + A_3^l e^{-qz}, & 0 < z < d \\ A_4^l e^{-qz}, & d < z < \infty \end{cases} \quad (3.4)$$

și pentru un sistem cu trei straturi

$$\phi(\mathbf{q}, z, 0) = \begin{cases} A_1^l e^{qz} & -\infty < z < 0 \\ A_2^l e^{qz} + A_3^l e^{-qz} & 0 < z < d \\ A_4^l e^{qz} + A_5^l e^{-qz} & d < z < 2d \\ A_6^l e^{-qz} & 2d < z < \infty \end{cases} \quad (3.5)$$

unde l reprezintă stratul în care se află sarcina punctiformă de electron. Pentru a găsi soluția $\phi(\mathbf{q}; z, z_1)$, folosim următoarele condiții de trecere la interfața $z = z_0$ între cele două medii [32]

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{q}; z_0^+, z_1) &= \phi(\mathbf{q}; z_0^-, z_1) \\ \kappa_n \frac{d\phi(\mathbf{q}; z, z_1)}{dz} \Big|_{z=z_0^+} &= \kappa_{n-1} \frac{d\phi(\mathbf{q}; z, z_1)}{dz} \Big|_{z=z_0^-} + \rho \end{aligned} \quad (3.6)$$

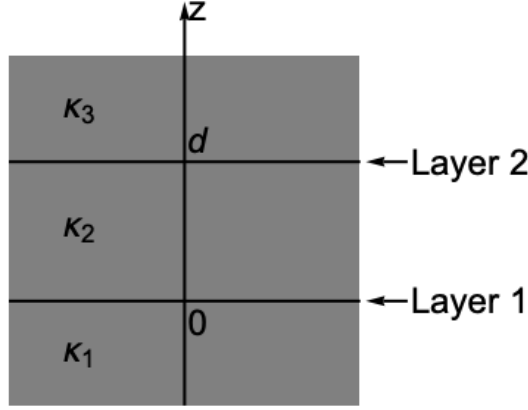


Figure 3.1: Two layer heterostructure

unde ρ este densitatea de sarcină la acea interfață. Tensorul de interacțiune Coulombiană poate fi determinat din următoarea ecuație [33, 80, 81]

$$v_{ij}(\mathbf{q}) = -e \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz_1 \phi(\mathbf{q}; z, z_1) |\chi_i(z)|^2 |\chi_j(z_1)|^2 \quad (3.7)$$

unde $i, j \in 1, n$ sunt indicii straturilor, iar $\chi_i(z)/\chi_j(z)$ sunt funcțiile de undă, care descriu localizarea electronilor pe axa z . Datorită localizării excelente a electronilor în grafen și silicene, aceste funcții au o formă delta Dirac [33, 34, 35]:

$$|\chi_i(z)|^2 = \delta(z - (i - 1)d), \quad i \in 1, n \quad (3.8)$$

Introducând Ec. (3.8) în Ec. (3.7) și integrând, obținem următoarele ecuații pentru a determina elementele tensorului de interacțiune Coulombiană în spațiul momentului:

$$v_{ij}(\mathbf{q}) = -e\phi(\mathbf{q}; (i - 1)d, (j - 1)d) \quad (3.9)$$

3.1 Interacțiunile Coulomb neecranate în sistemele cu două straturi

Structura sistemului cu două straturi cu un fundal dielectric neomogen este prezentată în Fig. 3.1. Funcția dielectrică este

$$\kappa(z) = \begin{cases} \kappa_1, & -\infty < z < 0 \\ \kappa_2, & 0 < z < d \\ \kappa_3, & d < z < \infty \end{cases} \quad (3.10)$$

Rezolvând Ec. (3.4) pentru fiecare dintre cele două straturi, obținem

$$v_{11}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi e^2}{q} \frac{\kappa_2 \cosh(qd) + \kappa_3 \sinh(qd)}{\kappa_2(\kappa_1 + \kappa_3) \cosh(qd) + (\kappa_2^2 + \kappa_1\kappa_3) \sinh(qd)} \quad (3.11a)$$

$$v_{22}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi e^2}{q} \frac{[\kappa_2 \cosh(qd) + \kappa_1 \sinh(qd)]}{\kappa_2(\kappa_1 + \kappa_3) \cosh(qd) + (\kappa_2^2 + \kappa_1\kappa_3) \sinh(qd)} \quad (3.11b)$$

$$v_{12}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi e^2}{q} \frac{\kappa_2}{\kappa_2(\kappa_1 + \kappa_3) \cosh(qd) + (\kappa_2^2 + \kappa_1\kappa_3) \sinh(qd)} \quad (3.11c)$$

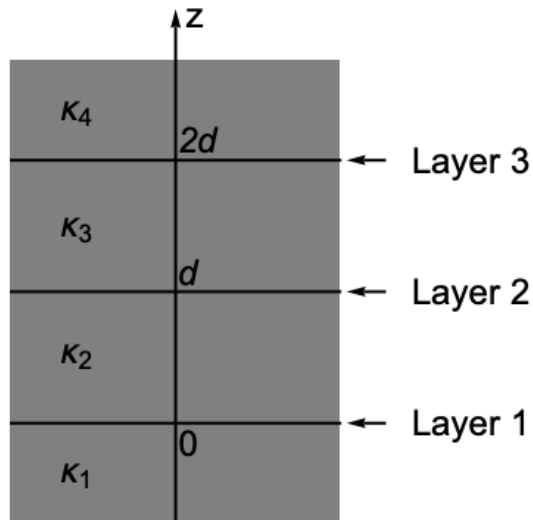


Figure 3.2: Three layer heterostructure

Rezultate similare sunt prezentate în Ref. [74].

3.2 Interacțiunile Coulomb neecranate în sistemele cu trei straturi

Structura sistemului cu trei straturi cu un fundal dielectric neomogen este prezentată în Fig. 3.2. Constanta dielectrică este

$$\kappa(z) = \begin{cases} \kappa_1 & -\infty < z < 0 \\ \kappa_2 & 0 < z < d \\ \kappa_3 & d < z < 2d \\ \kappa_4 & 2d < z < \infty \end{cases} \quad (3.12)$$

Rezolvând Ec. (3.5) pentru fiecare dintre cele trei straturi, obținem

$$v_{11}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi e^2}{q} \frac{[(\kappa_2 + \kappa_3)(\kappa_3 - \kappa_4) + 2\kappa_3(\kappa_2 - \kappa_3)e^{2qd} + (\kappa_2 + \kappa_3)(\kappa_3 + \kappa_4)e^{4qd}]}{M(qd)} \quad (3.13a)$$

$$v_{22}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi e^2}{q} \frac{4e^{2qd} [\kappa_1 \cosh(qd) + \kappa_2 \sinh(qd)] [\kappa_3 \cosh(qd) + \kappa_4 \sinh(qd)]}{M(qd)} \quad (3.13b)$$

$$v_{33}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi e^2}{q} \frac{[(\kappa_2 + \kappa_3)(\kappa_2 - \kappa_1) + 2\kappa_2(\kappa_3 - \kappa_2)e^{2qd} + (\kappa_1 + \kappa_2)(\kappa_2 + \kappa_3)e^{4qd}]}{M(qd)}$$

$$v_{12}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi e^2}{q} \frac{4\kappa_2 e^{2qd} [\kappa_3 \cosh(qd) + \kappa_4 \sinh(qd)]}{M(qd)} \quad (3.13c)$$

$$v_{13}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi e^2}{q} \frac{4\kappa_2 \kappa_3 e^{2qd}}{M(qd)} \quad (3.13d)$$

$$v_{32}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi e^2}{q} \frac{4\kappa_3 e^{2qd} [\kappa_2 \cosh(qd) + \kappa_1 \sinh(qd)]}{M(qd)} \quad (3.13e)$$

Rezultate similare sunt prezentate în Ref. [85].

Plasmoni și funcția de atenuare într-o structură cu două straturi silicenă-grafenă la temperatura zero ¹

4.1 Motivație

În această lucrare, realizăm o investigație sistematică a comportamentului funcției de atenuare în sistemele cu două straturi de silicenă-grafenă (DLSG) cu fundaluri omogene și neomogene. Știm că, pentru sistemele cu un singur strat, funcția de atenuare este legată de $-\text{Im } \epsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega)$. În cazul sistemelor cu două straturi, această funcție își schimbă semnul [69] și nu poate fi interpretată ca o densitate spectrală pozitiv definită [78]. Definiția noastră a funcției de atenuare va fi $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\mathbf{q}, \omega)]$ (partea imaginară negativă a urmei matricei de polarizare retardată) [78, 79].

4.2 Cadru teoretic

În această lucrare, investigăm o heterostructură formată dintr-un strat de silicenă și un strat de grafenă depuse pe substraturi dielectrice, așa cum este ilustrat în Fig. 4.1.

Ecuția Dyson a matricei de polarizare în aproximarea RPA [80, 81, 82] pentru $\omega > 0$ este

$$\hat{\Pi}^R(\mathbf{q}, \omega) = \hat{\Pi}^{0,R}(\mathbf{q}, \omega) + \hat{\Pi}^{0,R}(\mathbf{q}, \omega) \hat{V}(\mathbf{q}) \hat{\Pi}^R(\mathbf{q}, \omega) \quad (4.1)$$

unde $\hat{\Pi}^{0,R}(\mathbf{q}, \omega) = [\delta_{ij} \Pi_i^0(\mathbf{q}, \omega)]$, $\hat{V}(\mathbf{q}) = [v_{ij}(\mathbf{q})]$ și obținem

$$\hat{\Pi}^R(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} \begin{pmatrix} \Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega) \epsilon_2(\mathbf{q}, \omega) & v_{12}(\mathbf{q}) \Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega) \Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega) \\ v_{21}(\mathbf{q}) \Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega) \Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega) & \Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega) \epsilon_1(\mathbf{q}, \omega) \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

Funcția dielectrică dinamică a sistemului DLSG este [80, 81]

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = \epsilon_1(\mathbf{q}, \omega) \epsilon_2(\mathbf{q}, \omega) - v_{12}(\mathbf{q}) v_{21}(\mathbf{q}) \Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega) \Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega) \quad (4.3)$$

Funcția dielectrică dinamică a stratului i este dată de [80, 81]

$$\epsilon_i(\mathbf{q}, \omega) = 1 - v_{ii}(\mathbf{q}) \Pi_i^0(\mathbf{q}, \omega) \quad (4.4)$$

¹C. Caraiiani, Plasmons and loss function in a double-layer silicene-graphene heterostructure at zero-temperature, Physics Letters A 522, 129792 (2024) doi.org/10.1016/j.physleta.2024.129792

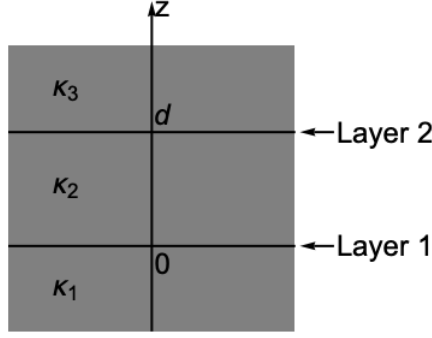


Figure 4.1: A double layer silicene-graphene (DLSG) heterostructure

Aici, $v_{ii}(\mathbf{q})$ și $v_{ij}(\mathbf{q})$ sunt elementele matricei Coulomb intra- și interstrat [74]

$$v_{ij}(\mathbf{q}) = \frac{2\pi e^2}{q} f_{ij}(\mathbf{q}) \quad (4.5)$$

with

$$f_{11}(\mathbf{q}) = \frac{2[\kappa_2 \cosh(qd) + \kappa_3 \sinh(qd)]}{\kappa_2(\kappa_1 + \kappa_3) \cosh(qd) + (\kappa_2^2 + \kappa_1\kappa_3) \sinh(qd)} \quad (4.6a)$$

$$f_{22}(\mathbf{q}) = \frac{2[\kappa_2 \cosh(qd) + \kappa_1 \sinh(qd)]}{\kappa_2(\kappa_1 + \kappa_3) \cosh(qd) + (\kappa_2^2 + \kappa_1\kappa_3) \sinh(qd)} \quad (4.6b)$$

$$f_{12}(\mathbf{q}) = \frac{2\kappa_2}{\kappa_2(\kappa_1 + \kappa_3) \cosh(qd) + (\kappa_2^2 + \kappa_1\kappa_3) \sinh(qd)} \quad (4.6c)$$

unde $q = |\mathbf{q}|$, iar d este distanța interstrat. Datorită simetriei tensorului Coulomb, avem $v_{12}(\mathbf{q}) = v_{21}(\mathbf{q})$. În plus, $\Pi_i^0(\mathbf{q}, \omega)$ reprezintă funcția de polarizare a stratului i . Prin urmare, funcția de polarizare a grafenei [55] este dată de

$$\Pi_g^0(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{g_s g_v}{2} \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{\lambda, \lambda' = \pm 1} \int_{R^2} \frac{dk_x dk_y}{4\pi^2} \left[1 + \lambda \lambda' \frac{(\hbar v_F^g)^2 \mathbf{k}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E^{\lambda'}(\mathbf{k}) E^\lambda(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right] \frac{n_F[E^\lambda(\mathbf{k})] - n_F[E^{\lambda'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})]}{\hbar\omega + E^\lambda(\mathbf{k}) - E^{\lambda'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\delta} \quad (4.7)$$

unde g_s (g_v) ține cont de degenerarea de spin (valley) și $g_s = g_v = 2$. Energia este $E^\lambda(\mathbf{k}) = \lambda \hbar v_F^g |\mathbf{k}|$ cu $\lambda = \pm 1$. Energia Fermi a grafenei este E_F^g și viteza Fermi a grafenei este v_F^g . În regimul $\hbar v_F^g q \ll \hbar\omega \ll E_F^g$, Ec. (4.7) se reduce [55] la

$$\Pi_g^0(\mathbf{q}, \omega) \approx \frac{E_F^g q^2}{\pi \hbar^2 \omega^2} \quad (4.8)$$

Funcția de polarizare a siliicenei este [60, 68]

$$\Pi_s^0(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{2} \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{\substack{\sigma, \xi, \\ \lambda, \lambda' = \pm 1}} \int_{R^2} \frac{dk_x dk_y}{4\pi^2} \left[1 + \lambda \lambda' \frac{(\hbar v_F^s)^2 \mathbf{k}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \Delta_{\sigma\xi}^2}{E_{\sigma\xi}^\lambda(\mathbf{k}) E_{\sigma\xi}^{\lambda'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right] \frac{n_F(E_{\sigma\xi}^\lambda(\mathbf{k})) - n_F(E_{\sigma\xi}^{\lambda'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\hbar\omega + E_{\sigma\xi}^{\lambda'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_{\sigma\xi}^\lambda(\mathbf{k}) + i\delta} \quad (4.9)$$

unde $\xi = \pm 1$ distinge între văile K (K') și σ este spinul electronului. De asemenea $\Delta_{\sigma\xi} = |\sigma\xi\Delta_{SO} - \Delta_z|$ unde Δ_{SO} este cuplajul spin-orbită și Δ_z este diferența de

potențial onsite cauzată de asimetria între subrețele A și B atunci când se aplică un câmp electric perpendicular. Spectrul energetic este $E_{\sigma\xi}^\lambda(\mathbf{k}) = \lambda\sqrt{(\hbar v_F^s)^2|\mathbf{k}|^2 + \Delta_{\sigma\xi}^2}$ unde $\lambda = \pm 1$. De acum înainte, presupunem că $\Delta_{SO} = 3.9$ meV și $\Delta_z = 0.75\Delta_{SO}$. Energia Fermi a silicenei este E_F^s iar viteza Fermi a silicenei este v_F^s . În regimul $\hbar v_F^s q \ll \hbar\omega \ll E_F^s$, Ec.(4.9) se reduce la [68]

$$\Pi_s^0(\mathbf{q}, \omega) \approx \sum_{\xi, \sigma = \pm 1} \frac{E_F^s}{4\pi\hbar^2} \frac{q^2}{\omega^2} \left[1 - \left(\frac{\Delta_{\xi, \sigma}}{E_F^s} \right)^2 \right] \Theta(E_F^s - \Delta_{\xi, \sigma}) \quad (4.10)$$

Densitatea de purtători de sarcină n_e^s în silicena este legată de E_F^s prin următoarea formulă [87]

$$E_F^s = \sqrt{\pi(\hbar v_F^s)^2 n_e^s + \frac{1}{2}(\Delta_{>}^2 + \Delta_{<}^2)} \quad (4.11)$$

where $\Delta_{>} = |\Delta_{SO} + \Delta_z|$ and $\Delta_{<} = |\Delta_{SO} - \Delta_z|$.

În această lucrare, ne interesează studiul puterii spectrale plasmonice. Primul pas este de a determina ramurile plasmonice din zerourile funcției dielectrice dinamice a sistemului DLSG cu ajutorul Ec. (4.3)

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega_{pl} - i\gamma_{pl}) = 0 \quad (4.12)$$

Ramura plasmonică este dată de $\omega_{pl} \equiv \omega_{pl}(\mathbf{q})$ iar rata de amortizare este dată de $\gamma_{pl} \equiv \gamma_{pl}(\mathbf{q})$. Lucrăm sub presupunerea de atenuare slabă ($\gamma_{pl} \ll \omega_{pl}$) ceea ce va însemna $\gamma_{pl}/\omega_{pl} \leq 0.1 \ll 1$. Prin urmare, ramurile plasmonice și ratele de amortizare vor fi determinate cu ajutorul următoarelor Ec. [80, 81]

$$\text{Re } \epsilon(\mathbf{q}, \omega_{pl}) = 0 \quad (4.13)$$

și

$$\gamma_{pl} = \text{Im } \epsilon(\mathbf{q}, \omega_{pl}) \left[\frac{\partial \text{Re } \epsilon(\mathbf{q}, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\omega_{pl}} \right]^{-1} \quad (4.14)$$

Al doilea pas este să studiem comportamentul funcției de atenuare deoarece aceasta oferă puterea spectrală totală asociată cu ramurile plasmonice [78, 79]. Expresia sa este

$$-\text{Im } \text{Tr}[\hat{\Pi}^R(\mathbf{q}, \omega)] = -\text{Im} \left[\frac{\Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega)\epsilon_2(\mathbf{q}, \omega) + \Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega)\epsilon_1(\mathbf{q}, \omega)}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} \right] \quad (4.15)$$

Când funcția de atenuare este restricționată la partea neamortizată a unei ramuri plasmonice, formula ei se reduce la

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\pi} \text{Im } \text{Tr}[\hat{\Pi}^R(\mathbf{q}, \omega)] \Big|_{pl} &= \text{Re} \left[\Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega)\epsilon_2(\mathbf{q}, \omega) + \Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega)\epsilon_1(\mathbf{q}, \omega) \right] \\ &\times \left[\frac{\partial \text{Re } \epsilon(\mathbf{q}, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\omega_{pl}} \right]^{-1} \delta(\omega - \omega_{pl}) \end{aligned} \quad (4.16)$$

De acum înainte, stabilim $\Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega) \equiv \Pi_s^0(\mathbf{q}, \omega)$ și $\Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega) \equiv \Pi_g^0(\mathbf{q}, \omega)$ și vom folosi următoarele variabile adimensionale $\bar{q} \equiv \hbar v_F^g q / E_F^g$, $\bar{\omega} \equiv \hbar \omega / E_F^g$, $\bar{\Delta}_{\xi, \sigma} \equiv \Delta_{\xi, \sigma} / E_F^s$, $\bar{d} \equiv (E_F^g / \hbar v_F^g) d$, $\bar{\gamma}_{pl} \equiv \hbar \gamma_{pl} / E_F^g$ and $\alpha = e^2 / 4\pi\epsilon_0 \hbar v_F^g \approx 2.2$. Stabilim că $E_F^s = \gamma_1 E_F^g$ unde γ_1 este un factor de proporționalitate și de asemenea folosim relația $v_F^s = \frac{1}{2} v_F^g$ [60, 68].

