



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
MESTRADO ACADÊMICO EM FÍSICA

JOSÉ ORLANDO DOS SANTOS MIRANDA

PLÁSMONS EM REDES PERIÓDICAS DE NANOFITAS DE GRAFENO E
FOSFORENO

FORTALEZA

2023

JOSÉ ORLANDO DOS SANTOS MIRANDA

PLÁSMONS EM REDES PERIÓDICAS DE NANOFITAS DE GRAFENO E FOSFORENO

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física da matéria condensada.

Orientador:

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa.

Coorientadores:

Prof. Dr. André Jorge Carvalho Chaves.

Prof. Dr. Francisco Ronan Viana Araújo.

FORTALEZA

2023

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

M643p Miranda, José Orlando dos Santos.

Plásmons em redes periódicas de nanofitas de grafeno e fosforeno / José Orlando dos Santos Miranda. – 2023.

96 f. : il. color.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2023.

Orientação: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa.

Coorientação: Prof. Dr. André Jorge Carvalho Chaves / Prof. Dr. Francisco Ronan Viana Araújo.

1. plasmônica. 2. plásmons-polárítons de superfície. 3. grafeno. 4. fosforeno. 5. nanofitas. I. Título.

CDD 530

JOSÉ ORLANDO DOS SANTOS MIRANDA

PLÁSMONS EM REDES PERIÓDICAS DE NANOFITAS DE GRAFENO E FOSFORENO

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física da matéria condensada.

Aprovada em: 18/12/2023.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Francisco Ronan Viana
Araújo (Coorientador)
Instituto Federal do Piauí (IFPI)

Prof. Dr. Andrey Chaves
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Luan Vieira de Castro
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Ao meu avô José Vitor (*in memoriam*).

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código De Financiamento 001.

A todos os meus amigos e familiares que estiveram presentes durante a elaboração desse trabalho, pelo apoio.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa, que sempre esteve presente e disposto a me ajudar a entender os sistemas físicos estudados neste trabalho. Agradeço, principalmente, pela empatia que teve ao lidar comigo quando enfrentei os percalços da vida.

"A natureza usa um fio muito longo para tecer suas tramas, mas um pequeno pedaço do tecido revela a organização de toda tapeçaria."

(FEYNMAN, 1967, p. 40.)

RESUMO

A plasmônica moderna ganhou um interesse renovado na última década com o advento da síntese do grafeno em 2004 e, conseqüentemente, o surgimento de novos materiais bidimensionais nos anos seguintes, surgindo como uma ferramenta viável para manipulação da luz com a matéria e possuindo uma série de propriedades atraentes para novas aplicações tecnológicas. Muitas das possíveis aplicações da plasmônica em grafeno se deve ao fato de que este quando dopado suporta plásmons-poláritons de superfície (SPP, ondas eletromagnéticas evanescentes acopladas às oscilações do plasma de elétrons livres, propagando-se ao longo da superfície de um condutor). Os SPPs não podem ser excitados por incidência de luz direta em um sistema homogêneo devido ao fato de que o momento de um poláriton de superfície é muito maior do que o da luz incidente com a mesma frequência. Outro material lamelar que tem chamado bastante atenção da comunidade científica, em virtude de suas propriedades anisotrópicas e por ser um semicondutor com *gap* de energia ajustável com relação ao número de camadas ou aplicação de campo elétrico externo, é o fosforeno. Como consequência da estrutura de bandas anisotrópica, o que leva a uma forte dependência angular na absorção de luz incidente, mostrou-se que a dispersão dos plásmons no fosforeno apresenta comportamentos diferentes dependentes da direção cristalográfica. Alguns dos mecanismos para se promover a excitação dos SPPs se baseiam no uso de redes de difração de Bragg ou na ondulação periódica da superfície do condutor. De forma similar, em grafeno, estudos recentes investigaram o espalhamento de radiação eletromagnética por padrões com grades metálicas no topo do grafeno como alternativa para excitar o SPP. Em adição, recentemente foi demonstrado que a modulação da condutividade óptica dá origem a um acoplamento da radiação eletromagnética de forma eficiente para SPPs em grafeno sem a necessidade de uma grade. Dentro deste contexto, no presente trabalho investigaremos o espalhamento da radiação eletromagnética incidindo sobre uma folha de um sistema bidimensional com condutividade modulada periodicamente e depositado em um substrato dielétrico. Analisaremos o acoplamento da radiação com os SPPs na forma de ondas de superfície do tipo Bloch para o caso específico de uma grade periódica de nanofitas de grafeno e de fosforeno, resolvendo o problema de espalhamento e calculando a transmitância, refletância e absorvância de ondas planas que incidem sobre o sistema.

Palavras-chave: plasmônica; plásmons-poláritons de superfície; grafeno; fosforeno; nanofitas.

ABSTRACT

The modern plasmonics has gained renewed interest in the last decade with the advent of graphene synthesis in 2004 and, consequently, the emergence of new two-dimensional materials in the following years. It has become a viable tool for manipulating light with matter, possessing a range of attractive properties for new technological applications. Many potential applications of plasmonics in graphene are attributed to the fact that when doped, it supports surface plasmon-polaritons (SPPs)—electromagnetic waves coupled to the oscillations of free electrons plasma—propagating along the surface of a conductor. SPPs cannot be excited by direct light incidence in a homogeneous system due to the surface polariton's momentum being much larger than that of incident light at the same frequency. Another lamellar material that has drawn considerable attention from the scientific community, due to its anisotropic properties and being a semiconductor with an adjustable energy gap concerning the number of layers or application of an external electric field, is phosphorene. As a consequence of its anisotropic band structure, leading to a strong angular dependence on incident light absorption, it has been shown that the dispersion of plasmons in phosphorene exhibits direction-dependent behaviors. Some mechanisms for promoting SPP excitation involve the use of Bragg diffraction gratings or periodic surface ripple on the conductor. Similarly, in graphene, recent studies have investigated electromagnetic radiation scattering by metallic grating patterns on top of graphene as an alternative method to excite SPP. Additionally, it has recently been demonstrated that modulating optical conductivity efficiently leads to electromagnetic radiation coupling with SPPs in graphene without the need for a grating. In this context, the present work investigates the scattering of electromagnetic radiation incident on a two-dimensional system with periodically modulated conductivity deposited on a dielectric substrate. We analyze the radiation coupling with SPPs in the form of Bloch surface waves for the specific case of a periodic array of graphene nanoribbons and phosphorene, solving the scattering problem and calculating the transmittance, reflectance, and absorbance of plane waves incident on the system.

Keywords: plasmonics; surface plasmon-polaritons; graphene; phosphorene; nanoribbons.

LISTA DE FIGURAS

<p>Figura 1 – Representação da estrutura física dos tipos de plásmons de superfície. (À esquerda) Plásmon localizado ou acoplamento de Localized Surface Plasmons (LSP)’s. (À direita) Acoplamento de plásmons-polárítions de superfície em um metal. O acoplamento onda-elétron resulta em uma onda confinada na interface</p>	21
<p>Figura 2 – Ilustração do (a) átomo isolado, e da (b) configuração de um metal hipotético para explicar o modelo de Drude. Os elétrons de valência deixam o átomo para formar o gás de elétrons livres</p>	22
<p>Figura 3 – Função dielétrica $\varepsilon/\varepsilon_0$ [Eq. (1.7)] para um gás de elétrons livres em função da frequência ω em unidades da frequência de plasma ω_p</p>	24
<p>Figura 4 – Acoplamento de prisma de Surface Plasmon Polariton (SPP)’s com a configuração desenvolvida por Kretschmann em (a) e por Otto em (b)</p>	30
<p>Figura 5 – Configuração de Otto para excitação de SPP. O experimento foi realizado com prata</p>	30
<p>Figura 6 – Relação de dispersão dos SPP’s para a técnica do <i>acoplamento de prisma</i> com a configuração de Kretschmann</p>	31
<p>Figura 7 – Configuração de <i>acoplamento de grade</i> para obtenção da compatibilidade de fase e excitação de SPP’s</p>	32
<p>Figura 8 – Esquema de uma folha de grafeno depositada entre dois meios dielétricos. A folha de grafeno está em $z = 0$, o meio 1 em $z < 0$ e o meio 2 em $z > 0$. . .</p>	33
<p>Figura 10 – Modo TM dos GSP’s obtidos pela solução numérica da Eq. (1.38) utilizando a condutividade de Drude (1.41) para diferentes parâmetros de amortecimento $\Gamma = \hbar \gamma$. Os dielétricos que revestem o grafeno são o ion gel ($\varepsilon_1 = 3$) e o SiO_2 ($\varepsilon_2 = 4$). As linhas tracejadas mostram a dispersão da luz nesses dielétricos. Aqui foi usado $E_F = 0,45$ eV e tomamos a parte real de q</p>	37
<p>Figura 11 – Comportamento da parte imaginária da condutividade do grafeno com a frequência angular ω. Utilizamos $E_F = 0.45$ eV e a linha tracejada demarca o limite de validade da Eq. (1.48)</p>	38

Figura 12 – Relação de dispersão do modo Polarização transversal elétrica (TE) para os Graphene Surface Plasmons (GSP)’s em uma estrutura dielétrico–grafeno–dielétrico, tomando o ar ($\epsilon_{ar} = 1$) como o meio dielétrico no painel (a) e o SiO_2 ($\epsilon_{SiO_2} = 3,9$) no painel (b). Aqui também usamos $E_F = 0,45$ eV . . .	39
Figura 13 – À esquerda temos a configuração da micro-fita periódica de grafeno investigada no trabalho de Ju <i>et al.</i> (JU <i>et al.</i> , 2011). À direita temos a vista lateral do mesmo dispositivo. A concentração de portadores nas fitas de grafeno é controlada por meio de uma porta superior de íon-gel, possibilitando larga faixa de dopagem por meio de <i>gating</i> eletrostático. A largura da fita varia entre 1 a 4 μm	40
Figura 14 – (a) Estrutura do dispositivo de empilhamento de camadas de grafeno e material isolante reportado por Yan <i>et al.</i> (YAN <i>et al.</i> , 2012) e (b) o respectivo espectro de transmissão relativo do infravermelho próximo ao ultravioleta, onde T e T_0 correspondem as transmissões através da amostra de quartzo com e sem a pilha de grafeno/isolante, respectivamente	41
Figura 15 – Acoplamento de luz em plásmons de grafeno através de ondas acústicas de superfície (SCHIEFELE <i>et al.</i> , 2013). Um sinal de alta frequência aplicado a um transdutor interdigital (IDT) em um filme piezoelétrico gera uma onda acústica de superfície (SAW) que se propaga na direção x . Em (b) vemos a dispersão de plásmons para grafeno em AlN e em ZnO	42
Figura 16 – A folha de grafeno é dopada localmente por átomos ou moléculas adsorvidas que criam um perfil de densidade de carga não homogêneo e, portanto, uma condutividade modulada	42
Figura 17 – Estrutura cristalina do Fosforeno	43
Figura 18 – Estrutura de bandas da monocamada de Fósforo negro, mostrando que o fosforeno é um semicondutor de <i>gap</i> direto (ver seta vermelha) em torno do ponto Γ e com bandas de energia com curvaturas diferentes ao longo das direções $\Gamma - X$ e $\Gamma - Y$, mostrando o seu carácter anisotrópico	44
Figura 19 – Dispersão de plásmons para o fosforeno para diferentes direções e diferentes dopagens	45
Figura 20 – Dependência da absorção em função do ângulo de polarização (painel da direita) e absorção em função do ângulo de incidência (painel da esquerda) .	46

Figura 21 – Representação esquemática de uma folha de grafeno com uma condutividade periódica arbitrariamente espacialmente dependente. As cores representam a intensidade de σ	49
Figura 22 – Representação esquemática dos campos incidentes e vetor de onda \mathbf{k} na situação de espalhamento. O campo magnético é paralelo à folha de grafeno com condutividade modulada periodicamente e o vetor de onda \mathbf{k} não possui componente em y	53
Figura 23 – Ilustração de uma onda plana com polarização TM incidindo em uma matriz periódica de nanofitas de grafeno (<i>grating</i>) com parâmetro de rede $R = d_g + d_0$, onde d_g e d_0 correspondem as larguras da nanofita e da região sem grafeno, respectivamente. O substrato tem constante dielétrica ϵ_1 e o superestrato ϵ_2	59
Figura 24 – Absorbância (curva sólida preta), transmitância (curva azul sólida) e refletância (curva pontilhada vermelha) de uma onda p-polarizada através de uma estrutura periódica de nanofitas de grafeno para $\Gamma = 3$ meV (painéis da esquerda) e $\Gamma = 9,2$ meV (painéis da direita)	60
Figura 25 – Absorbância (curva sólida vermelha), transmitância (curva sólida vermelha) e refletância (curva pontilhada preta) de uma onda p-polarizada incidindo em uma folha de grafeno uniforme e contínua para $\Gamma = 3$ meV (painéis da esquerda) e $\Gamma = 9,2$ meV (painéis da direita)	61
Figura 26 – (a) Curvas da absorbância para diferentes valores da densidade eletrônica n_e em unidades de $10^{13}/cm^2$. (b) Comportamento da frequência de ressonância de plásmon no grafeno ω_{GSP} com a variação da densidade eletrônica n_e . As constantes utilizadas são $\Gamma = 3.7$ meV, $d_g = 4 \mu m$, $R = 8 \mu m$, $\epsilon_1 = 3$, $\epsilon_2 = 4$ e $\theta = 0$	62
Figura 27 – Em (a) temos as curvas de absorção no grafeno para diferentes valores de R . Mantemos a largura da nanofita em $d_g = R/2$. Em (b) vemos os valores das frequências de ressonância para a primeira ordem de difração ($n = 1$) em termos de $k_{x,1} \equiv q$ e sua respectiva função de ajuste $a \times q^b$. As constantes utilizadas são $\Gamma = 3.7$ meV, $E_F = 0.3$ eV, $\epsilon_1 = 3$, $\epsilon_2 = 4$ e $\theta = 0$	63

Figura 28 – (a) Curvas de absorção como função da frequência tomando $\theta = 0$ e diferentes valores de larguras da nanofita d_g . (b) <i>Contour plot</i> do ângulo θ da frequência e da absorção, tomando o valor da largura da nanofita fixa de $d_g = 0.5R$. As constantes utilizadas são $\Gamma = 3.7$ meV, $E_F = 0.3$ eV, $R = 8 \mu m$, $\epsilon_1 = 3$ e $\epsilon_2 = 4$	63
Figura 29 – Representação da vista superior de uma folha de fosforeno com uma condutividade periódica arbitrariamente espacialmente dependente. As cores representam a intensidade de σ . Abaixo, direções armchair - AC e zigzag - ZZ são, respectivamente, as direções x e y	65
Figura 30 – Indicação das direções AC e ZZ no plano de isotropia e vista 3D da nanofita de fosforo negro	66
Figura 31 – Representação esquemática dos campos incidentes e vetor de onda \mathbf{k}_2 na situação de espalhamento em uma grade de nanofitas de fosforeno depositada em um substrato dielétrico. Os campos elétrico e magnético possuem componente em x , y e z e a periodicidade é na direção x (armchair)	76
Figura 32 – Absorbância (curvas pretas), transmitância (curvas azuis) e refletância (curvas vermelhas) de uma onda através de uma estrutura periódica de fitas de fosforeno	87
Figura 33 – Absorbância (curvas pretas), transmitância (curvas azuis) e refletância (curvas vermelhas) de uma onda incidindo em uma folha de fosforeno uniforme e contínua para $\Gamma = 3$ meV (painéis da esquerda) e $\Gamma = 10$ meV (painéis da direita)	87
Figura 34 – (a) Curvas da absorbância para diferentes valores da densidade eletrônica n_e em unidades de $10^{13}/cm^2$ do Fosforeno com a direção AC paralela à periodicidade. (b) Comportamento da frequência de ressonância de plasmón no Fosforeno ω_{FSP} com a variação da densidade eletrônica n_e . As constantes utilizadas são $\Gamma = 3$ meV, $d_F = 2 \mu m$, $R = 4 \mu m$, $\epsilon_1 = 10$, $\epsilon_2 = 1$, $\theta \approx 0^\circ$ e $\phi \approx 0^\circ$	88
Figura 35 – Em (a) temos as curvas de absorção no fosforeno para diferentes valores de R com a direção AC paralela à periodicidade. Em (b) vemos os valores das frequências de ressonância para a primeira ordem de difração ($n = 1$) em termos de $k_{x,1} \equiv q$ e sua respectiva função de ajuste $a \times q^b$. As constantes utilizadas são $\Gamma = 3$ meV, $n_e = 1.5 \times 10^{13} cm^{-2}$, $\epsilon_1 = 10$, $\epsilon_2 = 1$, $\theta \approx 0^\circ$ e $\phi \approx 0^\circ$. Mantemos a largura da nanofita em $d_F = R/2$	89

Figura 36 – Comportamento da absorvância no fosforeno monocamada ao variar os parâmetros d_F e θ com a direção AC paralela à periodicidade. Em (a) usamos $\theta \approx 0^\circ$ e $\phi \approx 0^\circ$ e em (b) $d_F = 0.5R$. As constantes utilizadas são $\Gamma = 3\text{ meV}$, $n_e = 1.5 \times 10^{13}\text{ cm}^{-2}$, $R = 4\ \mu\text{m}$, $\epsilon_1 = 10$ e $\epsilon_2 = 1$ 90

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Comprimentos de onda observados experimentalmente e obtidos teoricamente nos quais os metais alcalinos se tornam transparentes. Os valores são calculados a partir da relação $\lambda_p = 2\pi c/\omega_p$, onde ω_p é a frequência de plasma 25

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

EELS	Electron Energy-Loss Spectroscopy
GSP	Graphene Surface Plasmons
LSP	Localized Surface Plasmons
SPP	Surface Plasmon Polariton
TE	Polarização transversal elétrica
THz	Terahertz
TM	Polarização transversal magnética

LISTA DE SÍMBOLOS

e	Carga elétrica elementar
Z_a	Número atômico
τ	Tempo de relaxação
\vec{E}	Campo Elétrico
ω	Frequência angular
\vec{j}	Densidade de corrente
γ	<i>Damping</i>
μ_0	Permeabilidade magnética do vácuo
ϵ_0	Permissividade elétrica do vácuo
\vec{B}	Campo magnético
$\vec{\nabla}$	Operador Nabla ou Del
σ	Condutividade elétrica
ϵ	Permissividade elétrica relativa
κ	Fator de confinamento de plásmon
ω_p	Frequência de plasma
λ_p	Comprimento de onda de plasma
c	Velocidade da luz no vácuo
\vec{H}	Campo magnético auxiliar
β	Comprimento de decaimento do campo magnético
q	Número de onda na direção x
θ	Ângulo de incidência
\hat{i}	Vetor unitário na direção x
\hat{j}	Vetor unitário na direção y
\hat{k}	Vetor unitário na direção z
E_F	Energia de Fermi
\Re	Operador parte real

$\Im m$	Operador parte imaginária
h	Constante de Planck
Θ	Função de Heaviside
Γ	Energia de amortecimento
SiO_2	Íon gel
ZnO	Óxido de zinco
∞	Infinito positivo
Σ	Somatório discreto
$\delta_{i,j}$	Delta de Kronecker
\vec{S}	Vetor de Poynting
\mathcal{R}_n	Reflectância para a ordem de difração n
$\langle \vec{A} \rangle$	Valor médio sobre um período temporal
\mathcal{T}_n	Transmitância para a ordem de difração n
\mathcal{A}_n	Absorbância para a ordem de difração n
σ_g	Condutividade óptica do grafeno
σ_F	Tensor de condutividade óptica do fosforeno

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	20
1.1	Introdução à plasmônica	20
1.2	Modelo de Drude	21
1.3	Plásmons-poláriton de superfície	25
1.4	Excitações de Ondas de Superfície: <i>Prism and Grating couplings</i>	29
1.5	Plámons em grafeno	32
1.6	Plasmônica em redes periódicas de nanofitas de grafeno	40
1.7	Plásmons em fosforeno	42
1.8	Escopo do trabalho	46
2	PLÁSMONS EM REDES PERIÓDICAS DE NANOFITAS DE GRAFENO	48
2.1	Configurando o modelo	48
2.2	O problema do espalhamento na folha de grafeno com condutividade periódica	52
2.2.1	<i>Expressões para o cálculo da Transmitância, Refletância e Absorbância para o modo TM</i>	55
2.3	Grade periódica de nanofitas de grafeno	58
3	PLÁSMONS EM REDES PERIÓDICAS DE NANOFITAS DE FOSFORENO	65
3.1	Configurando o sistema	65
3.1.1	<i>Relação de dispersão</i>	66
3.2	Espalhamento em uma grade periódica de nanofitas de fosforeno	76
3.2.1	<i>Expressões gerais para o cálculo da Transmitância, Refletância e Absorbância</i>	82
3.3	Resultados da Transmitância, Refletância e Absorbância em função da frequência	86
4	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	92
	REFERÊNCIAS	94

1 INTRODUÇÃO

1.1 Introdução à plasmônica

A plasmônica é uma área da fotônica que visa uma melhor compreensão da interação da luz com a matéria. Na interface com a física de materiais, ela estuda a interação da luz com filmes finos e nanopartículas. Tal área teve seu surgimento com os trabalhos de Sommerfeld em 1899 (SOMMERFELD, 1899) e de Zenneck em 1907 (ZENNECK, 1907) sobre a propagação de ondas eletromagnéticas através da superfície de um condutor. Em ambos trabalhos foi percebido que determinados metais quando excitados por uma onda de comprimento de onda bem definido apresentava a possibilidade de excitar uma onda evanescente que percorria sua superfície. Tal onda ficou conhecida, posteriormente, como *plásmon de superfície*.

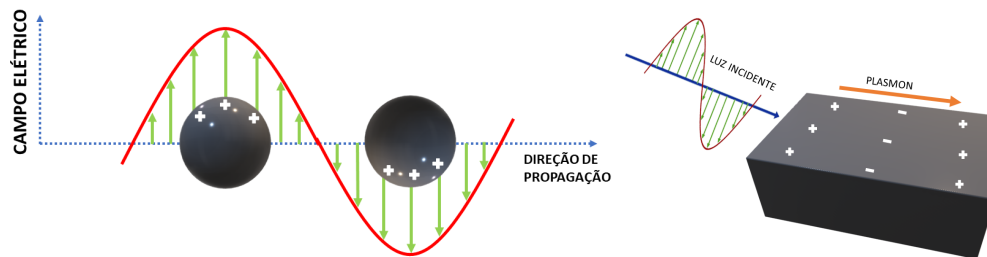
Na mesma época, precisamente em 1902, R. H. Wood (WOOD, 1902) publicava um trabalho onde mostrava o comportamento da luz incidente em uma grade de difração depositada em um metal. Ele observou padrões anormais na estrutura de faixas claras e escuras na luz refletida da grade de difração. Havia quedas de intensidade anômalas no espectro da luz visível difratada pela rede. Tal efeito levou o nome de *anomalia de Wood* e teve uma explicação confusa e contestável na época. O primeiro a formular uma descrição teórica dessas anomalias foi Lord Rayleigh (RAYLEIGH, 1907) em 1907. Ele expandiu o campo magnético espalhado em termos de ondas de saída e previu singularidades após o espalhamento em vários comprimentos de onda. Dessa forma, pôde prever que esses comprimentos de onda se assemelhavam às anomalias de Wood e ocorriam somente quando o campo elétrico era perpendicular à rede de difração. No entanto, observações posteriores de Wood mostravam a existência dessas anomalias também para o caso do campo paralelo à superfície.

Em 1941, Fano (FANO, 1941) conseguiu provar teoricamente que o fenômeno observado por Wood era devido à excitação de ondas de superfície na interface grade-metal. O trabalho de Fano foi melhorado com o passar do tempo por muitos autores. Ritchie (RITCHIE, 1957) foi o primeiro a usar o termo plásmon de superfície em 1957 em seu trabalho, que traduzindo para o português, é intitulado como “Perdas de plasma por elétrons rápidos em filmes finos”.

Devido à extensa gama de trabalhos que foram desenvolvidos desde então, atualmente sabemos que os plásmons são oriundos do acoplamento/ressonância de uma onda eletromagnética a diferentes tipos de partículas ou excitações, como por exemplo o acoplamento da oscilação

coletiva dos elétrons livres ou de condução de um metal e uma onda eletromagnética. A respeito deste último, existem dois tipos de plásmons de superfície (ver Fig. 1): os plásmons-polárítions de superfície, em inglês *Surface Plasmon Polariton* - SPP, que se propagam ao longo da interface entre um dielétrico e um condutor e os plásmons de superfície localizados, em inglês *Localized Surface Plasmons* - LSP, quando o acoplamento ocorre, por exemplo, com uma nanopartícula metálica com diâmetro muito menor que o comprimento de onda da luz incidente (ZAYATS; SMOLYANINOV, 2003). Os plásmons também podem ocorrer no interior do material quando a oscilação é em nível de densidade volumétrica. Nesse caso, temos os plásmons de volume (em inglês, *bulk plasmons*). No presente trabalho focaremos no primeiro caso, dos SPP's.

Figura 1 – Representação da estrutura física dos tipos de plásmons de superfície. (À esquerda) Plásmon localizado ou acoplamento de LSP's. (À direita) Acoplamento de plásmons-polárítions de superfície em um metal. O acoplamento onda-elétron resulta em uma onda confinada na interface



Fonte: autoria própria.

As pesquisas em plasmônica da última década permitiram descobrir que se pode manipular a interface dielétrico-metal de forma criativa de modo que o plásmom confinado tenha a mesma frequência da onda incidente, mas com o comprimento de onda muito menor. Isso pode permitir que os plásmons viajem em dispositivos em nanoescala transportando dados. Assim, é possível criar transistores menores e muito mais rápidos, abrindo a possibilidade de se utilizar a excitação de plásmons em uma grande variedade de aplicações tecnológicas como por exemplo, no desenvolvimento de dispositivos para melhorar a resolução de microscópios, para aumentar a eficiência de LED's e a sensibilidade de detectores químicos e biológicos (ATWATER, 2007).

1.2 Modelo de Drude

Quando o elétron foi descoberto em 1897, criou-se um desafio para a comunidade científica da época para entender seu comportamento e os fenômenos físicos a ele relacionados. Foi então que, em 1900, Paul Drude (DRUDE, 1909) propôs um modelo com base na dinâmica

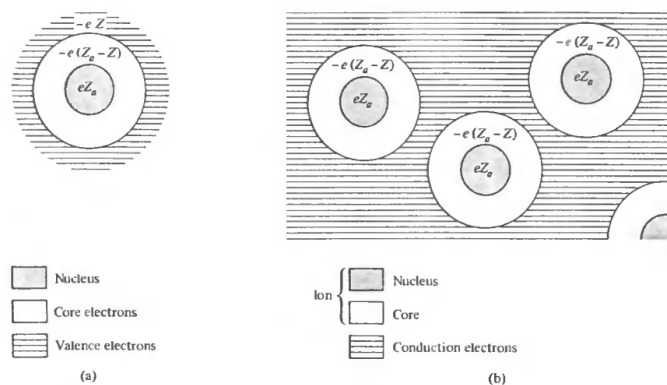
dessas partículas com objetivo de explicar a condução de eletricidade e de calor através dos metais.

O *Modelo de Drude* consiste em supor que quando há átomos unidos formando um material metálico, os elétrons da última camada se desprendem e se tornam livres e que esses elétrons livres tem o comportamento de um gás de partículas clássicas. Tal argumentação era plausível para aquela época antes do surgimento da Mecânica Quântica. Esse modelo considera também que os elétrons sofrem sucessivas colisões com os íons da rede, que são fixos, e que seu momento pode ser alterado por forças externas (provenientes de radiação eletromagnética) e por tais colisões. As interações elétron-elétron são desconsideradas, ou seja, os mesmos se movem de forma independente uns dos outros.

A Fig. 2 apresenta uma ilustração do modelo de Drude para uma determinada substância metálica. O núcleo atômico possui uma carga total eZ_a , onde e é a carga elétrica elementar ($e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Coulombs). Ao redor desse núcleo temos um total de $-Z_a$ elétrons, no entanto, uma quantidade Z está fracamente ligada à camada de valência e acaba desprendendo-se, tornando-se os chamados elétrons de condução. Dessa forma, a carga total ao redor do núcleo é $-e(Z_a - Z)$ e a carga de elétrons de condução é $-eZ$.

Drude utilizou a teoria cinética dos gases para descrever a interação elétron-íon de forma probabilística. Assim, definindo τ como o intervalo de tempo entre duas colisões sucessivas, ou tempo de relaxação, a probabilidade de um elétron sofrer uma colisão, para cada intervalo de tempo infinitesimal, é dt/τ .

Figura 2 – Ilustração do (a) átomo isolado, e da (b) configuração de um metal hipotético para explicar o modelo de Drude. Os elétrons de valência deixam o átomo para formar o gás de elétrons livres



Fonte: adaptada da Ref. Ashcroft e Mermin (1976, p. 3).

Considerando o tempo livre médio entre essas colisões τ , a equação de movimento

dos elétrons nesse modelo (ASHCROFT; MERMIN, 1976) é

$$\frac{d\vec{p}(t)}{dt} = -\frac{\vec{p}(t)}{\tau} - e\vec{E}(t), \quad (1.1)$$

onde $\vec{p}(t)$ é o momento total e $\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$ é o campo elétrico externo aplicado. Devemos propor uma solução para a Eq. (1.1) dependente do tempo de forma harmônica, da mesma forma que o campo elétrico. Assim, propondo $\vec{p}(t) = \vec{p}(\omega) e^{-i\omega t}$, obtemos

$$-i\omega\vec{p}(\omega) = -\frac{\vec{p}(\omega)}{\tau} - e\vec{E}(\omega),$$

o que resulta em

$$\vec{p}(\omega) = \frac{e\vec{E}(\omega)}{i\omega - \tau^{-1}}. \quad (1.2)$$

Como a densidade de corrente por unidade de volume devida a um número n de elétrons, de massa m , movendo-se com momento \vec{p} é $\vec{j} = -en\vec{p}/m$, então a Eq. (1.2) fornece que

$$\vec{j}(\omega) = \frac{e^2 n}{m} \frac{\vec{E}(\omega)}{(\tau^{-1} - i\omega)}. \quad (1.3)$$

Comparando a Eq. (1.3) com a lei de Ohm ($\vec{j} = \sigma\vec{E}$), obtemos a condutividade σ em função de ω , dada por

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m(\gamma - i\omega)}, \quad (1.4)$$

onde $\gamma \equiv \tau^{-1}$ é chamado de amortecimento (do inglês, *damping*).

Para relacionar esse resultado com as propriedades óticas dos metais é preciso utilizar as equações de Maxwell para se obter a função dielétrica em termos de $\sigma(\omega)$. Da lei de Ampère na forma diferencial, e utilizando a lei de Ohm para a densidade de corrente \vec{j} , temos que

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{B} &= \mu_0 \left(\vec{j} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right) \\ &= \mu_0 \left(\sigma \vec{E} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right) \\ &= \mu_0 \left(\epsilon_0 + \frac{i\sigma}{\omega} \right) \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \\ &= \mu_0 \epsilon(\omega) \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (1.5)$$

utilizando no último passo o fato da derivada temporal do campo elétrico ser dada por $\partial \vec{E} / \partial t = -i\omega \vec{E}$. A Eq. (1.5) nos fornece que

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 + \frac{i\sigma}{\omega}. \quad (1.6)$$

Assim, substituindo a Eq. (1.4) na Eq. (1.6) podemos escrever $\varepsilon(\omega)$ como

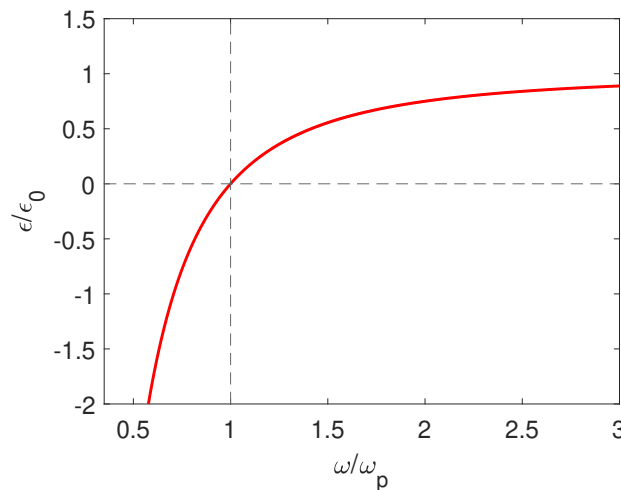
$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 - \frac{1}{i\omega} \left(\frac{e^2 n}{m} \right) = \varepsilon_0 \left[1 - \frac{\frac{e^2 n}{\varepsilon_0 m}}{\omega^2 + i\gamma\omega} \right] \rightarrow \boxed{\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 \left[1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \right]}. \quad (1.7)$$

Esta é a função dielétrica complexa em função de ω e com relaxamento γ para um gás de elétrons livres no metal descrita pelo modelo de Drude e representada graficamente na Fig. 3. O parâmetro $\omega_p^2 \equiv e^2 n / \varepsilon_0 m$ é chamado de frequência de plasma.

