

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ CENTRO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE TELEINFORMÁTICA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE TELEINFORMÁTICA

ANTONIO FRANCISCO AGUIAR

ESTUDO DE PROPAGAÇÃO DE PLÁSMONS DE SUPERFÍCIE EM GRAFENO E REALIZAÇÃO DE PORTAS LÓGICAS OR, AND E XOR.

FORTALEZA 2017

ANTONIO FRANCISCO AGUIAR

ESTUDO DE PROPAGAÇÃO DE PLÁSMONS DE SUPERFÍCIE EM GRAFENO E REALIZAÇÃO DE PORTAS LÓGICAS OR, AND E XOR.

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Teleinformática da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Engenharia de Teleinformática. Área de Concentração: Eletromagnetismo Aplicado.

Orientador: Prof. Dr. João Batista Rosa Silva.

FORTALEZA 2017

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação Universidade Federal do Ceará Biblioteca Universitária Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

A227e Aguiar, Antonio Francisco.

Estudo de propagação de plásmons de superfície em grafeno e realização de portas lógicas OR, AND e XOR. / Antonio Francisco Aguiar. – 2017. 78 f. : il. color.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Teleinformática, Fortaleza, 2017. Orientação: Prof. Dr. João Batista Rosa Silva.

1. Portas Lógicas. 2. Grafeno. 3. Nanofotônica. 4. Plásmons. 5. Plasmônica. I. Título.

CDD 621.38

ANTONIO FRANCISCO AGUIAR

ESTUDO DE PROPAGAÇÃO DE PLÁSMONS DE SUPERFÍCIE EM GRAFENO E REALIZAÇÃO DE PORTAS LÓGICAS OR, AND E XOR.

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Teleinformática da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Engenharia de Teleinformática. Área de Concentração: Eletromagnetismo Aplicado.

Aprovada em: <u>22 /12 / 2017</u>.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. João Batista Rosa Silva (Orientador) Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Rubens Viana Ramos Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. José Wally Mendonça Menezes Instituto Federal do Ceará (IFCE)

Aos meus pais, Joaquim e Maria. A minha esposa que me apoiou nos meus objetivos.

AGRADECIMENTOS

À FUNCAP, pelo apoio financeiro com a manutenção da bolsa de auxílio. Ao Prof. Dr. João Batista Rosa e Me. Daniel Marchesi pela orientação. Aos professores participantes da banca examinadora Rubens Viana Ramos e José Wally Mendonça Menezes pelo tempo, pelas valiosas colaborações e sugestões.

Aos colegas da turma de mestrado, pelas reflexões, críticas e sugestões recebidas.

"Loucura é querer resultados diferentes fazendo tudo exatamente igual!"

Albert Einstein.

RESUMO

Este trabalho tem como objetivo o estudo de dispositivos baseados em grafeno com finalidade de obter portas lógicas. O modelo é baseado em nanofitas de grafeno imersas em substrato dielétrico, construído de forma que haja acoplamento de "surface plásmons polaritons" (SPPs) entre folhas de grafeno. Um dispositivo interferométrico foi proposto como função da condutividade das nanofitas de grafeno e das dimensões geométrica. Foi feito uma análise numérica do comportamento dos modos SPPs em relação a seu potencial químico, assim como uma varredura de parâmetros geométricos do dispositivo com a finalidade de se obter as configurações necessárias para realização das funções lógicas AND, OR e XOR para modulação OOK. Os resultados mostraram que o menor nível de extinção obtido nas saídas das portas propostas, referente ao estado ON (bit lógico 1), foi de -4,75 dB. Enquanto que o estado OFF (bit lógico 0), o maior nível de extinção foi de -11,29 dB. Para a porta OR apresentou maior eficiência de transmissão e acoplamento, em torno de -4 dB, para um potencial químico de 0,229 eV para o grafeno embebido em um substrato de sílica com permissividade relativa de 2.1. Na porta AND o desempenho de transmissão foi aproximadamente de -5 dB na região de acoplamento, quando os dois canais de entrada estão ON. Isso comprova a eficiência das portas lógicas baseadas em plasmônica de grafeno, com uma razão de extinção média mínima entre os estados OFF / ON de 6 dB para todos os tipos de funções lógicas.

Palavras-chave: Portas Lógicas. Grafeno. Nanofotônica. Plásmons. Plasmônica.

ABSTRACT

This work aims to study devices based on graphene in order to obtain logic gates. The model is based on graphene immersed nanofits in dielectric substrate, constructed in such a way that there is coupling of surface plasmon polaritons (SPPs) between sheets of graphene. An interferometric device was proposed as a function of the conductivity of the graphene nanofits and of the geometric dimensions. It was made a numerical analysis of the behavior of the SPPs modes in relation to their chemical potential, as well as a scan of geometric parameters of the device in order to obtain the necessary configurations to perform the logical AND/OR/XOR functions for OOK modulation. The results showed that the lowest extinction level obtained at the proposed gates outputs, referring to the ON state (logical bit 1), was -4.75 dB. While the OFF state (logical bit 0), the highest extinction level was -11.29 dB. For the OR gate presented higher transmission and coupling efficiency, around -4 dB, for a chemical potential of 0.229 eV for the graphene embedded in a silica substrate with relative permittivity of 2.1. In the AND gate the transmission performance was approximately -5 dB in the coupling region, when the two input channels are ON. This proves the efficiency of graphene plasmon-based logic gates with a minimum average extinction ratio between the 6 dB OFF/ON states for all logic function types.

Keywords: Logical Ports. Graph. Nanofotônica. Plásmons. Plasmonic.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Esquema de oscilações coletivas dos elétrons da banda de condução de um
metal, também nomeado por plásmons de volume27
Figura 2 - Representação geométrica de um guia de onda planar. Propagação das ondas é
ao longo da direção x, em um sistema de coordenadas do plano cartesiano30
Figura 3 - Visualização de perfil geométrico de uma única interface metal/dielétrico cujos
modos SPP se propagam
Figura 4 - Representação geométrica de três camadas, sendo uma fina camada metálica (I)
embebida em dois meios (II, III) dielétricos infinitos
Figura 5 - Configuração tipo "Kretschmann" (a) e configuração tipo "Otto" (b), fibra óptica
metalizada (c), por fim uma grade de difração (d) podem ser usados para
excitação de plásmons de superfície42
Figura 6 - Em (a) está ilustrado um arranjo hexagonal de átomos de carbono que forma
uma folha de grafeno, e (b) esta destacando sua rede reciproca composta por
seus vetores primitivos
Figura 7 - Temos em (a) uma ilustração da dispersão de energia das bandas π^* e π do
grafeno. Em (b) é apresentado o corte em (a) no plano $k_x = 0$
Figura 8 - Estrutura em camadas e esquema de aplicação de "gate voltage" entre o silício e
a nanofita de grafeno
Figura 9 - A figura mostra uma estrutura geométrica de um guia de onda composta por
uma fita de grafeno de largura <i>w</i> 53
Figura 10 - Visualização da densidade de campo elétrico próximo na direção da fita de
largura $w = 100$ nm
Figura 11 - Representação do campo elétrico próximo dos modos denominados de A-D 56
Figura 12 - Comportamento e configuração dos modos SPPs, (a) Configuração do guia de
onda baseado em nanofitas de grafeno em paralelo separados por uma distância
d = 2a. Formação dos modos SPPs (b) simétrico (Es) e (c) antissimétrico (Ea)59
Figura 13 - Configuração de um divisor de guia de ondas de grafeno 1x2 em 2D61
Figura 14 - Dispositivo interferométrico com duas entradas e uma saída
Figura 15 - Campo elétrico normalizado E_y , e distribuição dos modos SPPs em um
dispositivo interferométrico como porta lógica OR com 0,229 eV de potencial
químico, $L_c = 294,46$ nm e $d = 50$ nm. Estado de entrada (a) '10', (b) '01', (c)

	'11'
Figura 16	- Campo normalizado E_y , e distribuição dos modos SPPs em um dispositivo
	interferométrico como portal lógica AND com 0,25 eV de potencial químico,
	$L_C = 408,37$ nm e $d = 60$ nm. Estado de entrada (a) '10', (b) '01', (c) '11'67
Figura 17	- Campo elétrico normalizado E_y , e distribuição dos modos SPPs em um
	dispositivo interferométrico como porta lógica XOR com 0,212 eV de
	potencial químico, $L_C = 346,75$ nm e $d = 50$ nm. Estado de entrada (a) '10', (b)
	'01', (c) '11'
Figura 18 -	- Representação gráfica e equação Booleana referente a porta AND77
Figura 19 -	- Representação gráfica e equação Booleana para porta OR
Figura 20 -	- Representação gráfica e equação Booleana para porta XOR

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Tabela verdade e correspondentes coeficientes de extinção (dB) para porta	is lógicas
AND/OR/XOR baseadas em grafeno totalmente óticas usando modulação	o OOK.
	70
Tabela 2 - Tabela verde para porta AND.	77
Tabela 3 - Tabela verdade para porta OR	78
Tabela 4 - Tabela verde para porta XOR	78

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

2D	Bidimensional
MZI	Interferometer from Mach-Zehnder
SPPs	Surface plásmons polaritons
GSP	Graphene surface plasmon polaritons
GSPP	Dispositivos nanofotônicos baseados em plasmônica de Grafeno
RPA-RT	Random phase approximation and number conserving relaxation-time
ТМ	Transversal magnético
TE	Transversal elétrico
FDFD	Finite Difference in Frequency Domain

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO16
2	PLÁMONS19
2.1	Introdução19
2.2	Plásmons19
2.3	Propriedades dos plásmons20
2.4	Surface Plasmo Polaritons (SPP)
2.5	SSP em Múltiplas Interfaces
2.6	Excitação e Acoplamento de Plásmons40
3	GRAFENO
3.1	Introdução
3.2	Grafeno
3.3	Propriedades Elétrica e Eletrônica44
3.4	Condutividade51
4	PLÁSMONS EM GRAFENO
4.1	Introducão
4.2	SPPs Suportados no Grafeno
4.3	Sistemas de Dupla Camadas em Nanofitas de Grafeno
4.4	Aconlamento de Modos SPPs em Grafeno: Divisor 1x2
5	POPTAS I ÓCICAS ÓPTICAS BASEADAS EM CRAFENO 62
5	Introdução
5.1	
5.2	Características de Portas Logicas Opticas usando Grateno
5.3	Novas portas Lógicas Opticas64
5.3.1	Realização da Porta OR (OU)
5.3.2	Realização da Porta AND (E)
5.3.3	Realização da Porta XOR (OU Exclusivo)
5.4	Discussão dos Resultados69

6	CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS	71
	REFERÊNCIAS	73
	APÊNDICE A – SBMO/SBMag 2017	76
	ANEXO A – Fundamentos de Portas lógicas (OR, AND e XOR)	77

1 INTRODUÇÃO

A grande demanda de processamento de dados em uma rede mundial de computadores conectados tem despertado grande interesse de desenvolver dispositivos totalmente ópticos com capacidade de processar e gerenciar grandes fluxos de informações de maneira extremamente rápidas. Com objetivo de solucionar a crescente demanda de tráfego, foram e continuem em processo de evolução e desenvolvimento de dispositivos ópticos, passivos ou ativos. Podemos citar dispositivos acopladores e seu importante papel em circuitos ópticos, que se destaca no processo de chaveamento de energia a taxas elevadas.

Portas lógicas ópticas tem se destacado e despertado grande interesse para fins de proporcionar uma evolução no sistema de transmissão de telecomunicações. Dispositivos de chaveamento extremamente rápidos podem ser divididos em duas categorias de forma geral, o primeiro é chave roteadora, cujo funcionamento baseia-se por ter uma porta de entrada conectada a uma das várias portas de saída, de forma que seu roteamento tem como referência a intensidade dos sinais ou por um controle externo. Quando apenas uma porta de saída é usada, teremos uma chave roteada funcionando como interruptor liga-desliga. Já se funcionar de acordo com a intensidade na porta de entrada, o dispositivo irá funcionar como um limitador. A categoria que mais interessa neste trabalho é baseada em uma operação Booleana que é executada de acordo com os estados de entrada. Os sistemas modernos que trabalham baseados em lógica digital (aproximação lógica) podem ser usados como uma excelente ferramenta possibilitando uma distribuição inteligente ao longo do sistema. Uma característica diferente em portas lógicas ópticas é sua forma de decisão, enquanto a chave roteadora representa sua decisão pela posição ou localização do dado, a porta lógica digital tem nível lógico "0" ou "1" (MENEZES *et al.*, 2007).

As propriedades do grafeno causaram grande interesse e impacto no campo da pesquisa que inclui estudos avançados em dispositivos optoeletrônicos e em grandes áreas como física, química, computação e biomedicina. Este novo material mostrou características mais favoráveis, como confinamento eletromagnético extremo, níveis baixos de perda por dissipação e tunelamento dinâmico com mudança de potencial químico. Esses fatores indicam maior flexibilidade do que os nanodispositivos baseados em metais, o que os torna mais favoráveis para a integração fotônica devido seu *footprint* (BAO; LOH, 2012).

O grafeno se destaca como um metamaterial (basicamente são arranjos estruturados propositalmente e não observados na natureza) com grande potencial para uma vasta gama de aplicações, uma delas é proporcionar avanços na miniaturização de circuitos eletrônicos e fotônicos. Suas aplicações ainda têm muito que serem estudadas, e vem sofrendo constantes avanços rumo às aplicações práticas como dispositivos de chaveamentos e acopladores direcionais, tendo em vista que a porta lógica eletrônica trata-se de um componente muito importante nos dispositivos de processamento e transmissão de sinais. Entretanto, as portas lógicas eletrônicas têm chegado ao seu limite e surgiram algumas desvantagens nas aplicações, como falhas de latência, gerando assim menor segurança e confiabilidade.

Uma das formas de superar essas limitações seria usar uma arquitetura totalmente óptica que reduza drasticamente a propagação na porta e atrasos de mudanças de estado. Uma vantagem importante é vista quando portas lógicas são conectadas em cascata, em que todas as portas podem ser alteradas simultaneamente e os atrasos não se somam em cascada como ocorre em porta lógica eletrônica, onde os atrasos de suas portas estão em cascata. Inovações em dispositivos totalmente ópticos vem desde pesquisas com silício sobre isolador que inclui arquiteturas como interferômetro de Mach-Zehnder (MZI) e de ressonância magnética.