4.3 Rezultate

În subsecțiunile următoare prezentăm rezultatele numerice și analitice pentru frecvența oscilațiilor plasmonice și pentru puterea spectrală plasmonică furnizată de funcția de atenuare. Realizăm acest lucru calculând rădăcinile Ec. (4.13). Obținem soluții de frecvență mai mare și de frecvență mai mică care corespund oscilațiilor în fază și în afara fazei ale densităților de purtători de sarcină n_e^s și n_e^g în straturile de silicenă și grafenă ale sistemului. Acestea sunt numite plasmoni optici (OP) și plasmoni acustici (AC).

Primul rezultat nou al lucrării este comportamentul ramurilor AC și OP. Spre deosebire de rezultatele anterioare pentru sistemele cu două straturi [68, 69, 70, 71, 74, 75], unde ramurile AC și OP sunt întotdeauna mărginite inferior de linia $\bar{\omega} = \bar{q}$ (cu rescalarea adecvată a variabilelor), în sistemul DLSG ramura AC traversează linia $\bar{\omega} = \bar{q}$ și tinde spre linia $\bar{\omega} = \frac{1}{2}\bar{q}$ line. Motivul din spatele acestui comportament este că contribuțiile inter-benzilor pentru silicenă vin din regiunea $\omega > v_F^s q$. Dar știm că $v_F^s = \frac{1}{2} v_F^g$, ceea ce, după rescalare, duce la $\bar{\omega} > \frac{1}{2}\bar{q}$. Ramura AC, deși este mărginită inferior de linia $\bar{\omega} = \bar{q}$ are contribuții din stările inter-benzilor silicenie și din stările inter-benzilor grafenei. După ce trece această linie și tinde spre linia $\bar{\omega} = \frac{1}{2}\bar{q}$ contribuțiile vor veni din stările inter-benzilor silicenei și din stările intra-benzilor grafenei. Pentru ramura OP, care este întotdeauna mărginită inferior de linia $\bar{\omega} = \bar{q}$ contribuțiile vin doar din stările inter-benzilor silicenei și din stările inter-benzilor grafenei.

Al doilea rezultat nou al acestei lucrări este comportamentul funcției de pierdere în limita $\bar{q} \rightarrow 0$. Pentru plasmonul AC, funcția de atenuare se comportă ca $-\text{Im Tr}[\Pi^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0))] \sim \bar{q}$ în timp ce pentru plasmonul OP se comportă ca $-\text{Im Tr}[\Pi^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0))] \sim \bar{q}^3$. Evaluările numerice în limita lungimilor de undă lungi, relativ la valorile alese pentru parametrii din lucrare, arată că plasmonul AC are mai multă putere spectrală decât plasmonul OP

4.3.1 Cazul omogen

În cazul omogen, fie $\kappa_1 = \kappa_2 = \kappa_3$. Alegem $\kappa_1 = \kappa_{\text{SiO}_2} = 3.8$. Fig. 4.2 arată frecvențele plasmonilor pentru diferite distanțe interstrat d și densități de purtători de sarcină n_e^s în stratul de silicenă. Deoarece lucrăm sub condiția de atenuare slabă, stabilim o valoare de limitare de 0.1, adică $\bar{\gamma}_{pl} / \bar{\omega}_{pl} \leq 0.1$. Prin urmare, obținem pentru $\bar{\gamma}_{pl} / \bar{\omega}_{pl} \leq 0.1$ frecvențele fizice ale ramurii plasmonice, în timp ce pentru $\bar{\gamma}_{pl} / \bar{\omega}_{pl} > 0.1$ obținem frecvențele nefizice ale ramurii plasmonice.

Figs. 4.2(a) - (b) ilustrează două efecte principale. Primul este efectul pe care

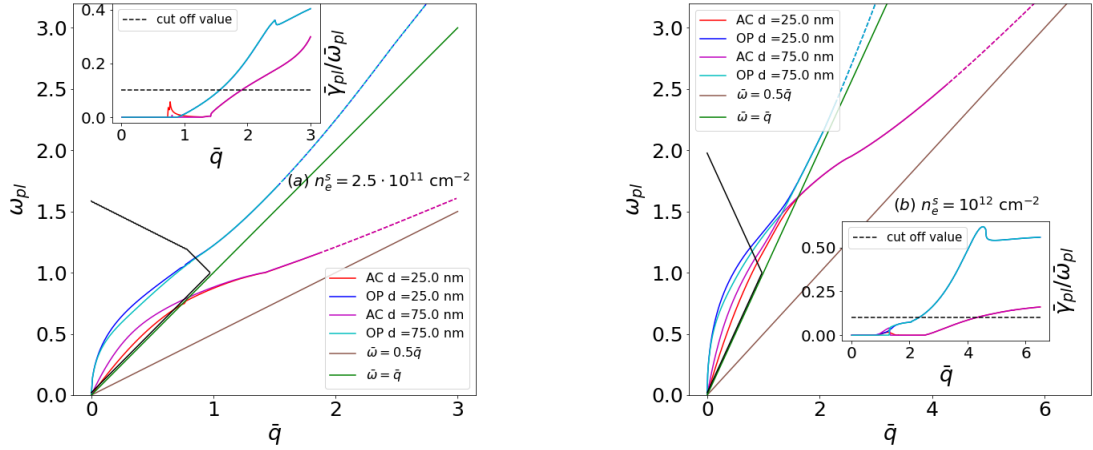


Figure 4.2: Frecvența plasmonilor AC și OP în sistemul DLSG cu fundal omogen pentru o densitate fixă de purtători în stratul de grafenă $n_e^g = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, variind distanțele interstrat $d = 25 \text{ nm}$, $d = 75 \text{ nm}$ și variind densitatea de purtători în stratul de silicică (a) $n_e^s = 2.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (b) $n_e^s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Inseturile din Fig. 4.2(a) - (b) afișează raportul $\bar{\gamma}_{pl}/\bar{\omega}_{pl}$ care cuantifică frecvențele fizice ale ramurii plasmonice (curba solidă) și frecvențele nefizice ale ramurii plasmonice (curba punctată) pentru o valoare de limitare fixă. Curba neagră solidă delimitează regiunea în care $\text{Im } \epsilon(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}) = 0$.

dezechilibrul în densitățile de purtători îl are asupra ramurilor plasmonice. Se poate observa că schimbarea densității în stratul de silicică duce la o creștere a frecvenței plasmonilor AC și OP pe măsură ce trecem de la $n_e^s = 2.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ la $n_e^s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Al doilea efect este legat de creșterea (scăderea) frecvenței plasmonilor AC (OP) neamortizați pe măsură ce creștem distanța interstrat d pentru fiecare densitate n_e^s fixată.

Exprimările analitice de ordinul principal în $\bar{q} \rightarrow 0$ pentru plasmoni $\bar{\omega}_{ac}(\bar{q})$ (AC) și pentru $\bar{\omega}_{op}(\bar{q})$ (OP) sunt obținute prin inserarea Ec. (4.8), Ec. (4.10) în Ec. (4.13) și găsirea rădăcinilor ecuației rezultate. Astfel, obținem

$$\bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0) \approx \left(\frac{4\bar{d}\alpha\gamma_1 \sum_{\xi,\sigma=\pm 1} g(\bar{\Delta}_{\xi,\sigma})}{\left[4 + \gamma_1 \sum_{\xi,\sigma=\pm 1} g(\bar{\Delta}_{\xi,\sigma})\right] \kappa_1} \right)^{\frac{1}{2}} \bar{q} \quad (4.17a)$$

$$\bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0) \approx \left(\frac{\left[4 + \gamma_1 \sum_{\xi,\sigma=\pm 1} g(\bar{\Delta}_{\xi,\sigma})\right] \alpha}{2\kappa_1} \bar{q} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.17b)$$

unde $g(\bar{\Delta}_{\xi,\sigma}) = (1 - \bar{\Delta}_{\xi,\sigma}^2) \Theta(1 - \bar{\Delta}_{\xi,\sigma})$. Deși $\bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0) \sim \bar{q}$ și $\bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0) \sim \sqrt{\bar{q}}$ au o dependență similară de \bar{q} față de cele prezentate în lucrările [68, 69, 74], există și unele diferențe. Într-un sistem DLSS [68], $\bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0)$ afișează o dependență similară față de $\bar{\Delta}_{\xi,\sigma}$ ca în sistemul nostru. Diferența dintre un sistem DLSS și sistemul nostru derivă din faptul că $\bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0)$ afișează o dependență mai complicată față

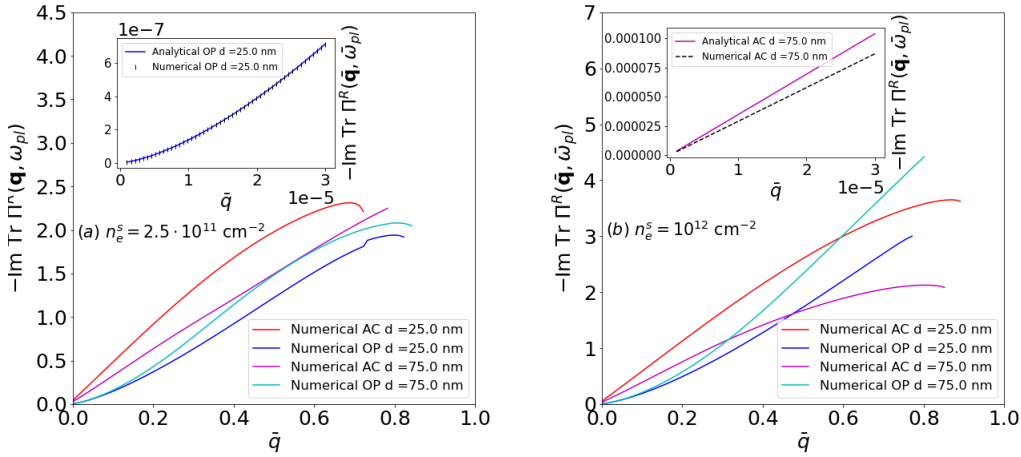


Figure 4.3: $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}_{pl}(\bar{q}))]$ al plasmonilor AC și OP neamortizați în sistemul DLSG cu fundal omogen pentru o densitate fixă de purtători în stratul de grafenă $n_e^g = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, variind distanțele interstrat $d = 25 \text{ nm}$, $d = 75 \text{ nm}$ și variind densitatea de purtători în stratul de silicenă (a) $n_e^s = 2.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (b) $n_e^s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Inseturile din Fig. 4.3(a) - (b) afișează evaluarea numerică a Ec. (4.16) în limita $\bar{q} \rightarrow 0$ comparativ cu formulele analitice din Ec. (4.19a) – (4.19b).

de $\bar{\Delta}_{\xi,\sigma}$ decât în sistemul DLSS. Aceasta se datorează prezenței stratului de grafenă în sistemul nostru. Dependența de densitățile de purtători este codificată în factorul de proporționalitate γ_1 . Deoarece $E_F^s = \gamma_1 E_F^g$ și bazându-ne pe Ec. (4.11) și pe faptul că $E_F^g = \hbar v_F^g \sqrt{\pi n_e^g}$, observăm că

$$\gamma_1 = \frac{1}{\hbar v_F^g} \sqrt{\frac{\pi (\hbar v_F^s)^2 n_e^s + \Delta_{SO}^2 + \Delta_z^2}{\pi n_e^g}} \quad (4.18)$$

Aceasta duce la o dependență mai complicată de densitățile de purtători n_e^s și n_e^g decât în cazul DLG [69] și BLG-BLG [74], pentru care formula dimensională are forma $\omega_{ac}^2(q \rightarrow 0) \sim (\sqrt{n_{e,1}} + \sqrt{n_{e,2}})/\sqrt{n_{e,1}}\sqrt{n_{e,2}}$ și $\omega_{op}^2(q \rightarrow 0) \sim (\sqrt{n_{e,1}} + \sqrt{n_{e,2}})$. Aici, $n_{e,1}$ și $n_{e,2}$ sunt densitățile stratului întâi și celui de-al doilea.

Expresia analitică pentru funcțiile de atenuare de ordinul principal în $\bar{q} \rightarrow 0$ este obținută prin introducerea Ecuației (4.8), Ec. (4.10), Ec. (4.17a) pentru plasmonul AC și Ec. (4.17b) pentru plasmonul OP în Ec. (4.16).

$$-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega})] \Big|_{\bar{\omega}=\bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0)} \approx \frac{\pi \kappa_1}{2d} \bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0) \quad (4.19a)$$

$$-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega})] \Big|_{\bar{\omega}=\bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0)} \approx \frac{\pi(16 + \gamma_1^2 [\sum_{\xi,\sigma=\pm 1} g(\bar{\Delta}_{\xi,\sigma})]^2) \kappa_1}{2[4 + \gamma_1 \sum_{\xi,\sigma=\pm 1} g(\bar{\Delta}_{\xi,\sigma})]^2} \times \bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0) \bar{q} \quad (4.19b)$$

Putem observa că funcția de atenuare restrânsă la plasmonul AC neamortizat se comportă ca $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0))] \sim \bar{q}$, în timp ce atunci când este restrânsă la plasmonul OP neamortizat, afișează un comportament $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0))] \sim \bar{q}^{\frac{3}{2}}$. Din evaluarea numerică a Ec. (4.19a)-(4.19b) în raport cu valorile alese pentru parametrii prezentați în lucrare, putem observa că plasmonul AC neamortizat are o putere spectrală mai mare decât plasmonul OP neamortizat în limita $\bar{q} \rightarrow 0$.

Fig. 4.3(a)-(b) ilustrează comportamentul funcției de atenuare din Ec. (4.16) restrânsă la plasmonii AC și OP neamortizati pentru diferite distanțe interstrat d și densități de purtători în stratul de silicenă. Se poate observa că pentru o distanță interstrat fixă $d = 25$ nm, schimbarea densității în stratul de silicenă, pe măsură ce trecem de la $n_e^s = 2.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ la $n_e^s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, nu schimbă faptul că puterea spectrală plasmonică a plasmonului AC neamortizat domină asupra celei a plasmonului OP neamortizat. Însă pentru $d = 75$ nm putem observa că această dominanță începe să dispară pe măsură ce creștem n_e^s . În acest caz, există un punct de trecere \bar{q}_s astfel încât pentru $\bar{q} < \bar{q}_s$ puterea spectrală plasmonică a plasmonului AC neamortizat domină asupra celei a plasmonului OP neamortizat. Pentru $\bar{q} > \bar{q}_s$ putem observa că rolurile se inversează și puterea spectrală a plasmonului OP neamortizat începe să domine asupra celei a plasmonului AC neamortizat. Pentru $n_e^s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, acest lucru se întâmplă la aproximativ $\bar{q}_s \approx 0.32$. Inseturile din Fig. 4.3(a)-(b) ilustrează comparația evaluării numerice a $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}_{pl}(\bar{q}))]$ din Ec. (4.16) față de expresia analitică din Ec. (4.19a)-(4.19b). Insetul din Fig. 4.3 (a) arată o concordanță excelentă între evaluarea numerică și cea analitică pentru plasmonul OP, în timp ce insetul din Fig. 4.3 (b) arată o concordanță aproape bună între comparația numerică și cea analitică pentru plasmonul AC.

Fig. 4.4(a)-(b) ilustrează plasmonii amortizati, care corespund unui vârf lărgit în funcția de atenuare. Pentru lărgiri mari, plasmonul devine supra-amortizat și nu

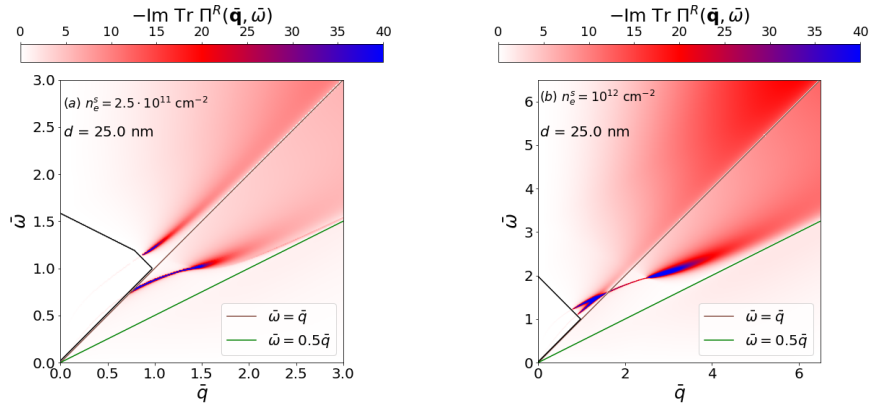


Figure 4.4: $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega})]$ în planul $(\bar{q}, \bar{\omega})$ pentru sistemul DLSG cu fundal omogen, pentru o densitate fixă de purtători în stratul de grafenă $n_e^g = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, distanță interstrat fixă $d = 25$ nm și densitate variabilă de purtători în stratul de silicenă (a) $n_e^s = 2.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (b) $n_e^s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Curba neagră solidă delimitează regiunea în care $\text{Im } \epsilon(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}) = 0$.

există un vârf în funcția de atenuare. O caracteristică interesantă pe care o observăm este că, pe măsură ce plasmonul AC părăsește limita (curba neagră solidă) a zonei în care $\text{Im } \epsilon(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}) = 0$ și trece peste linia $\bar{\omega} = \bar{q}$, funcția de atenuare restrânsă la curba plasmonului AC afișează un vârf foarte concentrat, cu o lărgire extrem de mică. Motivul pentru existența acestui vârf foarte concentrat este că, numeric, $\text{Im } \epsilon(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}_{ac}(\bar{q})) \ll 1$. După câte știm, această caracteristică nu a fost raportată în alte sisteme cu două straturi. La sfârșitul acestui vârf foarte concentrat, funcția de atenuare afișează un vârf lărgit cu o putere spectrală dominantă. Suprafața acestui vârf lărgit crește pe măsură ce densitatea n_e^s în stratul de silicenă crește.

Pentru distanța interstrat $d = 25$ nm, aproape de punctele unde plasmonii AC și OP traversează curba limită (curba neagră solidă) a zonei în care $\text{Im } \epsilon(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}) = 0$, vârfurile funcției de atenuare asociate cu ramurile plasmonice încep să se fuzioneze pe măsură ce n_e^s crește.