Analisando a Eq. (1.7), observa-se que, para altas frequências $\omega\tau \gg 1$ (ou equivalentemente $\omega/\gamma \gg 1$), a Eq. (1.7) pode ser reescrita como

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right). \quad (1.8)$$

Figura 3 – Função dielétrica $\varepsilon/\varepsilon_0$ [Eq. (1.7)] para um gás de elétrons livres em função da frequência ω em unidades da frequência de plasma ω_p



Fonte: autoria própria.

Para o caso de $\omega < \omega_p$ a função dielétrica é real e negativa o que implica que as soluções para \vec{E} decaem exponencialmente e a radiação não se propaga no metal. Agora, quando $\omega > \omega_p$ a função dielétrica é real e positiva, a radiação se propaga e o metal se torna transparente. É importante ressaltar que essa conclusão está correta somente para altas frequências, ou seja, quando a Eq. (1.8) é satisfeita. Sabe-se que os metais alcalinos tornam-se transparentes para frequências acima do ultravioleta (ASHCROFT; MERMIN, 1976).

Como podemos ver na Tabela 1, há um acordo razoável com os valores experimentais. Para outros tipos de metais, a função dielétrica tem outras contribuições e, portanto, ocorre uma maior disparidade entre o valor calculado através da Eq. (1.8) e os resultados experimentais (ASHCROFT; MERMIN, 1976).

Tabela 1 – Comprimentos de onda observados experimentalmente e obtidos teoricamente nos quais os metais alcalinos se tornam transparentes. Os valores são calculados a partir da relação $\lambda_p = 2\pi c/\omega_p$, onde ω_p é a frequência de plasma

ELEMENTO	λ_p TEÓRICO (10^3 \AA)	λ_p OBSERVADO (10^3 \AA)
Li	1,5	2,0
Na	2,0	2,1
K	2,8	3,1
Rb	3,1	3,6
Cs	3,5	4,4

Fonte: Ashcroft e Mermin (1976, p. 18).

1.3 Plásmons-poláriton de superfície

Como foi mencionado anteriormente, um plásmon-poláriton de superfície é uma onda eletromagnética que se propaga ao longo da interface entre um dielétrico e um metal. Sabe-se também que sua amplitude decai exponencialmente com o aumento da distância em cada meio da interface. Como um plásmon de superfície se propaga ao longo da interface, seu vetor de onda é real apenas na direção da interface. Isso significa que o vetor de onda \vec{k} tem uma componente real na direção paralela à interface e uma componente imaginária perpendicular à interface. Sem perda de generalidade, tomando x a direção paralela à interface e z a direção perpendicular, temos k_x real e as componentes imaginárias ao longo da direção z são: $k_{1z} = i\kappa_1$ para $z < 0$ e $k_{2z} = i\kappa_2$ para $z > 0$, onde os índices 1 e 2 representam os meios abaixo e acima do plano $z = 0$, respectivamente. Os valores de κ_1 e κ_2 determinam a diminuição exponencial da amplitude do campo elétrico a partir da fronteira entre os dois meios.

Portanto, com a interface em $z = 0$, o campo elétrico no primeiro e no segundo meios, respectivamente, podem ser escritos como

$$E_1 = E_1^+ e^{-\kappa_1 z + ik_x x} + E_1^- e^{+\kappa_1 z + ik_x x}, \quad z < 0, \quad (1.9a)$$

$$E_2 = E_2^+ e^{-\kappa_2 z + ik_x x} + E_2^- e^{+\kappa_2 z + ik_x x}, \quad z > 0. \quad (1.9b)$$

Para evitar divergências dos campos quando $z \rightarrow \infty$, é preciso que

$$E_1^+ = 0, \quad (1.10a)$$

$$E_2^- = 0. \quad (1.10b)$$

Para o caso da Polarização transversal elétrica (TE), que ocorre quando o campo elétrico é paralelo à superfície, usando a equação de Maxwell $\vec{k} \times \vec{E} = \frac{\omega\mu}{c}\vec{H}$, podemos mostrar que os campos E_1 e E_2 estão relacionados por meio de

$$\begin{pmatrix} E_2^+ \\ E_2^- \end{pmatrix} = \mathbf{M}^{(S)} \begin{pmatrix} E_1^+ \\ E_1^- \end{pmatrix}, \quad (1.11)$$

onde $\mathbf{M}^{(S)}$ é uma matriz chamada matriz de transferência e é dada por (MARKOS; SOUKOULIS, 2008)

$$\mathbf{M}^{(S)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\mu_2 k_{1z}}{\mu_1 k_{2z}} & 1 - \frac{\mu_2 k_{1z}}{\mu_1 k_{2z}} \\ 1 - \frac{\mu_2 k_{1z}}{\mu_1 k_{2z}} & 1 + \frac{\mu_2 k_{1z}}{\mu_1 k_{2z}} \end{pmatrix}. \quad (1.12)$$

Podemos escrever a Eq. (1.11) em termos dos elementos $M_{i,j}^{(S)}$, tal como

$$E_2^+ = M_{11}^{(S)} E_1^+ + M_{12}^{(S)} E_1^-, \quad (1.13a)$$

$$E_2^- = M_{21}^{(S)} E_1^+ + M_{22}^{(S)} E_1^-. \quad (1.13b)$$

Inserindo a Eq. (1.10a) nas Eqs. (1.13a) e (1.13b) podemos obter

$$E_2^+ = M_{12}^{(S)} E_1^- \quad \text{e} \quad E_2^- = M_{22}^{(S)} E_1^-. \quad (1.14)$$

Como E_2^- é nulo [Eq. (1.10b)] e E_1^- é diferente de zero, então o elemento M_{22} deve ser zero, assim obtemos a condição para a excitação da onda de superfície TE

$$M_{22}^{(S)}(i\kappa_1, i\kappa_2) = 0. \quad (1.15)$$

Definindo uma matriz $\mathbf{M}^{(P)}$ e procedendo de forma semelhante, podemos obter a condição para a excitação da onda de superfície para a Polarização transversal magnética (TM), que ocorre quando o campo magnético é paralelo à superfície (MARKOS; SOUKOULIS, 2008)

$$M_{22}^{(P)}(i\kappa_1, i\kappa_2) = 0. \quad (1.16)$$

Usando Eq. (1.15) no elemento $M_{22}^{(S)}$ obtemos para a polarização TE

$$\boxed{\frac{\kappa_1}{\mu_1} + \frac{\kappa_2}{\mu_2} = 0}. \quad (1.17)$$

De forma análoga para a polarização TM, obtemos

$$\boxed{\frac{\kappa_1}{\varepsilon_1} + \frac{\kappa_2}{\varepsilon_2} = 0}. \quad (1.18)$$

Assim, para que uma interface permita a existência de plásmon-poláriton de superfície (SPP), ela precisa satisfazer as Eqs. (1.17) e/ou (1.18). Como devemos ter $\kappa_{1,2} > 0$, é necessário que um dos os materiais tenha sua permissividade ε negativa para o caso TM ou a permeabilidade μ negativa para o caso TE. Ou seja, ε_1 e ε_2 devem ter sinais opostos, como no caso da interface de separação entre um metal ($Re\{\varepsilon\} < 0$) e um dielétrico ($\varepsilon > 0$).¹ Os termos κ_1 e κ_2 estão relacionados pela relação de dispersão das ondas eletromagnéticas nos meios

$$\omega^2 = \frac{c^2}{n_1^2} (k_x^2 - \kappa_1^2) = \frac{c^2}{n_2^2} (k_x^2 - \kappa_2^2). \quad (1.19)$$

Isolando κ_1 e κ_2 da Eq. (1.19) e substituindo na Eq. (1.17), obtemos

$$\frac{\kappa_1}{\kappa_2} = \sqrt{\frac{k_x^2 - \omega^2 \varepsilon_1 \mu_1 / c^2}{k_x^2 - \omega^2 \varepsilon_2 \mu_2 / c^2}} = -\frac{\mu_1}{\mu_2}, \quad (1.20)$$

que pode ser reescrita como

$$k_x^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_1 \mu_1 \frac{1 - \frac{\varepsilon_2 \mu_1}{\varepsilon_1 \mu_2}}{1 - \frac{\mu_1^2}{\mu_2^2}}, \quad (1.21)$$

que deve ser resolvido para uma dados $\varepsilon(\omega)$ e $\mu(\omega)$. Para a polarização TM, por meio da Eq. (1.18), obtemos

$$k_x^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_1 \mu_1 \frac{1 - \frac{\varepsilon_1 \mu_2}{\varepsilon_2 \mu_1}}{1 - \frac{\varepsilon_1^2}{\varepsilon_2^2}}. \quad (1.22)$$

Vamos analisar agora para o caso mais específico da interface entre um metal possuindo função dielétrica $\varepsilon_2(\omega)$ e um meio dielétrico, com ε_1 constante e positiva. No caso da polarização TM, o campo magnético é dado por

$$H_1 = e^{ikx - \kappa_1 z}, \quad z > 0, \quad (1.23a)$$

$$H_2 = e^{ikx - \kappa_2 z}, \quad z < 0, \quad (1.23b)$$

com o meio dielétrico ocupando a região $z > 0$, o metal localizado em $z < 0$ e a interface de separação em $z = 0$. As funções κ_1 e κ_2 , chamadas de comprimento de decaimento do campo

¹ Para a interface entre um condutor e um dielétrico a equação (1.17) não pode ser satisfeita, pois nesse caso ambos μ são próximos de $\mu_0 > 0$ do vácuo (GRIFFITHS, 1999). No entanto, pode ser satisfeita para materiais onde a $\mu < 0$, como um materiais de ressonância ferromagnética ou materiais canhotos (MARKOS; SOUKOULIS, 2008).

no meio dielétrico e no metal, respectivamente, são escritas como (ver Refs.(GONÇALVES; PERES, 2016), (MAIER, 2007))

$$\kappa_1 = [k^2 - \varepsilon_0(\omega^2/c^2)]^{\frac{1}{2}}, \quad (1.24a)$$

$$\kappa_2 = [k^2 - \varepsilon_2(\omega^2/c^2)]^{\frac{1}{2}}. \quad (1.24b)$$

Combinando as equações (1.24a) e (1.24b) com (1.18), o número de onda é obtido como

$$k(\omega) = \frac{\omega}{c} \left[\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (1.25)$$

Substituindo a Eq. (1.25) nas Eqs. (1.24a) e (1.24b), obtemos

$$\kappa_1 = \frac{\omega}{c} \left[\frac{-\varepsilon_1^2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (1.26a)$$

$$\kappa_2 = \frac{\omega}{c} \left[\frac{-\varepsilon_2^2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (1.26b)$$

Assim, por meio das Eqs. (1.23a) e (1.23b), temos que os campos descreverão uma onda de superfície se $\text{Re}\{\kappa_1\} > 0$ e $\text{Re}\{\kappa_2\} > 0$. Podemos impor essa condição de duas maneiras. A primeira é considerando que ε_2 seja real e negativo. A segunda é considerando ε_2 um número complexo, $\varepsilon_2 = \varepsilon' + i\varepsilon''$ com a parte imaginária ε' positiva. Dessa forma, a Eq. (1.25) mostra que o número de onda agora deve ser complexo, $k = k_1 + ik_2$ com k_1 e k_2 reais. Então, a equação (1.23) dos campos implica que k_2 está relacionado com atenuação das soluções SPPs a medida que se propaga na interface, caracterizada por um termo de decaimento exponencial como $e^{-k_2 x}$. Vamos considerar a situação onde temos perdas fracas na interface, nesse caso devemos ter $|\varepsilon'| \gg \varepsilon''$ e $\varepsilon_1 > \varepsilon''$. Substituindo $\varepsilon_2 = \varepsilon' + i\varepsilon''$ na equação (1.25) e expandindo em série de Taylor até a primeira ordem, obtemos

$$k_1 = \frac{\omega}{c} \left[\frac{\varepsilon_1 |\varepsilon'|}{|\varepsilon' - \varepsilon_1|} \right]^{\frac{1}{2}} \left\{ 1 - \frac{\varepsilon''^2 \varepsilon_1 [4|\varepsilon'| - \varepsilon_1]}{8\varepsilon'^2 [|\varepsilon'| - \varepsilon_1]^2} \right\}, \quad (1.27a)$$

$$k_2 = \frac{1}{2} \frac{\omega}{c} \frac{\varepsilon'' \varepsilon_1^{\frac{3}{2}}}{|\varepsilon'|^{\frac{1}{2}} [|\varepsilon'| - \varepsilon_1]^{\frac{3}{2}}}. \quad (1.27b)$$

Levando em conta as equações (1.23) e (1.27b), o comprimento de propagação de energia da onda de superfície resultante é definido como

$$l(\omega) = (2\text{Im}[k(\omega)])^{-1}, \quad (1.28)$$

que mede a distância que a onda de superfície percorre até que sua intensidade caia em $1/e$.²

1.4 Excitações de Ondas de Superfície: *Prism and Grating couplings*

Uma das formas de excitações de plásmons de superfície atuais consiste no bombardeando de filmes metálicos com elétrons, e como resposta mede-se a energia após o espalhamento. A forma aprimorada desse método é chamada de Espectroscopia de Perda de Energia Eletrônica (PETTIT *et al.*, 1975), em inglês *Electron Energy-Loss Spectroscopy (EELS)*, e permitiu o desenvolvimento de sistemas de transmissão de alta energia que possibilitaram a excitação e detecção de SPP's em uma faixa larga de energias. Uma outra forma é conhecida como acoplamento de campo próximo. Dá-se pelo fato de que o vetor de onda de um SPP é sempre maior do que o disponível para uma onda plana de propagação livre, assim ondas com frentes de fase não planares podem conter componentes de onda plana com vetores de onda suficientemente altos para permitir a excitação do SPP. Exemplos de fontes de campo próximo são antenas colocadas adjacentes a uma superfície metálica ou os campos próximos à ponta de um microscópio óptico de campo próximo (BOZHEVOLNYI, 1996).

No entanto, sabemos que não é possível excitar SPP's por meio da incidência direta de luz na interface metal dielétrico porque o número de onda q do SPP é sempre maior que o número de onda k no dielétrico [ver Eq.(1.25)].³ Assim, a projeção de k ao longo da interface, $k_x = k \sin \theta$, de uma onda incidindo sob um ângulo θ com a normal da superfície é sempre menor que a constante de propagação q do SPP, mesmo na incidência rasante, proibindo o casamento de fase (MAIER, 2007).

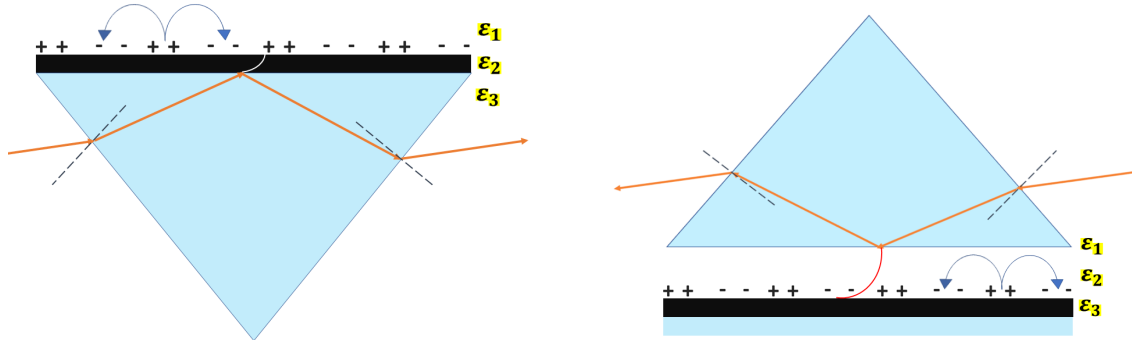
Existem duas técnicas mais conhecidas que contornam esse problema: o acoplamento de prisma (no inglês, *Prism Coupling* - ver Figs. 4 e 5) e acoplamento de grade (no inglês, *Grating Coupling*). O acoplamento de prisma busca a compatibilidade de fase por meio de sistema onde um filme de metal é colocado entre dois isolantes de constantes dielétricas diferentes. O processo de obtenção dos SPP's consiste em ter um isolante de menor constante dielétrica e outro com maior constante dielétrica.

Uma das técnicas de acoplamento de prisma é conhecida como a configuração de Otto (OTTO, 1968). Esta é utilizada quando não se deseja o contato direto com o filme fino

² Leve em conta que $\frac{1}{\sqrt{e}} \approx 60\%$ e $\frac{1}{e} \approx 40\%$. Logo, quando a amplitude dos campos é multiplicada por $\frac{1}{\sqrt{e}}$ ela cai em $\frac{1}{e}$.

³ Lembre que o número de onda mede a densidade de oscilações em uma onda por unidade de comprimento. Quanto maior o valor de k , mais oscilações ocorrem por unidade de comprimento.

Figura 4 – Acoplamento de prisma de SPP's com a configuração desenvolvida por Kretschmann em (a) e por Otto em (b)

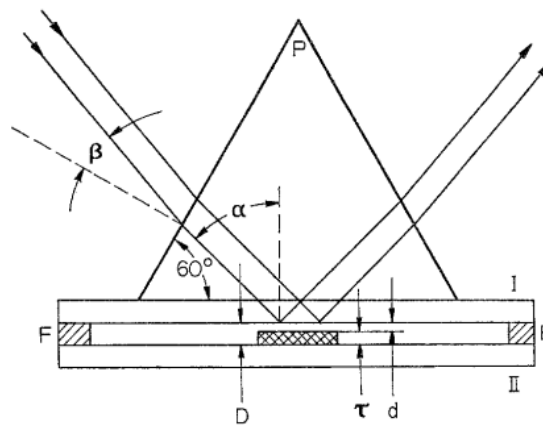


(a) O filme metálico de espessura de algumas dezenas de nanômetros é depositado na parte superior de um prisma.

(b) Há uma separação entre o filme metálico e o prisma por meio de uma fina lacuna de ar ou algum dielétrico.

Fonte: autoria própria.

Figura 5 – Configuração de Otto para excitação de SPP. O experimento foi realizado com prata



Fonte: adaptada da Ref. Otto (1968, p. 405).

para o estudo de sua qualidade. Representações da configuração de Otto são mostradas nas Figs. 4(b) e 5. Por outro lado, a configuração de Kretschmann (KRETSCHMANN, 1971), apresentada na Fig. 4(a), é mais simples e é comumente mais utilizada. Nesta última, considera-se o primeiro dielétrico sendo o ar (com $\epsilon_1 = 1$) e o segundo, tomado em formato de prisma, com constante ϵ_3 . Assim, um feixe refletido na interface entre o prisma e o metal terá um momento plano $k_x = k\sqrt{\epsilon_3} \sin \theta$, onde θ é o ângulo de incidência, que é suficiente para excitar plásmons de superfície na interface entre o metal e o dielétrico de baixo índice (metal/ar). A onda eletromagnética oriunda da reflexão total no prisma “tunela” para o terceiro meio como uma versão evanescente do feixe incidente. Daí a necessidade de tomar o segundo isolante em

formato de prisma. A relação de dispersão em cada interface é descrita conforme a Eq. (1.25)

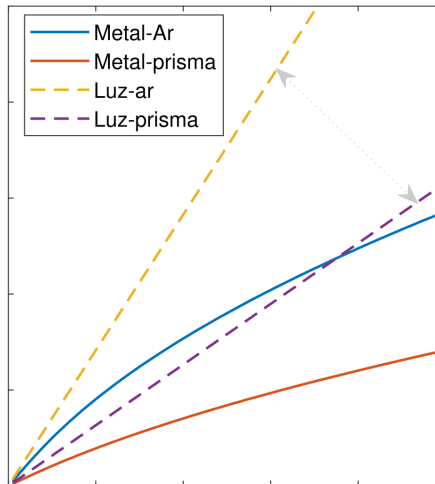
$$q_{ar/metal} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}}, \quad (1.29a)$$

$$q_{prisma/metal} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon_2 \varepsilon_3}{\varepsilon_2 + \varepsilon_3}}, \quad (1.29b)$$

para as interfaces ar/metal e prisma/metal, respectivamente. A expressão para $\varepsilon_2(\omega)$ é obtida por meio do modelo de Drude conforme a Eq. (1.8). A relação de dispersão em termos da frequência é mostrada na Fig. (6).

Observa-se que, devido à condição de $k_x = k\sqrt{\varepsilon_3} \sin \theta$, somente os SPP's com as constantes de propagação k_x entre a linhas de luz no ar (curva pontilhada amarela) e no dielétrico (curva pontilhada roxo) podem ser excitados. Assim, a compatibilidade de fase não é alcançada na interface prisma/metal (curva sólida vermelha), mas ocorre na interface ar/metal (curva sólida azul).

Figura 6 – Relação de dispersão dos SPP's para a técnica do *acoplamento de prisma* com a configuração de Kretschmann

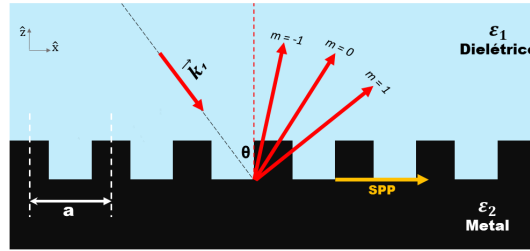


Fonte: autoria própria.

Para entender o *acoplamento de grade* vamos imaginar um feixe incidindo na interface de separação entre um metal e um dielétrico (ver Fig. 7). No entanto, consideraremos a interface com uma modulação periódica semelhante a uma grade de difração, ou seja, uma interface fisicamente modulada com uma periodicidade a . Com a adição dessa uma modulação periódica, espalhamos o feixe incidente de modo que um conjunto discreto de ordens de difração ($\dots, m = -1, m = 0, m = 1, \dots$) é produzido como ilustra a Fig. 7.

Dessa forma, um dos vetores de onda do conjunto discreto de ordens de difração possui uma componente paralela à interface, satisfazendo a condição de ressonância SPP's. Logo,

Figura 7 – Configuração de *acoplamento de grade* para obtenção da compatibilidade de fase e excitação de SPP's



Fonte: autoria própria.

sempre que

$$q = k_1 \sin \theta + mg \quad (1.30)$$

é satisfeita, onde $g = 2\pi/a$ é o vetor da grade recíproca, a compatibilidade de fase é alcançada e teremos a excitação dos SPP's. A modulação da rede também pode ser obtida por falhas ou rugosidades projetadas ou aleatórias (RAETHER, 1988; RAMÍREZ-DUVERGER; GARCÍA-LLAMAS, 2004), o que possibilita a projeção de diversas configurações de rede.

Sabemos que o processo inverso do acoplamento de plásmos por *gratings* pode ocorrer. Os SPP's que se propagam ao longo de uma superfície modulada com uma grade podem se acoplar à luz, irradiando para o dielétrico. Isso pode ocorrer sempre que projetarmos $mg < 0$ de modo a produzir uma diminuição no vetor de onda ao longo da interface. Ou seja, a modulação periódica ou rugosidade da rede, neste caso, funciona como um canal adicional de perda dos SPP's.

1.5 Plámons em grafeno

Desde seu isolamento em 2004 pelos físicos russos Andre Geim e Konstantin Novoselov no Reino Unido (GEIM *et al.*, 2004), o grafeno vem sendo um material amplamente estudado. Características como resistência mecânica, flexibilidade, transparência, impermeabilidade e boa condutividade elétrica levam o grafeno a ter diversas aplicações tecnológicas como, por exemplo, em eletrônica e fotônica moderna (AVOURIS; XIA, 2012). A observação experimental de SPP's em grafeno - em inglês *Graphene Surface Plasmons (GSP)* - fez aparecer a área da nano-plasmônica de grafeno. Para o estudo do GSP's, vamos considerar uma monocamada de grafeno (FALKOVSKY; PERSHOGUBA, 2007) localizada entre dois meios dielétricos semi-infinitos de constantes dielétricas relativas ϵ_1 e ϵ_2 , conforme ilustra a Fig. 8.

Vamos considerar dois casos: polarização TM (polarização P) e polarização TE

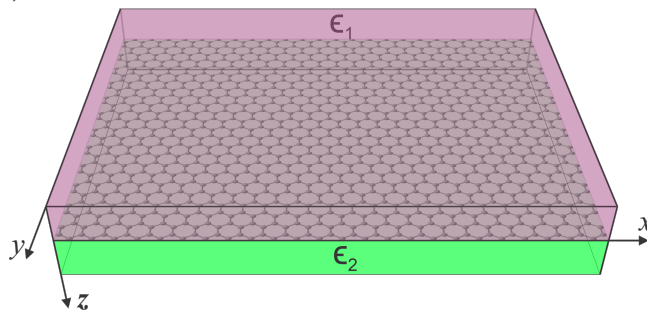
(polarização S). Primeiramente, para o caso da polarização TM, vamos propor como solução das equações de Maxwell uma onda eletromagnética com a seguinte configuração espacial:

$$\vec{E}_j = (E_{j,x}\hat{x} + E_{j,z}\hat{z}) e^{iqx} e^{-\kappa_j|z|}, \quad (1.31a)$$

$$\vec{B}_j = B_{j,y} e^{iqx} e^{-\kappa_j|z|} \hat{y}, \quad (1.31b)$$

onde acrescenta-se a parte temporal multiplicando o lado direito por $e^{-i\omega t}$, considerando-se ondas monocromáticas com frequência ω . O índice $j = \{1, 2\}$ refere-se aos meios dielétricos.

Figura 8 – Esquema de uma folha de grafeno depositada entre dois meios dielétricos. A folha de grafeno está em $z = 0$, o meio 1 em $z < 0$ e o meio 2 em $z > 0$



Fonte: autoria própria.

As Eqs. (1.31a) e (1.31b) descrevem uma onda de superfície localizada na vizinhança da folha de grafeno e propagando-se na direção \hat{x} . A invariância translacional do sistema ao longo do eixo x exige a conservação do momento linear nesta direção, tal que $q_1 = q_2 = q$. Substituindo as Eqs. (1.31a) e (1.31b) nas equações de Maxwell (Lei de Faraday e Lei de Ampère) para meios dielétricos isotrópicos e não-dispersivos⁴

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}_j = -\frac{\partial \vec{B}_j}{\partial t}, \quad (1.32)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B}_j = \frac{\epsilon_j}{c^2} \frac{\partial \vec{E}_j}{\partial t}, \quad (1.33)$$

obtemos

$$- \text{sgn}(z) \kappa_j E_{j,x} - iq E_{j,z} = i\omega B_{j,y}, \quad (1.34a)$$

$$\text{sgn}(z) \kappa_j B_{j,y} = -\frac{i\omega \epsilon_j}{c^2} E_{j,x}, \quad (1.34b)$$

$$iq B_{j,y} = -\frac{i\omega \epsilon_j}{c^2} E_{j,z}. \quad (1.34c)$$

⁴ ϵ e μ são escalares independentes do tempo.

Podemos reescrever as Eqs. (1.34b) e (1.34c) em termos de $B_{j,y}$, tal como

$$E_{j,x} = i \operatorname{sgn}(z) \frac{\kappa_j c^2}{\omega \varepsilon_j} B_{j,y}, \quad (1.35a)$$

$$E_{j,z} = -\frac{q c^2}{\omega \varepsilon_j} B_{j,y}, \quad (1.35b)$$

e em seguida substituir as Eqs. (1.35a) e (1.35b) na Eq. (1.34a) para obtermos κ em função de q e ω , dado por

$$\kappa_j^2 = q^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2}. \quad (1.36)$$

As condições de contorno relacionam os campos em $z = 0$, asseguram a continuidade da componente tangencial do campo elétrico e a descontinuidade da componente tangencial do campo magnético através da interface dielétrico/grafeno/dielétrico da seguinte forma

$$E_{1,x}(x, z)|_{z=0} = E_{2,x}(x, z)|_{z=0}, \quad (1.37a)$$

$$B_{1,y}(x, z)|_{z=0} - B_{2,y}(x, z)|_{z=0} = \mu_0 J_x(x) = \mu_0 \sigma_{xx} E_{2,x}(x, z)|_{z=0}, \quad (1.37b)$$

onde utilizamos a lei de Ohm. Note que a condutividade do grafeno aparece apenas na condição de contorno da Eq. (1.37b). Assumindo que o grafeno é um material bidimensional (2D) isotrópico, podemos tomar $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma(\omega)$, onde a condutividade $\sigma(\omega)$ contém as propriedades eletromagnéticas do grafeno. Das Eqs. (1.35a), (1.37a) e (1.37b) podemos obter

$$\boxed{\frac{\varepsilon_1}{\kappa_1(q, \omega)} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_2(q, \omega)} + i \frac{\sigma(\omega)}{\omega \varepsilon_0} = 0}. \quad (1.38)$$

A Eq. (1.38) nos fornece a relação de dispersão, ω versus q , para GSP's para o caso da polarização TM. Note que a Eq. (1.38) é uma equação implícita, não depende diretamente de ω . Logo, a mesma não tem solução analítica e deve ser resolvida por métodos numéricos. Se a parte real da condutividade for diferente de zero então as soluções são complexas. Por outro lado se a parte real for nula e a parte imaginária positiva, então temos soluções reais.

A condutividade dinâmica do grafeno

$$\sigma_g = \sigma_{intra} + \sigma_{inter}, \quad (1.39)$$

obtida à luz da teoria da resposta linear (GUSYNIN *et al.*, 2009; STAUBER *et al.*, 2008) por meio da fórmula de Kubo (MAHAN, 2000) é dividida em duas partes físicas

$$\sigma_{intra} = \frac{\sigma_0}{\pi} \frac{4E_F}{(\hbar \gamma - i\hbar \omega)}, \quad (1.40a)$$

$$\sigma_{inter} = \sigma_0 \left[\Theta(\hbar \omega - 2E_F) + \frac{i}{\pi} \ln \left| \frac{\hbar \omega - 2E_F}{\hbar \omega + 2E_F} \right| \right], \quad (1.40b)$$

onde Θ é a função de *Heaviside* e $\sigma_0 \equiv e^2/4\hbar$. A primeira parte, σ_{intra} [Eq. (1.40a)], corresponde às transições dentro da banda de condução (ou de valência) onde o momento não é conservado. A segunda parte, σ_{inter} [Eq. (1.40b)], descreve a contribuição das transições verticais da banda de valência para a banda de condução, em que o momento é conservado.

As expressões (1.39), (1.40a) e (1.40b) mostram que quando tivermos $2E_F > \hbar\omega$ o termo que descreve as transições interbanda fornece uma contribuição insignificante para a condutividade (STAUBER *et al.*, 2007). Portanto, para a região do espectro entre o Terahertz (THz) e o infravermelho médio a condutividade do grafeno é dominada por um termo do tipo Drude

$$\sigma(\omega) \approx \sigma_0 \frac{4i}{\pi} \frac{E_F}{(\hbar\omega + i\hbar\gamma)}. \quad (1.41)$$

A Fig. 9 mostra o espectro de GSP's, para o modo TM, em grafeno obtido da solução numérica da Eq. (1.38) com a condutividade dada na forma da Eq. (1.41), tomando o termo de amortecimento nulo ($\gamma = 0$).⁵ Nesse caso, como $\gamma = 0$, a condutividade é uma função puramente imaginária da frequência e, portanto, o vetor de onda q obtido da Eq. (1.36) deve ser real. Já para o caso em que tivermos γ finito e diferente de zero, a relação de dispersão fornece um valor complexo para o número de onda, isto é $q = q' + iq''$ em que a parte imaginária representa a atenuação do GSP.

Na Fig. 10 temos a curva de dispersão do modo TM para o GSP's, dada pela solução numérica da Eq. (1.38), tomando diferentes valores do parâmetro de amortecimento γ (levando em conta $\Gamma = \hbar\gamma$) na Eq. (1.41). Embora ao se levar em consideração o amortecimento, altera-se o espectro de forma significativa na região onde os vetores de ondas são baixos, ele é um fator importante na atenuação dos SPP's. Como as perdas em geral são um fator limitante em sistemas plasmônicos, deseja-se um Γ menor possível.