Várias portas lógicas totalmente óptica foram demonstradas, uma baseada em interferências ópticas lineares (FU *et al.*, 2012, ZHANG; ZHANG; LI, 2007, WEI *et al.*, 2011, FU *et al.*, 2013, LU *et al.*, 2013, PAN; WEI; XU, 2013) e outra baseada em efeitos ópticos não-lineares (ALMEIDA *et al.*, 2004, XU; LIPSON, 2007, ZHU *et al.*, 2006, LIU *et al.*, 2008, MCCUTCHEON *et al.*, 2009, LIU *et al.*, 2011). Enquanto portas logicas baseadas em grafeno podemos destacar: portas lógicas eletro-óptica de 10 Gbps usando interruptores de silício e grafeno em cascata com base em MZI e combinadores 2x1 de interferência multimodo (CHEN *et al.* 2016); no trabalho de (WU; TIAN; YANG, 2017) foi proposto um tipo de dispositivo lógico totalmente óptico baseado em *graphene surface plasmon polaritons* (ondas GSP); e no artigo de (YARAHMADI *et al.*, 2015) foi relatado o procedimento de projeto para o desenvolvimento de guia de onda plasmônica à base de grafeno de dimensões inferiores ao comprimento de onda, atuando como um interruptor THz ou uma porta lógico AND/OR.

Assim, inspirado nos resultados reportados em (WANG *et al.*, 2012), este trabalho propõe dispositivos ópticos interferométricos para realização de portas lógicas AND, OR e XOR baseadas no acoplamento SPP entre folhas de grafeno.

Esse trabalho está organizado da seguinte forma: Capítulo 1 descreve as propriedades dos plásmons em metais combinados com algum substrato dielétrico. Serão discutidas características fundamentais de um gás de elétrons livres e a formação de *surface plasmons polaritons* (SPP), assim como as formas de excitação e acoplamento dos plásmons de superfície em interface (metal/dielétrico) com uma ou mais camadas metálicas. No Capítulo 2 serão descritas as propriedades ópticas e eletrônicas do grafeno, fala-se um pouco da sua estrutura atômica que forma uma rede de Bravais e as implicações em suas propriedades físicas como a condutividade. O Capítulo 3 parte para o estudo da propagação dos modos plasmônicos em guias de ondas formadas por grafeno, com ênfase em sistemas de dupla camada e acoplamento de SPPs suportados pela estrutura. E no Capítulo 4 destaca as possibilidades de realização de novas portas lógicas usando grafeno com dopagem eletrostática (gate voltage). Partindo de análises de acoplamento total direto e interferência destrutiva ou construtiva através das propriedades geométricas e físicas que podem ser alteradas a favor de manipular a propagação dos modos SPPs para obtenção de funções lógicas; E finalmente, são apresentadas as conclusões e perspectivas desse trabalho.

2 PLÁMONS

2.1 Introdução

Este tópico tem como objetivo esclarecer as principais propriedades eletromagnéticas e características peculiares dos plásmons. Começando com uma introdução a teoria eletromagnética de ondas em metais nobres. E abordado conceitos elementares dos plásmons, como podem ser excitados e quais condições favoráveis para seu surgimento. As propagações dessas oscilações coletivas de elétrons em metais nobres podem ser descritas no âmbito clássico através das equações de Maxwell, e isso inclui nanoestruturas metálicas da ordem de alguns nanômetros. Não necessitando recorrer a mecânica quântica, em razão da alta densidade de transportadores de cargas livres, que resulta em pequenos intervalos entre os níveis de energia dos elétrons quando comparado com as excitações térmicas de energia a temperatura ambiente (MAIER, 2007). Portanto, o estudo de metais se encaixa no domínio da física clássica, no entanto não impede a extensa variedade de fenômenos ópticos inesperados devido à grande dependência das propriedades ópticas em função da frequência.

O Capítulo em questão tratara na Seção 2.2 e 2.3 de esclarecimentos dos plásmons e suas propriedades. Na Seção 2.4 como esses SPs são descritos na forma de polaritons e como interagem acoplando-se em interfaces tanto de camada única como em múltiplas camadas como destacado na Seção 2.5. E por fim na Seção 2.6 uma descrição das principais maneiras de excitação de SPPs.

2.2 Plásmons

Os plásmons são estudados com base em um modelo de gás de elétrons livres com uma determinada densidade em que se movem na direção de um fundo fixo de núcleos de íons positivos, este modelo plasmônico pode ser usado em uma ampla faixa de frequências a fim de explicar as propriedades ópticas dos metais. Em metais alcalinos a faixa espectral pode se estender até o ultravioleta, quando se trata de mentais nobres as transições interbanda estão presentes em frequências visíveis reduzindo o escopo de nossa abordagem. Em modelos de plasma, podemos desconsiderar detalhes da rede como potencial e suas interações elétronelétron. Um substituto disso é simplesmente levarmos em conta apenas alguns aspectos estruturais da banda que são incorporados na massa óptica efetiva *m* de cada elétron (MAIER, 2007).

As vibrações coletivas contidas e quantizadas em um gás de elétrons (ionizado) são responsáveis pelas propriedades peculiares que foram estudas pelos pesquisadores (PINES; BOWM, 1952, PINES, 1956) que denominaram pela primeira vez como plásmons, foram estudos descritivos das oscilações coletivas de elétrons livres em metais. Em ondas eletromagnéticas a energia é transportada em unidades quantizadas e chamadas de fótons, em plasmônica a energia é transportada na forma de quase partículas chamadas de "plásmons de superfície", esse termo foi usado a priori por Stern e Ferrell em 1960 para descrever plásmons excitados em interfaces metal/dielétrico.

No estudo de plásmons é importante destacar uma constante relativa denominada função dielétrica que retrata a resposta de um material submetido a um campo elétrico externo, que por sua vez induz dipolos, assim podendo criar seus próprios campos que são somados ao campo original. Na verdade, todos os efeitos mencionados devem ser considerados a todos os átomos do sistema (LIMA JR.; MOURA MOTA; SOMBRA, 2015).

O fato de não considerarmos colisões entre elétrons nos leva a considerar o potencial periódico em metais cristalinos causados por íons (oscilantes em suas posições de equilíbrio). Assim este modelo de estados eletrônicos é definido como ondas planas moduladas por funções periódicas relacionadas com o vetor de onda " \vec{k} " (MAIER, 2007, SZUNERITS; BOUKHERROUB, 2015).

2.3 Propriedades dos plásmons

Os metais são tipicamente conhecidos como altamente reflexivos em frequências até a parte visível do espectro, e não permitem a propagação de ondas eletromagnéticas através deles. Essa característica o qualifica para aplicações como revestimentos de guias de ondas e ressoadores que operam com radiação eletromagnética de micro-ondas e frequências de infravermelho. Em regime de baixa frequência uma aproximação pode ser considerada em condutores de condutividade finita, infinita ou fixa e se torna válida em razão de apenas uma fração insignificante das ondas eletromagnéticas penetra no metal. Ao passarmos para o regime de altas frequências, próximo ao espectro do infravermelho e parte do visível, existe penetração de campo significativamente maior, ocasionando uma dissipação assim inviabilizando uma escala de tamanho simples para dispositivos fotônicos que funcione em baixas frequências para tal regime (MAIER, 2007).

O modelo que descreve as propriedades ópticas dos plásmons em metais como um gás de elétrons livres que possui densidade numérica "*n*" é usado para estudo de fenômenos como dispersão. As propriedades dispersivas são descritas por uma função dielétrica complexa $\varepsilon(\omega)$ que fornece maior parte da descrição dos fenômenos eletromagnéticos aqui estudados. Considerado que os elétrons oscilam de acordo com o campo eletromagnético aplicado e seu movimento é amortecido em razão de colisões que acontecem com uma frequência típica $\gamma = 1/\tau$. Em que τ é o tempo de relaxamento do gás de elétrons livres, da ordem de 10^{-14} s em temperatura ambiente, que resulta em frequências da ordem de $\gamma = 100$ THz (MAIER, 2007).

Na ausência de campo eletromagnético aplicado, os elétrons da rede se movimentam de forma aleatória com velocidade média nula. Já sob um campo eletromagnético aplicado, os elétrons se movimentam de acordo com a força de Lorentz, regidos pelas leis de Newton, cuja velocidade média é diferente de zero (LIMA JR; MOURA MOTA; SOMBRA, 2015).

Um gás de elétrons em que seus elétrons ocupam estados da banda de condução possui massa efetiva (m^*) diferente das massas dos elétrons livres, e para determinação de sua massa efetiva são consideradas as interações dos elétrons com a rede cristalina. Os elétrons são considerados como "quase partículas" e seus movimentos oscilatórios como todo movimento em um sólido possui um "quantum" associado (LIMA JR; MOURA MOTA; SOMBRA, 2015).

Podemos escrever uma simples equação (2.1) do movimento de um elétron no plasma sujeito a um campo elétrico externo aplicado "E" onde m é massa do elétron e gama nesse caso é sua frequência de oscilação eletrônica como dito anteriormente (MAIER, 2007):

$$m\ddot{x} + m\gamma\dot{x} = -eE. \tag{2.1}$$

Se admitirmos um campo elétrico com dependência harmônica do tempo $E(t) = E_0 e^{i\omega t}$ pode

ser considerada uma solução particular para essa equação que descreve o movimento de oscilação do elétron $x(t) = x_0 e^{-i\omega t}$. No caso x_0 como sua amplitude complexa pode abranger qualquer alteração no campo de condução e se caracteriza como (MAIER, 2007)

$$x(t) = \frac{e}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} E(t).$$
(2.2)

Existe também uma contribuição para a polarização gerada pelos elétrons deslocados P = -nex, que é ado por (MAIER, 2007)

$$\mathbf{P} = -\frac{ne^2}{m\left(\omega^2 + i\gamma\omega\right)}\mathbf{E}.$$
(2.3)

Lembrando que $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$, logo depois de substituirmos \mathbf{P} nós temos que

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \right) \mathbf{E},$$
(2.4)

em que $\omega_p^2 = ne^2/(\varepsilon_0 m)$ é chamada de frequência de plasma do gás de elétrons livres. E por fim podemos escrever o resultado que procurávamos uma função dielétrica do gás de elétrons livres (MAIER, 2007):

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}.$$
(2.5)

A função é composta por duas componentes, uma é real e outra imaginária $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ e são da seguinte forma (MAIER, 2007)

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2}, \qquad (2.6a)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2 \tau}{\omega \left(1 + \omega^2 \tau^2\right)},\tag{2.6b}$$

nas equações (2.6a) e (2.6b) foi usado $\gamma = 1/\tau$. É interessante destacar que em (2.5) é usada para estudar um leque contendo diversos regimes de frequência em relação a frequência de colisão γ (MAIER, 2007). Para casos em que $\omega < \omega_p$ e que os metais possuem suas características metálicas. E no caso de frequências altas próximas de ω_p , em que o produto $\omega \tau \gg 1$, isso se leva a um amortecimento desprezível e $\varepsilon(\omega)$ pode ser majoritariamente real, e

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2},\tag{2.7}$$

é chamada de função dielétrica do plasma de elétrons livres sem amortecimento.

O comportamento dos metais nobre é altamente alterado por suas transições interbanda, isso acarreta no aumento de ε_2 como pode ser visto no ouro e prata (MAIER, 2007). Para o caso de uma faixa de frequências muito baixas, em que $\omega \ll \tau^{-1}$, e $\varepsilon_2 \gg \varepsilon_1$, logo as partes real e imaginária do índice de refração possuem magnitude dada por

$$n \approx \kappa = \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{2}} = \sqrt{\frac{\tau^2 \omega_p^2}{2\omega}}.$$
(2.8)

Podemos afirmar que nesta região os metais absorvem com coeficiente de absorção dado por

$$\alpha = \left(\frac{2\omega_p^2 \tau \omega}{c^2}\right)^{\frac{1}{2}}.$$
(2.9)

Agora adicionamos um termo chamado condutividade-de ou condutividade mínima σ_0 , a equação pode ser expressa usando $\sigma_0 = ne^2 \tau/m = \omega_p^2 \tau \varepsilon_0$ para que

$$\alpha = \sqrt{2\sigma_0 \omega \mu_0}. \tag{2.10}$$

De acordo com a aplicação da lei de absorção de Beers's, válida para o caso de baixas frequências, os campos dentro do metal podem cair como $e^{-\frac{\pi}{\delta}}$, e δ trata-se da profundidade da pele (penetração pelicular) dada por

$$\delta = \frac{2}{\alpha} = \frac{c}{\kappa\omega} = \sqrt{\frac{2}{\sigma_0 \omega \mu_0}}.$$
(2.11)

Em estudos mais detalhados sobre o comportamento de baixa frequência a luz da equação de transporte de Boltzmann (MAIER, 2007) demonstra que esta definição é válida com a condição de que o livre caminho médio dos elétrons seja $l = v_F \tau \ll \delta$, em que v_F é a velocidade de Fermi. Se considerarmos metais convencionais $l \approx 10 nm$ e $\delta \approx 100 nm$, logo se justifica o modelo de elétrons livres. Por outro lado, se considerarmos baixas temperaturas, o livre caminho médio pode sofrer mudanças significativas na ordem de grandeza, causando alterações na profundidade de penetração, conhecido como efeito anômalo da pele.

Anteriormente descrevíamos um metal de elétrons livres ideal, agora uma prevê descrição de como seria para o caso de um metal real. Considerando que no modelo de elétrons livres, $\varepsilon \rightarrow 1$ com $\omega \gg \omega_p$, em caso de metais nobres como ouro, prata e cobre, requer uma ampliação no modelo para a região $\omega > \omega_p$, afirmando que a faixa "d" preenchida perto da superfície de Fermi proporciona um ambiente muito polarizado. Conhecida como polarização residual por conta do fundo positivo dos núcleos de íons e pode ser caracterizada com a soma de um termo $\mathbf{P}_{\infty} = \varepsilon_0 (\varepsilon_{\infty} - 1) \mathbf{E}$, agora \mathbf{P} é apenas polarização (2.3) oriunda dos elétrons livres. Portando podemos descrever este efeito com uma constante dielétrica ε_{∞} (geralmente $1 \le \varepsilon_{\infty} \le 10$), que pode ser dada por (MAIER, 2007)

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}.$$
(2.12)

Este modelo é comprovado e demonstra claramente que em frequências visíveis suas aplicabilidades para o caso de elétrons livres, ele esclarece que os elétrons se decompõem devido a transições interbanda, proporcionando um aumento de ε_2 . Podemos intuitivamente ligar a função do plasma de elétrons livres (2.5) ao modelo clássico de P. Drude (1900) com uma condutividade AC $\sigma(\omega)$ (essa condutividade é oriunda de um potencial dependente do tempo) para os metais. Podemos demonstrar, se considerarmos a equação (2.1) escrita como (MAIER, 2007)

$$\dot{P} = -\frac{P}{\tau} - eE,\tag{2.13}$$

tal que $P = m\dot{x}$ é o momento de um elétron individual e livre. Se seguirmos os mesmos passos e argumentos anteriores descritos acima, é possível chegar a uma expressão para a condutividade AC dada por (MAIER, 2007)

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}.$$
(2.14)

Se compararmos a Equação (2.5) com (2.14), podemos escrever que (MAIER, 2007)

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\varepsilon_0}.$$
(2.15)

Depois de todo esse embasamento temos que a função dielétrica do gás de elétrons livres (2.5), logo temos um modelo de P. Drude com resposta óptica para os metais.