4.3.2 Cazul neomogen

În cazul neomogen, fie $\kappa_1 = \kappa_{\text{SiO}_2} = 3.8$, $\kappa_2 = \kappa_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 9.1$ și $\kappa_3 = \kappa_{\text{Air}} = 1$. Fig. 4.5 arată frecvențele plasmonilor pentru diferite densități de purtători n_e^s în stratul de silicenă și distanțe interstrat d . Asemenea cazului omogen, lucrăm sub condiția de amortizare slabă, așadar stabilim o valoare limită de 0.1, adică $\bar{\gamma}_{pl}/\bar{\omega}_{pl} \leq 0.1$.

Fig. 4.5(a) - (b) arată efecte similare cu cele din cazul omogen. Pe măsură ce dezechilibrul în densitățile de purtători crește prin schimbarea densității în stratul de silicenă de la $n_e^s = 5.0 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ la $n_e^s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, frecvențele plasmonilor AC

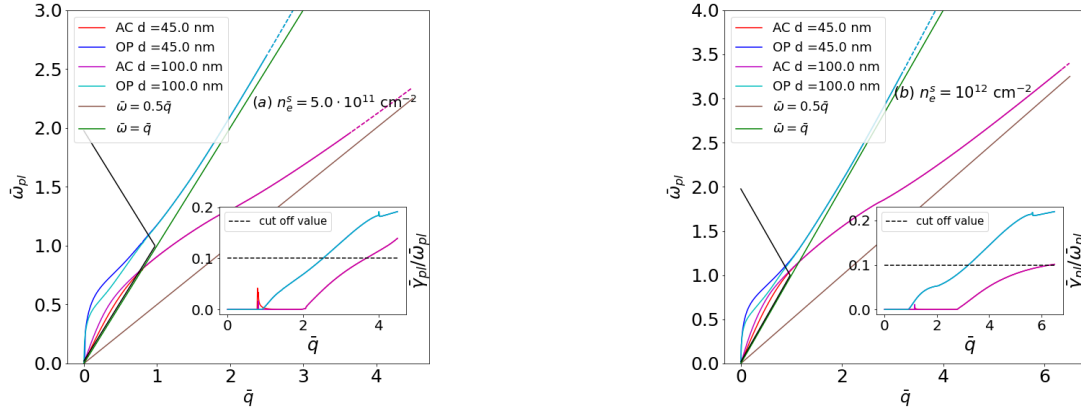


Figure 4.5: Frecvența plasmonilor AC și OP în sistemul DLSG cu fundal neomogen pentru o densitate fixă de purtători în stratul de grafenă $n_e^g = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, distanțe interstrat variind $d = 45$ nm, $d = 100$ nm și densitate variabilă de purtători în stratul de silicenă (a) $n_e^s = 5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (b) $n_e^s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Inserțiile din Fig. 4.5(a) - (b) afișează raportul $\bar{\gamma}_{pl}/\bar{\omega}_{pl}$ care cuantifică frecvențele fizice ale ramurii plasmonice (curba solidă) și frecvențele nefizice ale ramurii plasmonice (curba punctată) pentru o valoare limită fixă. Curba neagră solidă delimitează regiunea în care $\text{Im } \epsilon(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}) = 0$.

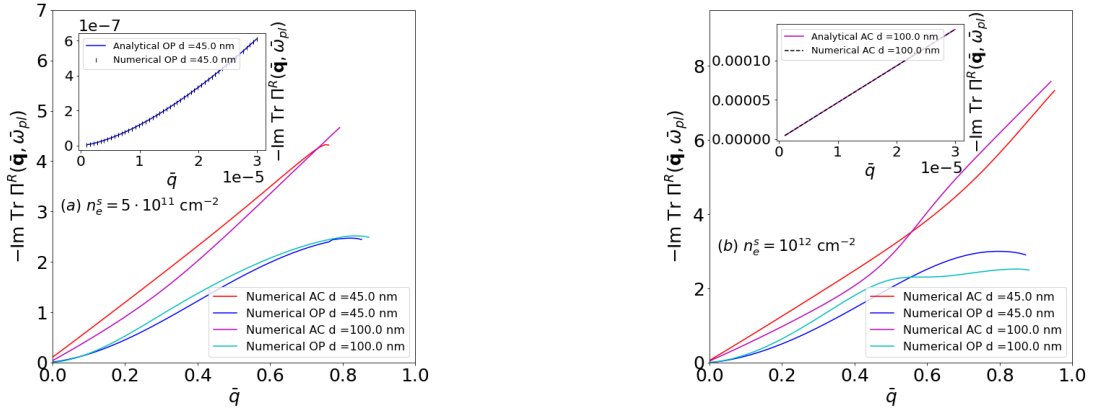


Figure 4.6: $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega}_{pl})]$ al plasmonilor AC și OP nedampați în sistemul DLSG cu fundal neomogen pentru o densitate fixă de purtători în stratul de grafen $n_e^g = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, distanțe inter-laminare variind $d = 45 \text{ nm}$, $d = 100 \text{ nm}$ și densitate variabilă de purtători în stratul de silicene (a) $n_e^s = 5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (b) $n_e^s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Inserțiile din Fig. 4.6(a) - (b) afișează evaluarea numerică a ecuației (4.16) în limita $\bar{q} \rightarrow 0$ comparativ cu formulele analitice din ecuații. (4.21a) – (4.21b).

și OP cresc de asemenea. Pe măsură ce creștem distanța interstrat d pentru fiecare densitate fixă n_e^s , observăm o creștere (scădere) a frecvenței plasmonilor AC (OP) nemortizați.

O mare diferență față de cazul omogen este neomogenitatea fundalului dielectric crește atât frecvența plasmonului OP, cât și pe cea a plasmonului AC.

Repetând pași similari ca în cazul omogen, obținem expresia analitică de ordinul principal pentru plasmonii AC și OP neamortizați în limita $q \rightarrow 0$.

$$\bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0) \approx \left(\frac{4\bar{d}\gamma_1\alpha \sum_{\xi,\sigma=\pm 1} g(\bar{\Delta}_{\xi,\sigma})}{\left[4 + \gamma_1 \sum_{\xi,\sigma=\pm 1} g(\bar{\Delta}_{\xi,\sigma})\right] \kappa_2} \right)^{\frac{1}{2}} \bar{q} \quad (4.20a)$$

$$\bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0) \approx \left(\frac{\left[4 + \gamma_1 \sum_{\xi,\sigma=\pm 1} g(\bar{\Delta}_{\xi,\sigma})\right] \alpha}{\kappa_1 + \kappa_3} \bar{q} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.20b)$$

We can see that if we set $\kappa_1 = \kappa_2 = \kappa_3$ Eqs. (4.20a)-(4.20b) reduce to Eqs. (4.17a)-(4.17b). Eqs. (4.20a)-(4.20b) exhibit a similar dependence on the dielectric constants as those from BLG-BLG system[74]. Repetând aceiași pași ca în cazul omogen, la ordinul principal în $\bar{q} \rightarrow 0$, expresia analitică a funcției de atenuare restricționată la

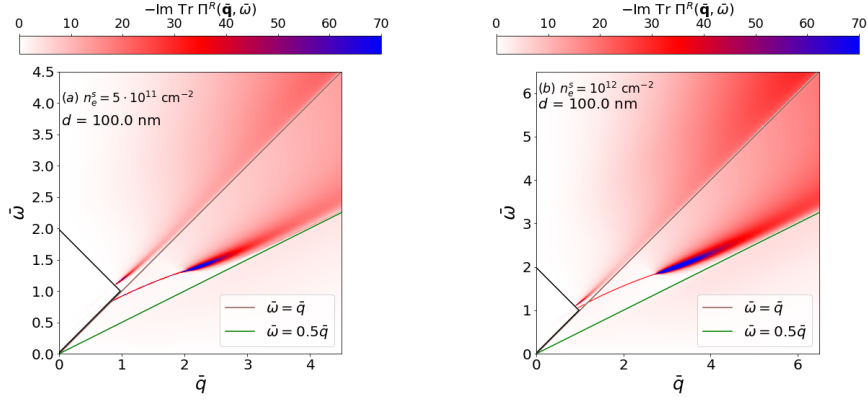


Figure 4.7: $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\mathbf{q}, \omega)]$ în planul (q, ω) pentru sistemul DLSG cu fundal neomogen pentru o densitate fixă de purtători în stratul de grafenă $n_e^g = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, distanță interstrat fixă $d = 100 \text{ nm}$ și densitate variabilă de purtători în stratul de silicică (a) $n_e^s = 5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (b) $n_e^s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Curba neagră solidă delimitează regiunea în care $\text{Im } \epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 0$.

ramurile plasmonilor AC și OP neamortizați este

$$-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega})] \Big|_{\omega=\bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0)} \approx \frac{\pi \kappa_2}{2d} \bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0) \quad (4.21a)$$

$$-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega})] \Big|_{\omega=\bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0)} \approx \frac{\pi(16 + \gamma_1^2 [\sum_{\xi, \sigma=\pm 1} g(\bar{\Delta}_{\xi, \sigma})]^2)}{4[4 + \gamma_1 \sum_{\xi, \sigma=\pm 1} g(\bar{\Delta}_{\xi, \sigma})]^2} \times (\kappa_1 + \kappa_3) \bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0) \bar{q} \quad (4.21b)$$

Este ușor de observat că, dacă lăsăm $\kappa_1 = \kappa_2 = \kappa_3$, Ec. (4.21a)-(4.21b) se reduc la Ec. (4.19a)-(4.19b).

Ecuatiile (4.21a)-(4.21b) prezintă o dependență similară de \bar{q} ca în cazul omogen, adică funcția de atenuare $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0))]$ $\sim \bar{q}$ pentru plasmonul AC neamortizat și $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0))]$ $\sim \bar{q}^{\frac{3}{2}}$ pentru plasmonul OP neamortizat. Evaluarea numerică a Ec. (4.21a)-(4.21b) în raport cu valorile alese pentru parametrii prezentați în lucrare arată că plasmonul AC neamortizat poartă mai multă putere spectrală decât plasmonul OP neamortizat în limita $\bar{q} \rightarrow 0$.

Fig. 4.6(a)-(b) ilustrează comportamentul funcției de atenuare din Ec. (4.16) restricționată la plasmonii AC și OP neamortizați pentru diferite densități de purtători n_e^s în stratul de silicică și distanțe inter-laminare d . Spre deosebire de cazul omogen, putem observa că schimbarea densității în stratul de silicică, pe măsură ce trecem de la $n_e^s = 5.0 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ la $n_e^s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ pentru fiecare distanță interstrat fixă d , nu schimbă faptul că puterea spectrală a plasmonului AC neamortizat domină asupra celei a plasmonului OP neamortizat. Inserțiile din Fig. 4.3(a)-(c) ilustrează comparația evaluării numerice a $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}_{pl}(\bar{q}))]$ din Ec. (4.16) versus expresia analitică din Ec. (4.21a)-(4.21b). Aceste insete arată o potrivire excelentă între evaluarea numerică și cea analitică.

Fig. 4.7(a)-(b) arată comportamentul funcției de atenuare în planul $(\bar{q}, \bar{\omega})$. Ca

în cazul omogen, observăm că, pe măsură ce plasmonul AC părăsește limita (curba solidă neagră) zonei unde $\text{Im } \epsilon(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}) = 0$, funcția de atenuare restricționată la plasmonul AC prezintă un vârf foarte concentrat, cu o lățire foarte mică. Motivul este același ca în cazul omogen, adică numeric $\text{Im } \epsilon(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}_{ac}(\bar{q})) \ll 1$. La capătul acestui vârf foarte concentrat, funcția de atenuare prezintă un vârf lățit, cu o putere spectrală dominantă mai mare decât cea din cazul omogen. Zona acestui vârf lățit crește pe măsură ce densitatea n_e^s din stratul de silicenă crește.

Funcția de atenuare în structuri cu trei straturi: cazurile silicenei și grafenei.

5.1 Motivație

Se știe bine că excitațiile colective sunt proprietăți importante ale sistemelor many-body. Fizica oscilațiilor plasmonice în materiale cu un singur strat și în straturi multiple poate avea aplicații potențiale în plasmonică, fotonica și optoelectronică [46, 47, 48, 49, 50, 51, 52]. Investigațiile teoretice asupra plasmonilor în sisteme cu un singur strat de silicenă (MLS) [59, 60, 61, 62], sisteme cu două straturi de silicenă (DLS) [68] și sisteme cu straturi multiple de silicenă [83] au fost realizate la temperaturi zero și finite. De asemenea, au existat investigații teoretice asupra plasmonilor în sisteme cu un singur strat, cum ar fi sistemul monostrat de grafena (MLG) [54, 55], sistemul monostrat grafena cu gap (MLGG) [56, 57], sistemul bistrat de grafenă (BLG) [58], realizate la temperaturi zero și finite. Au fost studii teoretice asupra plasmonilor în sisteme cu două straturi, cum ar fi sistemul cu două straturi de grafenă (DLG) [69, 70, 71], BLG-BLG [74], MLG-BLG [75] și, de asemenea, asupra sistemelor cu trei straturi, cum ar fi sistemul cu trei straturi de grafenă (TLG) [85].

Din câte știm, până în prezent, nu există o investigație sistematică a funcției de atenuare în sisteme cu trei straturi de silicenă (TLS) și TLG cu fundaluri omogene și neomogene. În cazul sistemelor cu un singur strat, funcția de atenuare este legată de $-\text{Im } \epsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega)$ (partea imaginară negativă a funcției dielectrice inverse). În cazul sistemelor cu două straturi, această funcție își schimbă semnul [69] și, prin urmare, nu poate fi interpretată ca o densitate spectrală definită pozitiv [78]. Vom defini funcția de atenuare ca $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\mathbf{q}, \omega)]$ (partea imaginară negativă a urmei matricii de polarizare retardată) [78, 79].

5.2 Cadru teoretic

Ecuția Dyson a matricii de polarizare retardată în aproximația RPA pentru o structură cu trei straturi [80] cu $\omega > 0$ este

$$\hat{\Pi}^R(\mathbf{q}, \omega) = \hat{\Pi}^{0,R}(\mathbf{q}, \omega) + \hat{\Pi}^{0,R}(\mathbf{q}, \omega) \hat{V}(\mathbf{q}) \hat{\Pi}^R(\mathbf{q}, \omega) \quad (5.1)$$

unde matricea de polarizare retardată de ordinul zero este

$$\hat{\Pi}^{0,R}(\mathbf{q}, \omega) = \begin{pmatrix} \Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega) & 0 & 0 \\ 0 & \Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega) & 0 \\ 0 & 0 & \Pi_3^0(\mathbf{q}, \omega) \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

iar tensorul Coulomb este

$$\hat{V}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} v_{11}(\mathbf{q}) & v_{12}(\mathbf{q}) & v_{13}(\mathbf{q}) \\ v_{21}(\mathbf{q}) & v_{22}(\mathbf{q}) & v_{23}(\mathbf{q}) \\ v_{31}(\mathbf{q}) & v_{32}(\mathbf{q}) & v_{33}(\mathbf{q}) \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

Astfel, Ec. (5.1) devine

$$\hat{\Pi}^R(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} \begin{pmatrix} \hat{\Pi}_{11}^R(\mathbf{q}, \omega) & \hat{\Pi}_{12}^R(\mathbf{q}, \omega) & \hat{\Pi}_{13}^R(\mathbf{q}, \omega) \\ \hat{\Pi}_{21}^R(\mathbf{q}, \omega) & \hat{\Pi}_{22}^R(\mathbf{q}, \omega) & \hat{\Pi}_{23}^R(\mathbf{q}, \omega) \\ \hat{\Pi}_{31}^R(\mathbf{q}, \omega) & \hat{\Pi}_{32}^R(\mathbf{q}, \omega) & \hat{\Pi}_{33}^R(\mathbf{q}, \omega) \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

Elementele matricei sunt date de

$$\hat{\Pi}_{11}^R(\mathbf{q}, \omega) = \Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega)\epsilon_{23}(\mathbf{q}, \omega) \quad (5.5a)$$

$$\hat{\Pi}_{12}^R(\mathbf{q}, \omega) = \Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega)[v_{12}(\mathbf{q})\Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega) + (v_{13}(\mathbf{q})v_{32}(\mathbf{q}) - v_{12}(\mathbf{q})v_{33}(\mathbf{q}))\Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega)\Pi_3^0(\mathbf{q}, \omega)] \quad (5.5b)$$

$$\hat{\Pi}_{13}^R(\mathbf{q}, \omega) = \Pi_3^0(\mathbf{q}, \omega)[v_{13}(\mathbf{q})\Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega) + (v_{12}(\mathbf{q})v_{23}(\mathbf{q}) - v_{13}(\mathbf{q})v_{22}(\mathbf{q}))\Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega)\Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega)] \quad (5.5c)$$

$$\hat{\Pi}_{21}^R(\mathbf{q}, \omega) = \Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega)[v_{21}(\mathbf{q})\Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega) + (v_{23}(\mathbf{q})v_{31}(\mathbf{q}) - v_{21}(\mathbf{q})v_{33}(\mathbf{q}))\Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega)\Pi_3^0(\mathbf{q}, \omega)] \quad (5.5d)$$

$$\hat{\Pi}_{22}^R(\mathbf{q}, \omega) = \Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega)\epsilon_{13}(\mathbf{q}, \omega) \quad (5.5e)$$

$$\hat{\Pi}_{23}^R(\mathbf{q}, \omega) = \Pi_3^0(\mathbf{q}, \omega)[v_{23}(\mathbf{q})\Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega) + (v_{13}(\mathbf{q})v_{21}(\mathbf{q}) - v_{11}(\mathbf{q})v_{23}(\mathbf{q}))\Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega)\Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega)] \quad (5.5f)$$

$$\hat{\Pi}_{31}^R(\mathbf{q}, \omega) = \Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega)[v_{31}(\mathbf{q})\Pi_3^0(\mathbf{q}, \omega) + (v_{21}(\mathbf{q})v_{32}(\mathbf{q}) - v_{22}(\mathbf{q})v_{31}(\mathbf{q}))\Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega)\Pi_3^0(\mathbf{q}, \omega)] \quad (5.5g)$$

$$\hat{\Pi}_{32}^R(\mathbf{q}, \omega) = \Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega)[v_{32}(\mathbf{q})\Pi_3^0(\mathbf{q}, \omega) + (v_{12}(\mathbf{q})v_{31}(\mathbf{q}) - v_{11}(\mathbf{q})v_{32}(\mathbf{q}))\Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega)\Pi_3^0(\mathbf{q}, \omega)] \quad (5.5h)$$

$$\hat{\Pi}_{33}^R(\mathbf{q}, \omega) = \Pi_3^0(\mathbf{q}, \omega)\epsilon_{12}(\mathbf{q}, \omega) \quad (5.5i)$$