Para excitações de GSP's no caso da polarização TE, obtidas em 2016 por Menabde *et al.* (MENABDE *et al.*, 2016), deve-se propor a seguinte solução para as equações de Maxwell

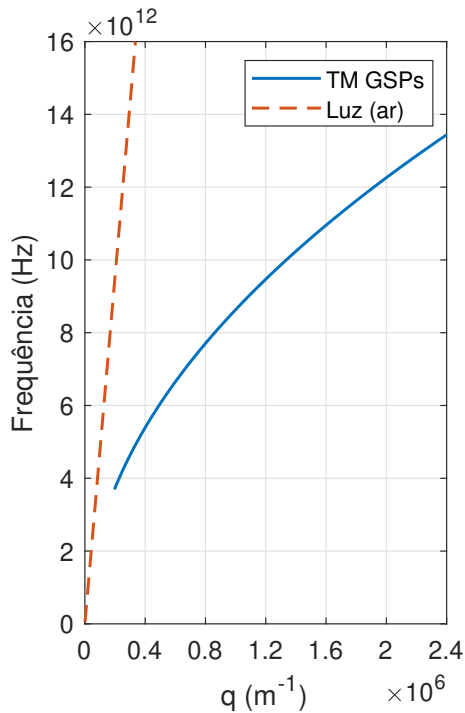
$$\vec{E}_j(\vec{r}, t) = E_{j,y} \hat{y} e^{-\kappa_j |z|} e^{i(qx - wt)}, \quad (1.42a)$$

$$\vec{B}_j(\vec{r}, t) = (B_{j,x} \hat{x} + B_{j,z} \hat{z}) e^{-\kappa_j |z|} e^{i(qx - wt)}. \quad (1.42b)$$

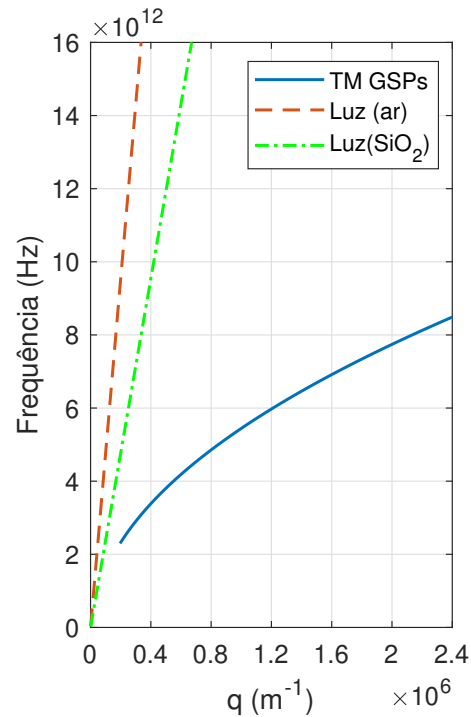
Substituindo as Eqs. (1.42a) e (1.42b) nas equações de Maxwell (1.32) e (1.33), obtemos

⁵ Por questões numéricas a relação de dispersão para q pequeno está ausente nos gráficos. Utilizamos o método da bisseção para obtenção das relações de dispersão desta seção. Para valores de q pequenos a equação (1.38) tem soluções complexas, não sendo o método da bisseção muito eficaz para essa região.

Figura 9 – Relação de dispersão do modo TM para o GSP's (curva sólida azul) em uma estrutura dielétrico-grafeno-dielétrico. À direita, temos o caso ar-grafeno- SiO_2 . Foi utilizado o valor de energia de Fermi de $E_F = 0,45$ eV



(a) Caso ar-grafeno-ar, onde $\epsilon_{ar} = 1$.



(b) Caso ar-grafeno- SiO_2 , onde $\epsilon_{SiO_2} = 3,9$.

Fonte: autoria própria.

$$B_{j,z} = \frac{q}{\omega} E_{j,y}, \quad (1.43a)$$

$$B_{j,x} = -i \operatorname{sgn}(z) \frac{\kappa_j}{\omega} E_{j,y}, \quad (1.43b)$$

$$B_{j,x} = -i \operatorname{sgn}(z) \frac{\kappa_j}{q} B_{j,z}. \quad (1.43c)$$

Em seguida, ao substituir a Eq. (1.43a) de $B_{j,z}$ na Eq. (1.43c) e igualar as Eqs. (1.43b) e (1.43c), obtemos κ em função de q e ω , tal como

$$\kappa_j^2 = q^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2}. \quad (1.44)$$

Para este caso (modo TE), as condições de contorno se tornam

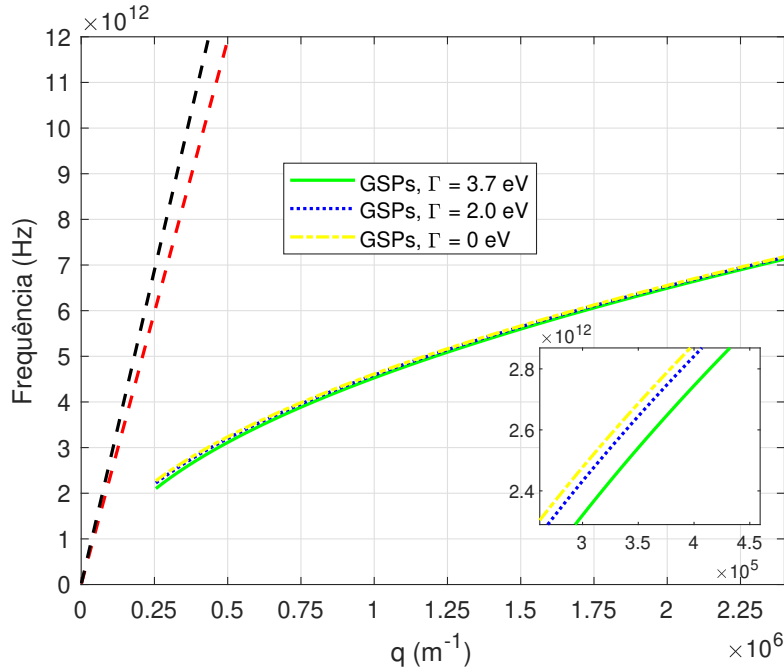
$$E_{1,y}(x,z)|_{z=0} = E_{2,y}(x,z)|_{z=0}, \quad (1.45a)$$

$$B_{2,x}(x,z)|_{z=0} - B_{1,x}(x,z)|_{z=0} = \mu_0 J_y(x) = \mu_0 \sigma_{yy} E_{2,y}(x,z)|_{z=0}. \quad (1.45b)$$

Como a condutividade no grafeno é isotrópica, então tomamos $\sigma(\omega) = \sigma_{yy} = \sigma_{xx}$. Combinando as Eqs. (1.41), (1.43b) e (1.43c) com as condições de contorno (1.45a) e (1.45b), obtemos

$$\boxed{\kappa_1(q, \omega) + \kappa_2(q, \omega) = i\mu_0 \omega \sigma(\omega)}. \quad (1.46)$$

Figura 10 – Modo TM dos GSP's obtidos pela solução numérica da Eq. (1.38) utilizando a condutividade de Drude (1.41) para diferentes parâmetros de amortecimento $\Gamma = \hbar\gamma$. Os dielétricos que revestem o grafeno são o ion gel ($\epsilon_1 = 3$) e o SiO_2 ($\epsilon_2 = 4$). As linhas tracejadas mostram a dispersão da luz nesses dielétricos. Aqui foi usado $E_F = 0,45$ eV e tomamos a parte real de q



Fonte: autoria própria.

A Eq. (1.46) nos fornece a relação de dispersão de GSP's para a polarização TE. Note que a Eq. (1.46) só tem solução se e somente se a parte imaginária de $\sigma(\omega)$ for negativa. Para sistemas convencionais de elétrons 2D, a condutividade segue o modelo de Drude, desde que as transições interbandas sejam ignoradas, de modo que a parte imaginária da condutividade óptica é sempre positiva. Como, por exemplo, podemos ver na condutividade tipo Drude do grafeno que

$$Im[\sigma(\omega)] = \frac{4\sigma_0}{\pi} \frac{\hbar\omega E_F}{(\hbar^2\omega^2 + \Gamma^2)}, \quad (1.47a)$$

$$\Re[\sigma(\omega)] = \frac{4\sigma_0}{\pi} \frac{\Gamma E_F}{(\hbar^2\omega^2 + \Gamma^2)}. \quad (1.47b)$$

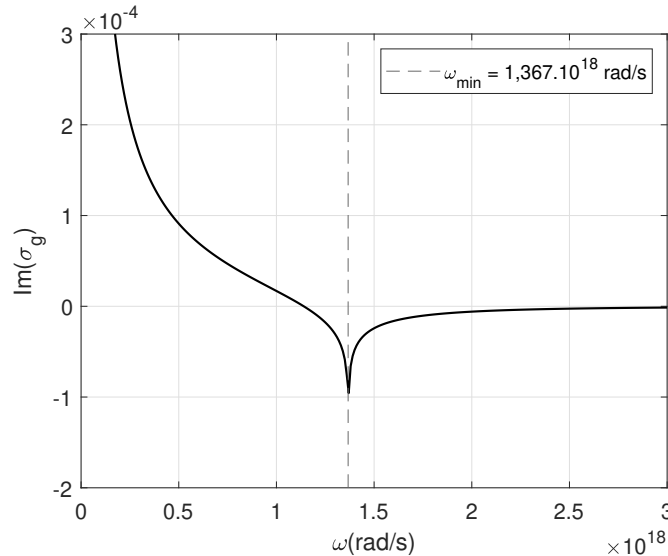
Portanto, os modos de superfície TE não podem ser realizados em um gás de elétrons 2D. No entanto, na condutividade do grafeno, além da contribuição intrabanda do tipo Drude, há o termo que explica os processos eletrônicos interbanda, como mostram as Eqs. (1.39), (1.40a) e (1.40b). Esse termo pode assumir valores negativos. Então, sempre que a soma de ambas as contribuições produzir um resultado em que a parte imaginária da condutividade é negativa, as excitações de GSP's do tipo TE são possíveis.

Dessa forma, com $\Gamma = 0$ e tomando $2E_F < \hbar\omega$ para que σ_{inter} não seja desprezável, a Eq. (1.39) pode ser reescrita como

$$\sigma_g(\omega) = \frac{\sigma_0}{\pi} \left\{ 1 + i \left[\frac{4E_F}{\hbar\omega} + \ln \left| \frac{\hbar\omega - 2E_F}{\hbar\omega + 2E_F} \right| \right] \right\}. \quad (1.48)$$

A Fig. 11 mostra o gráfico de $Im(\sigma_g)$ em função da frequência angular. Note que a condição de negatividade da parte imaginária da condutividade é satisfeita para $\omega > \omega_{min}$. Isto é, a condição $2E_F < \hbar\omega$ delimita os valores de ω para os quais a Eq. (1.48) é válida. Portanto, para que seja possível excitar GSP's do tipo TE, devemos buscar os valores de $\omega > \omega_{min}$ para os quais a parte imaginária da condutividade $\sigma_g(\omega)$ seja negativa. Tomando como exemplo o valor de energia de Fermi de $E_F = 0.45$ eV, vemos pela Fig. 11 que somente aqueles valores acima de $\omega_{min} = 1,367 \cdot 10^{18}$ rad/s obedecem tal condição.

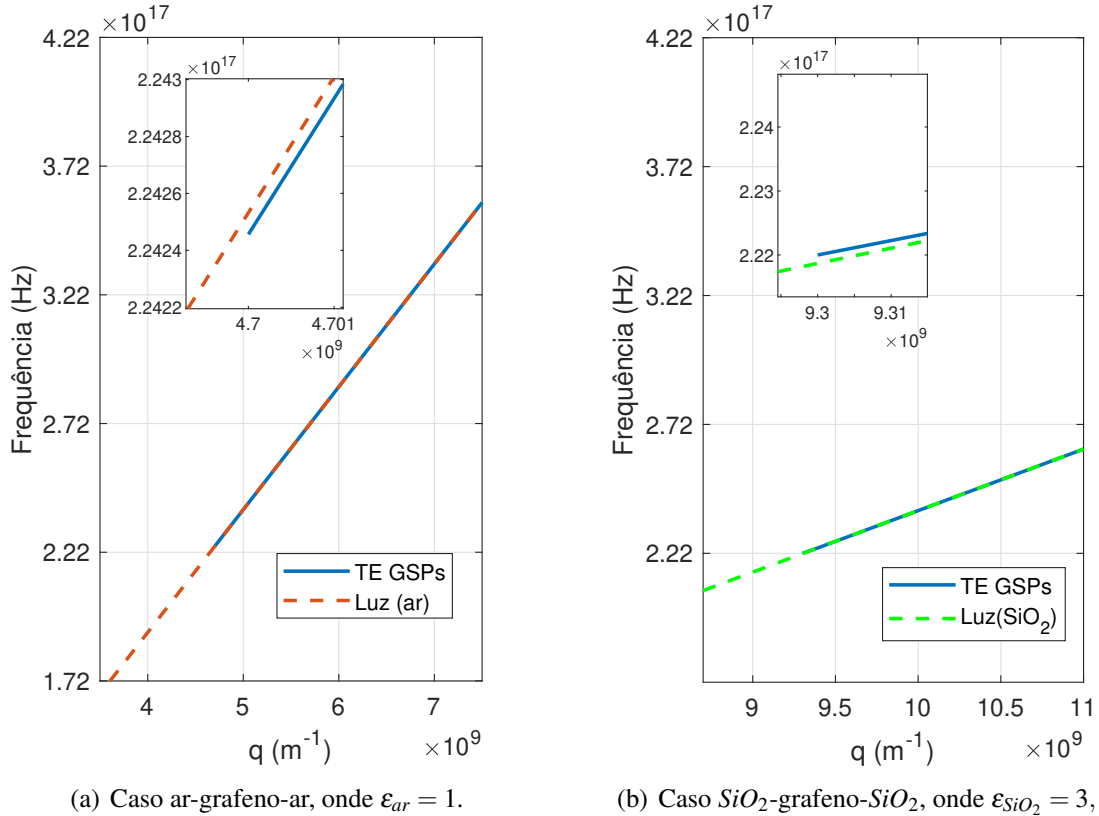
Figura 11 – Comportamento da parte imaginária da condutividade do grafeno com a frequência angular ω . Utilizamos $E_F = 0.45$ eV e a linha tracejada demarca o limite de validade da Eq. (1.48)



Fonte: autoria própria.

A Fig. 12 mostra as curvas de dispersão para o modo TE de GSP's obtidos pela solução da Eq. (1.46) com a condutividade dada pela Eq. (1.48) para diferentes valores de ϵ . Note que a curva de excitação dos modos TE para os GSP's parte sempre da frequência correspondente a ω_{min} tanto para o caso ar-grafeno-ar [Fig. 12(a)] quanto para o caso ar-grafeno- SiO_2 [Fig. 12(b)], conforme o esperado. Podemos observar que a curva do modo TE não se afasta muito da linha da luz, o que significa que o confinamento é bastante precário. Isso acontece porque o lado direito da relação de dispersão (1.46) é muito pequeno, levando a um afastamento

Figura 12 – Relação de dispersão do modo TE para os GSP's em uma estrutura dielétrico-grafeno-dielétrico, tomando o ar ($\epsilon_{ar} = 1$) como o meio dielétrico no painel (a) e o SiO_2 ($\epsilon_{SiO_2} = 3,9$) no painel (b). Aqui também usamos $E_F = 0,45$ eV



Fonte: autoria própria.

quase que desprezível. Isso justifica muito o porquê dos autores estudarem somente os GSP's com polarização TM, pois são os modos mais perceptíveis quando comparados aos modos TE.

Vamos agora considerar, para o caso da polarização TM, a situação em que a folha de grafeno está inserida em um sistema dielétrico simétrico, isto é, $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon$ de tal forma que tomamos o seu valor médio, $\epsilon = (\epsilon_1 + \epsilon_2)/2$, na relação de dispersão (1.38), que se torna

$$1 + i \frac{\sigma(\omega)}{2\omega\epsilon\epsilon_0} \sqrt{q^2 - \epsilon\omega^2/c^2} = 0. \quad (1.49)$$

Desconsiderando os efeitos de atraso, ou seja, no regime não retardado, em que $q \gg \sqrt{\epsilon}\omega/c$, a Eq. (1.49) fornece-se

$$q \approx i \frac{2\omega\epsilon\epsilon_0}{\sigma(\omega)}. \quad (1.50)$$

Sem levar em conta o amortecimento, a condutividade do grafeno [Eq. (1.41)] torna-se

$$\sigma(\omega) = 4i\alpha\epsilon_0c \frac{E_F}{\hbar\omega}, \quad (1.51)$$

onde $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$ é definido como constante de estrutura fina. Assim, a Eq. (1.50) permite escrever

$$\hbar\omega_{GSP} \approx \sqrt{\frac{2\alpha}{\epsilon}} E_F \hbar c q. \quad (1.52)$$

A Eq. (1.52) fornece a energia de plásmon no grafeno em termos de constantes determináveis em um sistema. Note-se que também permite concluir que $\omega_{GSP} \propto \sqrt{q}$. Como, para o grafeno, $E_F = \hbar v_F k_F$ com $k_F = \sqrt{\pi} \sqrt{n_e}$ (NETO *et al.*, 2009), analisando a Eq. (1.52) é possível chegar à conclusão de que

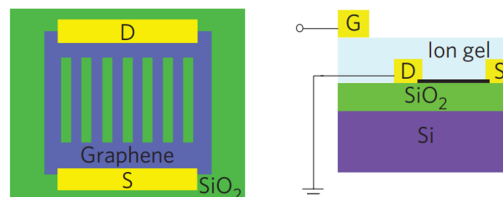
$$\omega_{GSP} \propto n_e^{\frac{1}{4}}, \quad (1.53)$$

que é uma assinatura típica e exclusiva dos GSP's, como confirmam os experimentos de Ju *et al.* (2011) (JU *et al.*, 2011), enquanto que a relação $\omega_{GSP} \propto \sqrt{q}$ é inerente de qualquer sistema eletrônico 2D.

1.6 Plasmônica em redes periódicas de nanofitas de grafeno

Em 2011, Ju *et al.* (JU *et al.*, 2011) publicaram um trabalho intitulado “Plasmônica de grafeno para metamateriais terahertz ajustáveis” (do inglês, *Graphene plasmonics for tunable terahertz metamaterials*). Os autores concluíram que não é possível excitar plásmons em folhas de grafeno homogêneas, mas por outro lado que se consegue facilmente ressonâncias de plásmons em estruturas de grafeno engenhosamente projetadas e que tenham dimensões muito menores que os comprimentos de onda da luz. Para tal utilizaram matrizes periódicas de micro-fitas de grafeno, como apresentado na Fig. 13.

Figura 13 – À esquerda temos a configuração da micro-fita periódica de grafeno investigada no trabalho de Ju *et al.* (JU *et al.*, 2011). À direita temos a vista lateral do mesmo dispositivo. A concentração de portadores nas fitas de grafeno é controlada por meio de uma porta superior de íon-gel, possibilitando larga faixa de dopagem por meio de *gating* eletrostático. A largura da fita varia entre 1 a 4 μm



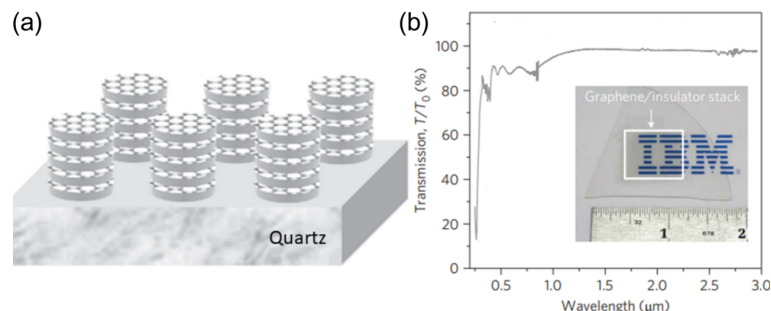
Fonte: adaptada da Ref. Ju *et al.* (2011, p. 631).

Eles conseguiram mostrar que ao se alterar a largura da micro-fita e o *doping* eletrostático, as ressonâncias de plásmons no grafeno podem ser ajustadas em um intervalo

na casa dos THz. O fato de mostrar ser possível excitar GSP's lançou as raízes para o estudo experimental da plasmônica em grafeno. Dessa forma, o trabalho de Ju *et al.* (JU *et al.*, 2011) inspirou uma gama de pesquisas científicas que foram publicadas posteriormente e, portanto, é considerado um trabalho fundamental na área. Comentaremos a seguir alguns desses trabalhos.

Logo no início de 2012, Christensen *et al.* (CHRISTENSEN *et al.*, 2012) conseguiram fornecer blocos de construção para construir circuitos de plásmons de grafeno para futuros dispositivos de plásmom compactos estudando as propriedades de propagação de plásmons guiados ao longo de nanofitas de grafeno individuais e com interação. O grupo da IBM, em Nova York, (YAN *et al.*, 2012) deu seguimento ao trabalho de Ju *et al.* (2011) (JU *et al.*, 2011) fazendo uma investigação de estruturas verticais baseadas em grafeno, com ênfase em pilhas de camadas de grafeno e isolantes, como apresentado na Fig. 14.

Figura 14 – (a) Estrutura do dispositivo de empilhamento de camadas de grafeno e material isolante reportado por Yan *et al.* (YAN *et al.*, 2012) e (b) o respectivo espectro de transmissão relativo do infravermelho próximo ao ultravioleta, onde T e T_0 correspondem as transmissões através da amostra de quartzo com e sem a pilha de grafeno/isolante, respectivamente



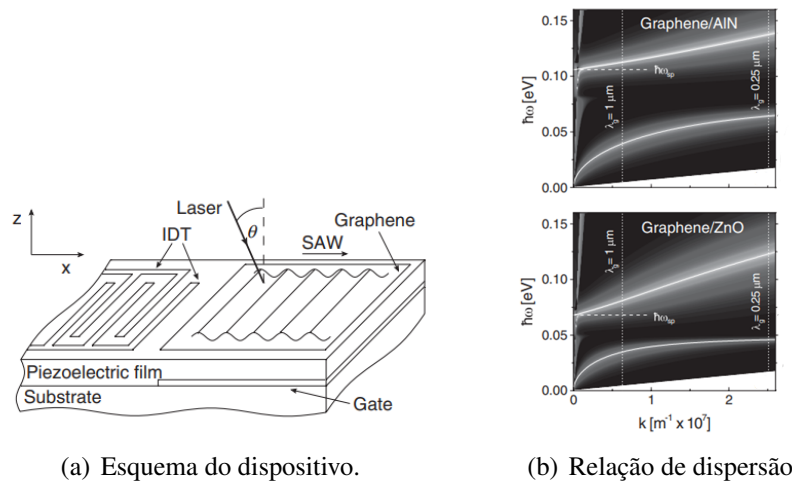
Fonte: adaptada da Ref. Yan *et al.* (2012, p. 2).

Foi mostrado que é possível manipular radiação de infravermelho médio e distante (THz) usando as estruturas citadas, obtendo uma resposta plasmônica com diversas aplicações, como por exemplo um absorvedor de radiação quase perfeito. Lee *et al.* (2012) (LEE *et al.*, 2012) conseguiu a excitação de plásmons de superfície em um metamaterial constituído por uma folha de grafeno depositada sobre uma camada de meta-átomos hexagonais.

Uma forma diferente de excitar plásmons em grafeno foi proposto por Schiefele *et al.* (2013) (SCHIEFELE *et al.*, 2013) e Farhat *et al.* (2011) (FARHAT *et al.*, 2011), que consiste em excitar SPP's por meio de ondas sonoras super acústicas de superfície geradas eletricamente (ver Fig. 15). A ideia é usar uma onda sonora para induzir um deslocamento espacial da folha de grafeno. Dessa forma, as vibrações elásticas da folha atuam como uma grade que permite o acoplamento do campo eletromagnético à propagação de SPP's no grafeno.

Peres *et al.* (2012) (PERES *et al.*, 2012) propôs outra maneira de obter SPP's em grafeno por meio da dopagem local do grafeno através da adsorção molecular (ver Fig. 16). Os mesmos autores mostraram também que tal dopagem pode ser feita controladamente impondo estruturas geométricas específicas para a folha de grafeno em conjunto a um substrato onde é depositado de modo a produzir um campo de deformação periódica no grafeno. Assim, pode-se produzir um padrão de condutividade periódica que acopla uma onda eletromagnética incidente e produz GSP's.

Figura 15 – Acoplamento de luz em plásmons de grafeno através de ondas acústicas de superfície (SCHIEFELE *et al.*, 2013). Um sinal de alta frequência aplicado a um transdutor interdigital (IDT) em um filme piezoelétrico gera uma onda acústica de superfície (SAW) que se propaga na direção x . Em (b) vemos a dispersão de plásmons para grafeno em AlN e em ZnO

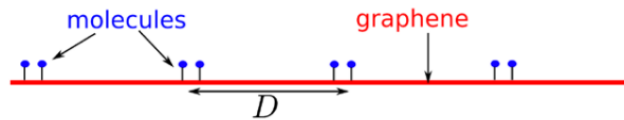


(a) Esquema do dispositivo.

(b) Relação de dispersão

Fonte: adaptada da Ref. Schiefele *et al.* (2013, p. 237405-2).

Figura 16 – A folha de grafeno é dopada localmente por átomos ou moléculas adsorvidas que criam um perfil de densidade de carga não homogêneo e, portanto, uma condutividade modulada



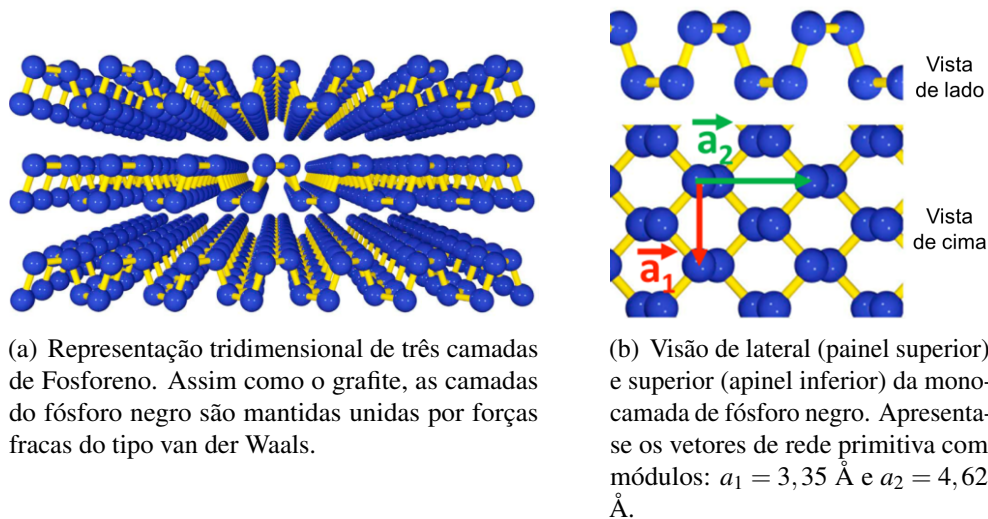
Fonte: adaptada da Ref. Peres *et al.* (2012, p. 2).

1.7 Plásmons em fosforeno

O fosforeno – uma monocamada do fósforo negro, alótropo do fósforo – é um material 2D semicondutor que ganhou destaque no campo da ciência dos materiais lamelares devido às suas propriedades eletrônicas intrínsecas de semicondutores do tipo p e que apresenta propriedades bastante anisotrópicas (LIU *et al.*, 2014). Assim como o grafeno, uma ou poucas

camadas de fosforeno podem ser isoladas através de esfoliação mecânica (NOVOSELOV *et al.*, 2005). Sua estrutura cristalina 2D com um formato hexagonal rugoso, conforme vemos na Fig. 17, e hibridização sp^3 dos átomos de fósforo da sua rede levam a um alto grau de anisotropia na sua estrutura de bandas (ver Fig. 18), onde as energias das bandas variam significativamente com a direção do momento. Como consequência da estrutura de bandas anisotrópica, tem-se que diferentes propriedades físicas podem apresentar diferentes comportamentos dependendo da direção em que são medidas, o que pode ser bastante promissor para aplicações optoeletrônicas que necessitem depender da direção.

Figura 17 – Estrutura cristalina do Fosforeno

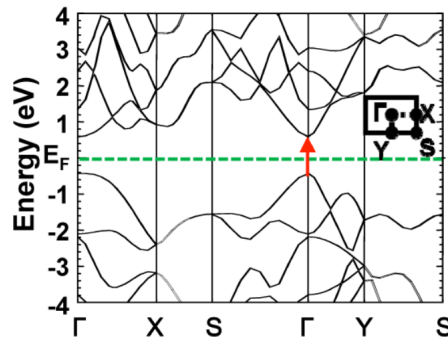


Fonte: adaptada da Ref. Liu e al. (2014, p. 4034).

Por se tratar de material semiconductor, o fosforeno apresenta um *band gap* não nulo. Na Fig. 18 o *band gap* direto calculado para a monocamada de fosforeno é de $\approx 2 \text{ eV}$ em Γ , um valor bem maior quando comparado com a sua versão *bulk* de $E_g = 0,31 \text{ eV}$ (LIU *et al.*, 2014). Essa comparação do valor do *band gap* mostra a possibilidade adicional de ajuste de *band gap* e propriedades eletrônicas que o fósforo negro possui conforme altera-se o número de camadas. Uma das consequências do largo valor de *gap* de energia no fosforeno esfoliado (monocamada) é a observação clara de fotoluminescência (LIU *et al.*, 2014), isto é, ao serem excitados pela luz os elétrons da banda de valência da monocamada de fosforeno absorvem a energia necessária para passarem para a banda de condução, e quando esses elétrons retornam para seus estados de energia originais (banda de valência) eles emitem fótons de luz visível ou ultravioleta. Tal efeito não é observado para o fosforeno no estado de *bulk*, pois seu *band gap* é pequeno.

As bandas anisotrópicas da Fig. 18 também influenciam diretamente no transporte

Figura 18 – Estrutura de bandas da monocamada de Fósforo negro, mostrando que o fosforeno é um semiconductor de *gap* direto (ver seta vermelha) em torno do ponto Γ e com bandas de energia com curvaturas diferentes ao longo das direções $\Gamma - X$ e $\Gamma - Y$, mostrando o seu carácter anisotrópico



Fonte: adaptada da Ref. Liu e al. (2014, p. 4034).

eletrônico. Na direção $\Gamma - Y$ (*armchair* - AC) a massa efetiva dos elétrons e buracos é muito menor que ao longo da direção $\Gamma - X$ (*zigzag* - ZZ). Nesta última, os portadores são significativamente mais pesados sugerindo comportamento de transporte eletrônico anisotrópico. Essa anisotropia influencia diretamente a mobilidade eletrônica, permitindo uma mobilidade mais alta ao longo da direção AC em comparação com a direção ZZ, o que pode ser explorado em dispositivos semicondutores anisotrópicos para otimizar o transporte de elétrons, pois indica a facilidade com que os elétrons podem se mover através do material (WU *et al.*, 2015).

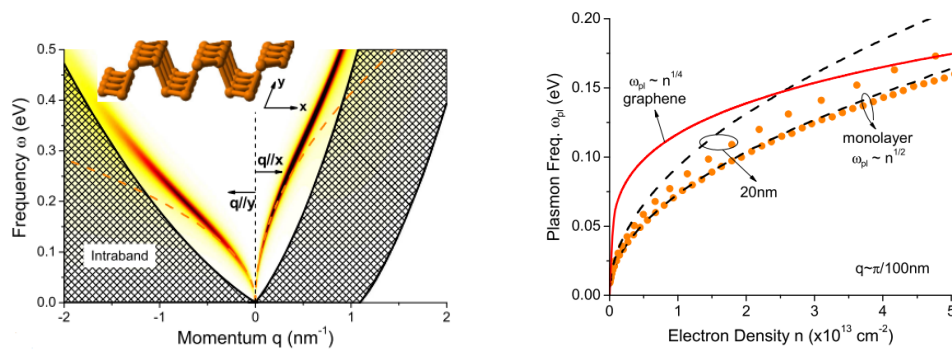
Além disso, as propriedades eletrônicas anisotrópicas também afetam a resposta óptica do fosforeno, permitindo a sintonização de suas propriedades plasmônicas. O fosforeno é conhecido por suportar plásmos em diferentes modos de polarização devido à sua anisotropia (LEE *et al.*, 2018). Isso significa que sua resposta à luz é direcionada pelas diferentes propriedades ópticas ao longo das direções AC e ZZ, tornando-o um material promissor para dispositivos plasmônicos anisotrópicos.

Desde a primeira exfoliação do fosforo negro em 2014 obtida por Li *et al.* (LI *et al.*, 2014) podemos encontrar diversos trabalhos que abordam as excitações plasmônicas de diferentes formas. O trabalho de Low *et al.* (2014) (LOW *et al.*, 2014b) traz uma análise das propriedades ópticas de filmes finos multicamadas de fosforo negro com espessura variando de poucas a dezenas de nanômetros. Os autores calcularam suas condutividades ópticas, usando a fórmula de Kubo, para as diferentes direções AC e ZZ. Também mostraram que os espectros de absorção óptica do fosforo negro multicamadas variam sensivelmente com a espessura, dopagem e polarização da luz, especialmente em todo o espectro tecnologicamente relevante do infravermelho médio ao próximo.