Não podemos deixar passar a dispersão de um gás de elétrons livres para um volume no regime $(\omega > \omega_p)$ de transparência. O estudo parte da relação de dispersão genérica dada por (MAIER, 2007)

$$k^{2} = \varepsilon \left(k, \omega\right) \frac{\omega^{2}}{c^{2}},$$
(2.16)

em seguida substituímos a Equação (2.7) na expressão genérica dada por (2.16) (MAIER, 2007), lembrando que \vec{k} é o vetor de onda, agora podemos escrever a relação de dispersão para propagação das ondas como

$$\omega^2 = \omega_p^2 + k^2 c^2. \tag{2.17}$$

Se plotarmos o gráfico dessa equação pode ser visto que, para frequências inferiores à de plásmons ($\omega < \omega_p$), a propagação de ondas eletromagnéticas transversais dentro do plasma metálico é proibida. No entanto para ($\omega > \omega_p$), podemos ter propagação dessas ondas transversais com uma velocidade de grupo igual a $v_g = d\omega/dk < c$ (MAIER, 2007).

Para um melhor esclarecimento da frequência de plasma ω_p podemos admitir um pequeno limite de amortecimento, $\varepsilon(\omega_p) = 0$ para $\vec{k} = 0$. Logo considerando que sua excitação deve coincidir com um modo longitudinal coletivo levando a $\varepsilon(k,\omega)=0$, e em particular consideramos que $\mathbf{D} = 0 = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$. Nós reconhecemos que para frequência de plasma, o campo elétrico é um campo de despolarização puro (MAIER, 2007), dado por $\mathbf{E} = -\mathbf{P}/\varepsilon_0$.

Podemos entender o significado físico de excitação em frequências de plasma (ω_p) como oscilações longitudinais do gás de elétrons de condução em um fundo positivo de núcleos de íons em uma placa de plasma. Podemos ver isso na Figura 1, onde temos uma

placa representando um deslocamento coletivo de elétrons de tamanho u, proporcionando uma densidade de carga superficial $\sigma = \pm neu$ nas bordas da laje.



Figura 1 - Esquema de oscilações coletivas dos elétrons da banda de condução de um metal, também nomeado por plásmons de volume.

Fonte: Retirada de MAIER (2007).

Levando a um campo elétrico homogêneo $E = neu/\varepsilon_0$ no interior da laje. Partindo do pressuposto quem os elétrons são submetidos a uma força restauradora, podemos descrever seu movimento usando a equação do movimento $nm\ddot{u} = -neE$. Em seguida substituímos a equação para o campo elétrico, lembrando que $\omega_p^2 = ne^2/\varepsilon_0 m$ então podemos escrever (MAIER, 2007)

$$\ddot{u} + \omega_p^2 u = 0. \tag{2.18}$$

Isto nos leva a reconhecer a frequência de plasma ω_p como natural de uma oscilação livre do mar de elétrons. Ao admitirmos que todos os elétrons se moveram em fase, logo ω_p é tomada como frequência de oscilação no limite de comprimento de onda, tal que $\vec{k} = 0$. Podemos chamar os quantum dessas oscilações de carga de plásmons de volume, para diferenciar dos plásmons de superfície que serão estudadas na próxima seção. Uma observação importante é que em razão de sua natureza longitudinal da excitação, o acoplamento das ondas eletromagnéticas transversais aos plásmons não são realizadas, e sua excitação ocorre apenas com o impacto de partículas. Consequentemente seu decaimento se manifesta através de transferência de energia para os elétrons individuais, fenômeno também denominado como amortecimento de Landau (MAIER, 2007). As oscilações longitudinais em fase de ω_p não são a única classe de oscilações, existem outros grupos de frequências mais altas com vetores de ondas finitos, em que $\varepsilon(k,\omega)=0$ pode ser aplicável. Como este estudo não foca na derivação da equação descritora da dispersão para plásmons de volume, no entanto, esta demonstração pode ser revisada em livros de física da matéria condessada como (MAIER, 2007). Uma expressão de ordem quadrática pode ser encontrada

$$\omega^2 = \omega_p^2 + \frac{6E_F k^2}{5m},$$
(2.19)

na equação E_F é a energia de Fermy. Vale ressaltar que, a dispersão pode ser calculada experimentalmente através do espalhamento inelástico, por exemplo, em espectroscopia de perda de energia eletrônica.

2.4 Surface Plasmo Polaritons (SPP)

Os plásmons polaritons de superfície são excitações oriundas de interações eletromagnéticas e se propagam na interface entre um material dielétrico e um condutor. As interações geram acoplamentos dos campos eletromagnéticos e as oscilações do plasma de elétrons livres presente no condutor. O estudo dessas interações partes da equação de onda, pois esta seção tem objetivo de elucidar os fundamentos dos SPP, em superfícies simples e planas e camada dupla de dielétricos. Quando se trata de excitações superficiais elas podem ser caracterizadas em termos de dispersão, perfil espacial e não menos importante com uma discussão sobre o coeficiente de confinamento do campo.

Vale ressaltar que o surgimento de SPPs é comum em interfaces entre dois materiais com permissividades de sinais opostos. Embora existam outros fenômenos como ressonância de SPs (SPR), que normalmente surge em nanopartículas ou em superfícies curvas, mas este trabalho foca em um dispositivo de interface plana construída por dielétrico/grafeno/dielétrico.

O estudo dos SPP é de natureza Física no que diz respeito a fenômenos eletromagnéticos e seus fundamentos tem como início o uso das equações de Maxwell, para

analisa de uma interface entre um metal e um dielétrico. Para um melhor entendimento deste estudo é ideal apresentar as equações de forma geral e aplicada a obtenção de equação de onda.

As equações de Maxwell quando consideramos um ambiente livre de cargas externas e densidades de correntes, podem ser rearranjadas para se obter a seguinte expressão

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2}.$$
(2.20)

Inicialmente temos que aplicar uma identidade de cálculo vetorial, em que o rotacional do rotacional de um vetor é igual ao gradiente do divergente desse vetor menos o seu laplaciano $\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E}$ e considerando também que $\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$, por conta da inexistência de estímulos do meio externo podemos escrever que

$$\nabla \left(-\frac{1}{\varepsilon} \mathbf{E} \cdot \nabla \varepsilon \right) - \nabla^2 \mathbf{E} = -\mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}.$$
(2.21)

Se admitirmos que ocorram pequenas mudanças no perfil dielétrico $\varepsilon = \varepsilon(r)$ para distancias da ordem do comprimento de onda óptico, a equação anterior pode ser simplificada para

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0.$$
(2.22)

Esta equação deve ser resolvida em regiões diferentes de constante ε , suas soluções têm que ser combinadas com base nas condições de fronteira adequadas. A equação ainda precisa passar por uma formulação para se adequar a descrição de propagação de ondas de propagação confinadas. Inicialmente consideramos uma dependência geral de tempo

harmônico $E(r,t) = E(r)e^{-i\omega t}$ do campo elétrico. Substituindo em (2.22), chegamos ao seguinte

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k_0^2 \varepsilon \mathbf{E} = 0, \tag{2.23}$$

lembrando que $k_0 = \omega/c$ é constante de fase da onda em propagação no vácuo, e anteriormente nós temos a equação de Helmholtz.

Próximo passo é definir a geometria de propagação (Figura 2), e por questões de simplificação o problema é abordado de forma unidimensional, ou seja, depende de uma única coordenada espacial. Logo as ondas se propagam unicamente na direção *x* do plano cartesiano e não apresentam mudanças na direção *y* no plano, isso induz que $\varepsilon = \varepsilon(z)$.

Figura 2 - Representação geométrica de um guia de onda planar. Propagação das ondas é ao longo da direção *x*, em um sistema de coordenadas do plano cartesiano.



Fonte: Reproduzida de MAIER (2007).

Seguindo com o problema de uma superfície eletromagnética, com o plano em z = 0 e coincidindo com a interface de sustentação das ondas de propagação, que podem ser representadas como $E(x, y, z) = E(z)e^{i\beta x}$. O termo complexo $\beta = k_x$ é denominado constante de propagação das ondas viajantes e representa a componente do vetor onda na direção de propagação. Ao inserirmos esse termo em (2.23) finalmente chegamos a forma adequada para equação de onda

$$\frac{\partial^2 E(z)}{\partial z^2} + \left(k_0^2 \varepsilon - \beta^2\right) E = 0, \qquad (2.24)$$

por analogia podemos deduzir uma equação semelhante para o campo magnético H.

Com a equação de onda é possível desenhar o perfil de campo no espaço e determinar a dispersão das ondas de propagação, estes campos (*E*, *H*) possuem componentes vetoriais que podem ser determinadas usando as equações de Maxwell. Estas componentes são consideradas com dependência de tempo harmônico $\left(\frac{\partial}{\partial t} = -i\omega\right)$ e se admitirmos uma propagação ao longo da direção x, $\left(\frac{\partial}{\partial x} = -i\beta\right)$ com uma uniformidade na direção y $\left(\frac{\partial}{\partial y} = 0\right)$ podemos escrever o seguinte sistema de equações para os componentes do campo (MAIER, 2007)

$$\frac{\partial E_y}{\partial z} = -i\omega\mu_0 H_x, \qquad (2.25a)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - i\beta E_z = i\omega\mu_0 H_y, \qquad (2.25b)$$

 $i\beta E_{y} = -i\omega\mu_{0}H_{z}, \qquad (2.25c)$

$$\frac{\partial H_y}{\partial z} = -i\omega\varepsilon_0 \varepsilon E_x, \qquad (2.25d)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - i\beta H_z = -i\omega\varepsilon_0 \varepsilon E_y, \qquad (2.25e)$$

$$i\beta H_y = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon E_z. \tag{2.25f}$$

Agora a partir deste sistema podemos prosseguir com a constatação de dois conjuntos de soluções que possuem detalhes de dois diferentes tipos de polarização das ondas de propagação. Primei e mais importante neste trabalho é os modos transversais elétricos TM ou do tipo p, neste modo as componentes do campo elétrico diferente de erro são apenas E_x , E_z e H_y , existem também os modos TE ou polarização s em que suas únicas componentes diferentes de zero são H_x , H_z e E_y (MAIER, 2007).

Temos então para modos TM o sistema de Equações (2.25) se restringe a

$$E_x = -i\frac{1}{\omega\varepsilon_0\varepsilon}\frac{\partial H_y}{\partial z},$$
(2.26a)

$$E_z = -\frac{\beta}{\omega\varepsilon_0\varepsilon} H_y. \tag{2.26b}$$

E podemos afirma também que a equação de onda para modo TM é

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} + \left(k_0^2 \varepsilon - \beta^2\right) H_y = 0.$$
(2.26c)

Seguindo os mesmos passos nós temos analogamente o conjunto para modos TE

$$H_x = i \frac{1}{\omega \mu_0} \frac{\partial E_y}{\partial z}, \qquad (2.27a)$$

$$H_z = -\frac{\beta}{\omega\mu_0} E_y, \qquad (2.27b)$$

e pra finalizar temos a equação de onda do modo TE

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + \left(k_0^2 \varepsilon - \beta^2\right) E_y = 0.$$
(2.27c)

Agora com estas equações podemos mergulhar fundo no estudo dos plásmons polaritons de superfície. Este estudo começa com a descrição de uma estrutura geométrica simples (Figura 3) de camada única que pode sustentar os SPPs entre um material dielétrico (z > 0) com permissividade real positiva ε_h e um condutor na parte inferior (z < 0) com uma função dielétrica $\varepsilon_m(\omega)$. Para manifestação de SPP existe uma exigência fundamental que implica Re $[\varepsilon_m] < 0$, esta condição é válida em frequências inferiores a frequências de plásmons ω_p . Lembrando que desejamos soluções para ondas confinadas em uma interface com decaimento evanescente na direção perpendicular a *z* (MAIER, 2007).

Neste estudo vamos abordar apenas os modos TM usando o conjunto de equações (2.27) em ambos os meios do sistema metal/dielétrico são escritas da seguinte forma

$$H_{y}(z) = A_{2}e^{i\beta x}e^{-k_{2}z},$$
(2.28a)

$$E_x(z) = iA_2 \frac{1}{\omega\varepsilon_0\varepsilon_d} k_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 z}, \qquad (2.28b)$$

$$E_{z}(z) = -A_{1} \frac{\beta}{\omega \varepsilon_{0} \varepsilon_{d}} e^{i\beta x} e^{-k_{2}z}, \qquad (2.28c)$$

para z > 0 temos que

$$H_{y}(z) = A_{1}e^{i\beta x}e^{k_{1}z}.$$
(2.29a)

$$E_{x}(z) = -iA_{1} \frac{1}{\omega\varepsilon_{0}\varepsilon_{m}} k_{1} e^{i\beta x} e^{k_{1}z}, \qquad (2.29b)$$

$$E_{z}(z) = -A_{1} \frac{\beta}{\omega \varepsilon_{0} \varepsilon_{m}} e^{i\beta x} e^{k_{1}z}, \qquad (2.29c)$$

no caso para $k_i \equiv k_{z,i}$ (*i* = 1, 2) representa a componente do vetor de onda perpendicular aos dois meios. Um valor define o comprimento de decaimento evanescente dos campos perpendiculares à interface, demonstram o grau de confinamento da onda (MAIER, 2007).

Figura 3 - Visualização de perfil geométrico de uma única interface metal/dielétrico cujos modos SPP se propagam.



Fonte: Adaptada de MAIER (2007).

Baseadas nas leis de continuidade entre dois meios de permissividade dielétrica diferente nos temos H_y e $\varepsilon_i E_z$ na interface tem que partir que $A_1 = A_2 \log o$

$$\frac{k_2}{k_1} = -\frac{\varepsilon_d}{\varepsilon_m}.$$
(2.30)

Convenientemente os sinais dos expoentes das expressões (2.28) e (2.29), proporciona que o confinamento das ondas de superfície ocorra quando $\operatorname{Re}[\varepsilon_m] < 0$ no caso de $\varepsilon_d > 0$, levando considerarmos que a existência dessas ondas ocorre apenas em matérias cuja parte real de sua constante dielétrica tenha sinais opostos ($\operatorname{Re}[\varepsilon_d] < -\operatorname{Re}[\varepsilon_m]$), obviamente teríamos, um

condutor e um isolante. Continuando com a manipulação das expressões, precisamos agora substituir H_y na Equação (2.26c) e chegarmos a

$$k_1^2 = \beta^2 - k_0^2 \varepsilon_m$$
 (2.31a)

$$k_2^2 = \beta^2 - k_0^2 \varepsilon_d. \tag{2.31b}$$

Agora se substituirmos estas equações em (2.30) podemos deduzir um dos resultados mais importantes dessa seção, que é a relação de dispersão dos modos SPP propagando entre as duas metades da interface metal/dielétrico

$$\beta = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_m \varepsilon_d}{\varepsilon_m + \varepsilon_d}}.$$
(2.32)

A equação que descreve o grau de dispersão é válida para a parte real e imaginária de ε_m , assim pode ser usada, para condutores com e sem dispersão. Esta relação para constante de propagação foi deduzida a partir da correspondência das componentes de campo elétrico e magnético tangencial a interface (MAIER, 2007).