Aici, $v_{ii}(\mathbf{q})$ și $v_{ij}(\mathbf{q})$ sunt elementele matricei Coulomb intra- și interstrat [85]

$$v_{ij}(\mathbf{q}) = \frac{2\pi e^2}{q} f_{ij}(\mathbf{q}) \quad (5.6)$$

cu

$$f_{11}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2 [(\kappa_2 + \kappa_3)(\kappa_3 - \kappa_4) + 2\kappa_3(\kappa_2 - \kappa_3)e^{2qd} + (\kappa_2 + \kappa_3)(\kappa_3 + \kappa_4)e^{4qd}]}{M(qd)} \quad (5.7a)$$

$$f_{22}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8e^{2qd} [\kappa_1 \cosh(qd) + \kappa_2 \sinh(qd)] [\kappa_3 \cosh(qd) + \kappa_4 \sinh(qd)]}{M(qd)} \quad (5.7b)$$

$$f_{33}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2 [(\kappa_2 + \kappa_3)(\kappa_2 - \kappa_1) + 2\kappa_2(\kappa_3 - \kappa_2)e^{2qd} + (\kappa_1 + \kappa_2)(\kappa_2 + \kappa_3)e^{4qd}]}{M(qd)} \quad (5.7c)$$

$$f_{12}(\mathbf{q}) = f_{21}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8\kappa_2 e^{2qd} [\kappa_3 \cosh(qd) + \kappa_4 \sinh(qd)]}{M(qd)} \quad (5.7d)$$

$$f_{13}(\mathbf{q}) = f_{31}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8\kappa_2 \kappa_3 e^{2qd}}{M(qd)} \quad (5.7e)$$

$$f_{32}(\mathbf{q}) = f_{23}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{8\kappa_3 e^{2qd} [\kappa_2 \cosh(qd) + \kappa_1 \sinh(qd)]}{M(qd)} \quad (5.7f)$$

$$M(qd) = (\kappa_1 - \kappa_2)(\kappa_2 + \kappa_3)(\kappa_3 - \kappa_4) + 2e^{2qd}(\kappa_2 - \kappa_3)(\kappa_1\kappa_3 - \kappa_2\kappa_4) + e^{4qd}(\kappa_1 + \kappa_2)(\kappa_2 + \kappa_3)(\kappa_3 + \kappa_4) \quad (5.7g)$$

unde $q = |\mathbf{q}|$ și d este distanța interstrat. Funcția dielectrică dinamică a sistemului TLS este [80]

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = \det \left| \hat{1} - \hat{V}(\mathbf{q}) \hat{\Pi}^{0,R}(\mathbf{q}, \omega) \right| \quad (5.8)$$

Funcția dielectrică dinamică a straturilor cuplate i și j este dată de

$$\epsilon_{ij}(\mathbf{q}, \omega) = \epsilon_i(\mathbf{q}, \omega) \epsilon_j(\mathbf{q}, \omega) - v_{ij}(\mathbf{q}) v_{ji}(\mathbf{q}) \Pi_i^0(\mathbf{q}, \omega) \Pi_j^0(\mathbf{q}, \omega) \quad (5.9)$$

unde funcția dielectrică dinamică a stratului i este

$$\epsilon_i(\mathbf{q}, \omega) = 1 - v_{ii}(\mathbf{q}) \Pi_i^0(\mathbf{q}, \omega) \quad (5.10)$$

În această lucrare suntem interesați să studiem puterea spectrală plasmonică. Primul pas este să determinăm ramurile plasmonice din zerourile funcției dielectrice dinamice a sistemului TLS cu ajutorul Ec. (5.8)

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega_{pl} - i\gamma_{pl}) = 0 \quad (5.11)$$

Ramura plasmonică este dată de $\omega_{pl} \equiv \omega_{pl}(\mathbf{q})$ și rata de amortizare este dată de $\gamma_{pl} \equiv \gamma_{pl}(\mathbf{q})$. Lucrăm sub presupunerea unei atenuări slabe ($\gamma_{pl} \ll \omega_{pl}$), ceea ce va însemna $\gamma_{pl}/\omega_{pl} \leq 0.1 \ll 1$. Prin urmare, ramurile plasmonice și rata de amortizare vor fi determinate cu ajutorul următoarelor ecuații [80]

$$\text{Re } \epsilon(\mathbf{q}, \omega_{pl}) = 0 \quad (5.12)$$

and

$$\gamma_{pl} = \text{Im } \epsilon(\mathbf{q}, \omega_{pl}) \left[\frac{\partial \text{Re } \epsilon(\mathbf{q}, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\omega_{pl}} \right]^{-1} \quad (5.13)$$

Al doilea pas este să studiem comportamentul funcției de atenuare deoarece aceasta oferă puterea spectrală totală asociată ramurilor plasmonice [78, 79]. Expresia sa este

$$-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\mathbf{q}, \omega)] = -\text{Im} \left[\frac{\Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega)\epsilon_{23}(\mathbf{q}, \omega) + \Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega)\epsilon_{13}(\mathbf{q}, \omega) + \Pi_3^0(\mathbf{q}, \omega)\epsilon_{12}(\mathbf{q}, \omega)}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} \right] \quad (5.14)$$

Când funcția de atenuare este restrânsă la partea neamortizată a unei ramuri plasmonice, se reduce la

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\mathbf{q}, \omega)] \Big|_{pl} = \text{Re} \left[\Pi_1^0(\mathbf{q}, \omega)\epsilon_{23}(\mathbf{q}, \omega) + \Pi_2^0(\mathbf{q}, \omega)\epsilon_{13}(\mathbf{q}, \omega) + \Pi_3^0(\mathbf{q}, \omega)\epsilon_{12}(\mathbf{q}, \omega) \right] \times \left[\frac{\partial \text{Re} \epsilon(\mathbf{q}, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\omega_{pl}} \right]^{-1} \delta(\omega - \omega_{pl}) \quad (5.15)$$

5.3 Cazul silicenei ²

Investigăm o structură formată din straturi de silicenă depuse pe substraturi dielectrice, așa cum este ilustrat în Fig. 5.1

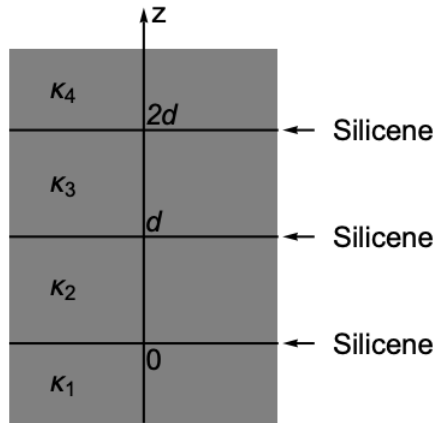


Figure 5.1: O structure cu trei straturi de silicenă (TLS)

În subsecțiunile următoare, vom prezenta rezultatele numerice și analitice pentru frecvența oscilațiilor plasmonice și pentru puterea spectrală plasmonică dată de funcția de atenuare. Ajungem la aceste rezultate determinând rădăcinile Ec.(5.12). Soluțiile de frecvență mai joasă și respectiv mai înaltă se referă la oscilațiile în fază și în afara fazei ale densităților de purtători din straturile de silicenă. Acestea sunt denumite plasmoni acustici (AC) $\bar{\omega}_{ac}(\bar{q})$ și plasmoni optici (OP) $\bar{\omega}_{op}(\bar{q})$.

5.3.1 Cazul omogen

În cazul omogen, presupunem că $\kappa_1 = \kappa_2 = \kappa_3 = \kappa_4$. Stabilim $\kappa_1 = \kappa_{\text{SiO}_2} = 3.8$. Introducem Ec. (4.10) în Ec. (5.12) și pentru ecuația rezultată găsim rădăcinile. La

²C. Caraiani, L. Ion, Loss function in a three layer silicene structure at zero temperature, accepted in Romanian Journal of Physics (2024)

ordinul principal în $\bar{q} \rightarrow 0$, ramurile plasmonice sunt

$$\bar{\omega}_{ac,1}(\bar{q} \rightarrow 0) \approx \left(\frac{\bar{d}\alpha \sum_{\xi,\sigma=\pm 1} (1 - \bar{\Delta}_{\xi,\sigma}^2) \Theta(1 - \bar{\Delta}_{\xi,\sigma})}{3\kappa_1} \right)^{\frac{1}{2}} \bar{q} \quad (5.16a)$$

$$\bar{\omega}_{ac,2}(\bar{q} \rightarrow 0) \approx \left(\frac{\bar{d}\alpha \sum_{\xi,\sigma=\pm 1} (1 - \bar{\Delta}_{\xi,\sigma}^2) \Theta(1 - \bar{\Delta}_{\xi,\sigma})}{\kappa_1} \right)^{\frac{1}{2}} \bar{q} \quad (5.16b)$$

$$\bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0) \approx \left(\frac{3\bar{q}\alpha \sum_{\xi,\sigma=\pm 1} (1 - \bar{\Delta}_{\xi,\sigma}^2) \Theta(1 - \bar{\Delta}_{\xi,\sigma})}{2\kappa_1} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.16c)$$

Observăm că $\bar{\omega}_{ac,1}(\bar{q} \rightarrow 0), \bar{\omega}_{ac,2}(\bar{q} \rightarrow 0) \sim \bar{q}$ și $\bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0) \sim \bar{q}^{\frac{1}{2}}$, arătând astfel o dependență similară de \bar{q} ca în cazul sistemelor cu două straturi [69, 74] și a structurii cu trei straturi de grafenă (TLG) [84]. Diferențele dintre sistemul TLS și sistemele menționate sunt date de dependența sistemului TLS de gap-ul de bandă $\Delta_{\sigma\xi}$.

Formulele analitice pentru funcția de atenuare restricționată la plasmonii neamortizați, la ordinul principal în $\bar{q} \rightarrow 0$, sunt obținute prin introducerea Ec. (4.10), Ec. (5.16a) pentru prima ramură acustică, Ec. (5.16b) pentru a doua ramură acustică și Ec. (5.16c) pentru ramura optică în Ec. (5.15).

$$-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega})] \Big|_{\bar{\omega}=\bar{\omega}_{ac,1}(\bar{q} \rightarrow 0)} \approx \frac{3\pi\kappa_1}{4\bar{d}} \bar{\omega}_{ac,1}(\bar{q} \rightarrow 0) \quad (5.17a)$$

$$-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega})] \Big|_{\bar{\omega}=\bar{\omega}_{ac,2}(\bar{q} \rightarrow 0)} \approx \frac{\pi\kappa_1}{4\bar{d}} \bar{\omega}_{ac,2}(\bar{q} \rightarrow 0) \quad (5.17b)$$

$$-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega})] \Big|_{\bar{\omega}=\bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0)} \approx \frac{\pi\kappa_1}{6} \bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0) \bar{q} \quad (5.17c)$$

Aceste formule sunt aceleași cu formulele din structura TLG, cu mențiunea că frecvențele plasmonilor prezintă dependența de gap-ul de bandă $\Delta_{\sigma\xi}$ în sistemul TLS.

Așa cum se întâmplă în cazul sistemului TLG, funcția de atenuare în limita lungimilor de undă lungi, restricționată la cele două ramuri de plasmoni AC neamortizate, se comportă ca $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0))] \sim \bar{q}$, în timp ce restricția la plasmonul OP neamortizat prezintă un comportament $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{\mathbf{q}}, \bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0))] \sim \bar{q}^{\frac{3}{2}}$. Evaluând numeric Ec. (5.17a)-(5.17c), putem observa că cele două ramuri de plasmoni AC neamortizați au o putere spectrală mai mare decât ramura de plasmon OP neamortizat în limita $\bar{q} \rightarrow 0$.

Figurile 5.2(a)-(b) arată curbele plasmonilor AC și OP în cazul omogen pentru diferite distanțe interstrat d . Folosim ipoteza de atenuare slabă, adică definim o valoare limită astfel încât $\bar{\gamma}_{pl}/\bar{\omega}_{pl} \leq 0.1$. Pentru $\bar{\gamma}_{pl}/\bar{\omega}_{pl} \leq 0.1$ obținem frecvențele fizice ale ramurii plasmonilor, în timp ce pentru $\bar{\gamma}_{pl}/\bar{\omega}_{pl} > 0.1$ obținem frecvențe nefizice ale ramurii plasmonilor. Observăm că condiția $\bar{\gamma}_{pl}/\bar{\omega}_{pl} \leq 0.1$ este îndeplinită

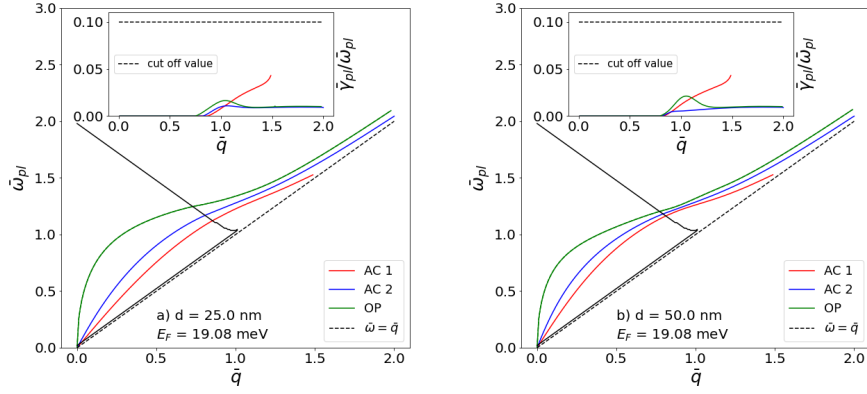


Figure 5.2: Frecvența plasmonilor AC 1, AC 2 și OP în sistemul TLS omogen pentru densitate de purtători fixă $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ și distanțe interstrat variabile (a) $d = 25 \text{ nm}$, (b) $d = 50 \text{ nm}$. Inserțiile din Fig. 5.2(a) - (b) afișează raportul $\bar{\gamma}_{pl}/\bar{\omega}_{pl}$ care cuantifică presupunerea de amortizare slabă pentru o valoare limită fixă. Curba solidă neagră delimitează regiunea unde $\text{Im } \epsilon(\bar{q}, \bar{\omega}) = 0$.

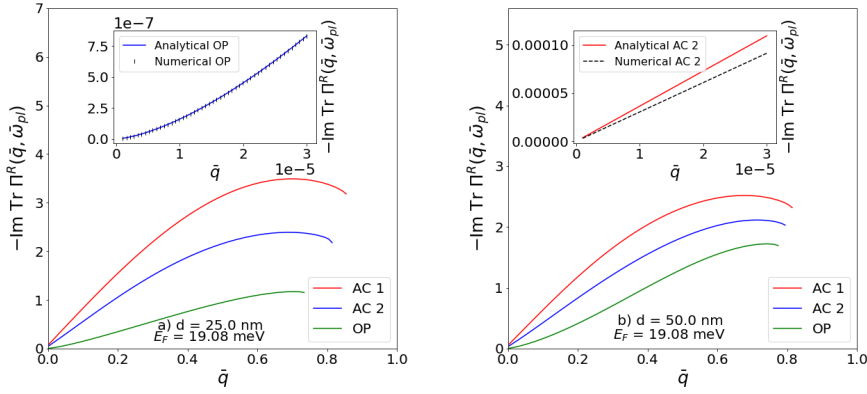


Figure 5.3: $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega}_{pl})]$ pentru plasmonii AC 1, AC 2 și OP neamortizați în sistemul TLS omogen, pentru densitate de purtători fixă $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ și distanțe interstrat variabile (a) $d = 25 \text{ nm}$, (b) $d = 50 \text{ nm}$. Inserțiile din Fig. 5.3(a) - (b) afișează evaluarea numerică a Ec. (5.15) în limita $\bar{q} \rightarrow 0$ comparativ cu formulele analitice din Ec. (5.17a) – (5.17c).

pentru toate frecvențele plasmonilor calculate, în timp ce în sistemul TLG aceasta nu se întâmplă. Putem observa că, în punctul q_c , unde curbele plasmonilor trec peste limita superioară (curba neagră solidă) a regiunii unde $\text{Im } \epsilon(\bar{q}, \bar{\omega}) = 0$, ramurile se apropie foarte mult pe măsură ce crește distanța interstrat. Un comportament similar este observat și în sistemul cu două straturi de grafenă (DLG) [69] și în sistemul TLG [84].

Fig. 5.4(a)-(b) ilustrează plasmonii amortizați, care sunt asociați cu un vârf lățit în funcția de atenuare. Pentru lățimi mari, plasmonul devine supra-amortizat și nu există un vârf asociat în funcția de atenuare. Observăm că, în cazul în care distanța interstrat este $d = 25 \text{ nm}$, vârfurile lățite de pe cele trei ramuri pot fi

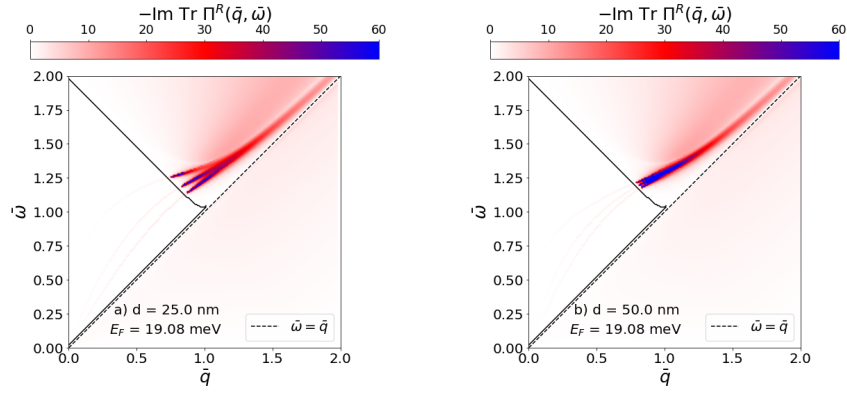


Figure 5.4: $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega})]$ în planul $(\bar{q}, \bar{\omega})$ pentru sistemul TLS omogen cu densitate de purtători fixă $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ și distanțe interstrat variabile (a) $d = 25 \text{ nm}$, (b) $d = 50 \text{ nm}$. Curba solidă neagră limitează regiunea în care $\text{Im } \epsilon(\bar{q}, \bar{\omega}) = 0$.

distinse, în timp ce în cazul în care distanța interstrat este $d = 50 \text{ nm}$, aceste contribuții nu pot fi diferențiate. Aceasta înseamnă că puterile spectrale ale celor trei ramuri de plasmon încep să fuzioneze pe măsură ce creștem distanța interstrat. Un comportament similar se observă și în sistemul TLG.

5.3.2 Cazul neomogen

În cazul neomogen, stabilim $\kappa_1 = \kappa_{\text{SiO}_2} = 3.8$, $\kappa_2 = \kappa_{\text{SiO}_2} = 3.8$, $\kappa_3 = \kappa_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 9.1$ și $\kappa_4 = \kappa_{\text{Air}} = 1$. Fig. 5.5(a)-(b) arată frecvențele plasmonilor în cazul neomogen. Putem observa că acestea prezintă un comportament similar cu cele din cazul omogen.