Posteriormente, no mesmo ano, o trabalho intitulado “*Plasmons and Screening in Monolayer and Multilayer Black Phosphorus*” (LOW *et al.*, 2014a) apresentou uma análise de absorção de plásmons para a monocamada e multicamada de fósforo negro através do cálculo de uma função dielétrica $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ usando um Hamiltoniano efetivo de baixas energias.⁶

Os resultados obtidos na Ref. (LOW *et al.*, 2014a) para a dispersão de plásmons para as diferentes direções são apresentados na Fig. 19(a). Note que há um comportamento diferente para cada uma das direções, o que é consequência da estrutura de bandas anisotrópica. Na Fig. 19(b), apresenta-se o comportamento das frequências de plásmons em função da densidade de portadores n e uma comparação com o caso do espectro do grafeno. No mencionado trabalho, eles reportam para a monocamada de fosforeno que as frequências de plásmons obedecem um tendência de $\omega_{pl} \approx n$ e que para um filme multicamada de 20 nm o expoente tende a ser menor que 0.5. Eles relatam que este desvio é devido à forte não-parabolicidade causada pelo acoplamento interbanda.

Figura 19 – Dispersão de plásmons para o fosforeno para diferentes direções e diferentes dopagens



(a) Dispersão de plásmons para a monocamada de fósforo negro ao longo das direções ZZ e AC.

(b) Dispersão de plásmons para diferentes densidades dos portadores ao longo da direção AC e uma comparação com o caso do grafeno.

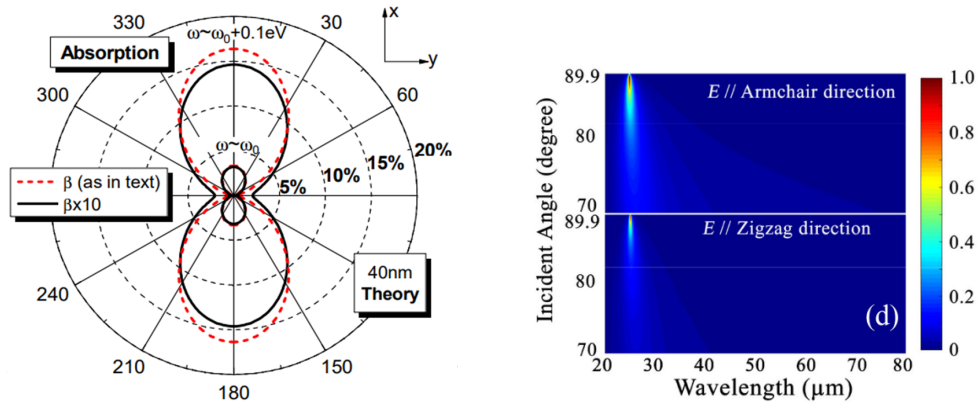
Fonte: adaptada da Ref. Low e al. (2014a, p. 106802-3).

Outra consequência da anisotropia do fósforo negro é a forte dependência angular na absorção de luz incidente, tanto para a monocamada quanto para a multicamada. O painel da esquerda da Fig. 20 apresenta a dependência do coeficiente de absorção interbanda, $A(\omega)$,

⁶ Alguns dos parâmetros utilizados no trabalho (LOW; AL., 2014a) serão utilizados para a obtenção dos resultados no Capítulo 3 desta dissertação, tais como os valores das massas efetivas $m_{cx} = m_{vx} = 0.15m_0$, $m_{cy} = 0.7m_0$ e $m_{vy} = 1.0m_0$ para a monocamada, onde m_{ij} com $i = \{c, v\}$ correspondendo as bandas de condução (c) e valência (v) e $j = \{x, y\}$ as direções x (AC) e y (ZZ) do material. No trabalho (LOW; AL., 2014a) eles reportaram resultados para o caso de multicamadas utilizando as massas de $m_{cx} = m_{vx} = 0.08m_0$, $m_{cy} = 0.7m_0$ e $m_{vy} = 1.0m_0$ e do *band gap* da monocamada de $\Delta = 2 \text{ eV}$.

com o ângulo de polarização α para um filme de fósforo negro com 40 nm de espessura, para frequências maiores ou iguais que o seu *gap*, obtida na Ref. (LOW *et al.*, 2014b).

Figura 20 – Dependência da absorção em função do ângulo de polarização (painel da direita) e absorção em função do ângulo de incidência (painel da esquerda)



(a) Representação polar da absorção para diferentes ângulos de polarização para a multicamada de fosforeno. O fator β é a força de acoplamento interbanda.

(b) Absorção em função do ângulo de incidência para a monocamada de fósforo negro e da incidência do modo TE.

Fonte: adaptada das Refs. Low e al. (2014b, p. 075434-4) e Feng e al. (2018, p. 4700407), respectivamente.

O painel da direita apresenta o espectro de absorção para a monocamada de fósforo negro em função do ângulo de incidência θ para a polarização TE. Nota-se que há uma redução na absorção com o aumento do ângulo de polarização para ângulos entre 0° e 90° . Já para ângulo de incidência, há um aumento da absorção com o aumento do ângulo em graus. O resultado da Fig. 20 foi obtido para uma nanofita de fósforo negro depositada em um substrato dielétrico seguido de um metal que funciona como um espelho, desse modo a transmissão através da amostra é nula e absorção é maximizada (FENG *et al.*, 2018). Já para a polarização TM, a absorção de plásmons na monocamada de fosforeno reduz-se à medida que ângulo de incidência aumenta, sendo o seu máximo na incidência normal, como reportado no trabalho realizado por Xiong *et al.* (2017) (XIONG *et al.*, 2017).

1.8 Escopo do trabalho

O presente trabalho tem como objetivo investigar as excitações de SPP's em redes periódicas de nanofitas de grafeno e de fosforeno. Assim, inicialmente desenvolvemos analiticamente o formalismo matemático apresentado pelos pesquisadores N. M. R. Peres e P. A. D. Gonçalves na Ref. (GONÇALVES; PERES, 2016). Essa descrição matemática para o

tratamento da superrede de nanofitas de grafeno posicionadas em um substrato, com uma condutividade periódica espacialmente dependente, é apresentada no Capítulo 2. Obtemos a relação de dispersão e analisamos o problema do espalhamento. Os resultados obtidos reproduzindo aqueles encontrados pelos pesquisadores N. M. R. Peres e P. A. D. Gonçalves no Capítulo 7 da Ref. (GONÇALVES; PERES, 2016) para um arranjo geométrico específico de nanofitas de grafeno são também discutidos no Capítulo 2. Em seguida, no Capítulo 3, exploramos o caso de nanofitas anisotrópicas formadas por monocamadas de fosforeno com formalismo matemático similar ao empregado para o caso do grafeno. Por fim, no Capítulo 4 apresentamos nossas conclusões preliminares e as perspectivas.

2 PLÁSMONS EM REDES PERIÓDICAS DE NANOFITAS DE GRAFENO

Neste capítulo faremos uma descrição matemática baseada nas equações de Maxwell que nos permitirá investigar os modos SPP'S quando temos uma condutividade modulada periodicamente sobre um substrato dielétrico. Consideraremos de uma forma geral o caso de uma folha de grafeno com condutividade modulada periodicamente (Secs. 2.1 e 2.2). Tal análise será feita investigando o acoplamento de radiação eletromagnética aos GSP's em um arranjo periódico de fitas de grafeno por meio da resolução do problema de espalhamento (Sec. 2.3) e encontrado a expressão para a transmitância, refletância e absorbância de ondas planas incidindo sobre o sistema físico mencionado.

2.1 Configurando o modelo

Consideremos um sistema 2D genérico com uma condutividade periódica espacialmente dependente dada por

$$\sigma(x) = \sigma(x + R), \quad (2.1)$$

representada na Fig. 21, onde R define o período da estrutura que pode ser vista como um cristal unidimensional ao longo do eixo x com constante de rede R . Aqui assumiremos que tal modulação é alcançada na folha de grafeno, que está depositada em um meio dielétrico, por meio da modulação periódica do seu nível de Fermi. Note pela Eq. (1.41) a dependência linear de σ com E_F . O sistema é assumido infinito ao longo da direção y , isto é, possui simetria translacional ao longo do eixo y , e a periodicidade é ao longo da direção x . O caráter unidimensional do sistema cristalográfico permite definir o vetor de rede primitiva recíproca como $G = \frac{2\pi}{R}$.

Da periodicidade do sistema em x , temos que os campos eletromagnéticos obedecem ao teorema de Bloch. Portanto, estamos procurando ondas de superfície de Bloch magnéticas transversais (polarização TM) na forma de uma série de Fourier-Floquet, tal como

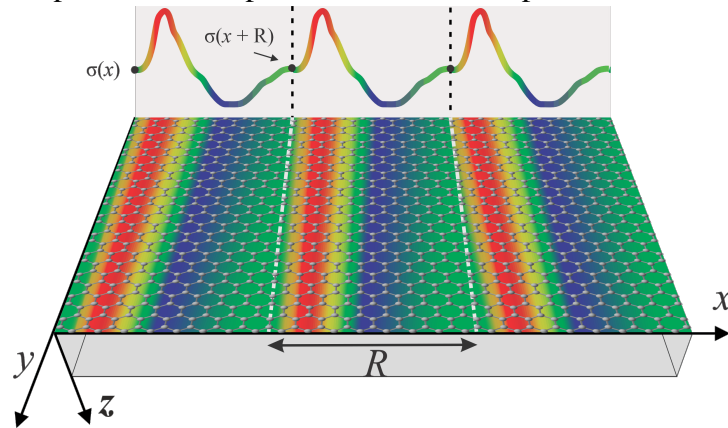
$$E_x^{(j)}(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_{x,n}^{(j)} e^{i(q+nG)x} e^{-\kappa_{j,n}|z|}, \quad (2.2a)$$

$$E_z^{(j)}(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_{z,n}^{(j)} e^{i(q+nG)x} e^{-\kappa_{j,n}|z|}, \quad (2.2b)$$

$$B_y^{(j)}(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_{y,n}^{(j)} e^{i(q+nG)x} e^{-\kappa_{j,n}|z|}. \quad (2.2c)$$

Aqui, o índice $j = 1$ refere-se ao substrato ($z > 0$) e $j = 2$ ao superstrato, acima do meio dielétrico ($z < 0$), cujas propriedades eletromagnéticas são totalmente caracterizadas pelas

Figura 21 – Representação esquemática de uma folha de grafeno com uma condutividade periódica arbitrariamente espacialmente dependente. As cores representam a intensidade de σ



Fonte: autoria própria.

permissividades relativas ϵ_1 e ϵ_2 , respectivamente. Os vetores de onda dos modos de Bloch (ou ordens de difração) são definidos como $k_{x,n} = q + nG$, com n inteiro. Se o sistema for linear, então cada componente de Fourier é independente das outras, de modo que podemos usar as equações de Maxwell

$$\vec{\nabla} \times \vec{B}^{(j)} = \frac{\epsilon_j}{c^2} \frac{\partial \vec{E}^{(j)}}{\partial t}, \quad (2.3a)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}^{(j)} = -\frac{\partial \vec{B}^{(j)}}{\partial t}. \quad (2.3b)$$

Desenvolvendo os termos da Eq. (2.3a), temos que

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{B}^{(j)} &= \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & B_y^{(j)} & 0 \end{vmatrix} = -\frac{\partial B_y^{(j)}}{\partial z} \hat{i} + \frac{\partial B_y^{(j)}}{\partial x} \hat{k} \\ &= \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) B_y^{(j)} \hat{i} + i(q + nG) B_y^{(j)} \hat{k}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

As Eqs. (2.2a), (2.2b) e (2.2c) fornecem as componentes espaciais do campo eletromagnético, já a componente temporal é $e^{-i\omega t}$. Então, temos

$$\frac{\epsilon_j}{c^2} \frac{\partial \vec{E}^{(j)}}{\partial t} = -i\omega \frac{\epsilon_j}{c^2} \vec{E}^{(j)}, \quad (2.5)$$

que resulta em

$$\begin{aligned} \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) B_{y,n}^{(j)} &= -\frac{i\omega \epsilon_j}{c^2} E_{x,n}^{(j)}, \\ \longrightarrow B_{y,n}^{(j)} &= -i \operatorname{sgn}(z) \frac{\omega \epsilon_j}{\kappa_{j,n} c^2} E_{x,n}^{(j)}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

em termos da componente x do campo elétrico. E, de forma semelhante, temos

$$\begin{aligned} i(q+nG)B_{y,n}^{(j)} &= -\frac{i\omega\epsilon_j}{c^2}E_{z,n}^{(j)}, \\ \longrightarrow B_{y,n}^{(j)} &= -\frac{\omega\epsilon_j}{c^2(q+nG)}E_{z,n}^{(j)}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

em termos da componente z do campo elétrico. Igualando as Eqs. (2.6) e (2.7), obtemos

$$E_{z,n}^{(j)} = i \operatorname{sgn}(z) \frac{(q+nG)}{\kappa_{j,n}} E_{x,n}^{(j)}. \quad (2.8)$$

Agora, desenvolvendo a Eq. (2.3b), temos

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{E}^{(j)} &= \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x^{(j)} & 0 & E_z^{(j)} \end{vmatrix} = -\left(\frac{\partial E_z^{(j)}}{\partial x} - \frac{\partial E_x^{(j)}}{\partial z} \right) \hat{j} \\ &= -\left[i(q+nG)E_z^{(j)} + \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_x^{(j)} \right] \hat{j}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

com a derivada em relação a parte temporal dada por

$$-\frac{\partial \vec{B}^{(j)}}{\partial t} = i\omega \vec{B}^{(j)}. \quad (2.10)$$

Portanto, obtemos que

$$\left[i(q+nG)E_{z,n}^{(j)} + \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_{x,n}^{(j)} \right] = -i\omega B_{y,n}^{(j)}. \quad (2.11)$$

Substituindo as Eqs. (2.6) e (2.8) na Eq. (2.11), temos

$$\begin{aligned} \left[-\frac{(q+nG)^2}{\kappa_{j,n}} \operatorname{sgn}(z) + \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) \right] &= -\operatorname{sgn}(z) \frac{\omega^2 \epsilon_j}{\kappa_{j,n} c^2}, \\ \longrightarrow -(q+nG)^2 + \kappa_{j,n}^2 &= -\frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2}, \\ \longrightarrow \kappa_{j,n} &= \sqrt{(q+nG)^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2}}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Note que as Eqs. (2.6), (2.7), (2.8) e (2.12) são semelhantes às Eqs. (1.43) apenas com mudança $q \rightarrow q+nG$. Tal mudança ocorre devido as ordens de difração (nG) que aparecem no espalhamento. Conforme discutido na Seção 1.4, essa é uma consequência da modulação periódica do sistema e é o que permite o casamento de fase entre a onda incidente e o GSP.

As condições de contorno em $z=0$ requerem a continuidade da componente tangencial do campo elétrico, isto é:

$$E_x^{(2)}(x,0) - E_x^{(1)}(x,0) = 0. \quad (2.13)$$

Assim, usando as Eqs. (2.2a), (2.2b) e (2.2c), temos

$$\sum_n \left[E_{x,n}^{(2)} - E_{x,n}^{(1)} \right] e^{inGx} = 0. \quad (2.14)$$

Da descontinuidade do campo magnético devido à presença de uma densidade de carga superficial, temos que

$$B_y^{(2)}(x, 0) - B_y^{(1)}(x, 0) = \mu_0 J(x) = \mu_0 \sigma(x) E_x^{(1)}(x, 0). \quad (2.15)$$

Novamente, usando as Eqs. (2.2a), (2.2b) e (2.2c), obtemos

$$\sum_n \left[B_{y,n}^{(2)} - B_{y,n}^{(1)} \right] e^{inGx} = \sum_n \mu_0 \sigma(x) E_{x,n}^{(1)} e^{inGx}. \quad (2.16)$$

Em semelhança com sistemas periódicos (por exemplo, um elétron sujeito a um potencial periódico em um sólido), temos que, para um conjunto periódico de nanofitas de grafeno ou um grafeno depositado com impurezas que levem a modulação periódica da energia de Fermi, como o exemplo que apresentamos na Fig. 16 da Sec. 1.6 que faz referência ao trabalho de Peres *et al.* (2012) (YAN *et al.*, 2012), podemos escrever a condutividade como uma série de Fourier

$$\sigma(x) = \sum_m \tilde{\sigma}_m e^{imGx}, \quad (2.17)$$

onde o termo $\tilde{\sigma}_m$ é

$$\tilde{\sigma}_m = \frac{1}{R} \int_0^R \sigma(x) e^{-imGx} dx. \quad (2.18)$$

Assim, mudando m para l no lado direito da Eq. (2.16), e substituindo a Eq. (2.17), obtemos

$$\begin{aligned} \sum_n \left[B_{y,n}^{(2)} - B_{y,n}^{(1)} \right] e^{inGx} &= \mu_0 \sum_l \left[\sum_m \tilde{\sigma}_m \right] e^{imGx} E_{x,l}^{(1)} e^{ilGx}, \\ \longrightarrow \sum_n \left[B_{y,n}^{(2)} - B_{y,n}^{(1)} \right] e^{inGx} &= \mu_0 \sum_{m,l} \tilde{\sigma}_m E_{x,l}^{(1)} e^{i(m+l)Gx}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Para o que segue, é conveniente definir $m = n - l$. Assim, podemos reescrever as Eqs. (2.14) e (2.19) como

$$E_{x,n}^{(2)} - E_{x,n}^{(1)} = 0, \quad (2.20a)$$

$$\sum_n \left[B_{y,n}^{(2)} - B_{y,n}^{(1)} \right] e^{inGx} = \mu_0 \sum_n \sum_l \tilde{\sigma}_{n-l} E_{x,l}^{(1)} e^{inGx}, \quad (2.20b)$$

o que resulta em

$$B_{y,n}^{(2)} - B_{y,n}^{(1)} = \mu_0 \sum_l \tilde{\sigma}_{n-l} E_{x,l}^{(1)}. \quad (2.21)$$

As Eqs. (2.6), (2.20a) e (2.21) dão

$$\left(\frac{\epsilon_1}{\kappa_{1,n}} + \frac{\epsilon_2}{\kappa_{2,n}} \right) E_{x,n}^{(1)} + \frac{i}{\omega \epsilon_0} \sum_l \tilde{\sigma}_{n-l} E_{x,l}^{(1)} = 0. \quad (2.22)$$

A Eq. (2.22) é um problema de autovalor não-linear cujos autovalores são os valores de ω que resultam em um espectro de bandas onde a condutividade é periódica. Para tanto, devemos considerar um sistema no qual as variações da condutividade sejam contínuas, pois a descontinuidade nas bordas das fitas produziria um problema de autovalor com solução numérica pouco convergente.

2.2 O problema do espalhamento na folha de grafeno com condutividade periódica

Os campos das ondas eletromagnéticas envolvidas no espalhamento que ocorre quando uma onda eletromagnética incide sobre uma folha de grafeno com uma condutividade periódica e apoiada em um substrato, podem ser escritos da seguinte maneira

$$E_x^{(j)}(x, z) = E_x^{inci} e^{iqx} e^{ik_z z} \delta_{j,2} + \sum_n E_{x,n}^{(j)} e^{i(q+nG)x} e^{-\kappa_{j,n}|z|}, \quad (2.23a)$$

$$E_z^{(j)}(x, z) = E_z^{inci} e^{iqx} e^{ik_z z} \delta_{j,2} + \sum_n E_{z,n}^{(j)} e^{i(q+nG)x} e^{-\kappa_{j,n}|z|}, \quad (2.23b)$$

$$B_y^{(j)}(x, z) = B_y^{inci} e^{iqx} e^{ik_z z} \delta_{j,2} + \sum_n B_{y,n}^{(j)} e^{i(q+nG)x} e^{-\kappa_{j,n}|z|}, \quad (2.23c)$$

onde $q = k \sin \theta$, $k_z = k \cos \theta$, conforme está representado na Fig. 22, $G = 2\pi/R$, $k = \sqrt{\epsilon_2} \omega/c$ e $\kappa_{j,n}$ é dado pela Eq. (2.12). O número $j = \{1, 2\}$ refere-se ao substrato abaixo do grafeno e ao meio dielétrico superior, respectivamente.

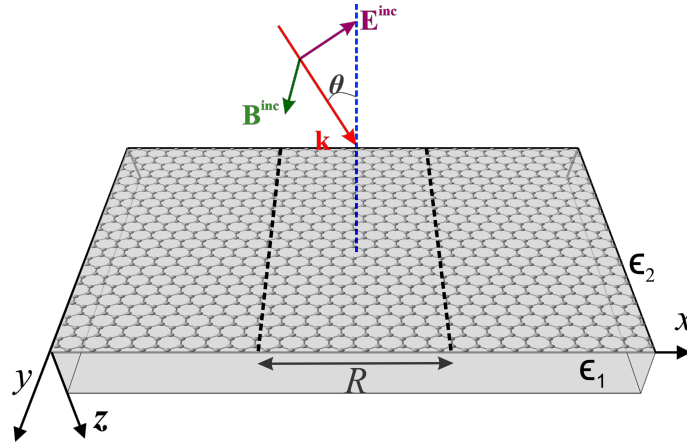
Sempre que $(q+nG)^2 > \omega^2 \epsilon_j / c^2$, temos uma onda confinada na interface. Por outro lado, sempre que $(q+nG)^2 < \omega^2 \epsilon_j / c^2$ implica

$$\kappa_{j,n} = i \sqrt{\frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} - (q+nG)^2}, \quad (2.24)$$

portanto, temos uma onda propagante.

Vamos aplicar as condições de contorno (2.13) e (2.15) aos campos das Eqs. (2.23a), (2.23b) e (2.23c) para obter as relações análogas às (2.20a) e (2.21) agora para o caso do espalhamento.

Figura 22 – Representação esquemática dos campos incidentes e vetor de onda \mathbf{k} na situação de espalhamento. O campo magnético é paralelo à folha de grafeno com condutividade modulada periodicamente e o vetor de onda \mathbf{k} não possui componente em y



Fonte: autoria própria.

Da continuidade do campo elétrico [Eq. (2.13)], para $n \neq 0$, temos:

$$\begin{aligned} E_x^{inci} + \sum_n E_{x,n}^{(2)} e^{inGx} - \sum_n E_{x,n}^{(1)} e^{inGx} &= 0 \\ \rightarrow E_x^{inci} + \sum_n \left(E_{x,n}^{(2)} - E_{x,n}^{(1)} \right) e^{inGx} &= 0. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Devido à simetria do problema devemos ter para a n -ésima ordem

$$E_{x,n}^{(2)} = E_{x,n}^{(1)}. \quad (2.26)$$

Agora, para $n = 0$, temos

$$E_x^{inci} + E_{x,0}^{(2)} - E_{x,0}^{(1)} = 0. \quad (2.27)$$

Da descontinuidade do campo magnético [Eq. (2.15)], para $n \neq 0$, temos:

$$B_y^{inci} + \sum_n \left(B_{y,n}^{(2)} - B_{y,n}^{(1)} \right) e^{inGx} = \mu_0 \sigma(x) \sum_l E_{x,l}^{(1)} e^{ilGx}. \quad (2.28)$$

o que nos leva novamente a

$$B_{y,n}^{(2)} - B_{y,n}^{(1)} = \mu_0 \sum_l \tilde{\sigma}_{n-l} E_{x,l}^{(1)}. \quad (2.29)$$

Agora, para $n = 0$, temos

$$B_y^{inci} + B_{y,0}^{(2)} - B_{y,0}^{(1)} = \mu_0 \sum_l \tilde{\sigma}_{-l} E_{x,l}^{(1)}. \quad (2.30)$$

Portanto, podemos concluir que as condições de contorno impõem que

$$E_{x,n}^{(2)} = E_{x,n}^{(1)} \quad \text{para } n \neq 0, \quad (2.31a)$$

$$E_x^{inci} + E_{x,0}^{(2)} = E_{x,0}^{(1)} \quad \text{para } n = 0, \quad (2.31b)$$

e

$$B_{y,n}^{(1)} - B_{y,n}^{(2)} + \mu_0 \sum \tilde{\sigma}_{n-l} E_{x,l}^{(1)} = 0 \quad \text{para } n \neq 0, \quad (2.32a)$$

$$B_{y,0}^{(1)} - B_y^{inci} - B_{y,0}^{(2)} + \mu_0 \sum \tilde{\sigma}_{-l} E_{x,l}^{(1)} = 0 \quad \text{para } n = 0. \quad (2.32b)$$

Nota-se que as expressões (2.31b) e (2.32b) são as Eqs. (2.20a) e (2.21) com um termo adicional relacionado às ondas incidentes.

Para $n \neq 0$, usando a Eq. (2.6), temos

$$B_{y,n}^{(1)} = -i \frac{\omega \varepsilon_1}{\kappa_{1,n} c^2} E_{x,n}^{(1)}, \quad (2.33a)$$

$$B_{y,n}^{(2)} = i \frac{\omega \varepsilon_2}{\kappa_{2,n} c^2} E_{x,n}^{(1)}. \quad (2.33b)$$

Substituindo as Eqs. (2.33) na Eq. (2.32a), obtemos

$$\begin{aligned} & -i \frac{\omega \varepsilon_1}{\kappa_{1,n} c^2} E_{x,n}^{(1)} - i \frac{\omega \varepsilon_2}{\kappa_{2,n} c^2} E_{x,n}^{(1)} + \mu_0 \sum \tilde{\sigma}_{n-l} E_{x,l}^{(1)} = 0 \\ & \rightarrow -i \frac{\omega}{c^2} \left(\frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,n}} + \frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,n}} \right) E_{x,n}^{(1)} + \mu_0 \sum \tilde{\sigma}_{n-l} E_{x,l}^{(1)} = 0 \\ & \rightarrow \left(\frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,n}} + \frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,n}} \right) E_{x,n}^{(1)} + i \mu_0 \frac{c^2}{\omega} \sum \tilde{\sigma}_{n-l} E_{x,l}^{(1)} = 0 \\ & \rightarrow \boxed{\left(\frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,n}} + \frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,n}} \right) E_{x,n}^{(1)} + \frac{i}{\varepsilon_0 \omega} \sum \tilde{\sigma}_{n-l} E_{x,l}^{(1)} = 0}. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Note a semelhança da Eq. (2.34) com (2.22). Agora, para $n = 0$ e usando a Eq. (2.31b), as Eqs. (2.33) se tornam

$$B_{y,0}^{(1)} = -i \frac{\omega \varepsilon_1}{\kappa_{1,0} c^2} E_{x,0}^{(1)}, \quad (2.35a)$$

$$B_{y,0}^{(2)} = i \frac{\omega \varepsilon_2}{\kappa_{2,0} c^2} \left(E_{x,0}^{(1)} - E_x^{inci} \right). \quad (2.35b)$$

Da mesma forma, substituindo as Eqs. (2.35) na Eq. (2.32b), obtemos

$$\begin{aligned} & -i \frac{\omega \varepsilon_1}{\kappa_{1,0} c^2} E_{x,0}^{(1)} - B_y^{inci} - i \frac{\omega \varepsilon_2}{\kappa_{2,0} c^2} \left(E_{x,0}^{(1)} - E_x^{inci} \right) + \mu_0 \sum \tilde{\sigma}_{-l} E_{x,l}^{(1)} = 0 \\ & \rightarrow -i \frac{\omega}{c^2} \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) E_{x,0}^{(1)} - B_y^{inci} + \frac{i \omega \varepsilon_2}{\kappa_{2,0} c^2} E_x^{inci} + \mu_0 \sum \tilde{\sigma}_{-l} E_{x,l}^{(1)} = 0 \\ & \rightarrow - \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) E_{x,0}^{(1)} - \frac{c^2}{i \omega} B_y^{inci} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} E_x^{inci} + \frac{\mu_0 c^2}{i \omega} \sum \tilde{\sigma}_{-l} E_{x,l}^{(1)} = 0 \\ & \rightarrow \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) E_{x,0}^{(1)} + \frac{i}{\varepsilon_0 \omega} \sum \tilde{\sigma}_{-l} E_{x,l}^{(1)} = i \frac{c^2}{\omega} B_y^{inci} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} E_x^{inci}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Aplicando as equações de Maxwell (2.4) e (2.5) aos campos incidentes, obtemos

$$\begin{aligned}
\nabla \times \mathbf{B}^{inci} &= -ik_z \tilde{B}_y^{inci} \hat{\mathbf{x}} + iq \tilde{B}_y^{inci} \hat{\mathbf{z}} = -i\omega \frac{\epsilon_2}{c^2} (\tilde{E}_x^{inci} \hat{\mathbf{x}} + \tilde{E}_z^{inci} \hat{\mathbf{z}}) \\
\rightarrow -ik_z \tilde{B}_y^{inci} &= -i\omega \frac{\epsilon_2}{c^2} \tilde{E}_x^{inci} \\
\rightarrow k_z B_y^{inci} &= \omega \frac{\epsilon_2}{c^2} E_x^{inci} \\
\rightarrow B_y^{inci} &= \frac{\omega \epsilon_2}{c^2 k_z} E_x^{inci}.
\end{aligned} \tag{2.37}$$

Sabemos que $\kappa_{2,0} = \sqrt{q^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_2}{c^2}}$, tem-se que

$$\begin{aligned}
q^2 + k_z^2 &= k^2 (\sin^2 \theta + \cos^2 \theta) = k^2 \\
\rightarrow q^2 + k_z^2 &= \frac{\omega^2 \epsilon_2}{c^2} \\
\rightarrow k_z &= \sqrt{\frac{\omega^2 \epsilon_2}{c^2} - q^2} = i \sqrt{q^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_2}{c^2}} \\
\rightarrow k_z = i \kappa_{2,0} &\rightarrow \kappa_{2,0} = -ik_z.
\end{aligned} \tag{2.38}$$

Substituindo as Eqs. (2.37) e (2.38) na Eq. (2.36), obtemos

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\epsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\epsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) E_{x,0}^{(1)} + \frac{i}{\epsilon_0 \omega} \sum \tilde{\sigma}_{-l} E_{x,l}^{(1)} &= i \frac{c^2}{\omega} \frac{\omega \epsilon_2}{c^2 k_z} E_x^{inci} - \frac{\epsilon_2}{ik_z} E_x^{inci} \\
\rightarrow \left(\frac{\epsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\epsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) E_{x,0}^{(1)} + \frac{i}{\epsilon_0 \omega} \sum \tilde{\sigma}_{-l} E_{x,l}^{(1)} &= i \frac{2\epsilon_2}{k_z} E_x^{inci}.
\end{aligned} \tag{2.39}$$

As Eqs. (2.34) e (2.39) são equações matriciais cujas soluções para um dado ω são as amplitudes do campo elétrico. Tais soluções podem ser obtidas numericamente através da diagonalização do problema de autovalor-autovetor generalizado. Tendo calculado tais amplitudes podemos, então, analisar graficamente o comportamento da refletância, transmitância e absorvância através da estrutura em termos da frequência angular ω . Para tal, vamos derivar tais expressões na próxima Seção 2.2.1.