Outro fato importante é que a susceptibilidade do metal é um número complexo e possui uma parte imaginaria responsável por inferir o grau de absorção de radiação do metal (perda ôhmica). Por consequência temos a constante de propagação do SPP também como um número complexo, em que sua parte real é responsável por determinar o comprimento de onda SPP e a parte imaginaria pode fornecer o comprimento de propagação.

Não discutiremos com detalhes as propriedades dos possíveis modos de propagação do tipo TE, em razão deles não existirem no caso do arranjo contendo metais nobres, no entanto podem ser encontrados em casos de substituição do metal nobre por uma fina película de Grafeno. A inexistência desse modo de polarização é fruto das condições de fronteira (continuidade) impostas na resolução da equação de onda, como visto anteriormente (TM), para chegar a uma expressão para a dispersão de SPP propagando na interface metal/dielétrico.

2.5 SSP em Múltiplas Interfaces

Agora analisaremos os fundamentos mais importantes no que dizem respeito a estruturas multicamadas e como os SPPs se comportam em finas camadas de metal imerso em um material dielétrico. Primeiro podemos afirmar que cada interface única pode suportar modos SPP e quando a separação entre duas interfaces opostas é comparável ou menor que o comprimento de decaimento evanescente determinado por $(\hat{z}=1/|k_z|)$ cuja a componente está relacionado com vetor de onda perpendicular à interface entre os dois meios, essas interações que ocorrem entre os SPPs são chamados de modos acoplados (MAIER, 2007).

Para maior entendimento das propriedades gerais dos SPPs acoplados, focaremos em uma estrutura geométrica com três camadas como podemos observar na Figura 4 (MAIER, 2007). Basicamente temos uma fina camada de um material metálico (I) posto ente duas camadas grosas de substrato dielétrico (II, III), um sistema heterógeno composto por isolante/condutor/isolante. Esta análise tem interesse no estudo dos modos da borda de baixa ordem, lembrando também que devemos começar com os modos TM não-oscilatórios na direção normal a *z*, usando a Equação (2.32). Considerando para z > a temos as componentes de campo como (MAIER, 2007)

$$H_{v} = A e^{i\beta x} e^{-k_{3}z}, \qquad (2.33a)$$

$$E_x = iA \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_3} k_3 e^{i\beta x} e^{-k_3 z} .$$
(2.33b)

$$E_z = -A \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_3} e^{i\beta x} e^{-k_3 z}, \qquad (2.33c)$$
Figura 4 - Representação geométrica de três camadas, sendo uma fina camada metálica (I) embebida em dois meios (II, III) dielétricos infinitos.



Fonte: Adaptada de MAIER (2007)

e na região z < -a nós temos (MAIER, 2007)

$$H_y = Be^{i\beta x}e^{k_2 z}, (2.34a)$$

$$E_x = -iB \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} k_2 e^{i\beta x} e^{k_2 z}, \qquad (2.34b)$$

$$E_z = -B \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} e^{i\beta x} e^{k_2 z}.$$
(2.34c)

Podemos afirmar que os campos decaem exponencialmente nos meios isolantes (II, III). Aqui novamente por conveniência admitimos a componente do vetor de onda perpendicular as interfaces como $k_i \equiv k_{z,i}$.

Na parte central -a < z < a onde está localizada a folha metálica, temos uma interface em contato com a parte inferior e superior das camadas dielétricas, proporcionando as seguintes equações (MAIER, 2007)

$$H_{v} = Ce^{i\beta x}e^{k_{1}z} + De^{i\beta x}e^{-k_{1}z},$$
(2.35a)

$$E_{x} = -iC \frac{1}{\omega \varepsilon_{0} \varepsilon_{1}} k_{1} e^{i\beta x} e^{k_{1} z} + iD \frac{1}{\omega \varepsilon_{0} \varepsilon_{1}} k_{1} e^{i\beta x} e^{-k_{1} z}, \qquad (2.35b)$$

$$E_{z} = C \frac{\beta}{\omega \varepsilon_{0} \varepsilon_{1}} e^{i\beta x} e^{k_{1}z} + D \frac{\beta}{\omega \varepsilon_{0} \varepsilon_{1}} e^{i\beta x} e^{-k_{1}z}.$$
(2.35c)

A condição de fronteira para a continuidade de H_y e E_x define

$$Ae^{-k_3a} = Ce^{k_1a} + De^{-k_1a}, (2.36a)$$

$$\frac{A}{\varepsilon_3}k_3e^{-k_3a} = -\frac{C}{\varepsilon_1}k_1e^{k_1a} + \frac{D}{\varepsilon_1}k_1e^{-k_1a},$$
(2.36a)

e para z = a temos

$$Be^{-k_2a} = Ce^{-k_1a} + De^{k_1a}, (2.37a)$$

$$-\frac{B}{\varepsilon_2}k_2e^{-k_2a} = -\frac{C}{\varepsilon_1}k_1e^{-k_1a} + \frac{D}{\varepsilon_1}k_1e^{k_1a},$$
(2.37a)

do lado oposto em z = -a, existira também um sistema linear de quatro equações acopladas. É preciso que H_y se adeque a (2.26c) nos três domínios diferentes, por meio de

$$k_i^2 = \beta^2 - k_0^2 \varepsilon_i. \tag{2.38}$$

Sendo que i = 1, 2, 3. Ao resolvermos o sistema de equações lineares chegaremos a uma expressão implícita relacionada a dispersão que liga β e ω através de (MAIER, 2007)

$$e^{-4k_{1}a} = \frac{k_{1}/\varepsilon_{1} + k_{2}/\varepsilon_{2}}{k_{1}/\varepsilon_{1} - k_{2}/\varepsilon_{2}} \frac{k_{1}/\varepsilon_{1} + k_{3}/\varepsilon_{3}}{k_{1}/\varepsilon_{1} - k_{3}/\varepsilon_{3}}.$$
(2.39)

Uma observação importante é que quando temos uma largura infinita ($a \rightarrow \infty$), a Equação (2.39) pode ser aproximada para (2.30), reduzindo-se a equação de dois modos SPP desacoplados nas respectivas interfaces.

Podemos considerar um caso importante para estudos neste trabalho, em que os dois substratos (II e III) são iguais logo suas repostas dielétricas também são iguais, $\varepsilon_2 = \varepsilon_3$ que leva a $k_2 = k_3$. Isso nos permite ter a relação (2.31) de dispersão dividida em duas equações, escrita como

$$\tanh k_1 a = -\frac{k_2 \varepsilon_1}{k_1 \varepsilon_2},\tag{2.40a}$$

$$\tanh k_1 a = -\frac{k_1 \varepsilon_2}{k_2 \varepsilon_1}.$$
(2.40b)

Através da Equação (2.40a), é demonstrada a paridade vetorial das componentes dos campos, e neste caso $E_x(z)$ é ímpar com $H_y(z)$ e $E_z(z)$ sendo pares, enquanto no caso da Equação (2.40b) qualifica os modos de paridade vetorial tal que $E_x(z)$ é função par com $H_y(z)$ e $E_z(z)$ são funções impares (MAIER, 2007).

Não podemos deixar de destacar que em estruturas simétricas de múltiplas interfaces é possível diminuir drasticamente a perda de propagação do SPP. Uma estrutura semelhante a da Figura 4, onde ocorrem dois SPPs idênticos associados ás duas interfaces entre metal e dielétrico (superior e inferior), consequentemente tornam-se acoplados, originando modos simétricos e assimétricos (com relação a orientação do campo elétrico principal) com constante de propagação determinadas através da relação de dispersão implícita (SHALAEV *et al.*, 2007):

$$\tanh\left(k_{m}a\right) = \frac{2\varepsilon_{d}k_{d}\varepsilon_{m}k_{m}}{\varepsilon_{d}^{2}k_{m}^{2} + \varepsilon_{m}^{2}k_{d}^{2}},$$
(2.41)

nesta equação temos $k_d = \sqrt{\beta^2 - \varepsilon_d k_0^2}$ e $k_m = \sqrt{\beta^2 - \varepsilon_m k_0^2}$ com $k_0 = \omega/c$, com "a" sendo espessura da camada de metal.

2.6 Excitação e Acoplamento de Plásmons

Uma abordagem comum para estudo de materiais em física do estado sólido é o conceito de plasma, em metais é considerado uma alta densidade de elétrons livres da ordem de 10^{23} cm⁻³. Se inicialmente desconsiderarmos a as perturbações causadas pela rede, podemos considerar as oscilações do plasma se propagando ao longo do metal com *quantum* de energia, associado ao plásmon de volume $\hbar \omega_p = \hbar \sqrt{4\pi n_e q_e^2/m_e}$, onde n_e , q_e e m_e são a densidade de elétrons, carga do elétron e massa, respectivamente (SZUNERITS, BOUKHERROUB, 2015). Lembrando que em limites planares, surge um novo modo, já conhecido como plásmon de superfície (PS), que possui vasto espectro de frequências que dependem do vetor de onda \vec{k} .

Considerando um meio ideal semi-infinito, admitimos que a relação de dispersão para ondas de plasma de superfície (OPS) é localizada a direita da linha de luz, isso quer dizer que os SPs têm maior vetor de onda quando comparados ao das ondas de luz com mesma energia $\hbar \omega$. Também conhecidos como plásmons de superfície "não radiativos", logo, não podem decair emitindo um fóton, ou no caso oposto, a luz incidente em uma superfície ideal não pode excitar um SP (SZUNERITS; BOUKHERROUB, 2015).

No entanto, se considerarmos situações definidas, os SPs podem acoplar em SPPs (produtores de luz), em que os campos eletromagnéticos decaem exponencialmente na região perpendicular à superfície cujo seus máximos podem ser medidos na interface, isso tipicamente visto em ondas de superfície. Com base na relação básica de dispersão do SP, podemos afirmar que o aumento do momento do fóton em relação a linha de luz se relaciona a ligação do SP a superfície. Existem divergências mínimas de momento resultante entre a luz e os SPs com mesma frequência, essa incompatibilidade deve ser balanceada se usarmos a luz para gerar SPs (SZUNERITS; BOUKHERROUB, 2015).

Em razão dessa necessidade de preenchimento do momento, existem três técnicas mais conhecidas para excitação de SPs. A primeira consiste no acoplamento de um prisma

para que o momento dos fótons da luz incidente seja ajustado ao momento do SP na interface dielétrico/metal. A segunda maneira seria com um tipo de fibra metalizada, essa fibra possui revestimento de metal com revestimento de sílica onde ocorrera excitação. Terceira maneira é baseada numa espécie de enrugamento periódico na superfície do metal. Outra técnica não ilustrada neste trabalho faz uso de dispersão causada por defeitos topológicos na superfície, por exemplo, um orifício com tamanho de sub-comprimento de onda. Vale salientar que a difração (espalhamento) da luz através de uma grade metálica permite combinar a luz incidente com o momento, logo pode ser acoplada aos SPs. Inversamente um processo importante pode acoplar o modo SP de forma não radiativa, acoplando à luz com boa eficiência e de forma controlada, atributos importantes para o desenvolvimento de diapositivos fotônicos a base de SP.

Anteriormente na equação (2.32) que caracteriza a magnitude do vetor de onda do PS em uma estrutura com interfaces paralelas cujo os meios possuem permissividades ε_m e ε_d , a excitação do PS ocorre somente se o número de onda do plásmon for maior que o do campo incidente k_0 . Neste caso para excitação por acoplamento de um prisma, nos leva a duas configurações para ter um aumento do vetor de onda da luz incidente, a Kretschmann e Otto, mostradas na Figura 5, o prisma é usado pra aumentar o número de onda da luz incidente para $k_p = n_1 k_0$, em que n_1 é o índice de refração do prisma, isso possibilita a excitação do SP (CAVALCANTI, 2013).





Fonte: Retirada de CAVALCANTI (2013).

Para o caso da fibra óptica, sua capa é removida e substituída por um revestimento metálico sobre o núcleo da fibra, como podemos ver na Figura 5c. Essa configuração tem princípio de funcionamento semelhante ao que vimos no acoplamento de um prisma na configuração Kretschmann, neste caso o núcleo da fibra é responsável por aumentar o número de onda do feixe de luz incidente no núcleo e assim gerando plásmons de superfície. O princípio da grade de difração ilustrada na Figura 5d é sua modulação da superfície periódica que adiciona ou subtrai múltiplos inteiros do número de onda da grade em rela ao número de onda incidente, a polarização causada pela rugosidade faz β superar o número de onda dos fótons incidentes e ocasionando a excitação do SP, lembrando que isso depende da constante de periodicidade da rede e do ângulo de incidência do feixe (CAVALCANTI, 2013).

3 GRAFENO

3.1 Introdução

No capítulo anterior foi abordado basicamente o funcionamento dos plásmons com foco em SPP. Agora entenderemos um pouco mais sobre as propriedades básicas do grafeno, como suas características eletrônicas e elétricas bem como suas propriedades ópticas e como sua condutividade óptica pode ser determinada e usada para manipular suas propriedades físicas. A seção seguinte trata um pouco do histórico do grafeno e suas propriedades peculiares descobertas ao longo dos anos, na Seção 3.3 tem o intuito de descrever o comportamento eletrônico, bem como, suas estruturas de bandas e suas implicações na eletrônica de dispositivos baseados em grafeno. As interações entre as bandas de condução e de valência são analisadas a fim de determinar a condutividade interbanda e intrabanda como vermos na última seção deste capítulo.

3.2 Grafeno

O grafeno foi sintetizado pela primeira vez em laboratório no ano de 2004 por dois pesquisadores da Universidade de Manchester, a partir de estudos da substância obtida do grafite como pioneiro na classe de materiais com estrutura cristalina e bidimensional (2D). Sua estrutura é composta de uma monocamada de átomos de carbono em arranjo de rede hexagonal em forma de favo de mel. Este metamaterial despertou grande interesse na comunidade científica, dentre outras coisas, devido às suas propriedades ópticas e eletrônicas que apresentavam grande potencial na evolução das tecnologias de dispositivos optoeletrônicos. Entre essas características, destaca-se a sua mobilidade de transporte de carga, que pode chegar a 200.000 $cm^2V^{-1}s^{-1}$ (WU, 2017), permitindo projetar dispositivos optoeletrônicos de alta velocidade. Outra característica de igual importância é o forte acoplamento com a luz incidente, possibilitando a geração de plásmons ao longo da superfície do grafeno.

Sua estrutura única de espessura atômica de aproximadamente 0.34 nm (WU, 2017) possui excepcional capacidade de transporte eletrônico em temperatura ambiente, em que próximo ao nível de Fermi possui uma curva de dispersão linear, obtendo-se elétrons com

massa efetiva nula, o que nos permite alterar quase instantaneamente sua condutividade por meio da aplicação de uma tensão elétrica que altere seu potencial químico.