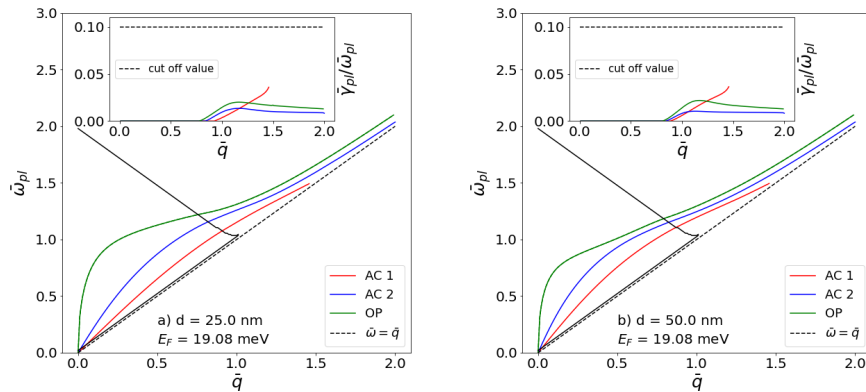


Figure 5.5: Frecvențele plasmonilor AC 1, AC 2 și OP în sistemul TLS neomogen pentru o densitate de purtători fixă $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, cu distanțe interstrat variabile (a) $d = 25 \text{ nm}$, (b) $d = 50 \text{ nm}$. Inserțiile din Fig. 5.5(a) - (b) afișează raportul $\bar{\gamma}_{pl}/\bar{\omega}_{pl}$ care cuantifică presupunerea de atenuare slabă pentru o valoare limită fixă. Curba neagră solidă delimitează regiunea unde $\text{Im } \epsilon(\bar{q}, \bar{\omega}) = 0$.

Fig. 5.6(a)-(b) ilustrează comportamentul funcției de atenuare restricționată la cele trei ramuri ale plasmonilor neamortizați. Observăm comportamente similare cu cele din cazul omogen. Putem observa că puterile spectrale ale celor două ramuri acustice ale plasmonilor predomină asupra puterii spectrale a plasmonului optic. De asemenea, observăm că puterile spectrale tind să se apropie una de cealaltă pe măsură ce creștem distanța interstrat.

Fig.5.7(a)-(b) ilustrează plasmonii neamortizați în cazul neomogen. Spre deosebire de cazul omogen, observăm că pentru $d = 25$ nm și $d = 50$ nm puterile spectrale ale celor trei ramuri pot fi distinse. Efectul neomogenității apare la $d = 50$ nm, deoarece putem încă distinge contribuțiile din cele trei ramuri, lucru care nu se întâmplă în cazul omogen. Un comportament similar poate fi observat și în sistemul TLG.

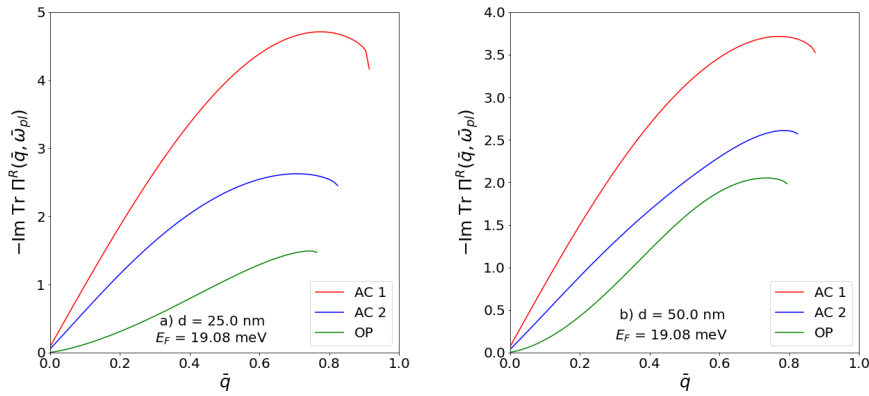


Figure 5.6: $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega}_{pl})]$ al plasmonilor neamortizați AC 1, AC 2 și OP în sistemul TLS neomogen cu densitate de purtători fixă $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, la distanțe interstrat variate (a) $d = 25$ nm, (b) $d = 50$ nm.

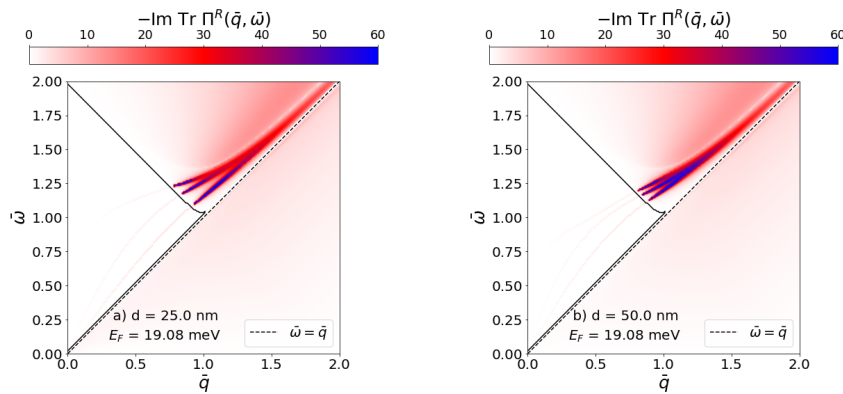


Figure 5.7: $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega})]$ în planul $(\bar{q}, \bar{\omega})$ pentru sistemul TLS neomogen cu densitate de purtători fixă $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, la distanțe interstrat variate (a) $d = 25$ nm, (b) $d = 50$ nm. Curba neagră solidă delimitează regiunea unde $\text{Im } \epsilon(\bar{q}, \bar{\omega}) = 0$.

5.4 Cazul grafenei ³

Investigăm o structură formată din straturi de grafenă depuse pe substraturi dielectrice, așa cum este ilustrat în Fig. 5.8

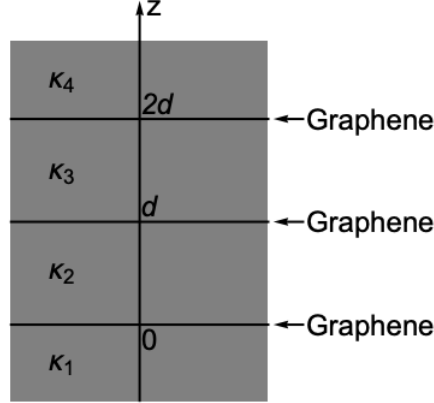


Figure 5.8: O structură cu trei straturi de grafenă (TLG)

În subsecțiunile următoare, prezentăm rezultatele numerice și analitice pentru frecvența oscilațiilor plasmonice și pentru puterea spectrală plasmonică oferită de funcția de atenuare. Ajungem la aceste rezultate prin determinarea rădăcinilor ecuației (5.12). Obținem soluții de frecvență mai mare și mai mică, care corespund oscilațiilor în fază și în afara fazei ale densităților de purtători din straturile de grafenă. Acestea sunt denumite plasmoni optici (OP) $\bar{\omega}_{op}(\bar{q})$ și plasmoni acustici (AC) $\bar{\omega}_{ac}(\bar{q})$.

5.4.1 Cazul omogen

În cazul omogen, stabilim $\kappa_1 = \kappa_2 = \kappa_3$. Alegem $\kappa_1 = \kappa_{\text{SiO}_2} = 3.8$. Introducem ecuația (4.8) în ecuația (5.12) și rezolvăm pentru rădăcinile ecuației rezultate. La ordinul principal în $\bar{q} \rightarrow 0$, ramurile plasmonice sunt

$$\bar{\omega}_{ac,1}(\bar{q} \rightarrow 0) \approx \left(\frac{4\bar{d}\alpha}{3\kappa_1} \right)^{\frac{1}{2}} \bar{q} \quad (5.18a)$$

$$\bar{\omega}_{ac,2}(\bar{q} \rightarrow 0) \approx \left(\frac{4\bar{d}\alpha}{\kappa_1} \right)^{\frac{1}{2}} \bar{q} \quad (5.18b)$$

$$\bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0) \approx \left(\frac{6\alpha\bar{q}}{\kappa_1} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.18c)$$

Observăm că $\bar{\omega}_{ac,1}(\bar{q} \rightarrow 0), \bar{\omega}_{ac,2}(\bar{q} \rightarrow 0) \sim \bar{q}$ și $\bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0) \sim \bar{q}^{\frac{1}{2}}$, arătând astfel o dependență similară de \bar{q} ca în cazul sistemelor cu două straturi [69, 74].

Funcția de atenuare restrânsă la plasmonii neamortizați, la ordinul principal în $\bar{q} \rightarrow 0$, este obținută prin introducerea ecuației (4.8), a ecuației (5.18a) pentru

³C. Caraiiani, L. Ion, Loss function in a three layer graphene structure at zero temperature, Presented at Bucharest University Faculty of Physics 2024 Meeting

prima ramură acustică, a ecuației (5.18b) pentru a doua ramură acustică și a ecuației (5.18c) pentru ramura optică în ecuația (5.15), obținând astfel:

$$-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega})] \Big|_{\bar{\omega}=\bar{\omega}_{ac,1}(\bar{q} \rightarrow 0)} \approx \frac{3\pi\kappa_1}{4d} \bar{\omega}_{ac,1}(\bar{q} \rightarrow 0) \quad (5.19a)$$

$$-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega})] \Big|_{\bar{\omega}=\bar{\omega}_{ac,2}(\bar{q} \rightarrow 0)} \approx \frac{\pi\kappa_1}{4d} \bar{\omega}_{ac,2}(\bar{q} \rightarrow 0) \quad (5.19b)$$

$$-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega})] \Big|_{\bar{\omega}=\bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0)} \approx \frac{\pi\kappa_1}{6} \bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0) \bar{q} \quad (5.19c)$$

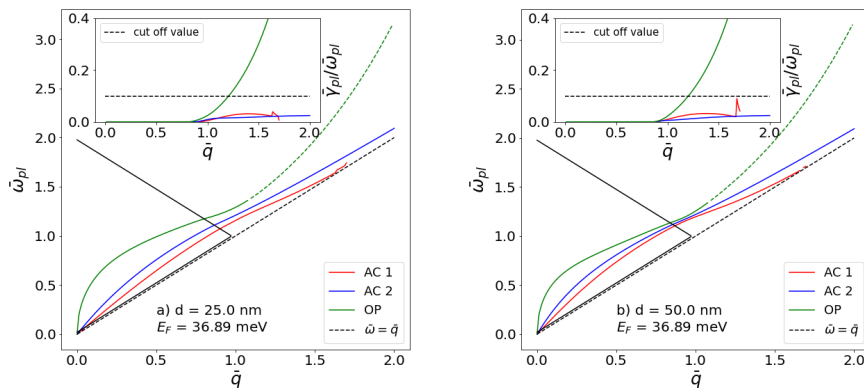


Figure 5.9: Frecvențele plasmonilor AC 1, AC 2 și OP în sistemul TLG omogen pentru densitatea de purtători fixă $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ și distanțe interstrat variabile (a) $d = 25 \text{ nm}$, (b) $d = 50 \text{ nm}$. Inserțiile din figurile 5.9(a) - (b) ilustrează raportul $\bar{\gamma}_{pl}/\bar{\omega}_{pl}$ care cuantifică frecvențele fizice ale ramurii plasmonice (curba solidă) și frecvențele nefizice ale ramurii plasmonice (curba întreruptă) pentru o valoare limită fixă. Curba solidă neagră limitează regiunea în care $\text{Im } \epsilon(\bar{q}, \bar{\omega}) = 0$.

Putem observa că funcția de atenuare, în limita $\bar{q} \rightarrow 0$, restricționată la cele două ramuri neamortizate AC ale plasmonilor, se comportă ca $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0))] \sim \bar{q}$, în timp ce, atunci când este restricționată la plasmonul OP neamortizat, afișează un comportament $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0))] \sim \bar{q}^2$. Din evaluarea numerică a Ec. (5.19a)-(5.19c) în raport cu parametrii prezentați în lucrare, putem vedea că cele două ramuri neamortizate AC ale plasmonilor poartă mai multă putere spectrală decât ramura neamortizată OP a plasmonului în limita lungilor de undă lungi.

Figurile 5.9(a)-(b) ilustrează curbele plasmonilor în cazul omogen pentru diferite distanțe interstrat d . Deoarece lucrăm sub condiția de atenuare slabă, stabilim o valoare limită de 0.1, adică $\bar{\gamma}_{pl}/\bar{\omega}_{pl} \leq 0.1$. Prin urmare, obținem pentru $\bar{\gamma}_{pl}/\bar{\omega}_{pl} \leq 0.1$ frecvențele fizice ale ramurii plasmonului, în timp ce pentru $\bar{\gamma}_{pl}/\bar{\omega}_{pl} > 0.1$ obținem frecvențele nefizice ale ramurii plasmonului. Un efect notabil este că, la punctul q_c , unde curbele plasmonilor trec de limita superioară (curba neagră solidă) a regiunii în care $\text{Im } \epsilon(\bar{q}, \bar{\omega}) = 0$, ramurile se apropie foarte mult pe măsură ce creștem distanța interstrat. Un comportament similar este observat și în Ref. [69].

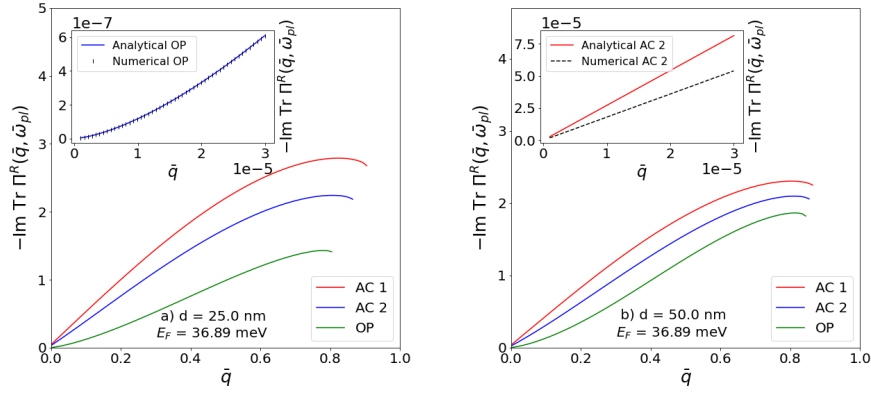


Figure 5.10: $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega}_{pl})]$ pentru plasmonii neamortizati AC 1, AC 2 și OP în sistemul TLG omogen pentru densitatea de purtători fixă $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, cu distanțe interstrat variabile (a) $d = 25 \text{ nm}$, (b) $d = 50 \text{ nm}$. Inserțiile din figurile 5.10(a) - (b) ilustrează evaluarea numerică a Ecuației (5.15) în limita $\bar{q} \rightarrow 0$ în comparație cu formulele analitice din Ec. (5.19a) – (5.19c).

Figurile 5.10(a)-(b) ilustrează comportamentul funcției de atenuare restricționate la cele trei ramuri ale plasmonilor neamortizati. Prima observație este că puterea spectrală a celor două ramuri plasmonice acustice domină asupra celei optice. Aceasta generalizează rezultatele din limita lungimilor de undă lungi. A doua observație este că această dominație este în ordine inversă, adică puterea spectrală asociată primei ramuri acustice domină asupra celei de-a doua ramuri acustice, care la rândul său domină asupra puterii spectrale a ramurii optice. A treia observație este că, pe măsură ce variem distanța interstrat de la $d = 25$ la $d = 50 \text{ nm}$, puterile spectrale tind să se apropie.

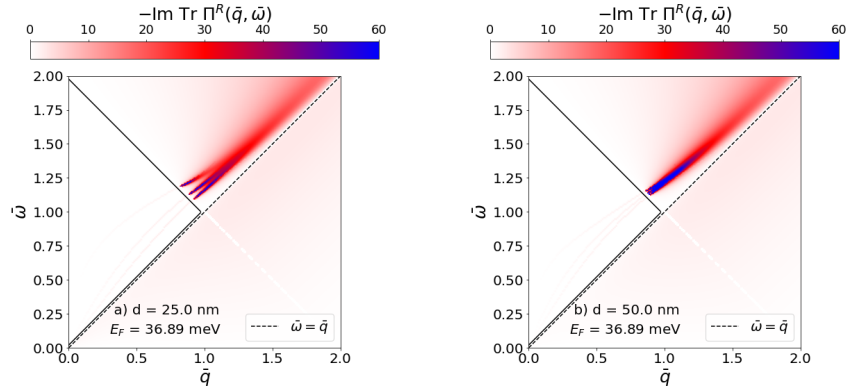


Figure 5.11: $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega})]$ în planul $(\bar{q}, \bar{\omega})$ pentru sistemul TLG omogen, cu densitate de portatori fixă $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ și distanțe interstrat variate (a) $d = 25 \text{ nm}$, (b) $d = 50 \text{ nm}$. Curba neagră solidă delimitează regiunea în care $\text{Im } \epsilon(\bar{q}, \bar{\omega}) = 0$.

Figurile 5.11(a)-(b) arată plasmonii amortizați, care corespund unui vârf lărgit în funcția de atenuare. Pentru o lărgire mare, plasmonul devine supra-amortizat și nu

există un vârf în funcția de atenuare. Observăm că pentru $d = 25$ nm contribuțiile celor trei ramuri pot fi distinse și separate, în timp ce pentru $d = 50$ nm aceste contribuții nu pot fi nici distinse, nici separate. Acest lucru înseamnă că, pe măsură ce creștem distanțele interstrat, puterile spectrale ale celor trei ramuri de plasmoni încep să fuzioneze.

5.4.2 Cazul neomogen

În cazul neomogen, stabilim $\kappa_1 = \kappa_{\text{SiO}_2} = 3.8$, $\kappa_2 = \kappa_{\text{SiO}_2} = 3.8$, $\kappa_3 = \kappa_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 9.1$ și $\kappa_4 = \kappa_{\text{Air}} = 1$. Figurile 5.12(a)-(b) ilustrează curbele plasmonilor pentru cazul neomogen. Acestea afișează un comportament similar cu cel din cazul omogen. Singura diferență notabilă este că ramura plasmonului optic, în cazul neomogen, are o frecvență de limitare mai mare pentru partea fizică a ramurii.

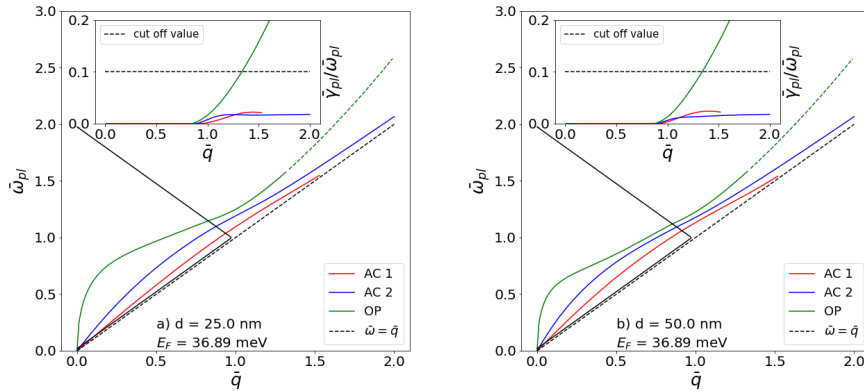


Figure 5.12: Frecvența plasmonilor AC 1, AC 2 și OP în sistemul TLG neomogen cu densitate de purtători fixă $n_e = 10^{11}$ cm $^{-2}$, pentru distanțe interstrat variate (a) $d = 25$ nm, (b) $d = 50$ nm. Curba solidă neagră limitează regiunea în care $\text{Im } \epsilon(\bar{q}, \bar{\omega}) = 0$.