2.2.1 Expressões para o cálculo da Transmitância, Refletância e Absorvância para o modo *TM*

Vamos deduzir, a seguir, as expressões para a transmitância, refletância e absorvância e mostrar que esses valores podem ser calculados em termos das amplitudes do campo elétrico. Para isso, considere o vetor de *Poynting* para as ondas eletromagnéticas envolvidas, sendo

$$\vec{S} = \frac{1}{\mu_0} \vec{E} \times \vec{B}. \tag{2.40}$$

Como as dependências temporais dos campos elétricos e magnéticos são termos harmônicos $e^{-i\omega t}$, o valor médio sobre um período temporal de \vec{S} é

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{2\mu_0} \Re e \{ \vec{E} \times \vec{B}^* \}. \quad (2.41)$$

Estamos considerando o caso da polarização TM, logo a Eq. (2.41) fica

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{2\mu_0} \Re e [E_x B_y^* \hat{z} - E_z B_y^* \hat{x}]. \quad (2.42)$$

Como o sistema está configurado de modo que o fluxo de energia atravessa a amostra ao longo do eixo z , então a Eq. (2.42) fica

$$\langle S_z \rangle \equiv S_z = \frac{1}{2\mu_0} \Re e [E_x B_y^*], \quad (2.43)$$

correspondendo ao fluxo médio de energia eletromagnética por unidade de área através do eixo z . Devemos levar em conta os campos incidentes, refletidos e transmitidos de modo a calcular os fluxos de energia incidente, refletido e transmitido através do sistema. As componentes dos campos são dadas nas Eqs. (2.23a), (2.23b) e (2.23c). Para os campos os campos incidentes, temos

$$S_z^{inc} = \frac{1}{2\mu_0} \Re e [E_x^{inc} B_y^{inc*}]. \quad (2.44)$$

Assim, utilizando B_y^{inc} obtido na Eq. (2.37) podemos reescrever a Eq. (2.44) como

$$\begin{aligned} S_z^{inc} &= \frac{1}{2\mu_0} \Re e [E_x^{inc} \frac{\omega \epsilon_2}{k_z c^2} E_x^{inc*}] \\ \rightarrow S_z^{inc} &= \frac{1}{2\mu_0} \frac{\omega \epsilon_2}{k_z c^2} |E_x^{inc}|^2 \\ \rightarrow S_z^{inc} &= \frac{\omega \epsilon_2 \epsilon_0}{2k_z} |E_x^{inc}|^2, \end{aligned} \quad (2.45)$$

onde utilizamos $c^2 = 1/\mu_0 \epsilon_0$. Para encontrar as expressões de S_z para os campos refletidos e transmitidos, devemos substituir a Eq. (2.2) na Eq. (2.43), resultando em

$$S_z = \frac{1}{2\mu_0} \Re e \left[\sum_n E_{x,n}^{(j)} e^{i(q+nG)x} e^{-\kappa_{j,n}|z|} B_{y,n}^{(j)*} e^{-i(q+nG)x} e^{-\kappa_{j,n}^*|z|} \right]. \quad (2.46)$$

Para a n -ésima ordem de difração, temos que

$$S_{z,n} = \frac{1}{2\mu_0} \Re e \left[E_{x,n}^{(j)} e^{-\kappa_{j,n}|z|} B_{y,n}^{(j)*} e^{-\kappa_{j,n}^*|z|} \right]. \quad (2.47)$$

Conforme mencionado anteriormente, para termos uma onda propagante $\kappa_{j,n}$ deve ser imaginário puro. Então, vamos definir

$$\kappa_{j,n} = i\sqrt{\varepsilon_j \omega^2 / c^2 - (q + nG)^2} \equiv i|\kappa_{j,n}|, \quad (2.48)$$

de modo que a expressão (2.47) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} S_{z,n} &= \frac{1}{2\mu_0} \Re e \left[E_{x,n}^{(j)} e^{-i|\kappa_{j,n}||z|} B_{y,n}^{(j)*} e^{i|\kappa_{j,n}||z|} \right] \\ \rightarrow S_{z,n} &= \frac{1}{2\mu_0} \Re e \left[E_{x,n}^{(j)} B_{y,n}^{(j)*} \right]. \end{aligned} \quad (2.49)$$

A Eq. (2.6) dá os valores de $B_{y,n}^{(j)}$ em termos de $E_{x,n}^{(j)}$. Levando em conta a condição para $\kappa_{j,n}$, podemos reescrevê-la como

$$\begin{aligned} B_{y,n}^{(j)} &= -i \operatorname{sgn}(z) \frac{\varepsilon_j \omega}{i c^2 |\kappa_{j,n}|} E_{x,n}^{(j)} \\ \rightarrow B_{y,n}^{(j)} &= -\operatorname{sgn}(z) \frac{\varepsilon_j \omega}{c^2 |\kappa_{j,n}|} E_{x,n}^{(j)}. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Substituindo a Eq. (2.50) na Eq. (2.49), temos

$$\begin{aligned} S_{z,n} &= \frac{1}{2\mu_0} \Re e \left[-\operatorname{sgn}(z) E_{x,n}^{(j)} \frac{\varepsilon_j \omega}{c^2 |\kappa_{j,n}|} E_{x,n}^{(j)*} \right] \\ \rightarrow S_{z,n} &= -\operatorname{sgn}(z) \frac{\varepsilon_j \varepsilon_0 \omega}{2 |\kappa_{j,n}|} |E_{x,n}^{(j)}|^2. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Dessa forma, as expressões para os fluxos de energia refletido e transmitido por unidade de área são dados, respectivamente, por

$$S_{z,n}^{Ref} = \frac{\varepsilon_2 \varepsilon_0 \omega}{2 |\kappa_{2,n}|} |E_{x,n}^{(2)}|^2, \quad (2.52a)$$

$$S_{z,n}^{Trans} = -\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_0 \omega}{2 |\kappa_{1,n}|} |E_{x,n}^{(1)}|^2. \quad (2.52b)$$

Note que quando $\kappa_{j,n}$ é real a expressão (2.50) é imaginária pura, o que implica que não há energia ao longo do eixo z , pois $S_{z,n} = S_{z,n}^{Ref} = S_{z,n}^{Trans} = 0$. Para a n -ésima ordem de difração, a transmitância e a reflectância são definidas, respectivamente, como

$$\mathcal{T}_n = \left| \frac{S_{z,n}^{Trans}}{S_z^{inc}} \right|, \quad (2.53a)$$

$$\mathcal{R}_n = \left| \frac{S_{z,n}^{Ref}}{S_z^{inc}} \right|. \quad (2.53b)$$

Assim, os valores totais para a transmitância e reflectância são

$$T = \sum_n \mathcal{T}_n \quad \text{com} \quad \mathcal{T}_n = \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \frac{k_z}{|\kappa_{1,n}|} \left| \frac{E_{x,n}^{(1)}}{E_x^{inci}} \right|^2, \quad (2.54a)$$

$$R = \sum_n \mathcal{R}_n \quad \text{com} \quad \mathcal{R}_n = \frac{k_z}{|\kappa_{2,n}|} \left| \frac{E_{x,n}^{(2)}}{E_x^{inci}} \right|^2. \quad (2.54b)$$

Somente as ordens de difração correspondente aos modos de propagação (casamento de fase) devem ser levados em conta na Eq. (2.54). Como a soma da transmitância (T), reflectância (R) e absorbância (A) deve ser 1 por se tratarem de probabilidades, podemos escrever a absorbância A como sendo

$$A = 1 - T - R. \quad (2.55)$$

Então, a absorbância para a n -ésima ordem de difração é

$$\mathcal{A}_n = 1 - \frac{k_z}{|E_x^{inci}|^2} \left[\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} |\kappa_{1,n}|^{-1} |E_{x,n}^{(1)}|^2 + |\kappa_{2,n}|^{-1} |E_{x,n}^{(2)}|^2 \right]. \quad (2.56)$$

2.3 Grade periódica de nanofitas de grafeno

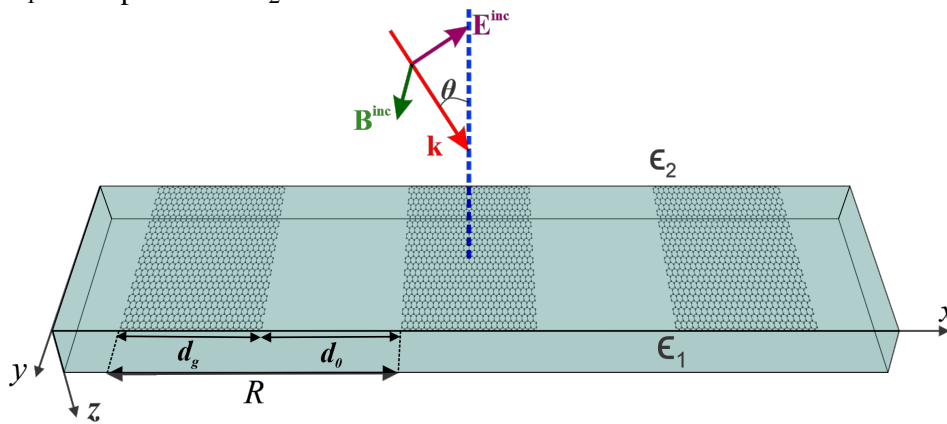
Nesta seção, aplicaremos o formalismo do Seção 2.2 ao caso específico cuja periodicidade na condutividade é devida ao arranjo periódico de nanofitas de grafeno e compararemos com os resultados obtidos no Capítulo 7 do livro “*An introduction to Graphene Plasmonics*” de autoria dos pesquisadores N. M. R. Peres e P. A. D. Gonçalves (GONÇALVES; PERES, 2016). Analisaremos os resultados de transmitância, reflectância e absorbância para diferentes parâmetros do sistema com condutividade periódica modulada espacientemente. Para tal, resolveremos numericamente o problema de espalhamento dado pelo sistema linear formado pelas Eqs. (2.34) e (2.39), visto como uma equação de autovalores-autovetores generalizada.

O formalismo desenvolvido na Seção 2.2 é, de uma certa forma, genérico para qualquer tipo de modulação periódica da condutividade, dada ao escrevermos $\sigma(x)$ na base de Fourier [ver Eqs. (2.17) e (2.18)]. A única restrição lá imposta foi de que σ fosse dependente da posição e periódica, $\sigma(x) = \sigma(x + R)$, mas não especificamos como seria essa dependência. Assumiremos aqui que $\sigma(x) = \sigma_g s(x)$ de modo que $s(x)$ seja uma função que depende da configuração do sistema e σ_g é a condutividade de Drude do grafeno, dada na Eq. (1.41). Logo, a Eq. (2.18) fica

$$\tilde{\sigma}_l = \frac{\sigma_g}{R} \int_0^R s(x) e^{-ilGx} dx. \quad (2.57)$$

O sistema em questão a ser estudado está representado na Fig. 23, em que uma rede periódica composta por nanofitas de grafeno está depositada em cima de um substrato, assim a nanofita está interposta entre dois meios de constantes dielétricas ϵ_1 e ϵ_2 , respectivamente. Note que a célula unitária do sistema periódico, com parâmetro de rede R , está dividida em uma região onde não há grafeno e outra ocupada pela nanofita de grafeno. A largura das nanofitas é d_g e a largura da região sem grafeno é d_0 .

Figura 23 – Ilustração de uma onda plana com polarização TM incidindo em uma matriz periódica de nanofitas de grafeno (*grating*) com parâmetro de rede $R = d_g + d_0$, onde d_g e d_0 correspondem as larguras da nanofita e da região sem grafeno, respectivamente. O substrato tem constante dielétrica ϵ_1 e o superestrato ϵ_2



Fonte: autoria própria.

Com a geometria apresentada na Fig. 23, temos que $s(x)$ pode ser escrita em termos da função degrau, que descreve uma descontinuidade abrupta na condutividade, tal como

$$s(x) = \Theta(x - d_0), \quad (2.58)$$

onde

$$\Theta(x - d_0) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < d_0 \\ \frac{1}{2}, & \text{se } x = d_0 \\ 1, & \text{se } x > d_0 \end{cases} . \quad (2.59)$$

Portanto, tomando $l = 0$ e substituindo a Eq. (2.58) na Eq. (2.57), tem-se que

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_0 &= \frac{\sigma_g}{R} \int_0^R \Theta(x - d_0) dx \\ &= \frac{\sigma_g}{R} \left[\int_0^{d_0} \Theta(x - d_0) dx + \int_{d_0}^R \Theta(x - d_0) dx \right] \\ &= \frac{\sigma_g}{R} (R - d_0) \\ &= \frac{\sigma_g}{R} d_g. \end{aligned} \quad (2.60)$$

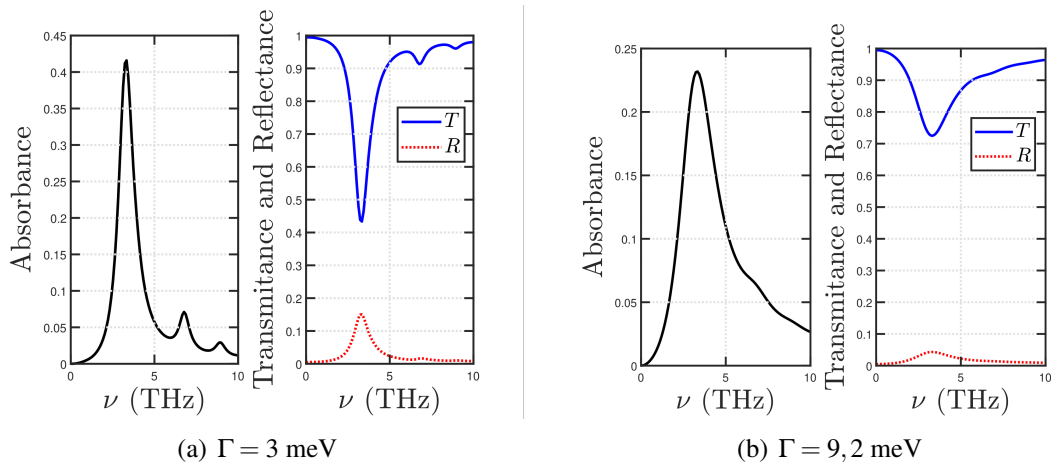
Agora, tomando $l \neq 0$ e substituindo a Eq. (2.58) na Eq. (2.57), tem-se que

$$\begin{aligned}\tilde{\sigma}_l &= \frac{\sigma_g}{R} \int_0^R \Theta(x - d_0) e^{-ilGx} dx \\ &= \frac{\sigma_g}{R} \int_{d_0}^R \Theta(x - d_0) e^{-ilGx} dx \\ &= \frac{\sigma_g}{l\pi} \sin\left(\frac{l\pi d_g}{R}\right) e^{\frac{i\pi d_g}{R}},\end{aligned}\tag{2.61}$$

lembrando que $G = 2\pi/R$.

Com os coeficientes da condutividade em mãos [Eqs. (2.60) e (2.61)], podemos substituí-los na equação linear formada pelas Eqs. (2.34) e (2.39) para calcular numericamente a transmitância, refletância e absorbância. Nas Figs. 24 e 25 apresentamos essas quantidades para diferentes valores de Γ para o caso de uma onda polarizada do tipo **p** incidindo em uma estrutura periódica de nanofitas de grafeno (Fig. 24) e para o caso do grafeno contínuo (Fig. 25).

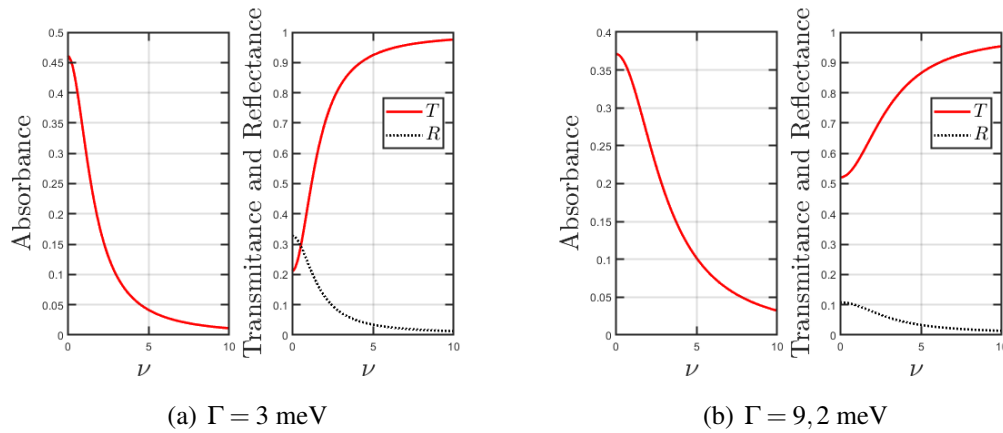
Figura 24 – Absorbância (curva sólida preta), transmitância (curva azul sólida) e refletância (curva pontilhada vermelha) de uma onda p-polarizada através de uma estrutura periódica de nanofitas de grafeno para $\Gamma = 3$ meV (painéis da esquerda) e $\Gamma = 9,2$ meV (painéis da direita)



Fonte: autoria própria.

Comparando os resultados mostrados nas Figs. 24 e 25 para o caso da rede periódica composta por nanofitas de grafeno e o caso do grafeno uniforme e contínuo, pode-se notar picos de ressonâncias bem definidos associados aos GSP's no caso da estrutura semelhante a uma *grating* que de acordo com a Ref. (PERES *et al.*, 2012) estão associados a diferentes vetores de Bragg (ordens de difração), enquanto que tais quantidades tem um comportamento suave para o caso contínuo. Nos valores das frequências de ressonância, percebe-se que o valor da absorbância é bem superior para o caso das nanofitas periódicas do que no caso contínuo, cujo aumento na absorbância corresponde ao acoplamento da radiação eletromagnética aos modos do

Figura 25 – Absorbância (curva sólida vermelha), transmitância (curva sólida vermelha) e refletância (curva pontilhada preta) de uma onda p-polarizada incidindo em uma folha de grafeno uniforme e contínua para $\Gamma = 3$ meV (painéis da esquerda) e $\Gamma = 9,2$ meV (painéis da direita)



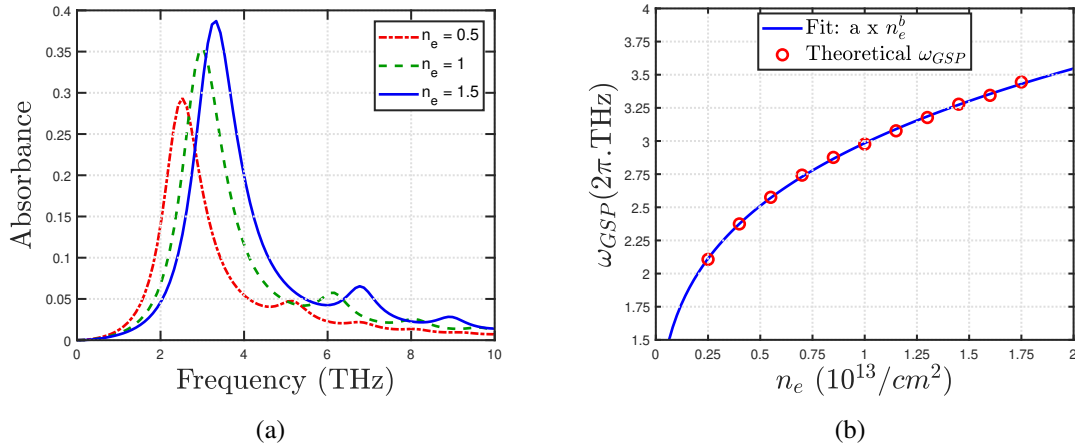
Fonte: autoria própria.

tipo de Bloch dos GSP, isto é, uma maior absorção induzida por GSP na estrutura de *grating*. Comparando as escalas dos resultados dos painéis da esquerda (a) com os da direita (b), note-se que os valores de absorbância são cada vez maiores e mais bem definidos quanto menores o valor de Γ .

Agora, vamos investigar como os espectros da absorbância dependem dos demais parâmetros envolvidos no problema. Começaremos pela quantidade de portadores por unidades de área (densidade eletrônica $\equiv n_e$). A Fig. 26(a) mostra que quanto maior a densidade eletrônica, mais intensas são as ressonâncias apresentando absorbâncias com maiores magnitudes, e seus picos ocorrem para frequências cada vez maiores. Compare o resultado para $n_e = 1.5 \times 10^{13}/\text{cm}^2$ (curva sólida azul) com o resultado para $n_e = 0.5 \times 10^{13}/\text{cm}^2$ (curva pontilhada vermelha). Sabendo da relação de dispersão do grafeno com a energia de Fermi dada por $E_F = \hbar v_F k_F$ e também da dependência do vetor de onda de Fermi k_F com a densidade dada por $k_F \propto \sqrt{n_e}$, vemos que quanto maior n_e maior será k_F e consequentemente maior será o valor de E_F , explicando os picos de ressonância se deslocarem para a direita para maiores frequências quando tomamos maiores densidades eletrônicas. Esses valores são típicos da densidade eletrônica do grafeno para energias de Fermi da ordem de 10^{-1} eV os quais são habituados a serem utilizados na literatura, como reportado nas Refs. (BISTRITZER; MACDONALD, 2009; CASTRO NETO *et al.*, 2009).

A Fig. 26(b) apresenta os valores das frequências de ressonância de plásmons no grafeno, obtidos a partir da Fig. 26(a) para a posição do primeiro pico de ressonância, em função da densidade eletrônica. Ao realizar o ajuste de função utilizando um formato do tipo $\text{constante} \times n_e^b$, obtemos $b = 0.2491 \approx 0.25$. Vemos, portanto, que $\omega_{GSP} \sim n_e^{\frac{1}{4}}$ sendo igual ao

Figura 26 – (a) Curvas da absorbância para diferentes valores da densidade eletrônica n_e em unidades de $10^{13}/\text{cm}^2$. (b) Comportamento da frequência de ressonância de plásmem no grafeno ω_{GSP} com a variação da densidade eletrônica n_e . As constantes utilizadas são $\Gamma = 3.7 \text{ meV}$, $d_g = 4 \mu\text{m}$, $R = 8 \mu\text{m}$, $\varepsilon_1 = 3$, $\varepsilon_2 = 4$ e $\theta = 0$



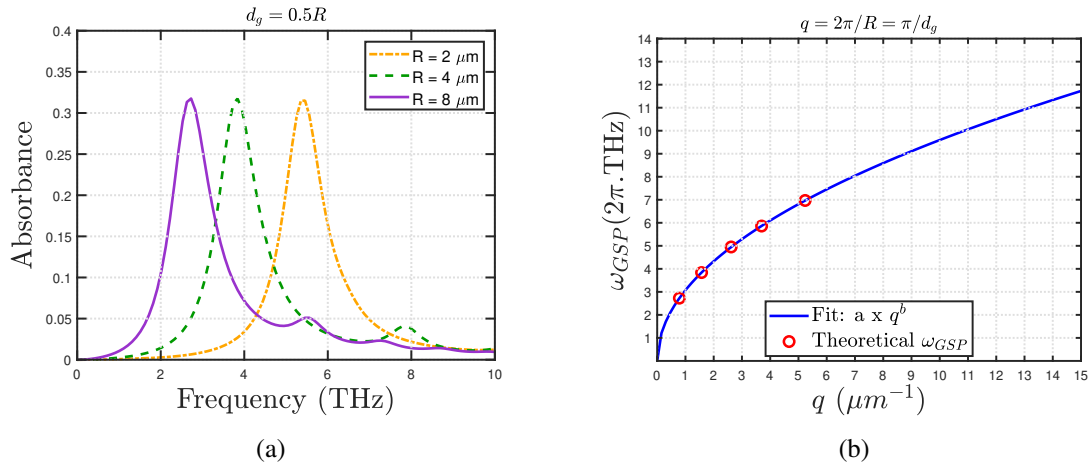
Fonte: autoria própria.

que já havíamos previsto na Seção 1.5 para uma uma folha de grafeno imersa em um meio simétrico.

Na Fig. 27 apresentamos o espectro de absorção para diferentes valores do período de rede R . Note na Fig. 27(a) que há um aumento do valor da frequência dos picos de ressonância à medida que o valor de R diminui. Podemos entender esse comportamento associando a redução ou aumento das larguras das nanofitas de grafeno com a física de poços quânticos, lembrando que quando reduzimos (aumentamos) a largura do poço de potencial os seus níveis de energia se tornam mais espaçados (próximos) possuindo mais (menos) níveis dentro de um mesmo intervalo de energia. Assim, ao reduzirmos a largura das nanofitas de grafeno, as energias e consequentemente as frequências de ressonâncias devem de fato ser maiores, como observado na Fig. 27(a). Na Fig. 27(b), os círculos vermelhos apresentam o comportamento das frequências de ressonância de plásmem em grafeno em função de q , onde tais valores foram obtidos das posições dos primeiros picos de ressonâncias da Fig. 27(a). Ao fazer o ajuste de função para a forma $constante \times q^b$ obtemos $b = 0.4947 \approx 0.5$, mostrando que as frequências seguem a relação de dispersão $\omega_{GSP} \propto \sqrt{q}$ em conformidade com os resultados obtidos por Ju *et al* (2011) (JU *et al.*, 2011).

Na Fig. 28 apresentamos as curvas de absorção para (a) diferentes larguras da nanofita d_g e (b) o seu comportamento para diferentes ângulos de incidência θ . Observe que as frequências de ressonância diminuem a medida que d_g cresce. Quando $d_g = 1R$ temos a curva para o caso da folha de grafeno uniforme, pois nesse caso $d_0 = 0$. Os valores das magnitudes

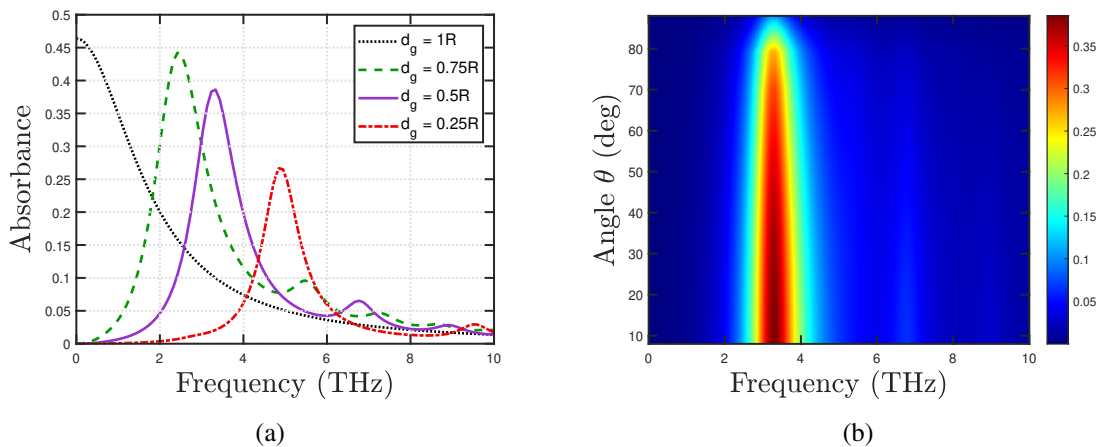
Figura 27 – Em (a) temos as curvas de absorção no grafeno para diferentes valores de R . Mantemos a largura da nanofita em $d_g = R/2$. Em (b) vemos os valores das frequências de ressonância para a primeira ordem de difração ($n = 1$) em termos de $k_{x,1} \equiv q$ e sua respectiva função de ajuste $a \times q^b$. As constantes utilizadas são $\Gamma = 3.7$ meV, $E_F = 0.3$ eV, $\varepsilon_1 = 3$, $\varepsilon_2 = 4$ e $\theta = 0$



Fonte: autoria própria.

da absorbância são maiores para d_g mais largos devido ao aumento da área preenchida por grafeno na célula unitária de período R . Vemos na Fig. 28(b) que a absorbância tem uma fraca dependência com o ângulo de incidência θ , apresentando um estreitamento do primeiro pico e uma atenuação dos picos subsequentes para ângulos maiores. Em adição, note que as posições dos picos de ressonância não são alterados quando θ varia.

Figura 28 – (a) Curvas de absorção como função da frequência tomando $\theta = 0$ e diferentes valores de larguras da nanofita d_g . (b) *Contour plot* do ângulo θ da frequência e da absorção, tomando o valor da largura da nanofita fixa de $d_g = 0.5R$. As constantes utilizadas são $\Gamma = 3.7$ meV, $E_F = 0.3$ eV, $R = 8 \mu\text{m}$, $\varepsilon_1 = 3$ e $\varepsilon_2 = 4$



Fonte: autoria própria.

Vale destacar que todos os resultados obtidos até o presente momento estão em

total acordo com aqueles apresentados no Capítulo 7 da Ref. (GONÇALVES; PERES, 2016), mostrando que o código computacional desenvolvido para tratar numericamente o problema da modulação periódica da condutividade em um sistema do tipo *grating* de grafeno depositado entre dois dielétricos está correto. Adaptaremos o mesmo código para tratar o caso de nanofitas de fosforeno no próximo capítulo.

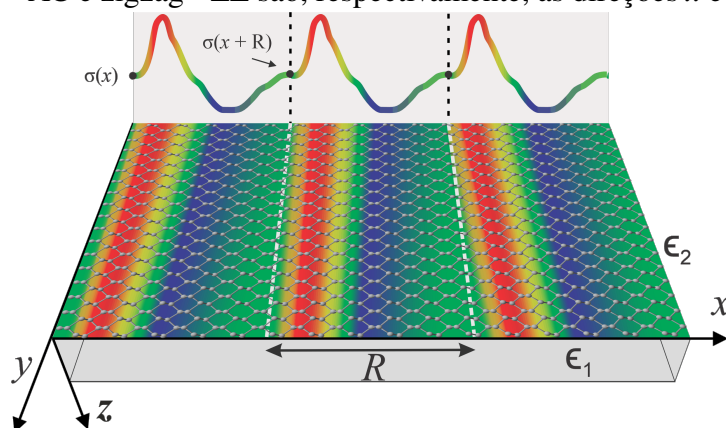
3 PLÁSMONS EM REDES PERIÓDICAS DE NANOFITAS DE FOSFORENO

Neste capítulo, nosso objetivo é aplicar o formalismo apresentado no capítulo 2 a uma rede periódica de nanofitas de fosforeno (ou fósforo negro), um material anisotrópico, semicondutor e alótropo do fósforo. Realizaremos uma análise concisa da estrutura de uma folha de fosforeno com condutividade modulada, que está posicionada sobre um substrato dielétrico. Investigaremos o acoplamento entre radiação eletromagnética e plásmons em um arranjo periódico de fitas de fosforeno, resolvendo o problema de espalhamento. Posteriormente, utilizaremos soluções numéricas para calcular a transmitância, refletância e absorbância de ondas planas incidentes no sistema.

3.1 Configurando o sistema

O sistema aqui tratado é composto por um arranjo periódico de nanofitas de fosforeno, depositado no plano $z = 0$ entre dois meios dielétricos com permissividades relativas ϵ_1 (para $z > 0$) e ϵ_2 (para $z < 0$), modelado por uma condutividade periódica espacialmente dependente que satisfaz a condição de Bloch $\sigma(x) = \sigma(x + R)$. Temos, portanto, um sistema semelhante ao descrito na figura 21, com a diferença de que agora temos uma folha de fosforeno no lugar da folha de grafeno como apresenta a figura 29.

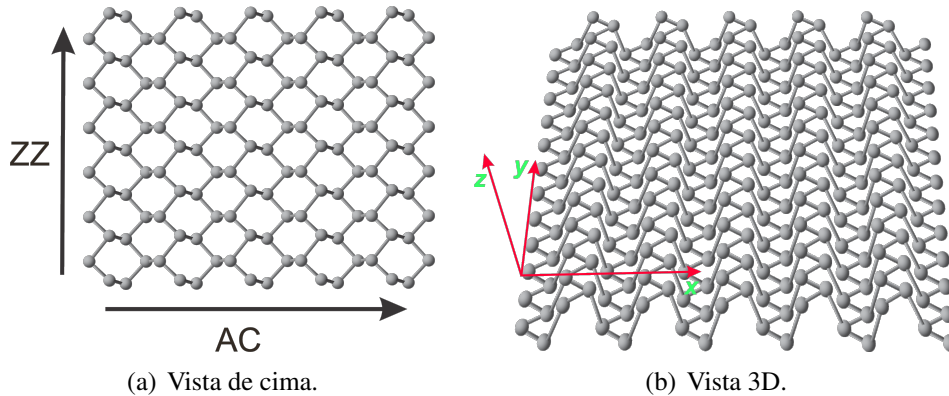
Figura 29 – Representação da vista superior de uma folha de fosforeno com uma condutividade periódica arbitrariamente espacialmente dependente. As cores representam a intensidade de σ . Abaixo, direções armchair - AC e zigzag - ZZ são, respectivamente, as direções x e y



Fonte: autoria própria.

A seguir, encontraremos a relação de dispersão do sistema e, em seguida, derivaremos a estrutura teórica para lidar com o problema de espalhamento.

Figura 30 – Indicação das direções AC e ZZ no plano de isotropia e vista 3D da nanofita de fosforo negro



Fonte: autoria própria.

3.1.1 Relação de dispersão

Conforme visto anteriormente, a periodicidade do sistema implica que ele obedece o teorema de Bloch, então as ondas eletromagnéticas acopladas podem ser escritas na base de Fourier como

$$\mathbf{E}_j(\mathbf{r}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (E_{x,n}^j \hat{\mathbf{x}} + E_{y,n}^j \hat{\mathbf{y}} + E_{z,n}^j \hat{\mathbf{z}}) e^{i(k_{x,n}x + k_{y,n}y) - \kappa_{j,n}|z|} \quad (3.1a)$$

$$\mathbf{B}_j(\mathbf{r}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (B_{x,n}^j \hat{\mathbf{x}} + B_{y,n}^j \hat{\mathbf{y}} + B_{z,n}^j \hat{\mathbf{z}}) e^{i(k_{x,n}x + k_{y,n}y) - \kappa_{j,n}|z|} \quad (3.1b)$$

Onde $j = 1$ denota a região do substrato para $z > 0$ e $j = 2$ a parte de cima do meio dielétrico, para $z < 0$, sendo cada região espacial caracterizada pelas permissividades relativas ε_1 e ε_2 , respectivamente. A dependência temporal das equações (3.1a) e (3.1b) é a forma harmônica típica $e^{-i\omega t}$. Os vetores de onda dos modos de Bloch(ou ordens de difração) continuam sendo $k_{x,n} = q + nG$, com n inteiro. Note que neste caso estamos tomando a forma geral dos campos com todas as componentes, isto é, não estamos considerando os casos de \vec{E}_j ou \vec{B}_j paralelos à interface como fizemos anteriormente.