O grafeno pode sofrer atenuações oriundas de impurezas e fônons presentes em nanofitas, e podem ser determinadas com um método conhecido como *"random phase approximation and number conserving relaxation-time* (RPA-RT)" em que um dos parâmetros é o "lifetime" (tempo de relaxação; Γ), (PARK *et al.*, 2017). Lembrando que segundo o modelo de P. Drude (1900), antes de um elétron colidir contra um íon (de forma aleatória), ele se movimentou livremente durante um curto período de tempo antes de sua última colisão. Esse intervalo de tempo é conhecido como tempo de relaxação ou tempo livre médio entre colisões.

Podemos afirmar que o grafeno é "intrínseco", no momento em que seu potencial químico que corresponde ao nível de Fermi nos pontos de Dirac, tem valor igual à zero, raramente pode ser encontrado nessa forma devido à grande recorrência de pequenas heterogeneidades espaciais. No entanto, o grafeno pode ser definido como "extrínseco" a partir do momento que inserimos elétrons na banda de condução ou lacunas na banda de valência, isso acontece quando aplicamos um "gate voltage" (BRANT, 2011), por exemplo. Lembrando que as bandas de energia podem ser preenchidas até o nível de energia de Fermi, que é determinado de acordo com o potencial eletrostático aplicado no grafeno. Logo sua condutividade fica dependente da carga inserida no entorno dos pontos de Dirac.

3.3 Propriedades Elétrica e Eletrônica

O grafeno é composto por átomos de carbono, e pode ser observado em várias camadas na composição do grafite. Uma monocamada atômica de carbono formando uma estrutura de favos de mel é descrição simples do que é o grafeno, um arranjo hexagonal de átomos de carbono que formam uma rede de Bravias composta por dois átomos de carbono A e B por célula unitária, separados por uma distância $a_0 = 0,142$ nm ao logo da direção $\vec{a_1} + \vec{a_2}$ para $\vec{a_1} = a\hat{x} + b\hat{y}$ e $\vec{a_2} = a\hat{x} - b\hat{y}$ com $a = 3a_0/2$ e $b = \sqrt{3}a_0/2$ (BRANT, 2011). Logo a rede hexagonal do grafeno pode ser observada como duas sub-redes equivalentes, A e B, deslocadas uma em relação à outra.

Na Figura 6a podemos visualizar o arranjo hexagonal de átomos de carbono presentes na composição de uma folha de grafeno com sua rede de Bravais composta por dois atomos de carbono por celula unitária. A área na cor cinza destaca uma célula unitária composta por dois átomos de carbono e seus vetores primitivos $\vec{a}_1 \in \vec{a}_2$, em que representam o tamanho de cada uma das linhas pontilhadas na área cinza da Figura 6b. Podemos observar como duas redes Bravias equivalentes que se interpenetram, a rede A destacada com pontos roxos, e rede B, em pontos rosa. Também podemos observar na Figura 6b a rede reciproca mostrada em (a). Temos que $\vec{A}_1 \in \vec{A}_2$ em (b) representam os vetores primitivos da rede reciproca que podem ser expressos como $\vec{A}_1 = \frac{\pi}{a}\hat{x} + \frac{\pi}{b}\hat{y}$ e $\vec{A}_2 = \frac{\pi}{a}\hat{x} - \frac{\pi}{b}\hat{y}$, e em cinza está representada a primeira zona de Brillouin cujas as coordenadas $(0,\pm\frac{2\pi}{3b})$ e $(\pm\frac{\pi}{b},\pm\frac{\pi}{3b})$ formam um hexágona, já os pontos K e K' definem os pontos onde as bandas de valência e de condução se tocam (BRANT, 2011).

Figura 6 - Em (a) está ilustrado um arranjo hexagonal de átomos de carbono que forma uma folha de grafeno, e (b) está destacando sua rede reciproca composta por seus vetores primitivos.



Fonte: Reproduzida de BRANT (2011).

Precisamos destacar que os átomos de carbono responsáveis pela formação de uma folha de grafeno possuem seus orbitais s, $p_x e p_y$ em hibridização sp^2 onde ocorrem as ligações do tipo σ na folha. Este tipo de hibridização o elétron do orbital de subnível 2s ganha mais energia e passa a ocupar um orbital de maior energia, enquanto elétrons dos orbitais $2p_y$ e $2p_z$ do subnível p perdem energia e passam a ocupar orbitais de menor energia, Enquanto os orbitais p_z , que são perpendiculares ao plano da folha, dão origem às ligações covalentes π , e são responsáveis por suas propriedades eletrônicas desse sólido (SAITO; DRESSELHAUS; DRESSELHAUS, 1998). Vale lembrar que a configuração espacial da hibridação sp^2 é trigonal plana, como pode ser visto na Figura 6b. Com três orbitais híbridos no plano que formam um ângulo de 120° entre se é um orbital p perpendicular ao plano. Essa forma de hibridação é comum em átomos de carbono com uma ligação dubla e duas ligações simples tal que três ligações são do tipo σ no plano e uma π perpendicular ao plano.

Agora partimos para o estudo de suas bandas de energia, e com base no que foi dito na seção anterior, podemos calcular o *tight-binding* das bandas de energia do grafeno usando como base as funções de Bloch obtidas a partir dos orbitais atômicos p_z . Baseando-se nos cálculos e considerando somente as interações entre primeiros vizinhos, podemos chegar a seguinte expressão para a relação de dispersão das bandas de energia oriundas dos orbitais π (SAITO; DRESSELHAUS; DRESSELHAUS, 1998):

$$E = \pm t \sqrt{1 + 4\cos\left(ak_x\right)\cos\left(bk_y\right) + 4\cos^2\left(bk_y\right)},\tag{3.1}$$

na equação os sinais + e – determinam as bandas $\pi^* e \pi$ do grafeno, nessa ordem, onde *t* é o elemento de matriz de transferência que vale 3,033 eV em grafeno (SAITO; DRESSELHAUS; DRESSELHAUS, 1998). O fato de existir dois elétrons π por célula unitária, assim temos a banda π preenchida e a energia de Fermi passa ao topo da banda nos pontos K e K', localizadas nas bordas da zona de Brillouin, logo as duas bandas são degeneradas. Observamos que nos três pontos K e os três pontos K' são formados os vales nas bandas de condução, π^* , e de valência, π . Podemos afirmar que temos uma degenerescência com vale igual a 2, considerando que 1/3 de cada vale está contido na primeira zona de Brillouin.

Para simplificar, consideramos energias próximas a de Fermi, com vetores de onda \vec{k} em torno dos pontos K e K', a Equação (3.1) pode ser aproximada para a seguinte expressão que descreve a dispersão de energia do grafeno em torno dos pontos K ou K' (CASTRO NETO *et al.*, 2009):

$$E(k) = \pm V_F \hbar |k|, \qquad (3.2)$$

onde o símbolo (+) representa a banda de condução, e (-) representa a banda de valência e

 $V_F = 3ta_0/2\hbar \approx 1 \times 10^6 \ m/s$.

A Figura 7a mostra a representação gráfica da dispersão das bandas de energia do grafeno extraídas da Equação (3.1), com a região na cor cinza trata-se da primeira zona de Brillouin. Na Figura 7b uma seção de plano situado em $k_x = 0$ onde a curva pontilhada representa a banda oriunda da Equação (3.1), e com a linha cheia temos a aproximação linear calculada usando a Equação (3.2). Tal relação linear é válida no espectro de luz visível logo inclui as frequências destinadas a telecomunicações.

Figura 7 - Temos em (a) uma ilustração da dispersão de energia das bandas $\pi^* e \pi$ do grafeno. Em (b) é apresentado o corte em (a) no plano $k_x = 0$.



Fonte: Retira de BRANT (2011).

Ao analisarmos a Equação (3.1) para dispersão linear de energia podemos notar uma semelhança para com a equação responsável por descrever a dispersão de energia de partículas relativísticas $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$ com $m_0 = 0$ e $p = h/\lambda$, para esta situação V_F faz o papel de velocidade da luz c. Isso permite que os portadores de carga no grafeno possam ser vistos como partículas relativísticas (GEIM; NOVOSELOV, 2007). Devido a existência de duas sub-redes equivalentes com dois átomos por célula unitária, tendo que a descrição dos portadores de carga no grafeno seja feita por funções de onda de duas componentes, em que cada uma delas se relaciona com uma das sub-redes.

O fato do espectro linear de energia do grafeno e a descrição dos portadores de carga por uma equação do tipo Dirac, (3.3), levam a varia analogias entre fenômenos de transporte em grafeno e fenômenos estudados pela eletrodinâmica quântica. Essa interpretação nos permite atribui uma "quiralidade" aos portadores de carga no grafeno. O

aspecto de "quiralidade" vem da projeção do pseudo-spin em direção ao movimento dos portadores de carga. Podendo ser positiva para elétrons e negativa no caso de buracos. Uma outra consequência do uso de uma equação de Dirac e uma análise do espectro de energia considerando muito semelhante ao de partículas relativísticas, tão logo esses portadores são chamados de férmios de Dirac sem massa ou partículas quirais de massa nula (GEIM; NOVOSELOV, 2007).

Como dito anteriormente, a relação de dispersão de energia tem comportamento linear nas proximidades dos pontos de Dirac, nos leva a afirmar que os portadores de carga no grafeno podem ser vistos como partículas relativísticas de massa igual a zero. Partindo do fato da existência de duas sub-redes equivalentes com dois átomos por célula unitária, o grafeno deve ser descrito por funções de onda com duas componentes, em que cada uma delas representa a contribuição de uma das sub-redes. Lembrando que é possível aplicar a equação de Dirac por conta do espectro de energia ser semelhante ao de partículas relativísticas, assim os portadores de carga podem se comportar como férmios de Dirac sem massa ou como partículas quirais sem massa. Tão logo, o hamiltoniano usado para descrever os portadores de carga é escrito como (GEIM; NOVOSELOV, 2007)

$$\hat{H} = \hbar V_F \begin{bmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{bmatrix} = \hbar V_F \vec{\sigma} \cdot \vec{k},$$
(3.3)

na equação $\vec{\sigma}$ é o conjunto de matrizes de Pauli $\sigma_x e \sigma_y$, $\vec{\sigma} = (\sigma_x + \sigma_y) e \vec{k}$ é o vetor de onda nas proximidades dos pontos K e K', denominados como pontos de Dirac (GEIM; NOVOSELOV, 2007).

O comportamento dos portadores de carga aqui descritos por funções de onda com duas componentes é semelhante ao usado para descrever funções de onda de spin. Entretanto, as duas componentes da função de onda estão relacionadas com cada uma das sub-redes da estrutura do grafeno e não ao spin das partículas. Isso nos leva a afirmar que os portadores de carga no grafeno possuem associados a eles um pseudo-spin, $\vec{\sigma}$. Esse suposto spin está associado à contribuição de cada sub-rede para a função de onda dos portadores de carga, logo, os elétrons e buracos que possuam pseudo-spin estão na mesma direção e podem ser imaginados como se possuíssem origem na mesma sub-rede (GEIM; NOVOSELOV, 2007). As propriedades eletrônicas do grafeno se refletem no comprimento de onda dos modos GSPP (λ_{GSPP}), logo também influencia sua distância de propagação L_{GSPP} (comprimento em que o modo GSPP perde sua energia até 1/*e* do valor inicial) que é calculado a partir dos seus vetores de onda, a partir (SHALAEV *et al.*, 2007, OOI *et al.*, 2013):

$$\lambda_{GSPP} = \frac{2\pi}{\text{Re}[\beta]}$$
(3.4a)

$$L_{GSPP} = \frac{1}{\operatorname{Im}[\beta]}.$$
(3.4b)

Considerando regiões espectrais frequências de baixa absorção, podemos obter uma relação matemática para o cálculo das perdas de energia, dada por:

$$\rho = \omega \tau = \frac{2\pi c\tau}{\lambda_0}.$$
(3.5)

Como podemos ver na Equação 3.5, é preciso conhecer o tempo de relaxamento para obter a perda de energia. A título de exemplo, esse tempo de relaxamento pode ser determinado usando a seguinte expressão para uma nanofita de grafeno dopada $\tau = \mu_c \mu/eV_F^2$ (WANG *et al.*, 2012, LIMA JR; SOMBRA, 2014), lembrando que μ é a mobilidade eletrônica.

O tempo de relaxamento leva em conta as perdas de energia dos modos GSPP gerados por absorção dos fótons pelos elétrons, no qual é bem mais significativo no regime interbanda do que no regime intrabanda. Vale ressaltar, que os átomos que compõem a rede cristalina têm oscilação natural em torno de suas posições de equilíbrio no cristal (vibrações da rede). Por conta dessas interações que proporciona ligação dos átomos no cristal (e no grafeno) os movimentos oscilatórios e coletivos podem ser vistos como normais de vibração em um sistema, nos quais possuem comprimentos de onda.

O grafeno pode ser dopado via "gate voltage" em temperaturas superiores a 200 K, e seus portadores de carga interagem mais fortemente com fônons ópticos do que com fônons acústicos, em razão de que sua transferência de energia em interações com os fônons ópticos serem bem mais intensa (DONG; XU; TAN, 2010). Vale destacar que o processo de relaxamento dos elétrons em grafeno é muito sensível a mudança da densidade de carga, essa densidade depende da diferença de tensão aplicada.

O doping eletrostático é aplicado entre um meio externo e a nanofita de grafeno, ou entre duas nanofitas de grafeno, e também entre um meio externo e uma das fitas paralelas, levando em conta o tipo de dispositivo nanofotônico que está sendo estudado. A Figura 8 ilustra um esquema para dopagem por "gate voltage"

Figura 8 - Estrutura em camadas e esquema de aplicação de "gate voltage" entre o silício e a nanofita de grafeno.



Fonte: Adaptado de LIMA JR; MOURA MOTA; SOMBRA (2017).

Com a liberdade de controle do "gate voltage" é possível fazer mudanças convenientes no potencial químico do grafeno, permitindo-o operar tanto na banda de condução como na banda de valência, isso a critério da voltagem aplicada que influencia o processo de difusão de cargas negativas ou positivas em um sistema plasmônico sob a influência de um campo elétrico (LIMA JR; MOURA MOTA; SOMBRA, 2015).

Uma das formas de obter esta dopagem em um dispositivo constituído de uma nanofita de grafeno é depositar um substrato de óxido de silício de espessura precisamente bem definida, em que deve apoiar-se em silício com grande teor de dopagem. Silício altamente dopado funciona aproximadamente como um contato metálico, considerando o dióxido de silício como isolante e o grafeno como um semicondutor de gap nulo, logo surge um efeito de campo em que é possível o controle da densidade de carga. Esses efeitos são alcançados aplicando uma diferença de potencial entre o grafeno e o silício.