Figs. 5.13(a)-(b) ilustrează comportamentul funcției de atenuare restricționate la cele trei ramuri ale plasmonilor neamortizați. Observăm aceleași similitudini în cazul neomogen ca și în cazul omogen. Prima similaritate este că puterea spectrală a celor două ramuri de plasmoni acustici domină asupra celei optice. A doua similaritate este că, pe măsură ce creștem distanța interstrat, puterile spectrale tind să se apropie.

Figs. 5.14(a)-(b) ilustrează plasmonii amortizați în cazul neomogen. Putem observa că pentru $d = 25$ nm și $d = 50$ nm, puterile spectrale ale celor trei ramuri pot fi distinse și separate. Efectul neomogenității apare la $d = 50$ nm, deoarece putem distinge în continuare contribuțiile celor trei ramuri, ceea ce nu se întâmplă în cazul omogen.

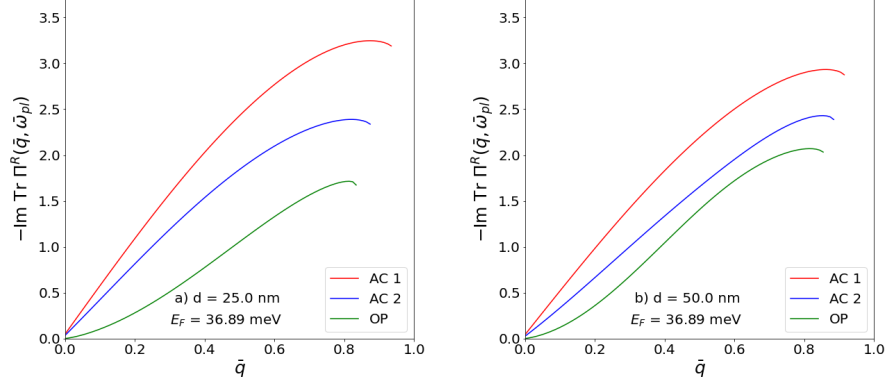


Figure 5.13: $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega}_{pl})]$ al plasmonilor neamortizați AC 1, AC 2 și OP în sistemul TLG neomogen, cu densitate de porteri fixă $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, variind distanțele interstrat (a) $d = 25 \text{ nm}$, (b) $d = 50 \text{ nm}$.

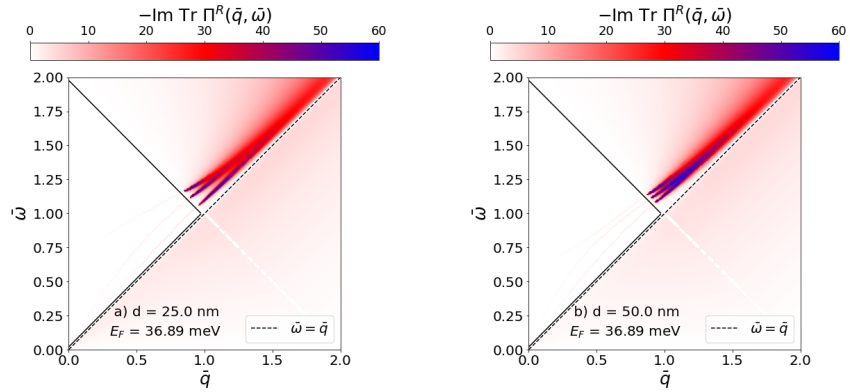


Figure 5.14: $-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega})]$ în planul $(\bar{q}, \bar{\omega})$ pentru sistemul TLG neomogen, cu densitate de porteri fixă $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, variind distanțele interstrat (a) $d = 25 \text{ nm}$, (b) $d = 50 \text{ nm}$. Curba solidă neagră delimitează regiunea în care $\text{Im} \epsilon(\bar{q}, \bar{\omega}) = 0$.

Temperatura de crossover în schimbul de căldură electron-fonon în nanostructuri cu mai multe straturi ⁴

6.1 Motivație

Pentru a detecta radiația cosmică, sunt necesare dispozitive ultra-senzitive. Pentru a obține un semnal curat, fluctuațiile termice din dispozitive trebuie reduse. O modalitate de a scădea temperatura electronică într-un metal este utilizarea tunelării metal-insulator-superconductor (NIS) [108]. Un rezultat recent de la Nquyen et. al. [89] a arătat cum această proprietate de răcire electronică poate fi realizată prin utilizarea de refrigeratoare cu joncțiuni tunel NIS, scăzând temperatura electronică de la o temperatură a băii de 150 mK la 32 mK. Aceste micro-refrigeratoare pot fi montate pe cipuri pentru a răci detectoare ultra-senzitive la temperaturi foarte joase (de exemplu, micro-calorimetre).

O configurație prototipică pentru un astfel de dispozitiv este prezentată în Fig. 6.1. Există o membrană dielectrică de nitru de siliciu (SiN_x) suspendată, deasupra căreia se află o insulă de metal normal din cupru. Această insulă metalică este conectată la plăci supraconductoare Al prin intermediul joncțiunilor tunel NIS. De asemenea, există un deget rece SINIS [109] atașat la substratul de SiN_x . Grosimea tipică d a filmului de Cu va fi în jur de 10 nm, în timp ce grosimea SiN_x va fi de aproximativ 90 nm. Temperatura de funcționare a dispozitivului este în jur de câteva sute de mK [108, 110]. Această gamă de temperaturi va induce o tranziție de dimensionalitate [108, 96] asupra gazului de fononi. De exemplu, temperatura de scalare a SiN_x este $T_C \equiv 237$ mK [98]. Să notăm cu T_{ph} temperatura fononică. Pentru $T_{ph} > T_C$, gazul are un comportament 3D (adică, ramurile fononice superioare vor contribui), în timp ce pentru $T_{ph} < T_C$ va avea un comportament quasi-bidimensional (adică va fi influențat doar de prima ramură fononică).

Într-un regim staționar, putem presupune că electronii au o distribuție Fermi cu temperatura T_e , în timp ce fononii au o distribuție Bose-Einstein cu temperatura T_{ph} . La temperaturi joase, luând în considerare mecanismul potențialului de deformare ca o modalitate prin care electronii se cuplează la fononi, fluxul de putere de la electroni

⁴D.V Anghel, C. Caraianni, Y. Galperin, Crossover temperature in the electron-phonon heat exchange in layered nanostructures, Phys. Scr. 94, 105704 (2019) doi.org/10.1016/j.physleta.2024.129792

la fononi generat prin aceste mecanisme respectă în general o lege de putere de forma

$$P \approx T_e^x - T_{ph}^x \quad (6.1)$$

Există o viziune generală că dependența de temperatură ar trebui să fie $P \approx T_e^{s+2} - T_{ph}^{s+2}$, unde s este dimensiunea sub-sistemului de dimensiune mai mică. Pentru grafena monostrat și bistrat, cercetătorii au determinat o dependență de temperatură de forma $P \approx T_e^4 - T_{ph}^4$. În nanofirele metalice, care sunt quasi 1D, s-a găsit o dependență $P \approx T_e^3 - T_{ph}^3$. De asemenea, s-a raportat o tranziție quasi-bidimensională în fluxul de căldură electron-fonon cu un exponent de lege de putere $x < 4.5$.

6.2 Cadru teoretic

Așa cum este descris în Refs. [90, 91], considerăm un film metalic (de exemplu, Cu) depus pe o membrană dielectrică suspendată (de exemplu, nitru de siliciu) și perfect lipit de aceasta [103, 104], așa cum este ilustrat în Fig.6.1. Pentru descrierea matematică, alegem un sistem de coordonate cartezian, astfel încât toate suprafețele membranei și ale filmului să fie paralele cu planul (xy) . În direcția z , membrana se întinde pe intervalul $[-L/2, L/2 - d]$, în timp ce metalul ocupă intervalul $[L/2 - d, L/2]$. În direcțiile x și y , sistemul este considerat foarte mare (comparativ cu lungimile de undă ale quasiparticulelor implicate) și are aria A ; presupunem că $L \ll \sqrt{A}$.

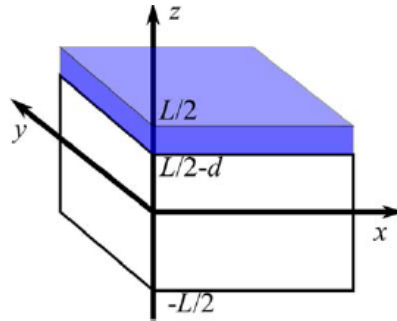


Figure 6.1: A metallic film (blue) of thickness d deposited on top of a substrate dielectric membrane of thickness $L - d$. The total system has a thickness L .

Metalul conține electroni, care interacționează cu fononii ce se propagă în întregul sistem. Funcțiile de undă ale electronilor se propaga în planul (xy) și sunt confinate pe direcția z . Notăm vectorul de undă al electronului cu $\mathbf{k} \equiv (\mathbf{k}_{\parallel}, k_z)$, unde \mathbf{k}_{\parallel} și k_z sunt componentele lui \mathbf{k} perpendiculare și paralele cu axa z , respectiv. Pentru \mathbf{k}_{\parallel} , impunem condiții de frontieră periodice în planul (xy) , în timp ce pentru k_z impunem condiții de frontieră Dirichlet la $z = L/2 - d$ și $z = L/2$. Acest lucru conduce la o densitate de stări (DOS) în variabila \mathbf{k}_{\parallel} egală cu $A/(2\pi)^2$ și la condiția de cuantificare $k_z \equiv n\pi/d$, unde n este un întreg. Atunci, funcția de undă a electronului este de forma

$$\psi_{\mathbf{k}_{\parallel}, n}(\mathbf{r}, t) \equiv \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_z}(\mathbf{r}, t) = \phi_{k_z}(z) e^{i(\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{r}_{\parallel} - \epsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}, n} t / \hbar)} / \sqrt{A}, \quad (6.2)$$

unde $\phi_{k_z}(z) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \left[\left(z + d - \frac{L}{2} \right) k_z \right]$ și energia electronului este

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_z},$$

unde m_e este masa efectivă a electronului.

Operatorii de câmp de anihilare și creație pentru electroni sunt

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_z} \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_z}(\mathbf{r}, t) c_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_z} \quad \text{and} \quad \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_z} \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_z}^*(\mathbf{r}, t) c_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_z}^{\dagger}, \quad (6.3)$$

respectiv, unde $c_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_z}$ și $c_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_z}^{\dagger}$ sunt operatorii de anihilare și creație pentru electroni în starea $\psi_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_z}$.

Modurile fononice sunt stări proprii ale ecuațiilor dinamice elastice și sunt grupate în trei polarizări: tăiere orizontală (h), simetrică (s) și antisimetrică (a) [100]. În timp ce modurile h sunt vibrații transversale pure (t), modurile s și a sunt superpoziții de vibrații transversale și longitudinale (l) [100] — într-o vibrație longitudinală, câmpul de deplasare este în direcția de propagare, în timp ce într-o vibrație transversală câmpul de deplasare și direcția de propagare sunt perpendiculare între ele.

Condițiile de frontieră libere impuse la $z = \pm L/2$ conduc la ecuația [100, 91]

$$\frac{-4q_{\parallel}^2 \bar{q}_l \bar{q}_t \xi}{(q_{\parallel}^2 - \bar{q}_t^2)^2} = \left[\frac{\tan(\bar{q}_t L/2)}{\tan(\bar{q}_l L/2)} \right]^{\pm 1}, \quad (6.4a)$$

pentru componentele \bar{q}_l și \bar{q}_t , unde $q_{\parallel} \equiv |\mathbf{q}_{\parallel}|$. Exponenții $+1$ și -1 din partea dreaptă (rhs) a ecuației (6.4a) corespund polarizărilor s și a , respectiv [100], în timp ce $\xi \equiv (\alpha, \nu)$ este un dublu, conținând polarizarea α (care, în ecuația (6.4a), este doar s sau a) și numărul de ramură $\nu = 0, 1, 2, \dots$ (ca în cazul polarizării h), așa cum vom specifica mai jos.

Dacă notăm cu c_l și c_t viteza sunetului longitudinale și transversale, respectiv, atunci frecvența unghiulară, comună atât vibrațiilor longitudinale, cât și celor transversale, este dată de

$$\omega_{q_{\parallel} \xi} = c_l \sqrt{\bar{q}_l^2 + q_{\parallel}^2} = c_t \sqrt{\bar{q}_t^2 + q_{\parallel}^2}. \quad (6.4b)$$

Sistemul (6.4) are un număr infinit numărabil de soluții, pentru fiecare α și q_{\parallel} . Aceste soluții sunt notate cu ν și formează ramurile atunci când sunt reprezentate ca funcții de q_{\parallel} . În general, $\bar{q}_{t\alpha\nu}$ și $\bar{q}_{l\alpha\nu}$ pot lua atât valori (pozitive) reale, cât și imaginare, așa cum este explicat, de exemplu, în [100] (vezi și [106]), în timp ce q_{\parallel} ia doar valori reale pozitive, prin definiție.

Prin urmare, introducem notările $\bar{q}_{t\alpha\nu} \equiv q_{t\alpha\nu} + ip_{t\alpha\nu}$ și $\bar{q}_{l\alpha\nu} \equiv q_{l\alpha\nu} + ip_{l\alpha\nu}$, în care fie q , fie p poate fi diferit de zero, dar nu ambele în același timp și în aceeași polarizare (vezi [106] pentru detalii).

Dacă ρ este densitatea de masă a sistemului (considerată omogenă în întreaga volum), atunci vitezele sunetului pot fi exprimate în termeni de coeficienții Lamé λ și μ [100],

$$c_t^2 = \frac{\mu}{\rho}, \quad c_l^2 = \frac{\lambda + 2\mu}{\rho}; \quad (6.5)$$

definim $J \equiv c_t^2/c_l^2$, care va fi utilizat mai jos.

Definim modurile elastice prin $\mathbf{w}_{\mathbf{q}_{\parallel}\xi}(z)e^{i(\mathbf{q}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}-\omega_{\mathbf{q}_{\parallel}\xi}t)}/\sqrt{A}$, unde funcțiile $\mathbf{w}_{\mathbf{q}_{\parallel}\xi}(z)$ sunt normalizate astfel încât $\int_{-L/2}^{L/2} \mathbf{w}_{\mathbf{q}_{\parallel}\xi}(z)\dagger\mathbf{w}_{\mathbf{q}_{\parallel}\xi'}(z)dz = \delta_{\xi,\xi'}$. Dacă alegem \mathbf{q}_{\parallel} pe direcția x , atunci $\mathbf{w}_{\mathbf{q}_{\parallel}\xi}(z)$ se află în planul (xz) , cu componentele [106, 90, 91]

$$w_{\mathbf{q}_{\parallel},s,\nu,x} = N_s i \bar{q}_t \left[2q_{\parallel}^2 \cos\left(\frac{\bar{q}_{t,\xi}L}{2}\right) \cos(\bar{q}_{l,\xi}z) + (\bar{q}_{t,\xi}^2 - q_{\parallel}^2) \cos\left(\frac{\bar{q}_{l,\xi}L}{2}\right) \cos(z\bar{q}_{t,\xi}) \right] \quad (6.6a)$$

$$w_{\mathbf{q}_{\parallel},s,\nu,z} = N_s q_{\parallel} \left[-2\bar{q}_{t,\xi}\bar{q}_{l,\xi} \cos\left(\frac{\bar{q}_{t,\xi}L}{2}\right) \sin(\bar{q}_{l,\xi}z) + (\bar{q}_{t,\xi}^2 - q_{\parallel}^2) \cos\left(\frac{\bar{q}_{l,\xi}L}{2}\right) \sin(z\bar{q}_{t,\xi}) \right], \quad (6.6b)$$

$$w_{\mathbf{q}_{\parallel},a,\nu,x} = N_a i \bar{q}_{t,\xi} \left[2q_{\parallel}^2 \sin\left(\frac{\bar{q}_{t,\xi}L}{2}\right) \sin(\bar{q}_{l,\xi}z) + (\bar{q}_{t,\xi}^2 - q_{\parallel}^2) \sin\left(\frac{\bar{q}_{l,\xi}L}{2}\right) \sin(z\bar{q}_{t,\xi}) \right], \quad (6.6c)$$

$$w_{\mathbf{q}_{\parallel},a,\nu,z} = N_a q_{\parallel} \left[2\bar{q}_{t,\xi}\bar{q}_{l,\xi} \sin\left(\frac{\bar{q}_{t,\xi}L}{2}\right) \cos(\bar{q}_{l,\xi}z) - (\bar{q}_{t,\xi}^2 - q_{\parallel}^2) \sin\left(\frac{\bar{q}_{l,\xi}L}{2}\right) \cos(z\bar{q}_{t,\xi}) \right], \quad (6.6d)$$

Pentru a simplifica notațiile, în cele ce urmează vom scrie q_t în loc de $q_{t,\xi}$ și q_l în loc de $q_{l,\xi}$, atunci când acest lucru nu duce la confuzii.

Așadar, constantele de normalizare sunt

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_s^2} = & A \left\{ 4|\bar{q}_t|^2 q_{\parallel}^2 \cos^2\left(\frac{\bar{q}_t L}{2}\right) \left[(|\bar{q}_l|^2 + q_{\parallel}^2) \frac{\sinh(p_l L)}{2p_l} - (|\bar{q}_l|^2 - q_{\parallel}^2) \frac{q_l L}{2q_t} \right] \right. \\ & + |\bar{q}_t^2 - q_{\parallel}^2|^2 \cos^2\left(\frac{\bar{q}_t L}{2}\right) \left[(|\bar{q}_l|^2 + q_{\parallel}^2) \frac{\sinh(p_t L)}{2p_t} + (|\bar{q}_l|^2 - q_{\parallel}^2) \frac{\sin(q_t L)}{2q_t} \right] \\ & \left. - 4q_{\parallel}^2 \cos^2\left(\frac{\bar{q}_t L}{2}\right) [p_t (|\bar{q}_t|^2 + k_{\parallel}^2) \sinh(p_t L) - q_t (|\bar{q}_t|^2 - q_{\parallel}^2) \sin(q_t L)] \right\}, \quad (6.7a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_a^2} = & A \left\{ 4|\bar{q}_t|^2 q_{\parallel}^2 \left| \sin\left(\frac{\bar{q}_t L}{2}\right) \right|^2 \left[(|\bar{q}_l|^2 + q_{\parallel}^2) \frac{\sinh(p_l L)}{2p_l} + (|\bar{q}_l|^2 - q_{\parallel}^2) \frac{\sin(q_l L)}{2q_t} \right] \right. \\ & + |\bar{q}_t^2 - q_{\parallel}^2|^2 \left| \sin\left(\frac{\bar{q}_t L}{2}\right) \right|^2 \left[(|\bar{q}_l|^2 + q_{\parallel}^2) \frac{\sinh(p_t L)}{2p_t} - (|\bar{q}_l|^2 - q_{\parallel}^2) \frac{\sin(q_t L)}{2q_t} \right] \\ & \left. - 4q_{\parallel}^2 \left| \sin\left(\frac{\bar{q}_t L}{2}\right) \right|^2 [p_t (|\bar{q}_t|^2 + q_{\parallel}^2) \sinh(p_t L) + k_t (|\bar{k}_t|^2 - q_{\parallel}^2) \sin(k_t L)] \right\}. \quad (6.7b) \end{aligned}$$

Dacă \mathbf{q}_{\parallel} are o direcție arbitrară în planul (x, y) , atunci componentele (6.6) trebuie rotite în consecință.