Dessa forma, aplicando os campos das equações (3.1) nas equações de Maxwell

$$\nabla \times \mathbf{E}_j = -\frac{\partial \mathbf{B}_j}{\partial t}, \quad (3.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}_j = \frac{\varepsilon_j}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}_j}{\partial t}. \quad (3.3)$$

Para a n-ésima ordem podemos desenvolver:

$$\nabla \times \mathbf{B}_j = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix} \quad (3.4a)$$

$$= \left(\frac{\partial B_z}{\partial y} - \frac{\partial B_y}{\partial z} \right) \hat{x} + \left(\frac{\partial B_x}{\partial z} - \frac{\partial B_z}{\partial x} \right) \hat{y} + \left(\frac{\partial B_y}{\partial x} - \frac{\partial B_x}{\partial y} \right) \hat{z} \quad (3.4b)$$

$$= [ik_y B_z + \text{sgn}(z) \kappa_{j,n} B_y] \hat{x} - [\text{sgn}(z) \kappa_{j,n} B_x + ik_{x,n} B_z] \hat{y} + i[k_{x,n} B_y - k_y B_x] \hat{z}, \quad (3.4c)$$

$$\frac{\epsilon_j}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}_j}{\partial t} = \frac{\epsilon_j}{c^2} \left[\frac{\partial E_x}{\partial t} \hat{x} + \frac{\partial E_y}{\partial t} \hat{y} + \frac{\partial E_z}{\partial t} \hat{z} \right] = -\frac{i\omega \epsilon_j}{c^2} \mathbf{E}_j. \quad (3.5)$$

Igualando as Equações (3.4c) e (3.5), obtemos

$$ik_y B_{z,n}^j + \kappa_{j,n} \text{sgn}(z) B_{y,n}^j = -\frac{i\omega \epsilon_j}{c^2} E_{x,n}^j, \quad (3.6a)$$

$$\kappa_{j,n} \text{sgn}(z) B_{x,n}^j + ik_{x,n} B_{z,n}^j = \frac{i\omega \epsilon_j}{c^2} E_{y,n}^j, \quad (3.6b)$$

$$k_{x,n} B_{y,n}^j - k_y B_{x,n}^j = -\frac{\omega \epsilon_j}{c^2} E_{z,n}^j. \quad (3.6c)$$

Podemos seguir um desenvolvimento similar para a Equação (3.2), da seguinte maneira

$$\nabla \times \mathbf{E}_j = \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) \hat{x} + \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \hat{y} + \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \hat{z} \quad (3.7a)$$

$$= [ik_y E_z + \text{sgn}(z) \kappa_{j,n} E_y] \hat{x} - [\text{sgn}(z) \kappa_{j,n} E_x + ik_{x,n} E_z] \hat{y} + i[k_{x,n} E_y - k_y E_x] \hat{z}, \quad (3.7b)$$

$$-\frac{\partial \mathbf{B}_j}{\partial t} = \left[\frac{\partial B_x}{\partial t} \hat{x} + \frac{\partial B_y}{\partial t} \hat{y} + \frac{\partial B_z}{\partial t} \hat{z} \right] = i\omega \mathbf{B}_j. \quad (3.8)$$

Igualando as equações (3.7b) e (3.8), obtemos

$$ik_y E_{z,n}^j + \kappa_{j,n} \text{sgn}(z) E_{y,n}^j = i\omega B_{x,n}^j, \quad (3.9a)$$

$$\kappa_{j,n} \text{sgn}(z) E_{x,n}^j + ik_{x,n} E_{z,n}^j = -i\omega B_{y,n}^j, \quad (3.9b)$$

$$k_{x,n} E_{y,n}^j - k_y E_{x,n}^j = \omega B_{z,n}^j. \quad (3.9c)$$

Vamos encontrar um conjunto de equações relacionando as componentes $E_{x,n}^j$, $E_{y,n}^j$ e $E_{z,n}^j$ fazendo o seguinte procedimento: Substitua $B_{x,n}^j$ da Eq.(3.9a) e $B_{z,n}^j$ da Eq.(3.9c) na Eq.(3.6b)

$$\kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) \left[\frac{k_y}{\omega} E_{z,n}^j - \frac{i}{\omega} \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_{y,n}^j \right] + ik_{x,n} \left[\frac{k_{x,n}}{\omega} E_{y,n}^j - \frac{k_y}{\omega} E_{x,n}^j \right] = \frac{i\omega \epsilon_j}{c^2} E_{y,n}^j \quad (3.10)$$

$$\longrightarrow -ik_{x,n} \frac{k_y}{\omega} E_{x,n}^j + \left[-\frac{i}{\omega} \kappa_{j,n}^2 \operatorname{sgn}(z)^2 + \frac{i}{\omega} k_{x,n}^2 - \frac{i\omega \epsilon_j}{c^2} \right] E_{y,n}^j + \kappa_{j,n} \frac{k_y}{\omega} \operatorname{sgn}(z) E_{z,n}^j = 0 \quad (3.11)$$

$$\longrightarrow -ik_{x,n} k_y E_{x,n}^j - i \left(\kappa_{j,n}^2 - k_{x,n}^2 + \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) E_{y,n}^j + \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) k_y E_{z,n}^j = 0. \quad (3.12)$$

Substitua $B_{x,n}^j$ da Eq.(3.9a) e $B_{y,n}^j$ da Eq.(3.9b) na Eq. (3.6c)

$$k_{x,n} \left[\frac{i}{\omega} \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_{x,n}^j - \frac{k_{x,n}}{\omega} E_{z,n}^j \right] - k_y \left[\frac{k_y}{\omega} E_{z,n}^j - \frac{i}{\omega} \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_{y,n}^j \right] = -\frac{\omega \epsilon_j}{c^2} E_{z,n}^j \quad (3.13)$$

$$\longrightarrow \frac{i}{\omega} k_{x,n} \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_{x,n}^j + \frac{i}{\omega} k_y \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_{y,n}^j + \left[-\frac{k_{x,n}^2}{\omega} - \frac{k_y^2}{\omega} + \frac{\omega \epsilon_j}{c^2} \right] E_{z,n}^j = 0 \quad (3.14)$$

$$\longrightarrow k_{x,n} \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_{x,n}^j + k_y \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_{y,n}^j + i \left(k_{x,n}^2 + k_y^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) E_{z,n}^j = 0. \quad (3.15)$$

Substitua $B_{y,n}^j$ da Eq.(3.9a) e $B_{z,n}^j$ da Eq.(3.9c) na Eq. (3.6a)

$$ik_y \left[\frac{k_{x,n}}{\omega} E_{y,n}^j - \frac{k_y}{\omega} E_{x,n}^j \right] + \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) \left[\frac{i}{\omega} \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_{x,n}^j - \frac{k_{x,n}}{\omega} E_{z,n}^j \right] = -\frac{\omega \epsilon_j}{c^2} E_{x,n}^j \quad (3.16)$$

$$\longrightarrow \left[-\frac{i}{\omega} k_y^2 + \frac{i}{\omega} \kappa_{j,n}^2 \operatorname{sgn}(z)^2 + \frac{i\omega \epsilon_j}{c^2} \right] E_{x,n}^j + \frac{i}{\omega} k_{x,n} k_y E_{y,n}^j - \frac{k_{x,n}}{\omega} \operatorname{sgn}(z) E_{z,n}^j = 0 \quad (3.17)$$

$$\longrightarrow \left[\kappa_{j,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right] E_{x,n}^j + k_{x,n} k_y E_{y,n}^j + ik_{x,n} \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_{z,n}^j = 0. \quad (3.18)$$

Dessa forma, o sistema de equações obtido é

$$-ik_{x,n} k_y E_{x,n}^j - i \left(\kappa_{j,n}^2 - k_{x,n}^2 + \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) E_{y,n}^j + \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) k_y E_{z,n}^j = 0, \quad (3.19a)$$

$$k_{x,n} \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_{x,n}^j + k_y \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_{y,n}^j + i \left(k_{x,n}^2 + k_y^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) E_{z,n}^j = 0, \quad (3.19b)$$

$$\left(\kappa_{j,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) E_{x,n}^j + k_{x,n} k_y E_{y,n}^j + ik_{x,n} \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_{z,n}^j = 0. \quad (3.19c)$$

Vamos desacoplar o sistema de equações da Eq (3.19) para obter uma relação entre $\kappa_{j,n}$ e as demais constantes. Para facilitar a manipulação das expressões, podemos reescrever o sistema na seguinte forma

$$-ia_1 E_{x,n}^j - ib_1 E_{y,n}^j + c_1 E_{z,n}^j = 0, \quad (3.20a)$$

$$a_2 E_{x,n}^j + b_2 E_{y,n}^j + ic_2 E_{z,n}^j = 0, \quad (3.20b)$$

$$a_3 E_{x,n}^j + b_3 E_{y,n}^j + ic_3 E_{z,n}^j = 0. \quad (3.20c)$$

Como $b_3 = a_1$, $b_2 = c_1$ e $c_3 = a_2$, temos

$$-ia_1E_{x,n}^j - ib_1E_{y,n}^j + c_1E_{z,n}^j = 0, \quad (3.21a)$$

$$a_2E_{x,n}^j + c_1E_{y,n}^j + ic_2E_{z,n}^j = 0, \quad (3.21b)$$

$$a_3E_{x,n}^j + a_1E_{y,n}^j + ia_2E_{z,n}^j = 0. \quad (3.21c)$$

Primeiro, vamos encontrar $E_{y,n}^j$ e $E_{z,n}^j$ em função de $E_{x,n}^j$. Isolando $E_{z,n}^j$ na Eq (3.21a) obtemos

$$E_{z,n}^j = \frac{i}{c_1}(a_1E_{x,n}^j + b_1E_{y,n}^j). \quad (3.22)$$

Vamos substituir $E_{z,n}^j$ na Eq (3.21b) e isolar $E_{y,n}^j$

$$a_2E_{x,n}^j + c_1E_{y,n}^j - \frac{c_2}{c_1}(a_1E_{x,n}^j + b_1E_{y,n}^j) = 0 \quad (3.23)$$

$$\longrightarrow \left(a_2 - \frac{a_1c_2}{c_1}\right)E_{x,n}^j + \left(c_1 - \frac{b_1c_2}{c_1}\right)E_{y,n}^j = 0 \quad (3.24)$$

$$\longrightarrow (c_1a_2 - a_1c_2)E_{x,n}^j + (c_1^2 - b_1c_2)E_{y,n}^j = 0 \quad (3.25)$$

$$\longrightarrow E_{y,n}^j = -\frac{(c_1a_2 - a_1c_2)}{(c_1^2 - b_1c_2)}E_{x,n}^j. \quad (3.26)$$

Para obter $E_{z,n}^j$ em função de $E_{x,n}^j$ basta substituir a Eq (3.26) na (3.22)

$$E_{z,n}^j = \frac{i}{c_1} \left[a_1 - b_1 \frac{(c_1a_2 - a_1c_2)}{(c_1^2 - b_1c_2)} \right] E_{x,n}^j. \quad (3.27)$$

Agora, vamos substituir na Eq (3.21c) os $E_{y,n}^j$ e $E_{z,n}^j$ obtidos anteriormente e simplificar o máximo possível:

$$a_3E_{x,n}^j - a_1 \frac{(c_1a_2 - a_1c_2)}{(c_1^2 - b_1c_2)}E_{x,n}^j - \frac{a_2}{c_1} \left[a_1 - b_1 \frac{(c_1a_2 - a_1c_2)}{(c_1^2 - b_1c_2)} \right] E_{x,n}^j = 0 \quad (3.28)$$

$$\longrightarrow c_1a_3(c_1^2 - b_1c_2) - c_1a_1(c_1a_2 - a_1c_2) - a_2 \left[a_1(c_1^2 - b_1c_2) - b_1(c_1a_2 - a_1c_2) \right] = 0 \quad (3.29)$$

$$\longrightarrow c_1^3a_3 - c_1b_1c_2a_3 - c_1^2a_1a_2 + a_1^2c_1c_2 - a_1a_2c_1^2 + \underline{a_2b_1a_1c_2} + a_2^2b_1c_1 - \underline{a_2b_1a_1c_2} = 0 \quad (3.30)$$

$$\longrightarrow c_1^2a_3 - b_1c_2a_3 - 2c_1a_1a_2 + a_1^2c_2 + a_2^2b_1 = 0 \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} \longrightarrow & \kappa_{j,n}^2 k_y^2 \left(\kappa_{j,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) - \left(\kappa_{j,n}^2 - k_{x,n}^2 + \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) \left(k_{x,n}^2 + k_y^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) \\ & * \left(\kappa_{j,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) - 2\kappa_{j,n}^2 k_{x,n}^2 k_y^2 + k_{x,n}^2 k_y^2 \left(k_{x,n}^2 + k_y^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) \\ & + k_{x,n}^2 \kappa_{j,n}^2 \left(\kappa_{j,n}^2 - k_{x,n}^2 + \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned}
&\longrightarrow \left(\kappa_{j,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) \left[\cancel{\kappa_{j,n}^2 k_y^2} - \kappa_{j,n}^2 k_{x,n}^2 - \cancel{\kappa_{j,n}^2 k_y^2} + \kappa_{j,n}^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} + \kappa_{j,n}^4 + k_{x,n}^2 k_y^2 - k_{x,n}^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} k_{x,n}^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} k_y^2 + \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right)^2 \right] - 2\kappa_{j,n}^2 k_{x,n}^2 k_y^2 + k_{x,n}^2 k_y^2 \left(k_{x,n}^2 + k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) \\
&\quad + k_{x,n}^2 \kappa_{j,n}^2 \left(\kappa_{j,n}^2 - k_{x,n}^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) = 0 \tag{3.33}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\longrightarrow \cancel{\kappa_{j,n}^4 k_{x,n}^2} + \kappa_{j,n}^4 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} + \cancel{\kappa_{j,n}^2 k_{x,n}^4} + \cancel{k_{x,n}^2 k_y^2 \kappa_{j,n}^2} - 2\kappa_{j,n}^2 k_{x,n}^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} - \kappa_{j,n}^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} k_y^2 \\
&\quad + \kappa_{j,n}^2 \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right)^2 + \cancel{k_y^2 \kappa_{j,n}^2 k_{x,n}^2} - k_y^2 \kappa_{j,n}^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} - \cancel{k_y^2 k_{x,n}^4} - \cancel{k_{x,n}^2 k_y^4} + 2k_y^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} k_{x,n}^2 + k_y^4 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \\
&\quad - k_y^2 \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right)^2 - \cancel{\frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \kappa_{j,n}^2 k_{x,n}^2} + \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right)^2 \kappa_{j,n}^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} k_{x,n}^4 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \cancel{k_{x,n}^2 k_y^2} \\
&\quad - 2k_{x,n}^2 \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right)^2 - \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right)^2 k_y^2 + \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right)^4 - \cancel{2\kappa_{j,n}^2 k_{x,n}^2 k_y^2} + \cancel{k_{x,n}^4 k_y^2} \\
&\quad + \cancel{k_{x,n}^2 k_y^4} - \cancel{k_{x,n}^2 k_y^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2}} + \cancel{k_{x,n}^2 \kappa_{j,n}^4} - \cancel{k_{x,n}^4 \kappa_{j,n}^2} + \cancel{k_{x,n}^2 \kappa_{j,n}^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2}} = 0 \tag{3.34}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\longrightarrow \kappa_{j,n}^4 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} - 2\kappa_{j,n}^2 k_{x,n}^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} - 2\kappa_{j,n}^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} k_y^2 + 2 \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right)^2 \kappa_{j,n}^2 + 2k_y^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} k_{x,n}^2 + k_y^4 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \\
&\quad - 2k_y^2 \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right)^2 + k_{x,n}^4 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} - 2k_{x,n}^2 \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right)^2 + \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right)^4 = 0 \tag{3.35}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\longrightarrow \kappa_{j,n}^4 - 2\kappa_{j,n}^2 k_{x,n}^2 - 2\kappa_{j,n}^2 k_y^2 + 2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \kappa_{j,n}^2 + 2k_y^2 k_{x,n}^2 + k_y^4 - 2k_y^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} + k_{x,n}^4 - 2k_{x,n}^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \\
&\quad + \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right)^2 = 0 \tag{3.36}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\longrightarrow \kappa_{j,n}^4 - \kappa_{j,n}^2 k_{x,n}^2 - \kappa_{j,n}^2 k_y^2 + \kappa_{j,n}^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} + k_{x,n}^4 - k_{x,n}^2 \kappa_{j,n}^2 + k_{x,n}^2 k_y^2 - k_{x,n}^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} + k_y^4 \\
&\quad - k_y^2 \kappa_{j,n}^2 + k_y^2 k_{x,n}^2 - k_y^2 \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} + \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right)^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \kappa_{j,n}^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} k_{x,n}^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} k_y^2 = 0 \tag{3.37}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\longrightarrow \kappa_{j,n}^2 \left(\kappa_{j,n}^2 - k_{x,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) + k_{x,n}^2 \left(k_{x,n}^2 - \kappa_{j,n}^2 + k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) \\
&\quad + k_y^2 \left(k_y^2 - \kappa_{j,n}^2 + k_{x,n}^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} + \kappa_{j,n}^2 - k_{x,n}^2 - k_y^2 \right) = 0 \tag{3.38}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\longrightarrow \kappa_{j,n}^2 \left(\kappa_{j,n}^2 - k_{x,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) - k_{x,n}^2 \left(\kappa_{j,n}^2 - k_{x,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) \\
&\quad - k_y^2 \left(\kappa_{j,n}^2 - k_{x,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \left(\kappa_{j,n}^2 - k_{x,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) = 0 \tag{3.39}
\end{aligned}$$

$$\longrightarrow \left(\kappa_{j,n}^2 - k_{x,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) \left(\kappa_{j,n}^2 - k_{x,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) = 0 \tag{3.40}$$

$$\longrightarrow \left(\kappa_{j,n}^2 - k_{x,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right)^2 = 0 \quad (3.41)$$

$$\longrightarrow \kappa_{j,n}^2 - k_{x,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} = 0 \quad (3.42)$$

$$\longrightarrow \kappa_{j,n} = \sqrt{k_{x,n}^2 + k_y^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2}}. \quad (3.43)$$

As condições de contorno do problema em $z = 0$ requerem a continuidade da componente tangencial (ou seja, direções x e y) do campo elétrico e a descontinuidade do campo magnético através da interface (ou seja, ao longo na direção z) devido à presença de uma densidade de corrente superficial induzida pelo campo elétrico ao longo das direções x e y . A continuidade do campo elétrico permite escrever

$$\hat{x} \cdot (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1)|_{z=0} = 0, \quad (3.44a)$$

$$\hat{y} \cdot (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1)|_{z=0} = 0. \quad (3.44b)$$

Somando e usando as expressão dos campos (Eq 3.1), desenvolvemos

$$\begin{aligned} & \hat{x} \cdot \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(E_{x,n}^{(2)} \hat{x} + E_{y,n}^{(2)} \hat{y} + E_{z,n}^{(2)} \hat{z} \right) - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(E_{x,n}^{(1)} \hat{x} + E_{y,n}^{(1)} \hat{y} + E_{z,n}^{(1)} \hat{z} \right) \right] e^{i(k_{x,n}x + k_y y)} \\ & + \hat{y} \cdot \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(E_{x,n}^{(2)} \hat{x} + E_{y,n}^{(2)} \hat{y} + E_{z,n}^{(2)} \hat{z} \right) - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(E_{x,n}^{(1)} \hat{x} + E_{y,n}^{(1)} \hat{y} + E_{z,n}^{(1)} \hat{z} \right) \right] e^{i(k_{x,n}x + k_y y)} \\ & = 0 \end{aligned} \quad (3.45)$$

$$\begin{aligned} \longrightarrow & \hat{x} \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\left(E_{x,n}^{(2)} - E_{x,n}^{(1)} \right) \hat{x} + \left(E_{y,n}^{(2)} - E_{y,n}^{(1)} \right) \hat{y} + \left(E_{z,n}^{(2)} - E_{z,n}^{(1)} \right) \hat{z} \right] e^{i(qx + nGx + k_y y)} \\ & + \hat{y} \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\left(E_{x,n}^{(2)} - E_{x,n}^{(1)} \right) \hat{x} + \left(E_{y,n}^{(2)} - E_{y,n}^{(1)} \right) \hat{y} + \left(E_{z,n}^{(2)} - E_{z,n}^{(1)} \right) \hat{z} \right] e^{i(qx + nGx + k_y y)} = 0 \end{aligned} \quad (3.46)$$

$$\longrightarrow \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(E_{x,n}^{(2)} - E_{x,n}^{(1)} \right) e^{inG} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(E_{y,n}^{(2)} - E_{y,n}^{(1)} \right) e^{inGx} = 0 \quad (3.47)$$

$$\longrightarrow \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\left(E_{x,n}^{(2)} - E_{x,n}^{(1)} \right) + \left(E_{y,n}^{(2)} - E_{y,n}^{(1)} \right) \right] e^{inGx} = 0. \quad (3.48)$$

Dessa forma, podemos concluir que, para a n -ésima ordem de difração

$$E_{x,n}^{(2)} = E_{x,n}^{(1)}, \quad (3.49a)$$

$$E_{y,n}^{(2)} = E_{y,n}^{(1)}. \quad (3.49b)$$

Em acordo com a lei de Ohm, podemos escrever a descontinuidade do campo magnético de forma sintetizada para as direções x e y como

$$\hat{\mathbf{z}} \times (\mathbf{B}_1 - \mathbf{B}_2)|_{z=0} = \mu_0 \mathbf{J}^{2D} = \mu_0 (J_x^{2D} \hat{\mathbf{x}} + J_y^{2D} \hat{\mathbf{y}}) = \mu_0 \sigma(x) \mathbf{E}_1|_{z=0}, \quad (3.50)$$

onde $\sigma(x)$ é o tensor 2×2 de condutividade do Fosforeno ((KHOA; AL., 2019),(PHUONG *et al.*, 2020)) definido como

$$\sigma(x) = \begin{pmatrix} \sigma_{xx}(x) & \sigma_{xy}(x) \\ \sigma_{xy}(x) & \sigma_{yy}(x) \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

Onde $\sigma_{yx}(x) = \sigma_{xy}(x)$. Dessa forma, a densidade de corrente \mathbf{J}^{2D} pode ser reescrita em termos dos elementos σ_{ij} como

$$\mathbf{J}^{2D} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx}(x) & \sigma_{xy}(x) \\ \sigma_{xy}(x) & \sigma_{yy}(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x^{(1)} \\ E_y^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx}E_x^{(1)} + \sigma_{xy}E_y^{(1)} \\ \sigma_{xy}E_x^{(1)} + \sigma_{yy}E_y^{(1)} \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

$$\longrightarrow \mathbf{J}^{2D} = (\sigma_{xx}E_x^{(1)} + \sigma_{xy}E_y^{(1)}) \hat{\mathbf{x}} + (\sigma_{xy}E_x^{(1)} + \sigma_{yy}E_y^{(1)}) \hat{\mathbf{y}}. \quad (3.53)$$

Como

$$\hat{\mathbf{z}} \times (\mathbf{B}_1 - \mathbf{B}_2)|_{z=0} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{x}} & \hat{\mathbf{y}} & \hat{\mathbf{z}} \\ 0 & 0 & 1 \\ (B_{1,x} - B_{2,x}) & (B_{1,y} - B_{2,y}) & (B_{1,z} - B_{2,z}) \end{vmatrix}$$

$$\longrightarrow \hat{\mathbf{z}} \times (\mathbf{B}_1 - \mathbf{B}_2)|_{z=0} = -(B_{1,y} - B_{2,y}) \hat{\mathbf{x}} + (B_{1,x} - B_{2,x}) \hat{\mathbf{y}}, \quad (3.54)$$

podemos usar as componentes dos campos da Eq (3.1), para reescrever a condição de contorno da (3.50) da seguinte forma

$$\begin{aligned} & \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[(B_{y,n}^{(2)} - B_{y,n}^{(1)}) \hat{\mathbf{x}} + (B_{x,n}^{(1)} - B_{x,n}^{(2)}) \hat{\mathbf{y}} \right] e^{i(qx+nGx+k_y y)} = \\ & \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left\{ (\sigma_{xx}E_{x,l}^{(1)} + \sigma_{xy}E_{y,l}^{(1)}) \hat{\mathbf{x}} + (\sigma_{xy}E_{x,l}^{(1)} + \sigma_{yy}E_{y,l}^{(1)}) \hat{\mathbf{y}} \right\} e^{i(qx+lGx+k_y y)} \\ \longrightarrow & \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[(B_{y,n}^{(2)} - B_{y,n}^{(1)}) \hat{\mathbf{x}} + (B_{x,n}^{(1)} - B_{x,n}^{(2)}) \hat{\mathbf{y}} \right] e^{inGx} = \\ & \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left\{ (\sigma_{xx}E_{x,l}^{(1)} + \sigma_{xy}E_{y,l}^{(1)}) \hat{\mathbf{x}} + (\sigma_{xy}E_{x,l}^{(1)} + \sigma_{yy}E_{y,l}^{(1)}) \hat{\mathbf{y}} \right\} e^{ilGx}. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Assim como fizemos para o grafeno na Eq. (2.17), a função da condutividade periódica espacialmente dependente do conjunto de nanofitas de fosforeno pode ser escrita como

$$\sigma_{\alpha}(x) = \sum_m \tilde{\sigma}_{\alpha,m} e^{imGx}, \quad (3.56)$$

com coeficientes de transformada de Fourier

$$\tilde{\sigma}_{\alpha,m} = \frac{1}{R} \int_0^R \sigma_{\alpha}(x) e^{-imGx} dx, \quad (3.57)$$

onde α é o índice xx , yy ou xy da condutividade. Portanto, fazendo a conveniente mudança $m = n - l$ na (3.56) e substituindo na Eq. (3.55) temos

$$\begin{aligned} & \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\left(B_{y,n}^{(2)} - B_{y,n}^{(1)} \right) \hat{\mathbf{x}} + \left(B_{x,n}^{(1)} - B_{x,n}^{(2)} \right) \hat{\mathbf{y}} \right] e^{inGx} = \\ & \mu_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\left(\tilde{\sigma}_{xx,n-l} e^{i(n-l)Gx} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,n-l} e^{i(n-l)Gx} E_{y,l}^{(1)} \right) \hat{\mathbf{x}} \right. \\ & \quad \left. + \left(\tilde{\sigma}_{xy,n-l} e^{i(n-l)Gx} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,n-l} e^{i(n-l)Gx} E_{y,l}^{(1)} \right) \hat{\mathbf{y}} \right] e^{ilGx} \quad (3.58) \\ \rightarrow & \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\left(B_{y,n}^{(2)} - B_{y,n}^{(1)} \right) \hat{\mathbf{x}} + \left(B_{x,n}^{(1)} - B_{x,n}^{(2)} \right) \hat{\mathbf{y}} \right] e^{inGx} = \\ & \mu_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\left(\tilde{\sigma}_{xx,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) \hat{\mathbf{x}} \right. \\ & \quad \left. + \left(\tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) \hat{\mathbf{y}} \right] e^{inGx}. \quad (3.59) \end{aligned}$$

Logo, os componentes $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{y}}$ da Eq.(3.59) podem ser reescritos, respectivamente,

como

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\left(B_{y,n}^{(2)} - B_{y,n}^{(1)} \right) - \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) \right] e^{inGx} = 0, \quad (3.60a)$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\left(B_{x,n}^{(1)} - B_{x,n}^{(2)} \right) - \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) \right] e^{inGx} = 0. \quad (3.60b)$$

Para a n -ésima ordem

$$B_{y,n}^{(2)} - B_{y,n}^{(1)} - \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0, \quad (3.61a)$$

$$B_{x,n}^{(1)} - B_{x,n}^{(2)} - \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0. \quad (3.61b)$$

Vamos usar as Eq. (3.19) e (3.9) de modo a obter as expressões $B_{x,n}^{(j)} \equiv B_{x,n}^{(j)}(E_{x,n}^{(j)}, E_{y,n}^{(j)})$ e $B_{y,n}^{(j)} \equiv B_{y,n}^{(j)}(E_{x,n}^{(j)}, E_{y,n}^{(j)})$. Isolando $E_{z,n}^{(j)}$ na Eq.(3.19c), obtemos

$$E_{z,n}^{(j)} = \frac{isgn(z)}{k_{x,n} \kappa_{j,n}} \left[\left(\kappa_{j,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) E_{x,n}^{(j)} - k_{x,n} k_y E_{y,n}^{(j)} \right]. \quad (3.62)$$

Substituindo $E_{z,n}^{(j)}$ na Eq.(3.9a) podemos desenvolver

$$B_{x,n}^{(j)} = \frac{k_y}{\omega} E_{z,n}^{(j)} - i \frac{\kappa_{j,n}}{\omega} \operatorname{sgn}(z) E_{y,n}^{(j)} \quad (3.63)$$

$$\longrightarrow B_{x,n}^{(j)} = i \frac{k_y \operatorname{sgn}(z)}{\omega \kappa_{j,n}} \left[\left(\kappa_{j,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) E_{x,n}^{(j)} + k_{x,n} k_y E_{y,n}^{(j)} \right] - i \frac{\kappa_{j,n}}{\omega} \operatorname{sgn}(z) E_{y,n}^{(j)} \quad (3.64)$$

$$\longrightarrow B_{x,n}^{(j)} = \frac{i \operatorname{sgn}(z)}{\omega \kappa_{j,n}} \left[\left(\kappa_{j,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) \frac{k_y}{k_{x,n}} E_{x,n}^{(j)} + k_y^2 E_{y,n}^{(j)} - \kappa_{j,n}^2 E_{y,n}^{(j)} \right] \quad (3.65)$$

$$\longrightarrow B_{x,n}^{(j)} = \frac{i \operatorname{sgn}(z)}{\omega \kappa_{j,n}} \left[\left(\kappa_{j,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) \frac{k_y}{k_{x,n}} E_{x,n}^{(j)} + (k_y^2 - \kappa_{j,n}^2) E_{y,n}^{(j)} \right]. \quad (3.66)$$

Agora, substituindo $E_{z,n}^{(j)}$ na Eq.(3.9b) temos

$$B_{y,n}^{(j)} = \frac{i}{\omega} \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_{x,n}^{(j)} - \frac{k_{x,n}}{\omega} E_{z,n}^{(j)} \quad (3.67)$$

$$\longrightarrow B_{y,n}^{(j)} = \frac{i}{\omega} \kappa_{j,n} \operatorname{sgn}(z) E_{x,n}^{(j)} - i \frac{\operatorname{sgn}(z)}{\omega \kappa_{j,n}} \left[\left(\kappa_{j,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) E_{x,n}^{(j)} + k_{x,n} k_y E_{y,n}^{(j)} \right] \quad (3.68)$$

$$\longrightarrow B_{y,n}^{(j)} = i \frac{\operatorname{sgn}(z)}{\omega \kappa_{j,n}} \left[\kappa_{j,n}^2 E_{x,n}^{(j)} - \left(\kappa_{j,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) E_{x,n}^{(j)} - k_{x,n} k_y E_{y,n}^{(j)} \right] \quad (3.69)$$

$$\longrightarrow B_{y,n}^{(j)} = \frac{i \operatorname{sgn}(z)}{\omega \kappa_{j,n}} \left[\left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_j}{c^2} \right) E_{x,n}^{(j)} - k_{x,n} k_y E_{y,n}^{(j)} \right]. \quad (3.70)$$

Com $B_{x,n}^{(j)}$ dado na Eq.(3.66) e $B_{y,n}^{(j)}$ dado na Eq.(3.70) podemos usar a relação (3.49) para escrever

$$B_{y,n}^{(1)} = \frac{i}{\omega \kappa_{1,n}} \left[\left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_1}{c^2} \right) E_{x,n}^{(1)} - k_{x,n} k_y E_{y,n}^{(1)} \right], \quad (3.71a)$$

$$B_{y,n}^{(2)} = \frac{-i}{\omega \kappa_{2,n}} \left[\left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \right) E_{x,n}^{(1)} - k_{x,n} k_y E_{y,n}^{(1)} \right], \quad (3.71b)$$

$$B_{x,n}^{(1)} = \frac{i}{\omega \kappa_{1,n}} \left[\left(\kappa_{1,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_1}{c^2} \right) \frac{k_y}{k_{x,n}} E_{x,n}^{(1)} + (k_y^2 - \kappa_{1,n}^2) E_{y,n}^{(1)} \right], \quad (3.71c)$$

$$B_{x,n}^{(2)} = \frac{-i}{\omega \kappa_{2,n}} \left[\left(\kappa_{2,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \right) \frac{k_y}{k_{x,n}} E_{x,n}^{(1)} + (k_y^2 - \kappa_{2,n}^2) E_{y,n}^{(1)} \right]. \quad (3.71d)$$