3.4 Condutividade

As propriedades ópticas de uma monocamada de grafeno começam a ser determinadas a partir de sua condutividade dinâmica $\sigma(\omega)$ da folha de grafeno, que é derivada da fórmula do Kubo (OOI *et al.* 2013). Que é resultante de uma contribuição intrabanda dada por

$$\sigma_{intra}(\omega) = \frac{ie^2 \mu_c}{\pi \hbar^2 (\omega + i\tau^{-1})},$$
(3.6)

e uma contribuição interbanda,

$$\sigma_{\text{inter}} = \frac{ie^2}{4\pi\hbar} \ln\left(\frac{2|\mu_c| - (\omega + i\tau^{-1})\hbar}{2|\mu_c| + (\omega + i\tau^{-1})\hbar}\right).$$
(3.7)

As equações (3.6) e (3.7) são válidas sob a condição $k_BT \ll |\mu_c|$, em que *i* é unidade imaginária, *e* é a carga do elétron, μ_c se trata do potencial químico, \hbar é a constante de Planck reduzida, ω frequência angular em radianos, τ é o tempo de relaxação, k_B é a constante de Boltzmann e *T* a temperatura. Sua condutividade total é a soma das duas contribuições, $\sigma_g(\omega) = \sigma_{intra} + \sigma_{inter}$, essas duas partes contribuintes determinam quais modos de propagação são permitidos, e no caso podem ser constatados a presença de dois modos: o transversal magnético (TM) que surge sob as condições de um potencial químico $\mu_c > 0$ e Im(σ_{intra}) > 0, e o modo transversal elétrico (TE), requer que e $|\mu_c| < \hbar\omega/2$ (OOI *et al.* 2013). Estes fatos nos permitem controlar a condutividade e consequência disso podem definir quais modos SPPs serão permitidos a propagação em uma folha de grafeno de acordo com μ_c , que pode ser controlado com dopagem química ou através de um "gate voltage".

4 PLÁSMONS EM GRAFENO

4.1 Introdução

Os avanços em pesquisas com grafeno vêm aumentando significativamente e contribuindo para o entendimento de efeitos físicos fundamentais únicos que apontam um caminho de aplicações tecnológicas muito promissoras. Em meio a tantas aplicações este trabalho tem foco em dispositivos miniaturizados com excitação de SPPs em nanofitas de grafeno imerso entre dois dielétricos.

Com objetivo de esclarecer conceitos básicos de plásmons em superfícies de grafeno a Seção 4.2 expõe o comportamento do campo elétrico próximo a uma única camada de átomos de carbono e suas propriedades vantajosas quando usadas na construção de guias de ondas no mínimo versáteis. Posteriormente, na Seção 4.3, é mostrado o comportamento do campo próximo em duas fitas quanto deslocadas verticalmente ou da outra. São importantes para compreensão dos modos de propagação e como eles se comportam quando interagem entre se, e como isso afeta a densidade de campo elétrico.

4.2 SPPs Suportados no Grafeno

Podemos destacar que o grafeno se permite carregar tanto sinais eletromagnéticos como correntes elétricas através dos mesmos circuitos finíssimos, que por sua vez possibilita um maior número de interconexões proporcionando uma taxa maior de transmissão de dados. Com base nessa motivação anteriormente estudos comprovaram que fitas de grafeno podem ser usadas para embarcar radiofrequências de banda larga com frequências que podem chegar a 10 GHz dentro de um circuito integrado, abrindo grandes possibilidades na construção de guias de ondas. Estas possuem duas grandes características, a primeira é que apesar de serem quase transparentes, o guia com grafeno é capaz de suportar plásmons de superfície em frequências da ordem de THz, e sua concentração de portadores (condutividade) é controlada através de doping eletrostático. Para que possamos visualizar melhor este guia de onda, a Figura 9 ilustra uma geometria construída com uma camada única de grafeno imersa em dois meios dielétricos, com constantes dielétricas ε_1 e ε_2 . O modo de propagação está na direção do eixo *y*, e "**q**" é o vetor de onda modal em unidades adimensionais. A coloração do gráfico

representa um exemplo de distribuição espacial da componente *x* do campo elétrico no plano *xy* e as setas indicam as linhas de campo elétrico no plano *xz* (NIKITIN *et al.*, 2011).



Figura 9 - A seguir uma estrutura geométrica de um guia de onda composta por uma fita de grafeno de largura w.

Fonte: Retirada de NIKITIN et al. (2011).

Outros estudos mostram como seria uma secção transversal de uma folha de grafeno e os possíveis modos de excitação. Os resultados de (CHRISTENSEN *et al.*, 2011) foram capazes de classificar as soluções relevantes para propagação de plásmons em função da frequência ω e vetor de onda paralelo k_{\parallel} a direção de propagação, assim os campos associados e correntes possuam dependência do tempo e de *z* ao longo da folha. Através da análise de uma fita de grafeno com largura w = 100 nm, um resultado importante é obtido para com a dispersão que ao ser plotada, a linha de luz é quase indistinguível do eixo vertical, levando a considerar que as bandas de plásmons são majoritariamente de natureza eletrostática, fato já esperado por razão da fita possuir largura ínfima se comprada ao comprimento de onda do fóton.

Os plásmons de superfície suportados por uma fita de grafeno pode ser visualizado na Figura 10. No caso a fita possui energia de Fermi $E_F = 0,5$ eV e seus correspondentes modos intitulados de A-D com vetor de onda paralelo fixo em $|k_{ll}| = 0,035$ nm⁻¹ e valores de energias correspondentes 0,19 eV (A), 0,22 eV (B), 0,29 eV (C), e 0,34 eV (D). Onde podemos ver que o modo A de menor energia possui perfil comum e sem interrupções no comprimento de onda, comportamento natural em estruturas de aprisionamento linear presentes em nanofios e fibras dielétricas por exemplo. Vale ressaltar que o campo elétrico próximo e na direção da fita caracteriza este modo como um monopolo, em virtude de não possuir nenhum tipo de nó ao longo da largura da fita e podemos observar

também que as linhas de campo representadas com setas na Figura 10, são praticamente perpendiculares ao plano da fita, onde a densidade dessas linhas é proporcional à densidade de carga da superfície induzida e isso não muda o sinal do modo A.

Figura 10 - Visualização da densidade de campo elétrico próximo na direção da fita de largura w = 100 nm.



Fonte: Produzida por CHRISTENSEN et al. (2011).

Os chamados modos de borda possuem máxima intensidade na borda das fitas e o contrário do que ocorre em A, modos de maior energia (visto em B-D) apresenta um perfil de dispersão óptica característico e uma energia limiar na direção de $k_{\parallel} = 0$ com isso a velocidade de grupo se abstrai. Pesquisas extensivas com $k_{\parallel} = 0$ atestam que estes modos podem se acoplar á propagação de luz na forma de dipolos e multipolos com ordem mais alta, lembrando que isso depende do número de nós, em razão de o seu vetor de onda está contido no cone de luz (CHRISTENSEN *et al.*, 2011).

Na Figura 10 também ilustra a distribuição do campo próximo e a representação bidimensional dos modos A-D, em A uma distribuição de campo próximo em uma configuração muito semelhante a um monopolo, por conta da inexistência de nós na densidade induzida ao longo da largura da fita. Diferente de A os modos de energia mais elevados como em B-D existe uma espécie de dispersão óptica característica, proporcionando uma energia limiar na direção de $k_{\parallel} = 0$ (CHRISTENSEN *et al.*, 2011). Logo teremos

dipolos, quadrupolos, e octapolos que como dito anteriormente dependem do número de nós porque seu vetor de onda está no interior de um cone de luz. É visível que, em todos os casos ocorre uma forte concentração de campo nas bordas da fita.

4.3 Sistemas de Dupla Camadas em Nanofitas de Grafeno

O fato de possuir características peculiares e vantajosas como podemos ver em (CHRISTENSEN *et al.*, 2011), o grafeno quando estudado em arranjos de duas folhas deslocadas verticalmente e não tão próximas como visto no grafite, se beneficia do fato de possuir maior parte do campo eletromagnético concentrado nas bordas da fita e o fato de sua interação ser muito forte, logo essas vantagens são usadas para transmitir informações entre as guias de ondas acopladas.

Existem duas formas interessantes de hibridização dos modos de propagação em sistemas com duas folhas de grafeno, que podem estar deslocadas verticalmente ou horizontalmente deslocadas. Falaremos do deslocamento vertical para melhor entendimento do comportamento do campo elétrico próximo mostrado na Figura 11 com as configurações correspondentes $k_{\parallel} = 0,1$ nm⁻¹; d = 5 nm em A e B; d = 20 nm em C e D; com as respectivas energias 0,15 eV (A), 0,21 eV (B), 0,20 eV (C), e 0,22 eV (D).

Figura 11 - Representação do campo elétrico próximo dos modos denominados de A-D.



Fonte: Reproduzida de CHRISTENSEN et al. (2011)

Quando são consideradas distanciais maiores na separação das fitas, a hibridização e divisão dos modos de baixa energia acabam envolvendo principalmente pares de estados inicialmente degenerados com um por fita. Para exemplificar, pegamos dois modos monopolos (modo A mostrado na Figura 10) para serem combinados numa formação de dois estados hibridizados, assim é formada duas bandas de menor energia vista na Figura 11. Essa ilustração do campo próximo de modos representa simplesmente as combinações entre dois monopolo de estado ligado e não ligado (modos C e D respectivamente), por sua vez não possuem nós na carga induzida de cada folha como mostrado na Figura 11b. O contrário acontece quando se tem modos de baixa energia em fitas com distancia de separação menores, onde sua formação em bastante diferente, visto que A ainda é uma combinação "antissimétrica" de monopolos, com B sendo uma combinação "antissimétrica" de dipolos (CHRISTENSEN *et al.*, 2011).

Este tipo de deslocamento vertical possibilita aplicações onde são usados para realizar acoplamento dos modos mecânicos formados em uma fita de grafeno suspenso, esses modos são acoplados com os plásmons contidos em um par de fitas formado em conjunto com uma segunda fita de grafeno localizada logo abaixo. Outro fator importante a ser considerado, é que pequenas variações na distância de separação das folhas de grafeno pode resultar em grandes alterações no perfil de dispersão dos plásmons, de maneira que um sinal plasmônico de frequência constante deve estar em ressonância com uma distância de separação especifica, logo, um plasma de frequência conveniente pode desencadear atração ou repulsão entre duas fitas vizinhas.

4.4 Acoplamento de Modos SPPs em Grafeno: Divisor 1x2

Assim como acontece em metais nobres, na qual uma interface grafeno/dielétrico, de forma que possam existir ondas de superfície é necessário que os materiais que compõem a interface tenham partes reais de suas permissividades dielétricas com sinais opostos, isso significa que os materiais da interface sejam um condutor e um dielétrico, por esta razão essa interface poderá suportar modos TM.

Destaca-se que uma onda quando polarizada de forma TM propagando em uma interface entre dois meios que possuem as seguintes componentes de campo: E_x , E_z e B_y (considerando que x é a direção de propagação), diferentes de zero, e no caso dos modos TE, eles possuem somente componentes de campo B_x , B_z e E_y . Podemos considerar a propagação de uma onda pode ser descrita por $E(r) = E(z)e^{-i(\beta x - \omega t)}$ com um vetor de onda dado por $\beta = 2\pi n_{eff}/\lambda_0$ as equações que caracterizam os campos elétricos e magnéticos para modos TM e TE que se propagam ao longo de dois meios e podem ser obtidas partindo da equação de Helmholtz e das equações de Maxwell (MAIER, 2007, CHEN, 1974). No entanto, para chegarmos a essas equações é considerando primeiramente, a propagação de modos TM em uma região que z > 0, salientamos que a permissividade elétrica e permeabilidade magnética são expressas como $\varepsilon \in \mu$, respectivamente.

Partindo de uma configuração com grafeno bidimensional (2D), com espessura efetiva de aproximadamente 0.34 nm, podemos de forma analítica descrever a propagação de modos TM, que por sinal acontece quando a permissividade complexa do grafeno é negativa (parte imaginária da sua condutividade é positiva). Partindo das equações Maxewll a

permissividade elétrica efetiva do grafeno pode ser deduzida considerando as condições de fronteira, sendo uma das formas dada por:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{i\sigma}{\omega\Delta},\tag{4.1}$$

de forma que Δ se trata da espessura da nanofita de grafeno, podemos chegar a permissividade relativa dividindo a Equação (4.1) por ε_0 , essa expressão pode ser vista na literatura da seguinte forma $\varepsilon_g = 1+i\sigma\eta_0/(k_0\Delta)$ (WANG, *et al*, 2012), onde σ é a condutividade de superfície do grafeno, η_0 (377 Ω) é a impedância do ar, $k_0 = 2\pi/\lambda$ com λ sendo o comprimento de onda incidente no ar. Como descrito anteriormente, a condutividade de superfície é governada pela fórmula do Kubo (σ_g), que tem estreita relação com comprimento de onda (frequência ω), temperatura *T*, potencial químico μ_c e tempo de relaxação do impulso τ .

Levando em conta apenas modos SPPs de polarização TM suportados pela estrutura de grafeno mostrado na Figura 12. Sob a luz de uma teoria tradicional de guias de onda, o campo elétrico contido em várias partes do sistema de grafeno de camada dupla pode ser descrito como:

$$E_{x} = \begin{cases} A \exp\left[-k_{h}(x-b)\right] & \text{para} \quad b < x < +\infty, \\ B \exp\left[k_{g}(x-b)\right] + C \exp\left[-k_{g}(x-a)\right] & \text{para} \quad a < x < b, \\ D \exp\left[k_{d}(x-a)\right] + E \exp\left[-k_{h}(x+a)\right] & \text{para} \quad -a < x < a, \\ F \exp\left[k_{g}(x+a)\right] + G \exp\left[-k_{g}(x+b)\right] & \text{para} \quad -b < x < -a, \\ H \exp\left[k_{h}(x+b)\right] & \text{para} \quad -\infty < x < -b, \end{cases}$$
(4.2)

onde $k_h = (\beta^2 - \varepsilon_h k_0^2)^{\frac{1}{2}}$ e $k_g = (\beta^2 - \varepsilon_g k_0^2)^{\frac{1}{2}}$. Em que $A \sim H$ são as amplitudes dos campos elétricos em diferentes regiões. Ao relacionarmos as condições de fronteira, no caso, campos transversais elétricos e magnéticos passam a ser contínuos nas interfaces, e assumindo o limite de Δ tender a zero, podemos afirmar que a relação de dispersão dos modos SPPs em sistema de guias de onda paralelos pode ser considerada como (WANG, *et al*, 2012):

$$-k_{h}\left[\pm\exp\left(-k_{h}d\right)-1\right]=2i\varepsilon_{h}k_{0}/(\eta_{0}\sigma_{g}).$$
(4.3)

A Equação (4.3), onde *d* é a distância entre as folhas de grafeno, pode ser derivada também a partir de uma interface composta por grafeno caracterizado por sua condutividade de superfície, que é tratado como um material convencional com espessura Δ que pode ser considerado nas simulações numéricas. A equação anterior possui duas soluções que representam os modos simétrico (E_s) e antissimétrico (E_a), respectivamente mostrado na Figura 12b e 12c (WANG, *et al*, 2012).

Figura 12 - Comportamento e configuração dos modos SPPs, (a) Configuração do guia de onda baseado em nanofitas de grafeno em paralelo separados por uma distância d = 2a. Formação dos modos SPPs (b) simétrico (Es) e (c) antissimétrico (Ea).