Cu aceste definiții, operatorul câmpului de deplasare este

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\xi, \mathbf{q}_{\parallel}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}_{\parallel}\xi}}} e^{i(\mathbf{q}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}-i\omega_{\mathbf{q}_{\parallel}\xi}t)} \left[a_{\mathbf{q}_{\parallel}\xi} \mathbf{w}_{\mathbf{q}_{\parallel}\xi}(z) + a_{-\mathbf{q}_{\parallel}\xi}^{\dagger} \mathbf{w}_{\mathbf{q}_{\parallel}\xi}^*(z) \right], \quad (6.8)$$

unde $a_{\mathbf{q}_{\parallel}\xi}^{\dagger}$ și $a_{\mathbf{q}_{\parallel}\xi}$ sunt operatorii de creație și anihilare pentru fononi.

Interacțiunea electron-fonon este calculată în cadrul modelului potențial de deformare, folosind Hamiltonianul de interacțiune [107],

$$H_{\text{def}} = \frac{2}{3} E_F \int_{V_{el}=A \times d} d^3\mathbf{r} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}). \quad (6.9)$$

Pornind de la ecuația (6.9) și aplicând regula de aur a lui Fermi $\Gamma_{i \rightarrow f} = (2\pi/\hbar)|\langle f|H_{\text{def}}|i\rangle|^2\delta(E_f - E_i)$ pentru a calcula ratele de tranziție Γ între starea inițială $|i\rangle$, cu energia E_i , și starea finală $|f\rangle$, cu energia E_f , puterea a fost calculată în Ref. [90, 91] ca fiind

$$P \equiv P^{(0)}(T_e) - P^{(1)}(T_e, T_{ph}), \quad (6.10a)$$

unde

$$P^{(0)}(T_e) \equiv P_s^{(0)}(T_e) + P_a^{(0)}(T_e), \quad (6.10b)$$

$$P^{(1)}(T_e, T_{ph}) \equiv P_s^{(1)}(T_e, T_{ph}) + P_a^{(1)}(T_e, T_{ph}), \quad (6.10c)$$

$$P_a^{(0)}(T_e) \equiv \frac{4\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel}, n, n'} \mathbf{q}_{\parallel, \nu} \hbar\omega_{\mathbf{q}_{\parallel}, \alpha, \nu} |g_{\alpha, \nu, \mathbf{q}_{\parallel}}^{n', n}|^2 [f(\beta_e \epsilon_{\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}, n'}) - f(\beta_e \epsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}, n})] n(\beta_e \epsilon_{\mathbf{q}_{\parallel}, \nu}), \quad (6.10d)$$

$$P_a^{(1)}(T_e, T_{ph}) \equiv \frac{4\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel}, n, n'} \mathbf{q}_{\parallel, \nu} \hbar\omega_{\mathbf{q}_{\parallel}, \alpha, \nu} |g_{\alpha, \nu, \mathbf{q}_{\parallel}}^{n', n}|^2 [f(\beta_e \epsilon_{\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}, n'}) - f(\beta_e \epsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}, n})] n(\beta_{ph} \epsilon_{\mathbf{q}_{\parallel}, \nu}), \quad (6.10e)$$

$f(x) \equiv (e^x + 1)^{-1}$ și $n(x) \equiv (e^x - 1)^{-1}$ sunt funcțiile de distribuție Fermi și Bose, respectiv, $\beta_e \equiv 1/(k_B T_e)$, $\beta_{ph} \equiv 1/(k_B T_{ph})$, în timp ce $\alpha = s$ sau a [90, 91].

Am folosit, de asemenea, notația

$$g_{\xi, \mathbf{q}_{\parallel}}^{n', n} = \frac{2}{3} E_F N_{\xi, \mathbf{q}_{\parallel}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}_{\parallel}, \xi}}} \int_{L/2-d}^{L/2} \phi_{n'}^*(z) \phi_n(z) \left[i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{w}_{\mathbf{q}_{\parallel}, \xi}(z) + \frac{dw_{\mathbf{q}_{\parallel}, \xi}(z)}{dz} \right] dz \quad (6.11)$$

unde constantele de normalizare $N_{\xi, \mathbf{q}_{\parallel}}$ sunt date în Ec. (6.7).

6.3 Rezultate

Considerăm că sistemul total are o grosime de $L = 100$ nm, dintre care filmul metalic are aproximativ 10 nm. Proprietățile elastice ale întregului sistem se datorează nitrurii de siliciu, pentru care densitatea $\rho = 3290$ kg m⁻³, cu viteza sunetului longitudinal $c_l = 10\,300$ m s⁻¹ și viteza sunetului transversal $c_t = 6200$ m s⁻¹.

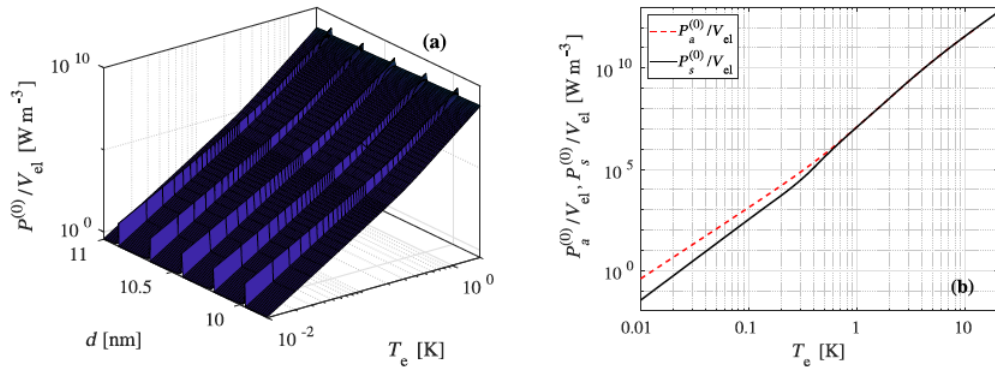


Figure 6.2: (a) Puterea termică $P^{(0)}$, ca funcție de T_e și de grosimea d a stratului metalic. (b) Contribuția modurilor simetrice și antisimetrice $P_s^{(0)}$ și $P_a^{(0)}$

În Fig. 6.2(a), observăm graficul din Ec. (6.10b), adică $P^{(0)}$ ca funcție de temperatura electronică T_e și de grosimea filmului subțire metalic d . Remarcăm

apariția unor creste înguste, separate de 'văi' largi, similar cu cele menționate în Refs. [90, 91]. Apariția creștelor se datorează faptului că energia Fermi intersectează baza benzii de conducție 2D.

În Fig. 6.2(b), pentru o grosime fixă de $d=10\text{nm}$, analizăm contribuțiile individuale ale modurilor de fonon simetrice și antisimetrice, adică $P_s^{(0)}$ și $P_a^{(0)}$. Putem observa trei tipuri de comportament induse de modurile de fonon simetrice și antisimetrice în trei domenii diferite de temperatură. La temperaturi scăzute, modurile de fonon antisimetrice predomină. În jurul temperaturii de crossover T_c , atât $P_s^{(0)}$ cât și $P_a^{(0)}$ prezintă un comportament de crossover. La temperaturi mai ridicate, peste T_c , $P_s^{(0)}$ și $P_a^{(0)}$ se unesc..

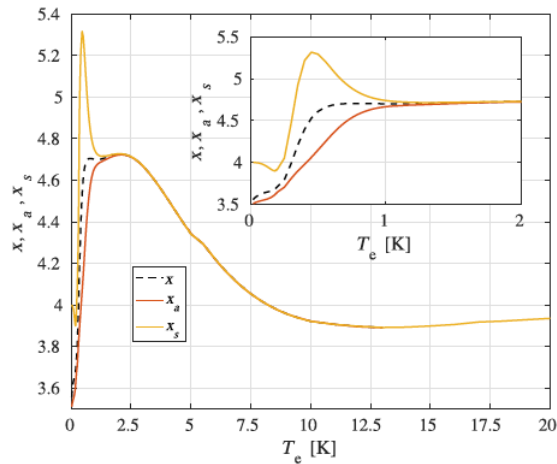


Figure 6.3: Comportamentul tipic al exponentilor dependenței de temperatură ai $P^{(0)}(x)$, $P_a^{(0)}(x_a)$, and $P_s^{(0)}(x_s)$ ca funcții de temperatura electronică T_e , pentru o grosime fixă a filmului metalic $d = 10 \text{ nm}$.

$$\begin{aligned}
 x_s &= \frac{\partial \ln(P_s^{(0)})}{\partial \ln(T_e)} = \frac{\partial \ln(P_s^{(1)})}{\partial \ln(T_{ph})} \\
 x_a &= \frac{\partial \ln(P_a^{(0)})}{\partial \ln(T_e)} = \frac{\partial \ln(P_a^{(1)})}{\partial \ln(T_{ph})}
 \end{aligned} \tag{6.12}$$

În Fig. 6.3, observăm comportamentul exponentilor x , x_s , x_a ai dependenței de temperatură a $P^{(0)}(x)$, $P_a^{(0)}(x_a)$, și $P_s^{(0)}(x_s)$ ca funcție de temperatura electronică T_e . Graficul arată comportamentul lor la temperaturi ridicate și scăzute în intervalul 0-20 K. Micuța umflătură de la 5 K este un artefact numeric datorat schimbării pasilor în calculul derivatei numerice. În regiunea de temperaturi scăzute, se observă rezultate similare cu cele din Refs. [90, 91], unde $x = x_a = 3.5$ și $x_s = 4$. De la 1.2 K în sus, exponentii x , x_s , x_a încep să se unească.

Concluzii generale

Studiile pe care le-am realizat aduc o contribuție importantă în literatură, deoarece oferim o investigație sistematică a puterii spectrale plasmonice totale prin utilizarea unei formule adecvate pentru funcția de atenuare. Acest lucru ne permite să înțelegem, pentru diferite densități electronice și distanțe interstrat, în limita lungilor lungimi de undă lungi, dependența de q a funcției de atenuare restricționate la ramurile acustice și plasmonice, precum și care ramuri poartă o putere spectrală plasmonică mai puternică în planul (q, ω) .

În concluzie, calculăm pentru cazurile omogene și neomogene frecvențele oscilațiilor plasmonice și funcția de atenuare în sistemele DLSG, TLS și TLG la temperatura zero, folosind aproximația RPA. Pentru cazurile omogene și neomogene în sistemul DLSG, observăm o dependență de \bar{q} a ramurilor plasmonice în limita $\bar{q} \rightarrow 0$ de tipul

$$\begin{aligned}\bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0) &\sim \bar{q} \\ \bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0) &\sim \sqrt{\bar{q}}\end{aligned}$$

în timp ce pentru restricția funcției de atenuare la ramurile acustice și optice, dependența de \bar{q} este

$$\begin{aligned}-\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega})] \Big|_{\bar{\omega}=\bar{\omega}_{ac}(\bar{q} \rightarrow 0)} &\sim \bar{q} \\ -\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega})] \Big|_{\bar{\omega}=\bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0)} &\sim \bar{q}^{\frac{3}{2}}\end{aligned}$$

Un rezultat nou pentru sistemul DLSG este că plasmonul acustic traversează linia $\bar{\omega} = \bar{q}$ și tinde către linia $\bar{\omega} = \frac{1}{2}\bar{q}$. O altă caracteristică nouă este că puterea spectrală plasmonică, după ce plasmonul AC traversează linia $\bar{\omega} = \bar{q}$, prezintă un vârf foarte subțire și concentrat până când se lărgeste.

Pentru sistemele TLS și TLG în cazul omogen, observăm o dependență de \bar{q} a ramurilor plasmonice în limita $\bar{q} \rightarrow 0$ de tip

$$\begin{aligned}\bar{\omega}_{ac,1}(\bar{q} \rightarrow 0) &\sim \bar{q} \\ \bar{\omega}_{ac,2}(\bar{q} \rightarrow 0) &\sim \bar{q} \\ \bar{\omega}_{op}(\bar{q} \rightarrow 0) &\sim \sqrt{\bar{q}}\end{aligned}$$

În timp ce pentru restricția funcției de pierdere la ramurile acustice și optice, dependența de \bar{q} este

$$\begin{aligned} -\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega})] \Big|_{\bar{\omega}=\bar{\omega}_{ac,1}(\bar{q}\rightarrow 0)} &\sim \bar{q} \\ -\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega})] \Big|_{\bar{\omega}=\bar{\omega}_{ac,2}(\bar{q}\rightarrow 0)} &\sim \bar{q} \\ -\text{Im Tr}[\hat{\Pi}^R(\bar{q}, \bar{\omega})] \Big|_{\bar{\omega}=\bar{\omega}_{op}(\bar{q}\rightarrow 0)} &\sim \bar{q}^{\frac{3}{2}} \end{aligned}$$

De asemenea, observăm în sistemul TLS că, în planul $(\bar{q}, \bar{\omega})$, începând de la vârfuri bine definite și separate ale plasmonului amortizat, pe măsură ce creștem distanța interstrat, aceste vârfuri încep să se unească. Comportamente similare sunt observate și în sistemul TLG.

Singurul efect notabil pe care neomogenitatea îl produce în sistemele TLS și TLG este că împiedică unirea ramurilor la punctul q_c , așa cum se întâmplă în cazul omogen. Astfel, în cazul neomogen, suntem capabili să distingem contribuțiile vârfurilor lărgite ale plasmonilor amortizați, ceea ce nu este posibil în cazul omogen.

Un rezultat comun pentru toate sistemele menționate este că greutatea spectrală a funcției de atenuare asociată cu ramurile plasmonice neamortizate este dominată de plasmonii acustici. Acest lucru se extinde, de asemenea, la partea amortizată a ramurii plasmonului acustic.

Aceste rezultate vor ajuta la obținerea unei interpretări mai bune a datelor experimentale privind proprietățile plasmonice ale heterostructurilor multistrat și la optimizarea performanțelor acestora pentru aplicații potențiale în dispozitive plasmonice.

Nu în ultimul rând, studiem cum dimensionalitatea a gazului de fononi afectează schimbul de căldură între subsistemele de electroni și fononi în nanostructuri multistrat. Puterea P schimbată între electroni și fononi este investigată numeric. În regimul de temperaturi joase, observăm că $P \approx T_e^x - T_{ph}^x$ cu exponentul $x = 3.5$, așa cum este menționat în [90, 91]. Exponentul x nu prezintă un comportament monotonic. În regimul de temperaturi joase, $x = 3.5$, dar pe măsură ce creștem temperatura și ajungem la T_c , x prezintă un comportament de platou, rămânând între 4.5 și 5. Această regiune de platou este situată între 0.5 și 2.5 K. După platou, x scade și, în jurul valorii de 7.5 K, atinge valori mai mici de 4 și rămâne astfel până la 20 K.

Studiul efectuat asupra schimbului de căldură între subsistemele de electroni și fononi în nanostructuri multistrat va ajuta la înțelegerea modului de optimizare a performanței dispozitivelor ultra-senzitive, cum ar fi microrefrigeratoarele, microbolometrele și microcalorimetrele.

Bibliography

- [1] F. Bonaccorso, L. Colombo, G. Yu, M. Stoller, V. Tozzini, A. C. Ferrari, R. S. Ruoff and V. Pellegrini, 2D materials. Graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems for energy conversion and storage, *Science* **347**, 1246501 (2015)
- [2] A. C. Ferrari et al, Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems, *Nanoscale* **7**, 4598–4810 (2015).
- [3] P. Miro, M. Audiffred T. Heine, An atlas of two-dimensional materials, *Chem. Soc. Rev.* **43**, 6537–6554 (2014).
- [4] K. Lee, G. Kulkarni, Z. Zhong, Coulomb blockade in monolayer MoS₂ single electron transistor, *Nanoscale* **8**, 7755–7760 (2016).
- [5] Q. Feng, F. Yan, W. Luo , K. Wang, Charge trap memory based on few-layer black phosphorus, *Nanoscale* **8**, 2686–2692 (2016).
- [6] J. Zhu, A. Chroneos, U. Schwingenschlogl, Silicene/germanene on MgX₂ (X = Cl, Br, and I) for Li-ion battery applications *Nanoscale* **8**, 7272–7277 (2016).
- [7] R. K. Ulaganathan, Y.-Y. Lu, C.-J. Kuo, S. R. Tamalampudi, R. Sankar, K. M. Boopathi, A. Anand, K. Yadav, R. J. Mathew, C.-R. Liu, F. C. Chou and Y.-T. Chen, High photosensitivity and broad spectral response of multi-layered germanium sulfide transistors, *Nanoscale* **8**, 2284–2292 (2016).
- [8] M. Dragoman, D. Dragoman, *Progress in Quantum Electronics* **32**, 1–41.9, 2008.
- [9] G. Giuliani, G. Vignale, *Quantum theory of the electron liquid*, Cambridge university press, 2005.
- [10] A. N. Grigorenko, M. Polini , K. S. Novoselov, Graphene plasmonics, *Nat. Photon.* **6**, 749–758 (2012).
- [11] M. Rocca, Low-energy EELS investigation of surface electronic excitations on metals, *Surface Science Reports* **22**, 1 – 71 (1995).
- [12] B. Ghosh, P. Kumar, A. Thakur, Y. S. Chauhan, S. Bhowmick and A. Agarwal, Anisotropic plasmons, excitons, and electron energy loss spectroscopy of phosphorene, *Phys. Rev. B.* **96**, 035422 (2017).
- [13] R. Sachdeva, A. Thakur, G. Vignale and A. Agarwal, Plasmon modes of a massive Dirac plasma, and their superlattices, *Phys. Rev. B* **91**, 205426 (2015).