Dessa forma, usando as Eq. (3.71a) e (3.71b), podemos desenvolver a Eq.(3.61a) da seguinte forma

$$\begin{aligned} & - \frac{i}{\omega} \left[\left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \right) \frac{E_{x,n}^{(1)}}{\kappa_{2,n}} - k_{x,n} k_y \frac{E_{y,n}^{(1)}}{\kappa_{2,n}} + \left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_1}{c^2} \right) \frac{E_{x,n}^{(1)}}{\kappa_{1,n}} - k_{x,n} k_y \frac{E_{y,n}^{(1)}}{\kappa_{1,n}} \right] \\ & - \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.72)$$

$$\begin{aligned} \longrightarrow & \frac{i}{\omega} \left[- \frac{\omega^2}{c^2} \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,n}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,n}} \right) E_{x,n}^{(1)} + k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,n}} + \frac{1}{\kappa_{2,n}} \right) E_{x,n}^{(1)} - k_{x,n} k_y \left(\frac{1}{\kappa_{1,n}} + \frac{1}{\kappa_{2,n}} \right) E_{y,n}^{(1)} \right] \\ & + \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.73)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow & - \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,n}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,n}} \right) E_{x,n}^{(1)} + \frac{c^2}{\omega^2} k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,n}} + \frac{1}{\kappa_{2,n}} \right) E_{x,n}^{(1)} - \frac{c^2}{\omega^2} k_{x,n} k_y \left(\frac{1}{\kappa_{1,n}} + \frac{1}{\kappa_{2,n}} \right) E_{y,n}^{(1)} \\ & + \frac{c^2 \mu_0}{i \omega} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.74)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow & - \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,n}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,n}} \right) E_{x,n}^{(1)} + \frac{c^2}{\omega^2} k_y \left(\frac{1}{\kappa_{1,n}} + \frac{1}{\kappa_{2,n}} \right) \left(k_y E_{x,n}^{(1)} - k_{x,n} E_{y,n}^{(1)} \right) \\ & - \frac{i \mu_0}{\mu_0 \varepsilon_0 \omega} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.75)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow & \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,n}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,n}} \right) E_{x,n}^{(1)} - \frac{c^2 k_y}{\omega^2} \left(\frac{1}{\kappa_{1,n}} + \frac{1}{\kappa_{2,n}} \right) \left(k_y E_{x,n}^{(1)} - k_{x,n} E_{y,n}^{(1)} \right) \\ & + \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.76)$$

Podemos proceder de forma análoga para as Eq. (3.71c), (3.71d) e (3.61b)

$$\begin{aligned} \frac{i}{\omega} \left[\left(\kappa_{1,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_1}{c^2} \right) \frac{k_y}{k_{x,n}} \frac{E_{x,n}^{(1)}}{\kappa_{1,n}} + (k_y^2 - \kappa_{1,n}^2) \frac{E_{y,n}^{(1)}}{\kappa_{2,n}} + \left(\kappa_{2,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \right) \frac{k_y}{k_{x,n}} \frac{E_{x,n}^{(1)}}{\kappa_{2,n}} \right. \\ \left. + (k_y^2 - \kappa_{2,n}^2) \frac{E_{y,n}^{(1)}}{\kappa_{1,n}} \right] - \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.77)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow & \frac{k_y}{k_{x,n}} \left[\frac{1}{\kappa_{2,n}} \left(\kappa_{2,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \right) + \frac{1}{\kappa_{1,n}} \left(\kappa_{1,n}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_1}{c^2} \right) \right] E_{x,l}^{(1)} + \left[\frac{1}{\kappa_{2,n}} (k_y^2 - \kappa_{2,n}^2) \right. \\ & \left. + \frac{1}{\kappa_{1,n}} (k_y^2 - \kappa_{1,n}^2) \right] E_{y,l}^{(1)} - \frac{\omega}{i} \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.78)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow & \frac{\omega^2}{c^2} \frac{k_y}{k_{x,n}} \left\{ \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,n}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,n}} \right) + \frac{c^2}{\omega^2} \left[\kappa_{1,n} + \kappa_{2,n} - k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,n}} + \frac{1}{\kappa_{2,n}} \right) \right] \right\} E_{x,n}^{(1)} + \left[k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,n}} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{\kappa_{2,n}} \right) - \kappa_{1,n} - \kappa_{2,n} \right] E_{y,n}^{(1)} + i \omega \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.79)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow & \frac{k_y}{k_{x,n}} \left\{ \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,n}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,n}} \right) + \frac{c^2}{\omega^2} \left[\kappa_{1,n} + \kappa_{2,n} - k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,n}} + \frac{1}{\kappa_{2,n}} \right) \right] \right\} E_{x,n}^{(1)} + \frac{c^2}{\omega^2} \left[k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,n}} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{\kappa_{2,n}} \right) - \kappa_{1,n} - \kappa_{2,n} \right] E_{y,n}^{(1)} + \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.80)$$

Portanto, a relação de dispersão do problema é o seguinte sistema de equações

$$\begin{aligned} \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,n}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,n}} \right) E_{x,n}^{(1)} - \frac{c^2 k_y}{\omega^2} \left(\frac{1}{\kappa_{1,n}} + \frac{1}{\kappa_{2,n}} \right) \left(k_y E_{x,n}^{(1)} - k_{x,n} E_{y,n}^{(1)} \right) \\ + \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0, \end{aligned} \quad (3.81a)$$

$$\frac{k_y}{k_{x,n}} \left\{ \left(\frac{\epsilon_1}{\kappa_{1,n}} + \frac{\epsilon_2}{\kappa_{2,n}} \right) + \frac{c^2}{\omega^2} \left[\kappa_{1,n} + \kappa_{2,n} - k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,n}} + \frac{1}{\kappa_{2,n}} \right) \right] \right\} E_{x,n}^{(1)} + \frac{c^2}{\omega^2} \left[k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,n}} + \frac{1}{\kappa_{2,n}} \right) - \kappa_{1,n} - \kappa_{2,n} \right] E_{y,n}^{(1)} + \frac{i}{\omega \epsilon_0} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,n-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0. \quad (3.81b)$$

A solução das Eqs. (3.81a) e (3.81b) fornece a estrutura de banda do espectro polaritônico em um sistema onde a condutividade do fosforeno é periódica.

3.2 Espalhamento em uma grade periódica de nanofitas de fosforeno

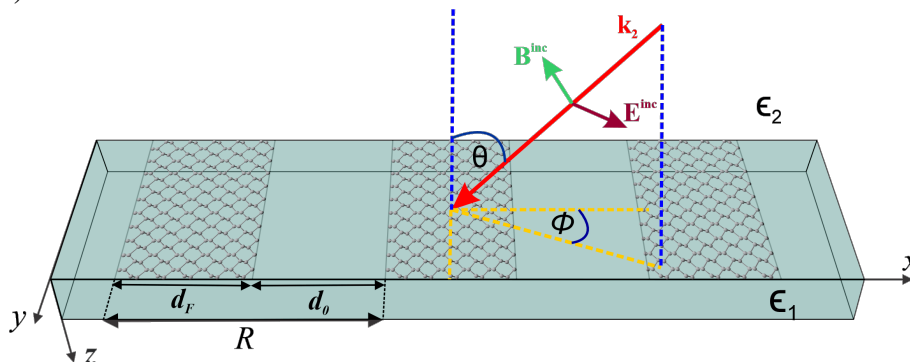
Agora, consideramos o espalhamento da radiação eletromagnética por uma grade periódica unidimensional de nanofitas de fosforeno e seu acoplamento aos plásmons polaritons de superfície. Da mesma forma que na seção 3.1.1, devido à periodicidade da grade, os campos eletromagnéticos podem ser expressos na forma de uma soma de Bloch. Portanto, para uma onda plana monocromática incidente na grade a partir da região onde a permissividade é ϵ_2 ($z < 0$), temos que:

$$\mathbf{E}_2 = \mathbf{E}_i + \mathbf{E}_r \quad \text{e} \quad \mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_t, \quad (3.82a)$$

$$\mathbf{B}_2 = \mathbf{B}_i + \mathbf{B}_r \quad \text{e} \quad \mathbf{B}_1 = \mathbf{B}_t, \quad (3.82b)$$

com o vetor de onda de entrada sendo definido como $\mathbf{k}_2 = k(\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$, onde θ e ϕ são, respectivamente, os ângulos polar e azimutal, conforme ilustra a figura 31, e $k = \sqrt{\epsilon_2} \omega / c$. Os índices i, r e t correspondem às ondas incidentes, refletidas e transmitidas através do sistema.

Figura 31 – Representação esquemática dos campos incidentes e vetor de onda \mathbf{k}_2 na situação de espalhamento em uma grade de nanofitas de fosforeno depositada em um substrato dielétrico. Os campos elétrico e magnético possuem componente em x, y e z e a periodicidade é na direção x (armchair)



Fonte: autoria própria.

Podemos reescrever as Eq. (3.82) como

$$\mathbf{E}_j(\mathbf{r}) = (E_{i_x}^j \hat{\mathbf{x}} + E_{i_y}^j \hat{\mathbf{y}} + E_{i_z}^j \hat{\mathbf{z}}) e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}} \delta_{2,j} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} (E_{x,n}^j \hat{\mathbf{x}} + E_{y,n}^j \hat{\mathbf{y}} + E_{z,n}^j \hat{\mathbf{z}}) e^{i(k_{x,n}x + k_{y,n}y) - \kappa_{j,n}|z|}, \quad (3.83a)$$

$$\mathbf{B}_j(\mathbf{r}) = (B_{i_x}^j \hat{\mathbf{x}} + B_{i_y}^j \hat{\mathbf{y}} + B_{i_z}^j \hat{\mathbf{z}}) e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}} \delta_{2,j} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} (B_{x,n}^j \hat{\mathbf{x}} + B_{y,n}^j \hat{\mathbf{y}} + B_{z,n}^j \hat{\mathbf{z}}) e^{i(k_{x,n}x + k_{y,n}y) - \kappa_{j,n}|z|}, \quad (3.83b)$$

onde $\kappa_{n,j}$ está definido na Eq. (3.43) e os números $j = 1, 2$ referem-se ao substrato abaixo do fosforeno e ao meio dielétrico superior, respectivamente. O primeiro termo das Eqs. (3.83a) e (3.83b) corresponde aos campos incidentes, \mathbf{E}_i e \mathbf{B}_i , quando $j = 2$, sendo as entradas do problema. É importante destacar que quando $k_{x,n}^2 + k_{y,n}^2 < \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2}$ temos uma onda propagante, pois nesse caso $\kappa_{j,n} = i\sqrt{\frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} - k_{x,n}^2 - k_{y,n}^2}$. Caso contrário, temos uma onda confinada na interface.

De forma semelhante ao obtido na seção 2.2, aplicando as condições de contorno (3.44) e (3.50) aos campos (3.83a) e (3.83b), obtemos expressões semelhantes às Eqs. (3.49) e (3.61) mas agora com um termo adicional relacionado à onda incidente quando $n = 0$. Dessa, forma a continuidade do campo elétrico impõe

$$E_{i_\beta} + E_{\beta,0}^{(2)} = E_{\beta,0}^{(1)} \quad \text{para } n = 0, \quad (3.84a)$$

$$E_{\beta,n}^{(2)} = E_{\beta,n}^{(1)} \quad \text{para } n \neq 0, \quad (3.84b)$$

onde o índice $\beta = x$ ou y . A descontinuidade do campo magnético impõe

$$B_{y,0}^{(2)} + B_{i_y} - B_{y,0}^{(1)} - \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} (\tilde{\sigma}_{xx,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{y,l}^{(1)}) = 0, \quad (3.85a)$$

$$B_{x,0}^{(1)} - B_{x,0}^{(2)} - B_{i_x} - \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} (\tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,-l} E_{y,l}^{(1)}) = 0. \quad (3.85b)$$

para $n = 0$. E

$$B_{y,n}^{(2)} - B_{y,n}^{(1)} - \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} (\tilde{\sigma}_{xx,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{y,l}^{(1)}) = 0, \quad (3.86a)$$

$$B_{x,n}^{(1)} - B_{x,n}^{(2)} - \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} (\tilde{\sigma}_{xy,n-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,n-l} E_{y,l}^{(1)}) = 0. \quad (3.86b)$$

para $n \neq 0$. Realizando as mesmas manipulações algébricas feitas na Seção 3.1, encontram-se as mesmas equações (3.81a) e (3.81b) para o problema de espalhamento quando $n \neq 0$. Para $n = 0$, vamos obter um sistema de equações semelhante usando as Eqs. (3.71) nas Eqs. (3.85a) e (3.85b). Começaremos usando a relação (3.84a) para reescrever as Eqs. (3.66) e (3.70) como

$$B_{x,0}^{(1)} = \frac{i}{\omega \kappa_{1,0}} \left[\left(\kappa_{1,0}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \epsilon_1}{c^2} \right) \frac{k_y}{k_{x,0}} E_{x,0}^{(1)} + (k_y^2 - \kappa_{1,0}^2) E_{y,0}^{(1)} \right], \quad (3.87a)$$

$$B_{x,0}^{(2)} = -\frac{i}{\omega \kappa_{2,0}} \left[\left(\kappa_{2,0}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \epsilon_2}{c^2} \right) \frac{k_y}{k_{x,0}} (E_{x,0}^{(1)} - E_{i_x}) + (k_y^2 - \kappa_{2,0}^2) (E_{y,0}^{(1)} - E_{i_y}) \right], \quad (3.87b)$$

$$B_{y,0}^{(1)} = \frac{i}{\omega \kappa_{1,0}} \left[\left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_1}{c^2} \right) E_{x,0}^{(1)} - k_{x,0} k_y E_{y,0}^{(1)} \right], \quad (3.87c)$$

$$B_{y,0}^{(2)} = -\frac{i}{\omega \kappa_{2,0}} \left[\left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \right) (E_{x,0}^{(1)} - E_{ix}) - k_{x,0} k_y (E_{y,0}^{(1)} - E_{iy}) \right]. \quad (3.87d)$$

Assim, substituindo as Eqs. (3.87c) e (3.87d) na Eq. (3.85a), temos

$$\begin{aligned} & -\frac{i}{\omega} \left[\frac{1}{\kappa_{2,0}} \left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \right) (E_{x,0}^{(1)} - E_{ix}) - \frac{1}{\kappa_{2,0}} k_{x,0} k_y (E_{y,0}^{(1)} - E_{iy}) + \frac{1}{\kappa_{1,0}} \left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_1}{c^2} \right) E_{x,0}^{(1)} \right. \\ & \left. - \frac{1}{\kappa_{1,0}} k_{x,0} k_y E_{y,0}^{(1)} \right] + B_{iy} - \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.88)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow & -\frac{\omega^2}{c^2} \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) E_{x,0}^{(1)} + k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) E_{x,0}^{(1)} - k_{x,0} k_y \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) E_{y,0}^{(1)} \\ & - \frac{1}{\kappa_{2,0}} \left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \right) E_{ix} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} k_{x,0} k_y E_{iy} - \frac{\omega}{i} B_{iy} + \frac{\omega}{i} \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.89)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow & \left[\left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) - \frac{c^2}{\omega^2} k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) \right] E_{x,0}^{(1)} + \frac{c^2}{\omega^2} k_{x,0} k_y \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) E_{y,0}^{(1)} \\ & + \frac{c^2}{\omega^2} \frac{1}{\kappa_{2,0}} \left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \right) E_{ix} - \frac{c^2}{\omega^2} \frac{1}{\kappa_{2,0}} k_{x,0} k_y E_{iy} - \frac{c^2}{\omega^2} i \omega B_{iy} \\ & + \frac{c^2}{\omega^2} i \omega \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.90)$$

Aplicando as equações de Maxwell (3.4b) e (3.5) nos campos incidentes, temos:

$$\begin{aligned} & (ik_y B_z^{inci} - ik_z B_y^{inci}) \hat{\mathbf{x}} + (ik_z B_x^{inci} - iq B_z^{inci}) \hat{\mathbf{y}} + (iq B_y^{inci} - ik_y B_x^{inci}) \hat{\mathbf{z}} \\ & = -i \frac{\omega \varepsilon_2}{c^2} (E_x^{inci} \hat{\mathbf{x}} + E_y^{inci} \hat{\mathbf{y}} + E_z^{inci} \hat{\mathbf{z}}), \end{aligned} \quad (3.91)$$

$$\rightarrow B_{iy} = \frac{1}{k_z} \left(\frac{\omega \varepsilon_2}{c^2} E_{ix} + k_y B_{iz} \right). \quad (3.92)$$

Aplicando as equações de Maxwell (3.7a) e (3.8) nos campos incidentes, temos:

$$\begin{aligned} & (ik_y E_z^{inci} - ik_z E_y^{inci}) \hat{\mathbf{x}} + (ik_z E_x^{inci} - iq E_z^{inci}) \hat{\mathbf{y}} + (iq E_y^{inci} - ik_y E_x^{inci}) \hat{\mathbf{z}} \\ & = i \omega (B_x^{inci} \hat{\mathbf{x}} + B_y^{inci} \hat{\mathbf{y}} + B_z^{inci} \hat{\mathbf{z}}) \end{aligned} \quad (3.93)$$

$$\rightarrow B_{iz} = \frac{1}{\omega} (k_{x,0} E_{iy} - k_y E_{ix}). \quad (3.94)$$

Então

$$B_{iy} = \frac{\omega \varepsilon_2}{c^2 k_z} E_{ix} + \frac{k_{x,0} k_y}{\omega k_z} E_{iy} - \frac{k_y^2}{\omega k_z} E_{ix} \quad (3.95)$$

$$\rightarrow B_{iy} = \left(\frac{\omega \varepsilon_2}{c^2 k_z} - \frac{k_y^2}{\omega k_z} \right) E_{ix} + \frac{k_{x,0} k_y}{\omega k_z} E_{iy}. \quad (3.96)$$

Substituindo a Eq. (3.96) na (3.90), obtemos

$$\begin{aligned} & \left[\left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) - \frac{c^2}{\omega^2} k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) \right] E_{x,0}^{(1)} + \frac{c^2}{\omega^2} k_{x,0} k_y \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) E_{y,0}^{(1)} \\ & + \frac{c^2}{\omega^2} \frac{1}{\kappa_{2,0}} \left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \right) E_{ix} - \frac{c^2}{\omega^2} \frac{1}{\kappa_{2,0}} k_{x,0} k_y E_{iy} - \frac{c^2}{\omega^2} i \omega \left[\left(\frac{\omega \varepsilon_2}{c^2 k_z} - \frac{k_y^2}{\omega k_z} \right) E_{ix} + \frac{k_{x,0} k_y}{\omega k_z} E_{iy} \right] \\ & + \frac{i}{\varepsilon_0 \omega} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.97)$$

$$\begin{aligned} \longrightarrow & \left[\left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) - \frac{c^2}{\omega^2} k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) \right] E_{x,0}^{(1)} + \frac{c^2}{\omega^2} k_{x,0} k_y \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) E_{y,0}^{(1)} \\ & - \frac{c^2}{\omega^2} \left\{ \left[\frac{1}{\kappa_{2,0}} \left(-k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \right) + \frac{i}{k_z} \left(\frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} - k_y^2 \right) \right] E_{ix} + \left(\frac{k_{x,0} k_y}{\kappa_{2,0}} + \frac{i k_{x,0} k_y}{k_z} \right) E_{iy} \right\} \\ & + \frac{i}{\varepsilon_0 \omega} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.98)$$

Mas

$$k_z^2 + k_{x,0}^2 + k_y^2 = k^2 \cos^2 \theta + k^2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi + k^2 \sin^2 \theta \sin^2 \phi, \quad (3.99)$$

$$= k^2 [\cos^2 \theta + \sin^2 \theta (\cos^2 \phi + \sin^2 \phi)] = k^2 = \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \quad (3.100)$$

$$\longrightarrow k_z^2 = - \left(k_{x,0}^2 + k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \right) \quad (3.101)$$

$$\longrightarrow k_z = i \sqrt{k_{x,0}^2 + k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2}} = i \kappa_{2,0} \quad (3.102)$$

$$\longrightarrow \kappa_{2,0} = -i k_z. \quad (3.103)$$

Então

$$-k_z^2 = k_{x,0}^2 + k_y^2 - \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \quad (3.104)$$

$$\longrightarrow k_y^2 = -k_z^2 - k_{x,0}^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2}. \quad (3.105)$$

Dessa forma, usando as Eqs. (3.103) e (3.105) na (3.98), obtemos

$$\begin{aligned} & \left[\left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) - \frac{c^2}{\omega^2} k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) \right] E_{x,0}^{(1)} + \frac{c^2}{\omega^2} k_{x,0} k_y \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) E_{y,0}^{(1)} \\ & - \frac{c^2}{\omega^2} \left\{ \left[\frac{i}{k_z} \left(k_z^2 + k_{x,0}^2 - \cancel{\frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2}} + \cancel{\frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2}} \right) + \frac{i}{k_z} \left(\cancel{\frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2}} + k_z^2 + k_{x,0}^2 - \cancel{\frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2}} \right) \right] E_{ix} \right. \\ & \left. + \left(\frac{i k_{x,0} k_y}{k_z} + \frac{i k_{x,0} k_y}{k_z} \right) E_{iy} \right\} + \frac{i}{\varepsilon_0 \omega} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.106)$$

$$\begin{aligned} \longrightarrow & \left[\left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) - \frac{c^2}{\omega^2} k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) \right] E_{x,0}^{(1)} + \frac{c^2}{\omega^2} k_{x,0} k_y \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) E_{y,0}^{(1)} \\ & - \frac{c^2}{\omega^2} \frac{2i}{k_z} \left[(k_z^2 + k_{x,0}^2) E_{ix} + k_{x,0} k_y E_{iy} \right] + \frac{i}{\varepsilon_0 \omega} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.107)$$

Podemos proceder de forma semelhante substituindo as Eqs. (3.87a) e (3.87b) na

(3.85b)

$$\begin{aligned} & \frac{i}{\omega} \left[\left(\kappa_{1,0}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_1}{c^2} \right) \frac{k_y}{k_{x,0}} \frac{E_{x,0}^{(1)}}{\kappa_{1,0}} + (k_y^2 - \kappa_{1,0}^2) \frac{E_{y,0}^{(1)}}{\kappa_{1,0}} \right. \\ & \left. + \left(\kappa_{2,0}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \right) \frac{k_y}{k_{x,0}} \frac{(E_{x,0}^{(1)} - E_{ix})}{\kappa_{2,0}} + (k_y^2 - \kappa_{2,0}^2) \frac{(E_{y,0}^{(1)} - E_{iy})}{\kappa_{2,0}} \right] \\ & - B_{ix} - \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.108)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow & \frac{k_y}{k_{x,0}} \left[\frac{\omega^2}{c^2} \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) + \kappa_{1,0} + \kappa_{2,0} - k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) \right] E_{x,0}^{(1)} \\ & + \left[k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) - \kappa_{1,0} - \kappa_{2,0} \right] E_{y,0}^{(1)} - \left(\kappa_{2,0}^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2} \right) \frac{k_y}{k_{x,0}} \frac{E_{ix}}{\kappa_{2,0}} \\ & - (k_y^2 - \kappa_{2,0}^2) \frac{E_{iy}}{\kappa_{2,0}} - \frac{\omega}{i} B_{ix} - \frac{\omega}{i} \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.109)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow & \frac{k_y}{k_{x,0}} \left\{ \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) + \frac{c^2}{\omega^2} \left[\kappa_{1,0} + \kappa_{2,0} - k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) \right] \right\} E_{x,0}^{(1)} \\ & + \frac{c^2}{\omega^2} \left[k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) - \kappa_{1,0} - \kappa_{2,0} \right] E_{y,0}^{(1)} \\ & - \frac{c^2}{\omega^2} \left[i k_{x,0} k_y \frac{E_{ix}}{k_z} + i (k_y^2 + k_z^2) \frac{E_{iy}}{k_z} - i \omega B_{ix} \right] + \frac{c^2}{\omega^2} i \omega \mu_0 \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0, \end{aligned} \quad (3.110)$$

onde usamos $k_{x,0}^2 = -k_z^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{c^2}$ obtido por meio da Eq. (3.105). Da relação (3.91), obtemos

$$B_{ix} = \frac{1}{k_z} \left(k_{x,0} B_{iz} - \frac{\omega \varepsilon_2}{c^2} E_{iy} \right). \quad (3.111)$$

Substituindo B_{iz} da Eq. (3.94), temos

$$B_{ix} = \frac{k_{x,0}^2}{\omega k_z} E_{iy} - \frac{k_{x,0} k_y}{\omega k_z} E_{ix} - \frac{\omega \varepsilon_2}{k_z c^2} E_{iy} \quad (3.112)$$

$$\rightarrow B_{ix} = \left(\frac{k_{x,0}^2}{\omega k_z} - \frac{\omega \varepsilon_2}{k_z c^2} \right) E_{iy} - \frac{k_{x,0} k_y}{\omega k_z} E_{ix}. \quad (3.113)$$

Substituindo a Eq. (3.113) na (3.110), obtemos

$$\begin{aligned}
& \frac{k_y}{k_{x,0}} \left\{ \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) + \frac{c^2}{\omega^2} \left[\kappa_{1,0} + \kappa_{2,0} - k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) \right] \right\} E_{x,n}^{(1)} \\
& + \frac{c^2}{\omega^2} \left[k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) - \kappa_{1,0} - \kappa_{2,0} \right] E_{y,0}^{(1)} \\
& - \frac{c^2}{\omega^2} \left[ik_{x,0}k_y \frac{E_{ix}}{k_z} + i(k_y^2 + k_z^2) \frac{E_{iy}}{k_z} - i \left(\frac{k_{x,0}^2}{k_z} - \frac{\omega^2 \varepsilon_2}{k_z c^2} \right) E_{iy} + i \frac{k_{x,0}k_y}{k_z} E_{ix} \right] \\
& + \frac{i}{\varepsilon_0 \omega} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0
\end{aligned} \tag{3.114}$$

$$\begin{aligned}
\rightarrow & \frac{k_y}{k_{x,0}} \left\{ \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) + \frac{c^2}{\omega^2} \left[\kappa_{1,0} + \kappa_{2,0} - k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) \right] \right\} E_{x,n}^{(1)} \\
& + \frac{c^2}{\omega^2} \left[k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) - \kappa_{1,0} - \kappa_{2,0} \right] E_{y,0}^{(1)} \\
& - \frac{c^2}{\omega^2} \left\{ 2ik_{x,0}k_y \frac{E_{ix}}{k_z} + \left[\frac{i}{k_z} (k_y^2 + k_z^2) - \frac{i}{k_z} \left(-k_z^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \cancel{\varepsilon_2}}{c^2} - \frac{\omega^2 \cancel{\varepsilon_2}}{c^2} \right) \right] E_{iy} \right\} \\
& + \frac{i}{\varepsilon_0 \omega} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0
\end{aligned} \tag{3.115}$$

$$\begin{aligned}
\rightarrow & \frac{k_y}{k_{x,0}} \left\{ \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) + \frac{c^2}{\omega^2} \left[\kappa_{1,0} + \kappa_{2,0} - k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) \right] \right\} E_{x,n}^{(1)} \\
& + \frac{c^2}{\omega^2} \left[k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) - \kappa_{1,0} - \kappa_{2,0} \right] E_{y,0}^{(1)} - \frac{c^2}{\omega^2} \left[\frac{2i}{k_z} k_{x,0}k_y E_{ix} + \frac{2i}{k_z} (k_y^2 + k_z^2) E_{iy} \right] \\
& + \frac{i}{\varepsilon_0 \omega} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0
\end{aligned} \tag{3.116}$$

$$\begin{aligned}
\rightarrow & \frac{k_y}{k_{x,0}} \left\{ \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) + \frac{c^2}{\omega^2} \left[\kappa_{1,0} + \kappa_{2,0} - k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) \right] \right\} E_{x,n}^{(1)} \\
& + \frac{c^2}{\omega^2} \left[k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) - \kappa_{1,0} - \kappa_{2,0} \right] E_{y,0}^{(1)} - \frac{c^2}{\omega^2} \frac{2i}{k_z} [k_{x,0}k_y E_{ix} + (k_y^2 + k_z^2) E_{iy}] \\
& + \frac{i}{\varepsilon_0 \omega} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0.
\end{aligned} \tag{3.117}$$

Finalmente, vemos que o sistema de equações, quando $n = 0$, para o problema do espalhamento é

$$\begin{aligned}
& \left[\left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) - \frac{c^2}{\omega^2} k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) \right] E_{x,0}^{(1)} + \frac{c^2}{\omega^2} k_{x,0}k_y \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) E_{y,0}^{(1)} \\
& - \frac{c^2}{\omega^2} \frac{2i}{k_z} [(k_z^2 + k_{x,0}^2) E_{ix} + k_{x,0}k_y E_{iy}] + \frac{i}{\varepsilon_0 \omega} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xx,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0,
\end{aligned} \tag{3.118a}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{k_y}{k_{x,0}} \left\{ \left(\frac{\varepsilon_1}{\kappa_{1,0}} + \frac{\varepsilon_2}{\kappa_{2,0}} \right) + \frac{c^2}{\omega^2} \left[\kappa_{1,0} + \kappa_{2,0} - k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) \right] \right\} E_{x,0}^{(1)} \\
& + \frac{c^2}{\omega^2} \left[k_y^2 \left(\frac{1}{\kappa_{1,0}} + \frac{1}{\kappa_{2,0}} \right) - \kappa_{1,0} - \kappa_{2,0} \right] E_{y,0}^{(1)} - \frac{c^2}{\omega^2} \frac{2i}{k_z} [k_{x,0} k_y E_{i_x} + (k_y^2 + k_z^2) E_{i_y}] \\
& + \frac{i}{\varepsilon_0 \omega} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\tilde{\sigma}_{xy,-l} E_{x,l}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{yy,-l} E_{y,l}^{(1)} \right) = 0. \tag{3.118b}
\end{aligned}$$

Observe que, semelhantemente ao sistema obtido na seção 2.2, as Eqs. (3.81a), (3.81b), (3.118b) e (3.118a) são equações matriciais, cujas soluções, para um dado ω , são as amplitudes do campo elétrico. Tais soluções podem ser obtidas numericamente com auxílio da equação (3.26), que permite escrever a componente $E_{y,n}^{(j)}$ em função da componente $E_{x,n}^{(j)}$ da seguinte forma

$$E_{y,n}^{(j)} = D_{n,j} E_{x,n}^{(j)}, \tag{3.119}$$

onde

$$D_{n,j} = - \frac{(c_1 a_2 - a_1 c_2)}{(c_1^2 - b_1 c_2)}. \tag{3.120}$$

Para os campos incidentes, podemos aplicar as equações de Maxwell para obter um sistema de equações análogo ao da equação (3.19) de modo a obter E_{i_y} em função de E_{i_x} na seguinte forma: $E_{i_y} = D E_{i_x}$, onde

$$D = \frac{q k_y - \frac{k_y}{q} (k^2 - k_y^2 - k_z^2)}{k^2 - q^2 - k_y^2 - k_z^2}. \tag{3.121}$$

Note-se que, como $q = k \sin \theta \cos \phi$, a equação (3.121) implica em uma indeterminação quando $\theta = 0^\circ$ e $\phi = 90^\circ$. Tendo calculado tais amplitudes podemos, então, analisar graficamente o comportamento da Reflectância, Transmitância e Absorbância através da estrutura em termos da frequência angular ω .

3.2.1 Expressões gerais para o cálculo da Transmitância, Refletância e Absorbância

Na seção 2.2.1, deduzimos as expressões para Transmitância, Refletância e Absorbância a fim de calcular essas grandezas em uma grade de nanofitas de grafeno, considerando apenas o caso do modo TM de incidência. No entanto, neste capítulo, estamos abordando o caso de uma onda incidente em uma grade de nanofitas de fosforeno, onde os campos elétrico e magnético possuem componentes nas direções x , y e z . Portanto, as Eqs. (2.54a) e (2.54b) não são aplicáveis para o cálculo dessas grandezas físicas no caso das nanofitas de fosforeno.