Fonte: Produzida por WANG et al. (2012).

Nesse caso, β pode ser calculado como $\beta_{\pm} = \left(\varepsilon_h k_0^2 + k_{h,\pm}^2\right)^{1/2}$, fornecendo assim as constantes de propagação dos modos simétricos (β_+) e antissimétrico (β_-). Para um caso particular em que a espessura das folhas de grafeno seja suficientemente grande, as constantes de propagação dos modos simétricos e antissimétricos convergem no vetor de onda SPPs suportado por um grafeno com uma única camada,

$$k_{SPP} = k_0 \sqrt{\varepsilon_h - \left(\frac{2\varepsilon_h}{\eta_0 \sigma_g}\right)^2} \quad . \tag{4.4}$$

Para *d* grande, ou seja, acoplamentos fracos, e podemos admitir que $\beta_+ = k_{SPP} + \Delta\beta_+$ e $\beta_- = k_{SPP} + \Delta\beta_-$, no caso $\Delta\beta_+$ e $\Delta\beta_-$ são pequenas contribuições comparadas a k_{SPP} . Essas pequenas quantidades podem ser calculadas aproximadamente, e com isso chegamos a seguinte expressão (WANG, *et al*, 2012)

$$\beta_{\pm} \approx k_{SPP} + \frac{2i\varepsilon_h k_0 / (\eta_0 \sigma_g) - k_p (1 \mp u_p)}{(1 \mp u_p) k_{SPP} / k_p \pm k_{SPP} d} , \qquad (4.5)$$

considerando que $k_p = \left(k_{SPP}^2 - \varepsilon_h k_0^2\right)^{1/2}$ e $u_p = \exp\left(-k_p d\right)$.

A partir das equações anteriores referentes aos modos SPPs simétrico e antissimétrico, destaca-se como descrito em que a constante de propagação do modo simétrico diminui quando o espaçamento (d = 2a) entre as folhas aumenta, e simultaneamente o modo antissimétrico aumenta. Como visto na Figura 12, um esquema de "automodos" suportados em camada única de grafeno, E₁ ou E₂, é mostrado como modo antissimétrico, na Figura 12b, e simétrico, na Figura 12c, sobre o plano do grafeno, representados por E_a (antissimétrico) e E_s (simétrico) em um sistema com duas folhas de grafeno, que possibilitam o surgimento de superposições de modos ímpares e pares dos "automodos" (E₁ e E₂). Estes fatos têm como consequência um acoplamento de modos SPPs entre duas folhas de grafeno, e pode ser descrito por um coeficiente dado por (WANG, *et al*, 2012)

$$C_g = \frac{\beta_- - \beta_+}{2} \,. \tag{4.6}$$

Vale salientar que o módulo do coeficiente de acoplamento decai exponencialmente à medida que a distância entre as folhas aumenta. Considerando que $\operatorname{Re}(\beta_+) > \operatorname{Re}(\beta_-)$, a parte real do coeficiente de acoplamento é negativa (WANG, *et al*, 2012).

Conhecido a constante de acoplamento entre os modos que se propagam em guias de ondas paralelos, pode-se determinar o comprimento de acoplamento (L_C) que fornece a distância percorrida pelos modos até que ocorra transferência total de energia de um guia de onda para o outro que é dado pela equação (WANG, *et al*, 2012):

$$L_C = \frac{\pi}{2\sqrt{2}\left|C_g\right|}.\tag{4.7}$$

Baseado nas propriedades apresentadas, podemos analisar um divisor de feixe de uma entrada e duas saídas Figura 13, ele foi estudado recentemente por Wang *et al* (2012), seus estudos partem desse divisor de feixe com objetivo de chegar a um interferômetro de Mach-Zehnder. Foram observados dois perfis de modos de propagação, os quais foram descritos anteriormente. Estes modos são chamados de simétrico e antissimétricos e ambos possuem bom confinamento e capacidade de se perpetuarem por alguns comprimentos de onda SPP. Entretanto o modo simétrico tem menor período de oscilação espacial e apresenta menos perdas na propagação que o modo antissimétrico.



Figura 13 - Configuração de um divisor de guia de ondas de grafeno 1x2 em 2D.

Fonte: Adaptada de WANG et al. (2012)

Foi constatado que é possível controlar o acoplamento e a transmissão destes modos de acordo com o potencial químico definido para uma determinada região de acoplamento entre as fitas de grafeno. Outros pontos importantes foram verificados, como o comprimento de acoplamento entre a folha de entrada (não dopada) e as folhas de saída calculado através da Equação (4.7) para o caso de um divisor de potência de 3 dB com distância entre as duas fitas de saída d = 100 nm, e a variação do tamanho desta separação também influencia no comportamento de ressonância dos modos de propagação.

5 PORTAS LÓGICAS ÓPTICAS BASEADAS EM GRAFENO

5.1 Introdução

As portas lógicas são componentes fundamentais na criação desde circuitos digitais e circuitos integrados complexos, duas aplicações bem conhecidas são os processadores e microprocessadores. Existem sete tipos de portas lógicas (AND, NAND, OR, NOR, XOR, NXOR e NOT) são caracterizadas por sua tabela verdade que relaciona os estados lógicos das entradas com os da saída, neste trabalho estudou-se apenas a OR, AND e XOR (MENEZES, 2006).

No processamento de informações em eletrônica digital, são permitidos somente dois números, "0" e "1", analogamente ao estado de uma lâmpada apagada ou acesa. Este capítulo irá falar um pouco sobre portas lógicas, bem como suas características e estudo de novas possíveis portas lógicas usando grafeno. As simulações numéricas têm objetivo de produzir as propriedades físicas através de aproximações para que se possa fazer uma análise do campo elétrico próximo, e dos seus modos de propagação em nanofitas de grafeno. Os resultados foram obtidos em um software (*comsol multiphysics*) dedicado a estudos de propriedades físicas e materiais envolvidos simultaneamente, partindo de um arranjo geométrico onde suas características são modeladas. A partir destes resultados se chegou as possíveis portas lógicas (OR, AND e XOR) detalhadas nas próximas secções do capítulo.

5.2 Características de Portas Lógicas Ópticas usando Grafeno

O crescimento vertiginoso do tráfego de dados desencadeou um desafio para a eletrônica de silício de modo que sua largura de banda tem se tornado um fator limitador para atender uma demanda de maior processamento desses dados. A fotônica baseada em silício sempre se destacou com sua alta largura de banda e se tornou promissor para computação devido a sua capacidade de processamento de informações. Em especial, destacam-se as unidades básicas, as portas lógicas ópticas baseadas em silício ganharam bastante atenção nos últimos anos.

Entretanto, por mais que esses dispositivos totalmente ópticos baseados em silício possam realizar operações lógicas de alta velocidade, existe uma dificuldade em conseguir uma integração em grande escala levando em consideração a necessidade de ter lasers de bombeio fortes para induzir efeitos não lineares e obter funções lógicas. Outro limitador na largura de banda desses dispositivos é o fato de serem sensíveis a variações de temperatura.

As portas lógicas totalmente ópticas baseadas em fibras convencionais e fibras de cristal fotônico estão no campo de pesquisa já algum tempo e são baseadas nas características de transmissão de um meio com seu fator de não linearidade presente e usando pulsos de controle óptico. São usados diferentes tipos de efeitos não lineares para se conseguir portas lógicas totalmente ópticas, em que condição ideal seria alto coeficiente de não linearidade do meio, e uma resposta ágil destes efeitos, em torno de picosegundos, são também desejadas, assim como a independência da polarização e uma largura de banda mais larga possível.

O grafeno, por possuir propriedades eletrônicas e ópticas superiores aos materiais convencionais, se tornou uma opção promissora para criação de novos dispositivos como reposta de porta variável via dopagem eletrostática ("gate voltage"), alta mobilidade eletrônica e absorção óptica de banda larga.

Em dispositivos baseados em grafeno, a construção das portas lógicas totalmente ópticas pode ser eficientemente obtida por meio de dispositivos de interferência linear destrutiva ou construtiva como visto em (OOI *et al*, 2014). Depois de definido um potencial químico adequado para uma boa propagação dos modos SPPs, em seguida uma interferência necessária é obtida por meio de variações na geometria, alterando o tamanho dos braços do dispositivo e como consequência ocorre mudança no caminho óptico a fim de se obter interferência destrutiva ou construtiva.

A flexibilidade de realizar mudanças nas propriedades ópticas do grafeno de forma precisa e rápida possibilitou a geração de portas lógicas ópticas através de "gate voltage" (OOI *et al*, 2014), em que sua condutividade e permissividade são alteradas através de uma diferença de potencial aplicada ou dopagem química. É interessante ressaltar que usando "gate voltage" as entradas lógicas são devido a diferença de potencial aplicada, gerando, dessa forma, o padrão de interferência adequado à execução das portas lógicas. Para maior variedade de portas lógicas, são feitos ajustes na geometria, como a alteração da

distância vertical entre as nanofitas de grafeno e distanciamento horizontal entre elas dentro do substrato dielétrico.

5.3 Novas Portas Lógicas Ópticas

A partir de estudos e simulações realizados tendo como base um divisor de feixe 1x2 como ilustrado na Figura 13 com o grafeno representado na cor cinza, o estudo proposto neste trabalho trata-se da análise de propagação de modos SPPs em nanofitas de grafeno suspensos no ar. Para analisar a distribuição de campo elétrico, são realizadas simulações numéricas a fim de se obter o comportamento do campo próximo e seus respectivos modos, em paralelo são realizadas as devidas adaptações no potencial químico e ajustes geométricos. Os dispositivos propostos nesse trabalho foram baseados no divisor de guia de ondas que é representado na Figura 13 (WANG *et al.*, 2012) 1x2 (uma entrada e duas saídas), mas com suas portas invertidas (2x1), duas entradas e uma saída, como mostrado na Figura 14.

O bit lógico 0 e o bit 1 foram codificados usando uma modulação OOK, ou seja, quando a porta de entrada 1 (ou a porta de entrada 2 ou ambas) está ativada (inserção da luz), o bit 1 foi transmitido no dispositivo para saída, caso contrário, quando o bit 0 for transmitida por uma das portas de entrada, a porta de entrada é desligada (sem inserção de luz). As duas entradas serviram para definir os estados lógicos de entrada 00, 10, 01 e 11, as portas com bit diferente de 0 terão uma potência de entrada igual a 1 mW e o bit 0 a porta estará desligada.



Figura 14 - Dispositivo interferométrico com duas entradas e uma saída.

Como podemos ver na Figura 14, ele possui uma região de acoplamento destacada na cor amarela, as nanofitas de grafeno representadas nas cores amarelo e cinza, imersa em um material dielétrico (mostrado na cor verde) podem ter seu comprimento ajustado, de modo que se obtenha o padrão de interferência desejado. Para o caso estudado, foram feitas

Fonte: Produzida pelo autor (2017).

variações graduais no comprimento das nanofitas de entrada com a finalidade de se obter um padrão de interferência, que por sua vez, nos permite obtenção de portas lógicas OR e AND.

O dispositivo interferométrico mostrado na Figura 12 foi analisado pelo método numérico de diferenças finitas no domínio da frequência (FDFD - *Finite Difference in Frequency Domain*) para uma análise de dispersão das constantes de propagação dos modos SPPs. Nas simulações, o grafeno pode ser considerado como um material de permissividade (filme metálico) equivalente ε_g .

5.3.1 Realização da Porta OR (OU)

A função lógica OR foi obtida a partir do dispositivo interferométrico mostrado na Figura 15, com os seguintes parâmetros de configuração: $L_C = 294,46$ nm, d = 50 nm, $\varepsilon_h = 2,1$ (meio dielétrico SiO₂). $\lambda_0 = 10$ µm, T = 300 K e $\tau = 0.5$ ps (valor prático para a perda de transporte de grafeno (WANG *et al.*, 2012). A Figura 15 descreve o a intensidade normalizada do campo elétrico E_y e a distribuição de SPP no dispositivo interferométrico para o estado lógico de entradas: '10', onde apenas a porta 1 está ligada, Figura 15(a); '01', onde apenas a porta 2 está ligada, Figura 15b; e '11', em que ambas as portas estão ligadas, Figura 15c.

Figura 15 - Campo elétrico normalizado E_y , e distribuição dos modos SPPs em um dispositivo interferométrico como porta lógica OR com 0,229 eV de potencial químico, $L_C = 294,46$ nm e d = 50 nm. Estado de entrada (a) '10', (b) '01', (c) '11'.



Fonte: Produzida pelo autor (2017).

5.3.2 Realização da Porta AND (E)

Também é possível obter a função lógica AND com o mesmo dispositivo interferométrico mostrado na Figura 16, alterando apenas μ_c , L_c e d para os seguintes valores, respectivamente, 0,25 eV, 408,37 nm e 60 nm. A Figura 16 mostra a intensidade normalizada do campo elétrico E_y e a distribuição de SPP no dispositivo interferométrico para os estados lógicos de entradas: '10' na Figura 16a; '01' na Figura 16b; e '11', na Figura 16c.

Figura 16 - Campo normalizado E_y , e distribuição dos modos SPPs em um dispositivo interferométrico como portal lógica AND com 0,25 eV de potencial químico, $L_C = 408,37$ nm e d = 60 nm. Estado de entrada (a) '10', (b) '01', (c) '11'.



Fonte: Produzida pelo autor (2017).

Observa-se, nesta configuração, que apenas uma pequena fração de energia é transferida quando somente uma das portas é ligada, no entanto, a diferença é bastante significativa quando comparado ao caso de em que as duas entradas são excitadas, permitindo, desta forma, obtenção de uma porta AND.

5.3.3 Realização da Porta XOR (OU Exclusivo)

A obtenção da função lógica XOR é possível com os seguintes parâmetros: 0,212 eV de potencial químico, $L_C = 346,75$ nm e d = 50 nm. Entretanto, foi necessário realizar um ajuste entre um dos braços das portas de entrada de tal maneira que possibilite a interferência destrutiva entre os modos SPPs quando ambas as entradas estiveram ligadas, ou seja, quando o estado '11' for transmitido. Para que isso ocorra, foi adicionado na porta de entrada 2 um caminho extra em formato de "S", composto de dois semicírculos com 50 nm de raio de curvatura (XIAO; GAN; LI, 2015), essa diferença de caminho, mostrada na Figura 17, possibilita uma diferença de fase entre os dois modos SPPs que causará uma interferência destrutiva entre os ondas acopladas no guia intermediário, obtendo-se portanto uma potência próxima a zero na porta de saída.

A Figura 17 descreve o campo elétrico E_y e a distribuição de SPP no dispositivo interferométrico funcionando como uma porta XOR para os estados lógicos de entradas: '10' na Figura 17a; '01' na Figura 17b; e '11', na Figura 17c.

Como mostrado na Figura 17, é possível realizar uma porta lógica XOR com essa configuração de interferência proporcionada pelo desfasamento entre os modos propagantes nos guias do interferômetro.