- [14] A. Thakur, K. Sadhukhan and A. Agarwal, Dynamic current-current susceptibility in three-dimensional Dirac and Weyl semimetals, *Phys. Rev. B.* **97**, 035403 (2018).
- [15] A. Scholz, T. Stauber and J. Schliemann, Plasmons and screening in a monolayer of MoS₂, *Phys. Rev. B.* **88**, 035135 (2013).
- [16] T. Low, R. Roldán, H. Wang, F. Xia, P. Avouris, L. M. Moreno and F. Guinea, Plasmons and Screening in Monolayer and Multilayer Black Phosphorus, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 106802 (2014).
- [17] E. H. Hwang and S. Das Sarma, Dielectric function, screening, and plasmons in two-dimensional graphene, *Phys. Rev. B.* **75**, 205418 (2007).
- [18] Saito, R., G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, London, 1998.
- [19] M. Barbier, “Transport properties of nanostructures and superlattices on single-layer and bilayer graphene”, PhD thesis, Universiteit Antwerpen, 2012.
- [20] M. O. Goerbig, Electronic properties of graphene in a strong magnetic field, *Rev. of Mod. Phys.* **83**, 1193–1243 (2011).
- [21] B. Partoens and F. M. Peeters, “From graphene to graphite: Electronic structure around the K point”, *Phys. Rev. B* **74**, 075404 (2006).
- [22] M. Mucha-Kruczynski, O. Tsypliyatyev, A. Grishin, E. McCann, V. I. Falko, A. Bostwick, and E. Rotenberg, “Characterization of graphene through anisotropy of constant energy maps in angle-resolved photoemission”, *Phys. Rev. B* **77**, 195403 (2008).
- [23] D. D. L. Chung, “Review: Graphite”, *Journal of Materials Science* **37**, 1475–1489 (2002).
- [24] C. W. J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1337–1354 (2008).
- [25] K.W.K. Shung, Dielectric function and plasmon structure of stage-1 intercalated graphite, *Phys. Rev. B* **34**, 979-993 (1986).
- [26] B. Van Duppen, “Plasmonics in graphene and related materials”, PhD. thesis, Universiteit Antwerpen, 2016.
- [27] C.-C. Liu, H. Jiang, Y. Yao, “Low-energy effective Hamiltonian involving spin-orbit coupling in silicene and two-dimensional germanium and tin”, *Phys. Rev. B* **84**, 195430 (2011)
- [28] J. C. Slater, G. F. Koster, “Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem”, *Phys. Rev.* **94**, 1498–1524 (1954)
- [29] C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, Quantum Spin Hall Effect in Silicene and Two-Dimensional Germanium, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 076802 (2011).

- [30] H. Min, J. E. Hill, N. a. Sinitsyn, B. R. Sahu, L. Kleinman, and A. H. MacDonald, “Intrinsic and Rashba spin-orbit interactions in graphene sheets”, *Phys. Rev. B* **74**, 165310 (2006)
- [31] M. Ezawa, “Valley-Polarized Metals and Quantum Anomalous Hall Effect in Silicene”, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 055502 (2012)
- [32] J. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 3rd Edition, John Wiley & Sons, 1998.
- [33] S.D. Sarma, A. Madhukar, Collective modes of spatially separated, two-component, two-dimensional plasma in solids, *Phys. Rev. B* **23**, 805 (1981).
- [34] D. Grecu, Plasma frequency of the electron gas in layered structures, *Phys. Rev. B* **8**, 1958 (1973).
- [35] P.B. Visscher, L.M. Falicov, Dielectric screening in a layered electron gas, *Phys. Rev. B* **3**, 2541 (1971).
- [36] K. Novoselov, A.K. Geim, S. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A. Firsov, Electric field effect in atomically thin carbon films, *Science* **306** (5696) (2004) 666–669.
- [37] K. Novoselov, A.K. Geim, S. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, A. Firsov, Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene, *Nature* **438** (7065) (2005) 197–200.
- [38] A.H.C. Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K. Novoselov, A.K. Geim, The electronic properties of graphene, *Rev. Mod. Phys.* **81** (1) (2009) 109–162.
- [39] A.K. Geim, A.H. MacDonald, Graphene: exploring carbon flatland, *Phys. Today* **60** (8)(2007) 35–41.
- [40] S.D. Sarma, S. Adam, E.H. Hwang, E. Rossi, Electronic transport in two-dimensional graphene, *Rev. Mod. Phys.* **83** (2) (2011) 407–470.
- [41] A. Avsar, H. Ochoa, F. Guinea, B. Özyilmaz, J. Van Wees, I.J. Vera-Marun, Colloquium: spintronics in graphene and other two-dimensional materials, *Rev. Mod. Phys.* **92** (2) (2020).
- [42] Z. Ni, Q. Liu, K. Tang, J. Zheng, J. Zhou, R. Qin, Z. Gao, D. Yu, J. Lu, Tunable band gap in silicene and germanene, *Nano Lett.* **12** (1) (2011) 113–118.
- [43] N. Drummond, V. Zólyomi, V. Falko, Electrically tunable band gap in silicene, *Phys. Rev. B* **85** (7) (2012).
- [44] H. Chang, J. Zhou, H. Zhang, Y. Yao, Probing the topological phase transition via density oscillations in silicene and germanene, *Phys. Rev. B* **89** (20) (2014).
- [45] J. Zhao, H. Liu, Z. Yu, R. Quhe, Y. Wang, C. Liu, H. Zhong, N. Han, J. Lu, Y. Yao, K. Wu, Rise of silicene: a competitive 2D material, *Prog. Mater. Sci.* **83** (2016) 24–151.

- [46] A. Grigorenko, M. Polini, K. Novoselov, Graphene plasmonics, *Nat. Photonics* **6** (11) (2012) 749–758.
- [47] S. Xia, X. Zhai, L. Wang, S. Wen, Plasmonically induced transparency in double layered graphene nanoribbons, *Photon. Res.* **6** (7) (2018) 692.
- [48] S. Xia, X. Zhai, Y. Huang, J. Liu, L. Wang, S. Wen, Multi-band perfect plasmonic absorptions using rectangular graphene gratings, *Opt. Lett.* **42** (15) (2017) 3052.
- [49] V. Ryzhii, M. Ryzhii, V. Mitin, M.S. Shur, A. Satou, T. Otsuji, Terahertz photomixing using plasma resonances in double-graphene layer structures, *J. Appl. Phys.* **113** (17)(2013).
- [50] H. Nasari, M.S. Abrishamian, P. Berini, Nonlinear optics of surface plasmon polaritons in subwavelength graphene ribbon resonators, *Opt. Express* **24** (1) (2016) 708.
- [51] Y. Li, Y. Su, X. Zhai, L. Wang, A novel modulation mechanism in plasmon-induced transparency waveguide, *Europhys. Lett.* **125** (3) (2019) 34002.
- [52] F.H.L. Koppens, D.E. Chang, F.J.G. De Abajo, Graphene plasmonics: a platform for strong light–matter interactions, *Nano Lett.* **11** (8) (2011) 3370–3377.
- [53] P. Avouris, M. Freitag, Graphene photonics, plasmonics, and optoelectronics, *IEEEJ. Sel. Top. Quantum Electron.* **20** (1) (2014) 72–83.
- [54] B. Wunsch, T. Stauber, F. Sols, F. Guinea, Dynamical polarization of graphene at finite doping, *New J. Phys.* **8** (12) (2006) 318.
- [55] E.H. Hwang, S.D. Sarma, Dielectric function, screening, and plasmons in two dimensional graphene, *Phys. Rev. B* **75** (20) (2007).
- [56] P.K. Pyatkovskiy, Dynamical polarization, screening, and plasmons in gapped-graphene, *J. Phys. Condens. Matter* **21** (2) (2008) 025506.
- [57] D. Patel, S.S.Z. Ashraf, A. Sharma, Finite temperature dynamical polarization and plasmons in gapped graphene, *Phys. Status Solidi B : Basic Solid State Phys.* **252** (8) (2015) 1817–1826.
- [58] R. Sensarma, E.H. Hwang, S.D. Sarma, Dynamic screening and low-energy collective modes in bilayer graphene, *Phys. Rev. B* **82** (19) (2010) 11.
- [59] B. Van Duppen, P. Vasilopoulos, F.M. Peeters, Spin and valley polarization of plasmons in silicene due to external fields, *Phys. Rev. B* **90** (3) (2014).
- [60] C.J. Tabert, E.J. Nicol, Dynamical polarization function, plasmons, and screening in silicene and other buckled honeycomb lattices, *Phys. Rev. B* **89** (19) (2014).
- [61] J. Wu, S.C. Chen, M. Lin, Temperature-dependent Coulomb excitations in silicene, *New J. Phys.* **16** (12) (2014) 125002.

- [62] A. Iurov, G. Gumbs, D. Huang, Temperature-dependent collective effects for silicene and germanene, *J. Phys. Condens. Matter* **29** (13) (2017) 135602.
- [63] J.D. Malcolm, E.J. Nicol, Frequency-dependent polarizability, plasmons, and screening in the two-dimensional pseudospin-1 dice lattice, *Phys. Rev. B* **93** (2016) 165433.
- [64] A. Iurov, L. Zhemchuzhna, G. Gumbs, D. Huang, D. Dahal, Y. Abranyos, Finite-temperature plasmons, damping, and collective behavior in the $\alpha - \mathcal{T}_3$ model, *Phys. Rev. B* **105** (2022) 245414.
- [65] A. Iurov, L. Zhemchuzhna, G. Gumbs, D. Huang, P. Fekete, F. Anwar, D. Dahal, N. Weekes, Tailoring plasmon excitations in $\alpha - \mathcal{T}_3$ armchair nanoribbons, *Sci. Rep.* **11** (1) (2021).
- [66] G.E. Santoro, G.F. Giuliani, Acoustic plasmons in a conducting double layer, *Phys. Rev. B* **37** (1988) 937–940
- [67] A. Iurov, G. Gumbs, D. Huang, L. Zhemchuzhna, Controlling plasmon modes and damping in buckled two-dimensional material open systems, *J. Appl. Phys.* **121** (8)(2017).
- [68] N. Dadkhah, T. Vazifeshenas, M. Farmanbar, T. Salavati-Fard, A theoretical study of collective plasmonic excitations in double-layer silicene at finite temperature, *J. Appl. Phys.* **125** (10) (2019).
- [69] E.H. Hwang, S.D. Sarma, Plasmon modes of spatially separated double-layer graphene, *Phys. Rev. B* **80** (20) (2009).
- [70] T. Vazifeshenas, T. Amlaki, M. Farmanbar, F. Parhizgar, Temperature effect on plasmon dispersions in double-layer graphene systems, *Phys. Lett. A* **374** (48) (2010)4899–4903.
- [71] D. Van Tuan, N.Q. Khánh, Plasmon modes of double-layer graphene at finite temperature, *Physica E Low-Dimens. Syst. Nanostruct.* **54** (2013) 267–272.
- [72] A. Principi, M. Carrega, V. Asgari, R. Pellegrini, M. Polini, Plasmons and Coulomb drag in Dirac-Schrödinger hybrid electron systems, *Phys. Rev. B* **86** (8) (2012).
- [73] N. Van Men, N.Q. Khánh, Plasmon modes in graphene–GaAs heterostructures, *Phys. Lett. A* **381** (44) (2017) 3779–3784.
- [74] N. Van Men, N.Q. Khánh, D.T.K. Phuong, Plasmon modes in double bilayer graphene heterostructures, *Solid State Commun.* **294** (2019) 43–48.
- [75] Q.K. Nguyen, N. Van Men, Plasmon modes in bilayer–monolayer graphene heterostructures, *Phys. Status Solidi B: Basic Solid State Phys.* **255** (7) (2018).
- [76] V.M. Nguyen, D.T.K. Phuong, Silicene-2DEG heterostructures: collective excitations investigations, *Physica B : Condens. Matter* **668** (2023) 415257.

- [77] M. Bejas, V. Zimmermann, D. Betto, T.D. Boyko, R.J. Green, T. Loew, N.B. Brookes, G. Cristiani, G. Logvenov, M. Minola, B. Keimer, H. Yamase, A. Greco, M. Hepting, Plasmon dispersion in bilayer cuprate superconductors, *Phys. Rev. B* **109** (2024)144516.
- [78] T. Stauber, G. Gómez-Santos, Plasmons in layered structures including graphene, *New J. Phys.* **14** (10) (2012) 105018.
- [79] T. Stauber, G. Gómez-Santos, Plasmons and near-field amplification in double layer graphene, *Phys. Rev. B* **85** (7) (2012).
- [80] A. Fetter, J. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, Dover Books on Physics, Dover Publications, 2003.
- [81] P.R. Lungu, *Introducere in teoria cuantică a sistemelor de particule identice*, Bucharest University Press, 2014.
- [82] H. Bruus, K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*, Oxford Graduate Texts, OUP Oxford, 2004.
- [83] N. Van Men, *Journal of Physics: Condensed Matter* **34** (8), 085301 (2021).
- [84] C Caraiani, L. Ion , In preparation
- [85] D. T. K. Phuong, N. Van Men, *Phys. Lett. A* **383**(33), 125971
- [86] P. M. Platzmann, P. A. Wolff, *Waves and Interactions in Solid State Plasmas*, Academic, New York, 1973
- [87] A. Iurov, G. Gumbs, D. Huang, G. Balakrishnan, Thermal plasmons controlled by different thermal-convolution paths in tunable extrinsic Dirac structures, *Phys. Rev. B* **96** (24) (2017).
- [88] F. Giazotto , T.T Heikkilä, A. Luukanen ,A.M. Savin, J.P. Pekola , Opportunities for mesoscopics in thermometry and refrigeration: Physics and applications, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 217 (2006).
- [89] H.Q. Nguyen, M. Meschke, H. Courtois, J.P. Pekola , Sub-50-mK Electronic Cooling with Large-Area Superconducting Tunnel Junctions, *Phys. Rev. Appl.* **2**, 054001 (2014).
- [90] D.V. Anghel, S. Cojocaru, Electron–phonon heat exchange in layered nano-systems, *Solid State Commun.* **227**, 56 (2016).
- [91] D.V. Anghel, S. Cojocaru, Electron–phonon heat exchange in quasi-two-dimensional nanolayers, *Eur. Phys. J. B* **90**,260 (2017).
- [92] F.C. Wellstood, C. Urbina, J. Clarke, Hot-electron effects in metals, *Phys. Rev. B* **49**, 5942 (1994).
- [93] J.K. Viljas, T.T. Heikkilä, Electron-phonon heat transfer in monolayer and bilayer graphene, *Phys. Rev. B* **81**, 245404 (2010).

- [94] S. Cojocaru, D.V Anghel, Low-temperature electron-phonon heat transfer in metal films, *Phys. Rev. B* **93**, 115405 (2016).
- [95] F.W.J Hekking, A.O. Niskanen, J. P. Pekola, Electron-phonon coupling and longitudinal mechanical-mode cooling in a metallic nanowire, *Phys. Rev.B* **77**, 033401 (2008).
- [96] D.V. Anghel, J.P. Pekola, M.M. Leivo, J.K. Suoknuuti, M. Manninen, Properties of the Phonon Gas in Ultrathin Membranes at Low Temperature, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2958 (1998).
- [97] D.V. Anghel, M. Manninen, Behavior of the phonon gas in restricted geometries at low temperatures, *Phys. Rev. B* **59**, 9854 (1999).
- [98] T. Kuhn, D.V. Anghel, J.P. Pekola, M. Manninen , Y. M. Galperin, Heat transport in ultrathin dielectric membranes and bridges, *Phys. Rev. B* **70**, 125425 (2004).
- [99] T. Kuhn , D.V Anghel, Y.M. Galperin, M. Manninen, Interaction of Lamb modes with two-level systems in amorphous nanoscopic membranes, *Phys. Rev. B* **76**, 165425 (2007).
- [100] B.A. Auld B, *Acoustic Fields and Waves in Solids* 2nd edn(Malabar, FL: Robert E. Krieger Publishing, 1990).
- [101] H. Ftouni, D. Tainoff, J. Richard, K. Lulla, J. Guidi, E. Collin, O. Bourgeois, Specific heat measurement of thin suspended SiN membrane from 8 K to 300 K using the 3ω -Volklein method , *Rev. Sci. Instrum.* **84**, 094902 (2013).
- [102] B.L Zink, F. Hellman, Specific heat and thermal conductivity of low-stress amorphous Si–N membranes, *Solid State Commun.* **129**, 199 (2004).
- [103] D.V. Anghel, L. Kuzmin, Capacitively coupled hot-electron nanobolometer as far-infrared photon counter, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 293 (2003).
- [104] D.V. Anghel, A. Luukanen, J.P. Pekola, Performance of cryogenic microbolometers and calorimeters with on-chip coolers, *Appl. Phys.Lett.* **78**, 556 (2001).
- [105] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Solid State Physics*, NewYork: Harcourt College Publishers, 1976.
- [106] D.V. Anghel, T. Kuhn, Quantization of the elastic modes in an isotropic plate, *J. Phys. A: Math. Theor.* **40**, 10429 (2007).
- [107] J. M. Ziman , *Electrons and Phonons*, Oxford: ClaredonPress, 1960.
- [108] M.M. Leivo,A.J. Manninen, J.P. Pekola, Refrigeration of a dielectric membrane by superconductor/insulator/normal-metal/insulator/superconductor tunneling, *Applied Physics Letters*, **70**, 1885,(1997).

- [109] J.P. Pekola, A.J. Manninen, M.M. Leivo, K. Arutyunov, J.K. Suoknuuti, T.I. Suppala, B. Collaudin, Microrefrigeration by quasiparticle tunnelling in NIS and SIS junctions, *Phys. B: Condens. Matter* **280** (2000).
- [110] D.V. Anghel, J.P. Pekola, Noise in Refrigerating Tunnel Junctions and in Microbolometers, *J. Low Temp. Phys.* **123**, 197 (2001).

Lista contribuțiilor proprii

8.1 Lucrări publicate în reviste

8.1.1 Reviste indexate ISI

1. D.V. Anghel, **C. Caraiani**, Y. Galperin, Crossover temperature in the electron-phonon heat exchange in layered nanostructures, *Physica Scripta* **94**, 105704 (2019)
doi.org/10.1088/1402-4896/ab2346
2. **C. Caraiani**, Plasmons and loss function in a double-layer silicene-graphene heterostructure at zero-temperature, *Physics Letters A* **522**, 129792 (2024)
doi.org/10.1016/j.physleta.2024.129792
3. **C. Caraiani**, L. Ion , Loss function in a three layer silicene structure at zero temperature, accepted in *Romanian Journal of Physics* (2024)

8.2 Lucrări prezentate la conferințe

8.2.1 Conferințe internaționale

1. **C. Caraiani**, V. Baran, D. Gambacurta, A comparative study of microscopic models and transport approaches to Pygmy Dipole Resonances , TIM 18 TIMISOARA, 24-26 Mai, 2018, Universitatea de Vest Timisoara

8.2.2 Conferințe naționale

1. **C. Caraiani**, L. Ion, Behavior of paramagnetic current-current correlation function of a two-dimensional electron gas at low temperatures, Bucharest University Faculty of Physics 2022 Meeting
2. **C. Caraiani**, L. Ion, Loss function in a three layer graphene structure at zero temperature, Bucharest University Faculty of Physics 2024 Meeting