Figura 17 - Campo elétrico normalizado E_y , e distribuição dos modos SPPs em um dispositivo interferométrico como porta lógica XOR com 0,212 eV de potencial químico, $L_C = 346,75$ nm e d = 50 nm. Estado de entrada (a) '10', (b) '01', (c) '11'.



Fonte: Produzida pelo autor (2017).

5.4 Discussão dos Resultados

Pode-se notar, nas Figuras 15 e 16 (funções OR e AND, respectivamente), uma distribuição praticamente uniforme dos modos SPPs ao longo das nanofitas de grafenos, caracterizando um retro-espalhamento desprezível na região de acoplamento. Isso deve-se ao fato de que a taxa de transferência (TR) de potência entre as entradas, quando os estados lógicos '10' ou '01' são transmitidos, foi de -34 dB e -12 dB, em média, para as portas OR e AND, respectivamente.

Por outro lado, no caso da função XOR, Figura 17, observa-se uma perturbação significativa na distribuição de intensidade dos modos SPPs quando ambas as entradas estão ligadas, resultante do desfasamento do caminho "S", da reflexão e do acoplamento de campo entre as nanofitas das portas de entrada, Apesar de TR da porta XOR ter sido de -17 dB, menor que a da AND.

A razão de contraste de potência (PCR) foi usada também para analisar o desempenho das portas lógicas propostas. O PCR pode ser expresso (em dB) como PCR = $10log_{10} (P_1/P_0)$, onde P_1 é potência corresponde ao bit 1 no canal de saída e P_0 é a potência corresponde ao bit 0 no canal de saída. Verificou-se PCR mínimo de, aproximadamente, 6 dB e 21 dB para AND e porta lógica XOR, respectivamente.

Tabela 1 - Tabela verdade e correspondentes coeficientes de extinção (dB) para portas lógicas AND/OR/XOR baseadas em grafeno totalmente óticas usando modulação OOK.

Entrada		OR	(dB)	AND	(dB)	XOR	(dB)
0	0	0	-8	0	-∞	0	8
0	1	1	-4,43	0	-11,30	1	-4,20
1	0	1	-4,43	0	-11,29	1	-4,75
1	1	1	1,46	1	-3,33	0	-24,23

Fonte: Elaborada pelo autor (2017).

Na Tabela 1, reportamos nossos níveis de extinção simulados (que é o resultado de atenuação e os processos de interferência destrutivos) para portas lógicas baseadas em grafeno AND/OU/XOR usando modulação OOK. Nos estados ON (nível lógico 1), os níveis de extinção para todas as portas lógicas são no máximo -4,75 dB. Nos estados OFF (nível lógico 0), os níveis de extinção têm um valor mínimo de -11,3 dB. Isso mostra que as portas lógicas de grafeno plasmônico são eficientes, possuindo uma razão de extinção média mínima entre os estados OFF / ON de 6 dB para todos os tipos de lógica. Portanto, um possível valor limite entre os resultados "0" (OFF) e "1" (ON) é de -7 dB.

Vale ressaltar que, a partir da porta XOR proposta, pode-se obter a porta NOT quando uma das entradas da XOR for colocada no estado lógico 1 e a outra entrada funcionando como a entrada da porta NOT. Conseguintemente, é possível obter as portas NOR e NAND cascateando-as como a porta NOT.

6 CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS

Baseado nas investigações via simulações numéricas realizada neste trabalho, pode-se concluir que dispositivos nanofotônicos baseados em plasmônica de Grafeno (GSPP) são uma alternativa bastante promissora no projeto de dispositivos de portas lógicas de menor *footprint* e consumo de potência reduzida. Tendo isso em mente, neste trabalho foi realizado um estudo de propagação de modos SPPs em guias de onda, com foco em dispositivos interferométricos. Os estudos numéricos apontaram para viabilidade de construção de portas lógicas OR, AND e XOR totalmente ópticas, que foram baseados em um divisor de guia de ondas de grafeno (sem alterar a tensão aplicada à camada de grafeno, definindo os estados de "ON / OFF") usando a modulação OOK.

Para a porta OU, o dispositivo apresentou maior eficiência de transmissão e acoplamento, em torno de -4 dB, para o potencial químico de 0,229 eV e, embora as nanofitas de grafeno (folhas) foram incorporadas em substrato de sílica com permitividade elétrica relativa de 2,1, os resultados mostraram uma resposta de eficiência na implementação desta porta.

Para porta AND, foi necessária uma diminuição no desempenho da transmissão, em torno de -5 dB, na região de acoplamento a fim de que se obtivesse um padrão de interferência construtiva quando ambas entradas forem ligadas e através de varreduras paramétricas ($d \ e \ L_c$, com potencial químico definido em 0,25 eV) e medições do campo, foi obtido uma configuração ótima, com uma distância entre as nanofitas de 60 nm e comprimento de acoplamento de 408,37 nm. Percebeu-se também que sua execução é menos eficiente que outras, devido à pequena diferença de intensidade entre os valores de saída associados ao bit 0 e 1.

Não menos importante, a implementação da porta XOR teve uma mudança mais significativa na geometria para alcançar o padrão de interferência destrutivo no estado em que os dois canais de entrada estão ON. Como mencionado anteriormente, no formato do garfo, foi adicionado um caminho em forma de "S" no canal de entrada 2. Essa disposição resulta em um padrão de interferência destrutivo no caso de duas portas conectadas e permitindo que o campo passe quando apenas um dos canais de entradas foi configurado para o estado ON. E partir dessa porta é possível implementar as portas universais NOR e NAND.

Por fim, os estudos feitos neste trabalho abrem a possibilidade para:

- a otimização dos nanodispositvos propostos para outros comprimentos de ondas;
- análise 3D e do *fan-out*.
REFERÊNCIAS

ADAM, Shaffique *et al.* A self-consistent Theory for Graphene Transport. **PNAS**, v. 104, n. 47, p. 18392–18397, May. 2007.

ALMEIDA, Wilson R. *et al.* All-optical control of light on a silicon chip. **Nature**, v. 431, n. 7012, p. 1081-1084, Oct. 2004.

BAO, Qiaoliang; LOH, Kian Ping. Graphene Photonics, Plasmonics, and Broadband Optoelectronic Devices. **ACS Nano**, v. 6, n. 5, p. 3677-3694, Apr. 2012.

BRANT, Juliana Caldeira. **Transporte Elétrico Em Nanoestruturas De Grafeno:** Influência da Funcionalização, da GEOMETRIA e da Dopagem do Substrato. 2011. 97 f. Tese (Doutorado em Ciências) – UFMG, Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Física, Belo Horizonte 2011.

CASTRO NETO, Antonio H. *et al.* The electronic properties of graphene. **Rev. Mod. Phys**, v. 81, n. 1, p. 109-162, Jan/Mar. 2009.

CAVALCANTI, Gustavo Oliveira. **Caracterização precisa de filmes metálicos e novas propostas de transdutores ópticos por ressonância de plásmons de superfície**. 2013, 96 f, Tese (Doutorado em Engenharia Elétrica) - UFPE, Centro De Tecnologia e Geociências, Recife 2013.

CHEN, Francis F. Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion. 2nd ed., New York: Plenum Press, 1974, 490 f, ISBN: 0-306-41332-9.

CHEN, Weiwei *et al.* Electro-optical logic gates based on graphene–silicon waveguides. **Opt. Commun**, v. 372, p. 85–90, Apr. 2016.

CHRISTENSEN, Johan *et al.* Graphene plasmon waveguiding and hybridization in individual and paired nanoribbons. **American Chemical Society**, v. 6, n. 1, p. 431-440, Dec. 2011.

DONG, H.M.; XU, W.; TAN, R.B. Temperature relaxation and energy loss of hot carriers in graphene. **Solid State Communications**, v. 150, p. 1770–1773, Apr. 2010.

DRUDE, Paul Karl Ludwig. Zur Elektronentheorie der Metalle, *Ann. Phys.*, v. 306, n. 3, p. 532-560. 1900.

FU, Yulan *et al.* All-optical logic gates based on nanoscale plasmonic slot waveguides. **Nano** Lett. v. 12, n. 11, p. 5784-5790, Oct. 2012.

FU, Yulan; HU, Xiaoyong; GONG, Qihuang. Silicon photonic crystal all-optical logic gates. **Phys. Lett**. A, v. 377, p. 329-333, Nov. 2013.

GEIM, A.K.; NOVOSELOV, K.S. The rise of graphene. **Nature Materials**, v. 6, p. 183-191. Mar. 2007.

LIMA JR, Almir Wirth; MOURA MOTA, João Cesar; SOMBRA, Antonio Sergio Bezerra. Attenuation, dispersion and nonlinearity effects in graphene-based waveguides. **Beilstein J.** Nanotechnol v. 6, p. 1221–1228, May. 2015.

LIMA JR, Almir Wirth; MOURA MOTA, João Cesar; SOMBRA, Antonio Sérgio Bezerra. **Nanotecnology/Nanophotonics (Based on Graphene)**, LAP Lambert Academic Publishing, 124 f, 2015, ISBN-10: 3659705527.

LIMA JR.; A. Wirth; SOMBRA, A.S.B. Graphene-photonic crystal switch, **Optics Communications**, v. 321, p.150–156, Feb. 2014.

LIU, Qiang *et al.* All-optical half adder based on cross structures in two-dimensional photonic crystals. **Opt. Express**, v. 16, n. 23, p. 18992-19000, Nov. 2008.

LIU, Ye *et al.* All-optical logic gates based on two-dimensional low-refractive-index nonlinear photonic Crystal slabs. **Opt. Express**, v. 19, n. 3, p. 1945-1953, Jan. 2011.

LU, Cuicui *et al.* Ferroelectric hybrid plasmonic waveguide for all-optical logic gate applications. **Plasmonics**, v. 8, n. 2, p. 749-754, Nov. 2013.

MAIER, S. A. **Plasmonics:** Fundamentals and Applications. Springer Science, 2007, 223 f, ISBN: 978-0-387- 33150-8.

MCCUTCHEON, Murray W. *et al.* All-optical conditional logic with a nonlinear photonic crystal nanocavity. **Appl. Phys. Lett.**, v. 95, n. 22, p. 221102, Nov. 2009.

MENEZES, J. W. M. *et al.* Optical switches and all-fiber logical devices based on triangular and planar three-core nonlinear optical fiber couplers. **Optics Communications**, v. 276, p. 107-115, Mar. 2007.

MENEZES, José Wally Mendonça. **Implementação de portas lógicas com acoplador diferencial não linear triplo planar de fibras ópticas**. 2006. 112 f. Mestrado (Em Física) Universidade Federal do Ceará, Fortaleza 2006.

NIKITIN, A. Yu *et al.* Edge and waveguide terahertz surface plasmon modes in graphene microribbons. **Physical Review**, v. 84, n. 161407, p. 1-4, Oct. 2011.

OOI, Kelvin J. A. *et al.* Electro-optical graphene plasmonic logic gates. **Optics Letters**, v. 39, n. 6, p. 1629-1632, Mar. 2014.

OOI, Kelvin J. A. *et al.* Mid-infrared active graphene nanoribbon plasmonic waveguide devices. J. Opt. Soc. Am. B, v. 30, n. 12, p. 3111-3116, Dec. 2013.

PAN, Deng; WEI, Hong; XU, Hongxing. Optic interferometric logic gates based on metal slot waveguide network realizing whole fundamental logic operations. **Opt. Express**, v. 21, n. 8, p. 9556-9562, Apr. 2013.

WEI, Hong *et al.* Quantum dot-based local field imaging reveals plasmon-based interferometric logic in silver nanowire networks. **Nano Lett.** v. 11, n. 2, p. 471-475, Dec. 2011.

WU, Xiaoting; TIAN, Jinping; YANG, Rongcao. A type of all-optical logic gate based on graphene surface plasmon polaritons. **Optics Communications**, v. 403, p. 185–192, July. 2017.

XIAO, Ting-Hui; GAN, Lin; LI, Zhi-Yuan. Graphene surface plasmon polaritons transport on curved substrates. **Photon. Res.** v. 3, n. 6, p. 300-307, Dec. 2015.

XU, Qianfan; LIPSON Michal. All-optical logic based on silicon micro-ring resonators. **Opt. Express**, v. 15, n. 3, p. 924-929, Feb. 2007.

YARAHMADI Morteza *et al.* Subwavelength graphene-based plasmonic THz switches and logic gates. **IEEE Tran. THz Sci. Tech.**, v. 5, n. 5, p. 725-731, July. 2015.

ZHANG, Yuanliang; ZHANG, Yao.; LI, Baojun Li. Highly-efficient directional emission from photonic crystal waveguides for coupling of freely propagated terahertz waves into Si slab waveguides. **Opt. Express**, v. 15, n. 15, p. 9281-9286, Jul. 2007.

ZHU, Zhi-Hong *et al.* High-contrast light-by-light switching and gate based on nonlinear photonic crystals. **Opt. Express**, v. 14, n. 5, p.1783-1788, Mar. 2006.

APÊNDICE A - SBMO/SBMag 2017

Journal of Microwaves, Optoelectronics and Electromagnetic Applications, Vol. 17, No. 2, June 2018 DOI: <u>http://dx.doi.org/10.1590/2179-10742018v17i21186</u>



ANEXO A – Fundamentos de Portas lógicas (OR, AND e XOR)

• Porta AND (E)

A porta AND ("E") é baseada na multiplicação dos estados de entrada "0" e "1" chamados de A e B e o resultado de saída vem de $A \cdot B$ (Figura 18), como se trata de uma multiplicação se um dos estados de entrada for "0" teremos saída igual a zero, e se os dois estados de entrada for "1" ai teremos saída igual a "1".

Figura 18 - Representação gráfica e equação Booleana referente a porta AND.



Fonte: Reproduzida de MENEZES (2006).

Tabela 2 - Tabela verde para porta AND.

Α	В	S
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1

Fonte: Reproduzida de MENEZES (2006).

• Porta OR (OU)

A porta lógica OR é representada por uma soma de estados e realiza a operação lógica OR (OU), sendo assim se A ou B possuem valor diferente de "0" teremos resultado na saída diferente de zero (Figura 19). E no caso dos dois estados de entrada forem "0" o resultado de saída será nulo.

Figura 19 - Representação gráfica e equação Booleana para porta OR.



Fonte: Retirada de MENEZES (2006).

Tabela 3 - Tabela verdade para porta OR.

Α	В	S
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	1

Fonte: Retirada de MENEZES (2006).

• Porta XOR (OU Exclusivo)

A porta lógica XOR é representada pelo símbolo , seu funcionamento é simples, sua operação e comparar dois valores que se forem diferentes produz saída igual a "1" visto na Figura 20, quando todos os estados de entrada forem iguais são iguais a saída será "0".

Figura 20 - Representação gráfica e equação Booleana para porta XOR.



Fonte: Retirada de MENEZES (2006).

Tabela 4 - Tabela verde para porta XOR.

Α	В	S
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

Fonte: Retirada de MENEZES (2006)