Por essa razão, vamos deduzir, a seguir, as expressões para a Transmitância, Refletância e Absorbância através da estrutura analisada neste capítulo mostrando que esses valores podem ser calculados em termos das amplitudes do campo elétrico. Para isso, considere o vetor de poynting para as ondas eletromagnéticas envolvidas sendo

$$\mathbf{S} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E} \times \mathbf{B}. \quad (3.122)$$

Como a dependência temporal dos campos elétricos e magnéticos continuam sendo termos harmônicos $e^{-i\omega t}$, o valor médio sobre um período temporal de \mathbf{S} ainda é

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{2\mu_0} \Re e \{ \mathbf{E} \times \mathbf{B}^* \}. \quad (3.123)$$

Realizando o produto vetorial $\vec{E} \times \vec{B}^*$, a Eq. (3.123) pode ser reescrita como

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{2\mu_0} \Re e \{ (E_y B_z^* - E_z B_y^*) \hat{\mathbf{x}} + (E_z B_x^* - E_x B_z^*) \hat{\mathbf{y}} + (E_x B_y^* - E_y B_x^*) \hat{\mathbf{z}} \}. \quad (3.124)$$

Dessa forma, o fluxo médio de energia eletromagnética por unidade de área através do eixo z , aqui, será definido como

$$\langle S_z \rangle \equiv S_z = \frac{1}{2\mu_0} \Re e [E_x B_y^* - E_y B_x^*], \quad (3.125)$$

sendo o fluxo médio de energia eletromagnética por unidade de área através do eixo z . Assim, para os campos incidentes, temos

$$S_z^{inc} = \frac{1}{2\mu_0} \Re e [E_{ix} e^{ik_2 \cdot \mathbf{r}} B_{iy}^* e^{-ik_2 \cdot \mathbf{r}} - E_{iy} e^{ik_2 \cdot \mathbf{r}} B_{ix}^* e^{-ik_2 \cdot \mathbf{r}}] \quad (3.126)$$

$$\longrightarrow S_z^{inc} = \frac{1}{2\mu_0} \Re e [E_{ix} B_{iy}^* - E_{iy} B_{ix}^*]. \quad (3.127)$$

Substituindo as Eqs. (3.96) e (3.113) na Eq. (3.127), obtemos

$$S_z^{inc} = \frac{1}{2\mu_0} \Re e \left\{ E_{ix} \left[\left(\frac{\omega \epsilon_2}{c^2 k_z} - \frac{k_y^2}{\omega k_z} \right) E_{ix}^* + \frac{k_{x,0} k_y}{\omega k_z} E_{iy}^* \right] - E_{iy} \left[\left(\frac{k_{x,0}^2}{\omega k_z} - \frac{\omega \epsilon_2}{k_z c^2} \right) E_{iy}^* - \frac{k_{x,0} k_y}{\omega k_z} E_{ix}^* \right] \right\} \quad (3.128)$$

$$\longrightarrow S_z^{inc} = \frac{1}{2\mu_0} \Re e \left[\left(\frac{\omega \epsilon_2}{c^2 k_z} - \frac{k_y^2}{\omega k_z} \right) E_{ix}^* E_{ix} + \frac{k_{x,0} k_y}{\omega k_z} E_{ix}^* E_{iy} - \left(\frac{k_{x,0}^2}{\omega k_z} - \frac{\omega \epsilon_2}{k_z c^2} \right) E_{iy}^* E_{iy} + \frac{k_{x,0} k_y}{\omega k_z} E_{ix}^* E_{iy} \right] \quad (3.129)$$

$$\begin{aligned} \longrightarrow S_z^{inc} &= \frac{1}{2\mu_0 k_z \omega} \left\{ \left(\frac{\omega^2 \epsilon_2}{c^2} - k_y^2 \right) |E_{ix}|^2 + \left(\frac{\omega^2 \epsilon_2}{c^2} - k_{x,0}^2 \right) |E_{iy}|^2 \right. \\ &\quad \left. + 2k_{x,0} k_y \Re [E_{ix}^* E_{iy}] \right\}. \end{aligned} \quad (3.130)$$

Onde usamos a propriedade $\Re[z_1^* z_2] = \Re[z_1 z_2^*]$ com $z_1 = a_1 + b_1 i$ e $z_2 = a_2 + b_2 i$.

Para encontrar o fluxo refletido e transmitido por unidade área, vamos substituir as componentes dos campos, para a n -ésima ordem, conforme são dadas pelas Eqs. (3.1a) e (3.1b) na Eq. (3.125)

$$S_{n,z} = \frac{1}{2\mu_0} \Re [E_{x,n}^{(j)} e^{-\kappa_{j,n}|z|} B_{y,n}^{(j)*} e^{-\kappa_{j,n}^*|z|} - E_{y,n}^{(j)} e^{-\kappa_{j,n}|z|} B_{x,n}^{(j)*} e^{-\kappa_{j,n}^*|z|}]. \quad (3.131)$$

Para uma onda propagante devemos ter $\kappa_{j,n} = i\sqrt{\frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} - k_{x,n}^2 - k_y^2}$, dessa forma definimos

$$\kappa_{j,n} = i\sqrt{\frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} - k_{x,n}^2 - k_y^2} \equiv i|\kappa_{j,n}|, \quad (3.132)$$

de modo que

$$S_{n,z} = \frac{1}{2\mu_0} \Re [E_{x,n}^{(j)} e^{-i|\kappa_{j,n}||z|} B_{y,n}^{(j)*} e^{i|\kappa_{j,n}||z|} - E_{y,n}^{(j)} e^{-i|\kappa_{j,n}||z|} B_{x,n}^{(j)*} e^{i|\kappa_{j,n}||z|}] \quad (3.133)$$

$$\longrightarrow S_{n,z} = \frac{1}{2\mu_0} \Re [E_{x,n}^{(j)} B_{y,n}^{(j)*} - E_{y,n}^{(j)} B_{x,n}^{(j)*}]. \quad (3.134)$$

Levando em conta a condição (3.132) as Eqs. (3.66) e (3.70) podem ser reescritas como

$$B_{x,n}^{(j)} = \frac{\text{sgn}(z)}{\omega|\kappa_{j,n}|} \left[\left(-|\kappa_{j,n}|^2 - k_y^2 + \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) \frac{k_y}{k_{x,n}} E_{x,n}^{(j)} + (k_y^2 + |\kappa_{j,n}|^2) E_{y,n}^{(j)} \right], \quad (3.135)$$

$$B_{y,n}^{(j)} = \frac{\text{sgn}(z)}{\omega|\kappa_{j,n}|} \left[\left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) E_{x,n}^{(j)} - k_{x,n} k_y E_{y,n}^{(j)} \right]. \quad (3.136)$$

Substituindo $|\kappa_{j,n}|$ em $B_{x,n}^{(j)}$ da Eq. (3.135), obtemos

$$B_{x,n}^{(j)} = \frac{\text{sgn}(z)}{\omega|\kappa_{j,n}|} \left[\left(-\frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} + k_{x,n}^2 + \cancel{k_y^2} - \cancel{k_y^2} + \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) \frac{k_y}{k_{x,n}} E_{x,n}^{(j)} + (\cancel{k_y^2} + \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} - k_{x,n}^2 - \cancel{k_y^2}) E_{y,n}^{(j)} \right] \quad (3.137)$$

$$\longrightarrow B_{x,n}^{(j)} = \frac{\text{sgn}(z)}{\omega|\kappa_{j,n}|} \left[k_{x,n} k_y E_{x,n}^{(j)} + \left(\frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} - k_{x,n}^2 \right) E_{y,n}^{(j)} \right]. \quad (3.138)$$

Substituindo as Eqs. (3.136) e (3.138) na (3.134), temos

$$\begin{aligned} S_{n,z} &= \frac{\text{sgn}(z)}{2\mu_0 |\kappa_{j,n}| \omega} \Re \left\{ E_{x,n}^{(j)} \left[\left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) E_{x,n}^{(j)*} - k_{x,n} k_y E_{y,n}^{(j)*} \right] \right. \\ &\quad \left. - E_{y,n}^{(j)} \left[k_{x,n} k_y E_{x,n}^{(j)*} + \left(\frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} - k_{x,n}^2 \right) E_{y,n}^{(j)*} \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.139)$$

$$\begin{aligned} \longrightarrow S_{n,z} &= \frac{\text{sgn}(z)}{2\mu_0|\kappa_{j,n}|\omega} \Re \left[\left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) |E_{x,n}^{(j)}|^2 - k_{x,n} k_y E_{x,n}^{(j)} E_{y,n}^{(j)*} \right. \\ &\quad \left. - k_{x,n} k_y E_{x,n}^{(j)*} E_{y,n}^{(j)} - \left(\frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} - k_{x,n}^2 \right) |E_{y,n}^{(j)}|^2 \right] \end{aligned} \quad (3.140)$$

$$\begin{aligned} \longrightarrow S_{n,z} &= \frac{\text{sgn}(z)}{2\mu_0|\kappa_{j,n}|\omega} \left\{ \left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} \right) |E_{x,n}^{(j)}|^2 - \left(\frac{\omega^2 \epsilon_j}{c^2} - k_{x,n}^2 \right) |E_{y,n}^{(j)}|^2 \right. \\ &\quad \left. - 2k_{x,n} k_y \Re \left[E_{x,n}^{(j)*} E_{y,n}^{(j)} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.141)$$

Dessa forma, as expressões para os fluxos de energia refletido e transmitido por unidade de área são dados, respectivamente, por

$$\begin{aligned} S_{n,z}^{REF} &= \frac{-1}{2\mu_0|\kappa_{2,n}|\omega} \left\{ \left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_2}{c^2} \right) |E_{x,n}^{(2)}|^2 - \left(\frac{\omega^2 \epsilon_2}{c^2} - k_{x,n}^2 \right) |E_{y,n}^{(2)}|^2 \right. \\ &\quad \left. - 2k_{x,n} k_y \Re \left[E_{x,n}^{(2)*} E_{y,n}^{(2)} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.142)$$

$$\begin{aligned} S_{n,z}^{Trans} &= \frac{1}{2\mu_0|\kappa_{1,n}|\omega} \left\{ \left(k_y^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_1}{c^2} \right) |E_{x,n}^{(1)}|^2 - \left(\frac{\omega^2 \epsilon_1}{c^2} - k_{x,n}^2 \right) |E_{y,n}^{(1)}|^2 \right. \\ &\quad \left. - 2k_{x,n} k_y \Re \left[E_{x,n}^{(1)*} E_{y,n}^{(1)} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.143)$$

Conforme vimos anteriormente, para a n-ésima ordem de difração, a transmitância e a refletância são definidas, respectivamente, como

$$\mathcal{T}_n = \left| \frac{S_{z,n}^{Trans}}{S_z^{inc}} \right|, \quad \mathcal{R}_n = \left| \frac{S_{z,n}^{REF}}{S_z^{inc}} \right|. \quad (3.144)$$

Substituindo as Eqs. (3.130), (3.142) e (3.143), obtemos

$$\mathcal{T}_n = \frac{k_z}{|\kappa_{1,n}|} \left| \frac{\left(\frac{\omega^2 \epsilon_1}{c^2} - k_y^2 \right) |E_{x,n}^{(1)}|^2 + \left(\frac{\omega^2 \epsilon_1}{c^2} - k_{x,n}^2 \right) |E_{y,n}^{(1)}|^2 + 2k_{x,n} k_y \Re \left[E_{x,n}^{(1)*} E_{y,n}^{(1)} \right]}{\left(\frac{\omega^2 \epsilon_2}{c^2} - k_y^2 \right) |E_{i_x}|^2 + \left(\frac{\omega^2 \epsilon_2}{c^2} - q^2 \right) |E_{i_y}|^2 + 2qk_y \Re \left[E_{i_x}^* E_{i_y} \right]} \right|, \quad (3.145)$$

$$\mathcal{R}_n = \frac{k_z}{|\kappa_{2,n}|} \left| \frac{\left(\frac{\omega^2 \epsilon_2}{c^2} - k_y^2 \right) |E_{x,n}^{(2)}|^2 + \left(\frac{\omega^2 \epsilon_2}{c^2} - k_{x,n}^2 \right) |E_{y,n}^{(2)}|^2 + 2k_{x,n} k_y \Re \left[E_{x,n}^{(2)*} E_{y,n}^{(2)} \right]}{\left(\frac{\omega^2 \epsilon_2}{c^2} - k_y^2 \right) |E_{i_x}|^2 + \left(\frac{\omega^2 \epsilon_2}{c^2} - q^2 \right) |E_{i_y}|^2 + 2qk_y \Re \left[E_{i_x}^* E_{i_y} \right]} \right|. \quad (3.146)$$

De modo que seus valores totais são

$$T = \sum_n \mathcal{T}_n, \quad R = \sum_n \mathcal{R}_n. \quad (3.147)$$

Tendo calculado a transmitância e a refletância, a absorvância é obtida por meio de

$$A = 1 - T - R. \quad (3.148)$$

3.3 Resultados da Transmitância, Refletância e Absorbância em função da frequência

Para obter as soluções numéricas das Eqs. (3.81a), (3.81b), (3.118b) e (3.118a) é necessário descrever matematicamente de que forma se dá a periodicidade da condutividade. Conforme mostra a figura 31, a grade periódica é composta por regiões com fosforeno, de largura d_F , e regiões sem fosforeno, de largura d_0 , com parâmetro de rede R . Dessa forma, a geometria do sistema, permite escrever a condutividade como

$$\sigma_\alpha(x) = \sigma_\alpha^F s(x), \quad (3.149)$$

onde σ_α^F é a condutividade ótica do tipo Fosforeno monocamada para a direção α , que é aproximada por um termo tipo drude para frequências até o infravermelho médio, dada por (LOW; AL., 2014a)

$$\sigma_\alpha^F = \sigma_{jj} = \frac{e^2 n_e}{m_j(\omega + i\Gamma/\hbar)}. \quad (3.150)$$

Onde $\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0$, Γ é o damping, $m_x = m_{AC} = 0.15 m_0$ e $m_y = m_{ZZ} = 0.7 m_0$ são as massas efetivas para uma espessura $a = 2.3 \text{ \AA}$ (LOW *et al.* 2014b) e band gap 2 eV (TRAN *et al.*, 2014), com a configuração da nanofita dada na figura 31. Podemos mudar a orientação da nanofita de modo que a periodicidade seja na direção ZZ, nesse caso $m_x = m_{ZZ} = 0.7 m_0$ e $m_y = m_{AC} = 0.15 m_0$.

A função $s(x)$ pode ser escrita em termos da função degrau, que descreve uma descontinuidade abrupta na condutividade, como

$$s(x) = \Theta(x - d_0). \quad (3.151)$$

Portanto, a equação (3.57) pode ser reescrita como

$$\tilde{\sigma}_{\alpha,l} = \frac{\sigma_F^\alpha}{R} \int_0^R s(x) e^{-ilGx} dx. \quad (3.152)$$

Procedendo de forma análoga ao que foi feito na seção 2.3, obtemos

$$\tilde{\sigma}_{\alpha,0} = \frac{\sigma_F^\alpha}{R} d_F. \quad (3.153)$$

para $l = 0$ e

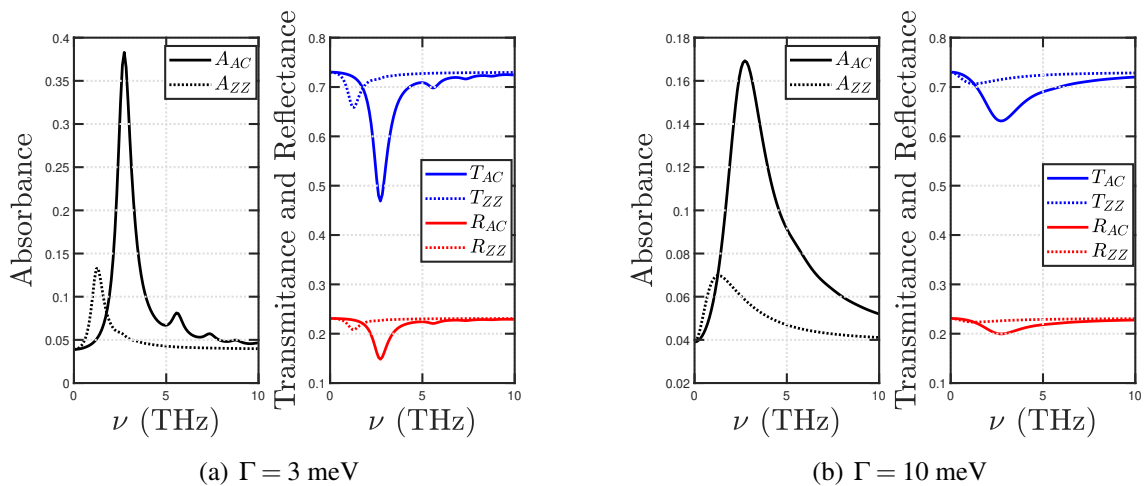
$$\tilde{\sigma}_{\alpha,l} = \frac{\sigma_F^\alpha}{l\pi} \sin\left(\frac{l\pi d_F}{R}\right) e^{\frac{i l \pi d_F}{R}}, \quad (3.154)$$

para $l \neq 0$.

Após resolver numericamente o problema das Eqs. (3.81a), (3.81b), (3.118a) e (3.118b) usamos suas soluções, que são as amplitudes dos campos, para calcular a Transmitância, Refletância e Absorbância em função da frequência.

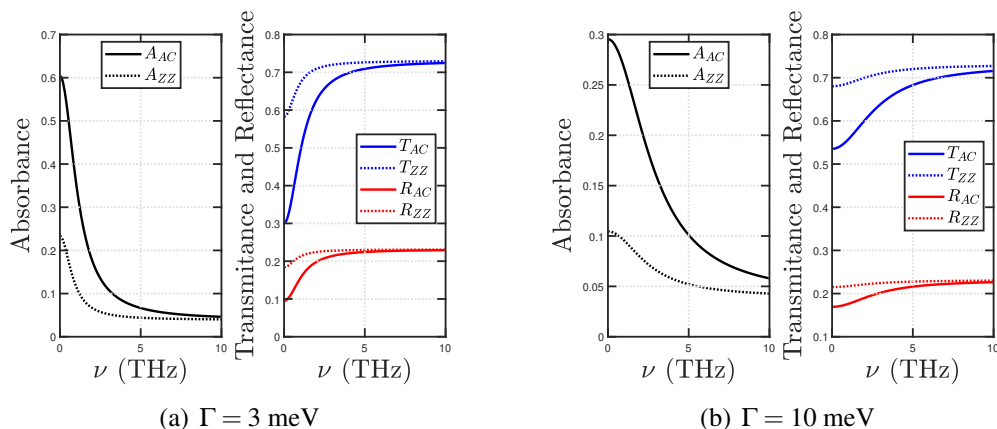
Nas Figs. 32 e 33 apresentamos essas quantidades para diferentes valores de Γ para o caso de uma onda eletromagnética incidindo em uma estrutura periódica de fitas de fosforeno (Fig. 32) e para o caso do fosforeno contínuo (Fig. 33). As linhas contínuas resultam da orientação da nanofita em que a direção AC é paralela à direção x e as linhas pontilhadas para o caso em que a direção ZZ é paralela à direção x . Ambos os casos para a incidência normal.

Figura 32 – Absorbância (curvas pretas), transmitância (curvas azuis) e refletância (curvas vermelhas) de uma onda através de uma estrutura periódica de fitas de fosforeno



Fonte: autoria própria.

Figura 33 – Absorbância (curvas pretas), transmitância (curvas azuis) e refletância (curvas vermelhas) de uma onda incidindo em uma folha de fosforeno uniforme e contínua para $\Gamma = 3 \text{ meV}$ (painéis da esquerda) e $\Gamma = 10 \text{ meV}$ (painéis da direita)



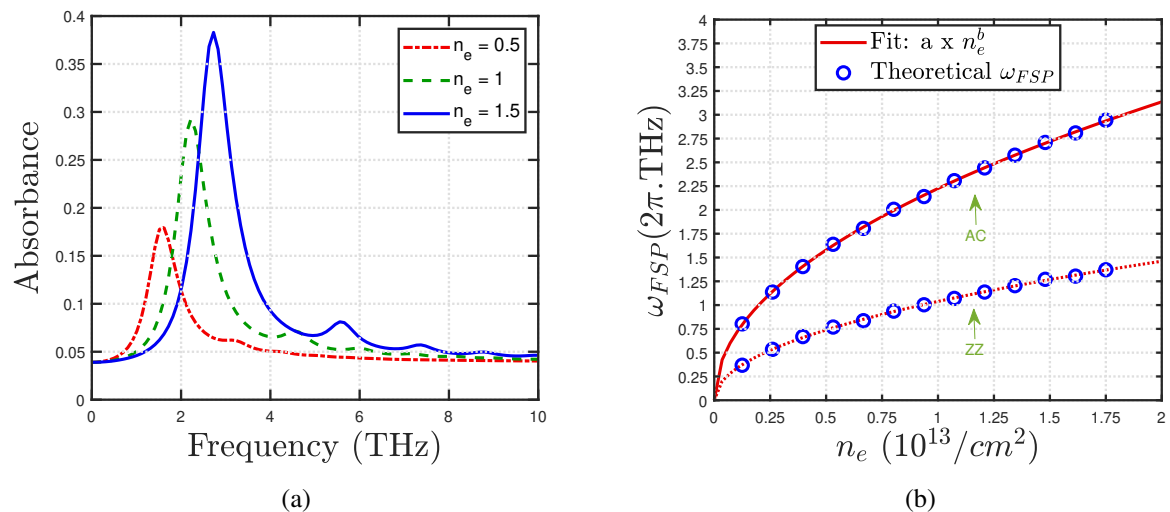
Fonte: autoria própria.

Os resultados apresentados nas Figs. 32 e 33 mostram picos de ressonâncias bem definidos associados aos plásmos polártons de superfície no fosforeno (FSP) no caso da estrutura semelhante a uma *grating*, enquanto que tais quantidades tem um comportamento suave para o caso da nanofita contínua. Note-se que os picos de absorbância, associados ao acoplamento da radiação eletromagnética aos modos do tipo de Bloch dos FSP's, são bem maiores e bem definidos quanto menor o valor de Γ .

Esses resultados também mostram que os valores de absorbância e as frequências de FSP, associadas aos picos, são bem menores quando a direção ZZ é paralela à direção da periodicidade da rede em comparação ao caso em que a direção AC é a paralela à periodicidade. Tal resultado é consequência direta do diferente valor de massa efetiva para as direções AC e ZZ (FENG; AL., 2018).

Assim como na seção 2.3, vamos analisar o comportamento dos espectros de absorção com a variação dos demais parâmetros do sistema. A figura 34 apresenta o comportamento da absorbância em função da densidade eletrônica n_e .

Figura 34 – (a) Curvas da absorbância para diferentes valores da densidade eletrônica n_e em unidades de $10^{13}/\text{cm}^2$ do Fosforeno com a direção AC paralela à periodicidade. (b) Comportamento da frequência de ressonância de plasmón no Fosforeno ω_{FSP} com a variação da densidade eletrônica n_e . As constantes utilizadas são $\Gamma = 3\text{meV}$, $d_F = 2\mu\text{m}$, $R = 4\mu\text{m}$, $\varepsilon_1 = 10$, $\varepsilon_2 = 1$, $\theta \approx 0^\circ$ e $\phi \approx 0^\circ$



Fonte: autoria própria.

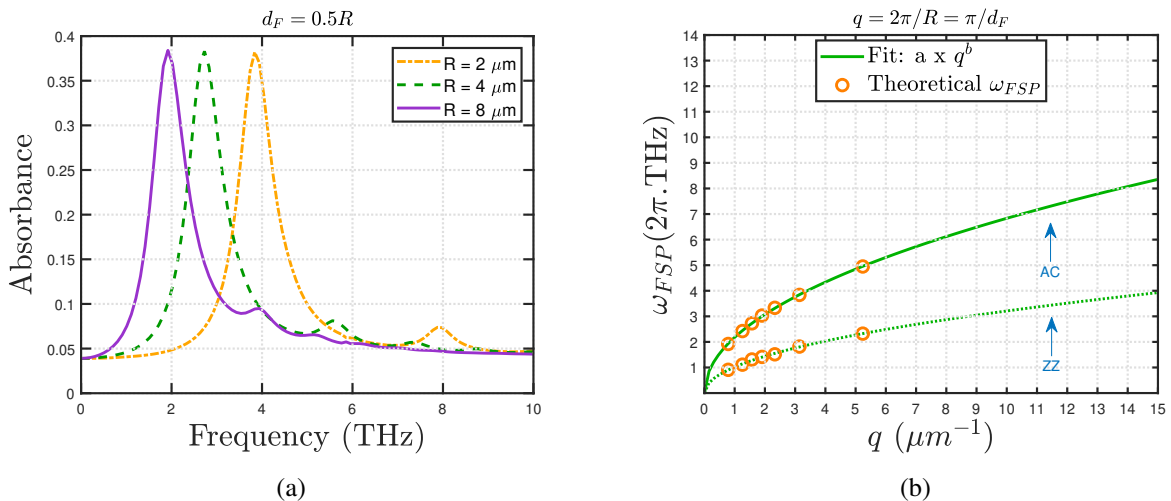
Na figura 34a vemos que há um aumento nos picos de absorbância com o aumento da densidade eletrônica n_e bem como há um aumento nas frequências associadas aos picos. Comparando com a figura 26a, nota-se que as curvas são bem mais afastadas para o caso da

nanofita periódica de fosforeno.

Na figura 34b apresentamos os valores das frequências de ressonância de plásmons no fosforeno, círculos azuis obtidos a partir dos primeiros picos de absorbância de cada curva, em função da densidade eletrônica para os casos em que a direção AC e ZZ são paralelas à periodicidade. As curvas vermelhas apresentam o ajuste de função usando um formato do tipo $constante \times n_e^b$. Para o caso da direção AC (curva vermelha cheia) obtemos $b = 0.4950$ e para o caso da direção ZZ (curva vermelha pontilhada) obtemos $b = 0.4921$, em ambos os casos podemos aproximar $b \approx 0.5$. Tal resultado está em conformidade com os da ref. (LOW *et al.*, 2014a) apresentados na figura 19b, onde nota-se que o fosforeno monocamada obedece a relação $\omega_{FSP} \sim n_e^{\frac{1}{2}}$ diferentemente do grafeno que obedece $\omega_{GSP} \sim n_e^{\frac{1}{4}}$.

A figura 35 mostra o comportamento da absorbância quando o parâmetro analisado é a constante de rede R .

Figura 35 – Em (a) temos as curvas de absorção no fosforeno para diferentes valores de R com a direção AC paralela à periodicidade. Em (b) vemos os valores das frequências de ressonância para a primeira ordem de difração ($n = 1$) em termos de $k_{x,1} \equiv q$ e sua respectiva função de ajuste $a \times q^b$. As constantes utilizadas são $\Gamma = 3$ meV, $n_e = 1.5 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$, $\epsilon_1 = 10$, $\epsilon_2 = 1$, $\theta \approx 0^\circ$ e $\phi \approx 0^\circ$. Mantemos a largura da nanofita em $d_F = R/2$



Fonte: autoria própria.

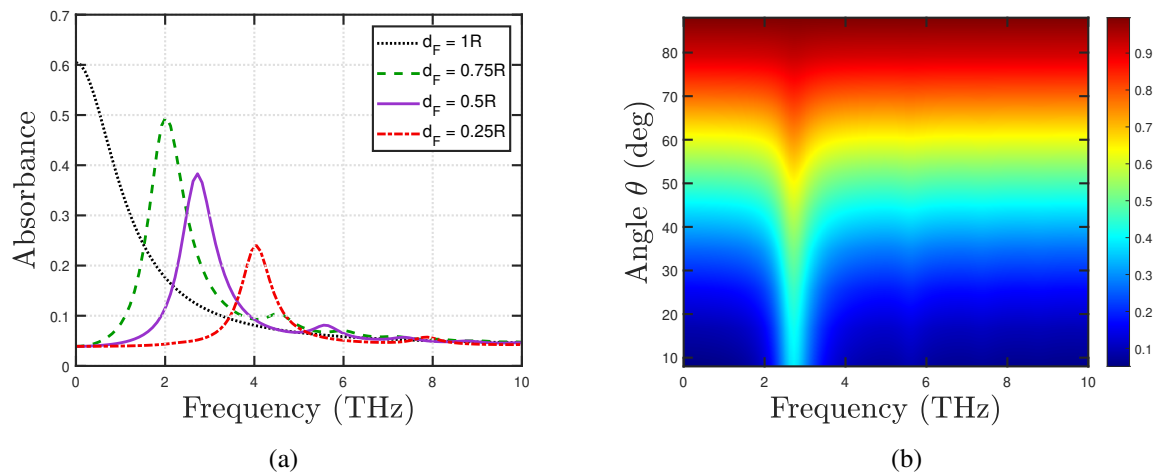
A Fig. 35a apresenta o espectro de absorbância para três valores de R mantendo a direção AC paralela à periodicidade da rede. Note que, assim como no caso do grafeno, os valores máximos de absorbância permanecem inalterados quando muda-se o valor de R e há um aumento no valor das frequências de ressonância de plásmon.

Na fig. 35b os círculos amarelos das frequências de ressonâncias de FSP's na nanofita de fosforeno em função do número de onda q para o caso em que a periodicidade é paralela

à direção AC e ZZ. As linhas verdes cheia e pontilhada são o ajuste de função para a forma $\text{constante} \times q^b$ para os casos das direções AC e ZZ paralelas à periodicidade, respectivamente. O valor de b obtido para a linha cheia foi de 0.4981 e de 0.4983 para a linha pontilhada. Dessa forma, obtemos que a nanofita de monocamada de fosforeno do sistema proposto nesse trabalho obedece a relação de dispersão de plásmons $\omega_{FSP} \sim q^{\frac{1}{2}}$ assim como todo material bidimensional (PERES *et al.*, 2012), (JU *et al.*, 2011), (LOW *et al.*, 2014a).

Finalmente, na Fig. 36 apresentamos o comportamento dos espectros de absorção quando variamos os parâmetros largura da nanofita de fosforeno (d_F) e o ângulo de incidência (θ) mantendo a direção AC paralela à periodicidade e $\phi \approx 0^\circ$.

Figura 36 – Comportamento da absorbância no fosforeno monocamada ao variar os parâmetros d_F e θ com a direção AC paralela à periodicidade. Em (a) usamos $\theta \approx 0^\circ$ e $\phi \approx 0^\circ$ e em (b) $d_F = 0.5R$. As constantes utilizadas são $\Gamma = 3\text{meV}$, $n_e = 1.5 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$, $R = 4\mu\text{m}$, $\epsilon_1 = 10$ e $\epsilon_2 = 1$



Fonte: autoria própria.

Vemos que, assim no caso do grafeno, as frequências de ressonância diminuem a medida que d_F cresce. Os valores de absorbância são maiores para d_F mais elevados devido o aumento da área preenchida por fosforeno na célula unitária de período R .

A Figura 36b mostra que a absorbância tem uma forte dependência do ângulo de incidência θ . No entanto, é importante observar que a frequência de ressonância não sofre alteração com a variação desse parâmetro. Ao variar o ângulo de 0.001° a 16° , observamos que a absorção sofre um aumento quase desprezível. No entanto, para ângulos maiores, a absorção aumenta significativamente. Mas, para ângulos superiores a 70° , os picos de absorbância não se tornam bem definidos, tornando difícil identificar o valor da frequência de plásmon. Esse

aumento da absorbância com o ângulo de incidência na monocamada de fósforo negro também é discutido nos resultados das referências (FENG *et al.*, 2018) e (XIONG *et al.*, 2017), embora o sistema proposto pelos autores seja diferente do que analisamos neste trabalho.

4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Esse trabalho visa o estudo da excitação e manipulação de modos SPP's em um sistema formado por uma interface entre dois meios dielétricos com um material 2D genérico com condutividade ótica modulada espacialmente de forma periódica na interface dos meios dielétricos.

No primeiro capítulo desta dissertação, apresentamos para o leitor as relações de dispersão dos modos transversais elétricos (TE) e transversais magnéticos (TM) na excitação de SPP na interface entre dois meios com constantes dielétricas diferentes, discutindo em quais situações teremos ou não acoplamento da luz com o SPP. Para tal, revisamos as equações de Maxwell e as condições de contorno na interface dos dois meios dielétricos. Apresentamos o modelo de Drude e realizamos essa breve revisão teórica dos modos TE e TM para ambos os casos: na ausência e na presença de grafeno na interface, onde no último as condições de contorno são modificadas. Ao final do Capítulo 1, motivamos o alvo de estudo desta dissertação com trabalhos anteriores reportados na literatura sobre grades metálicas como forma de excitação dos SPP's. Em adição, apresentamos algumas propriedades optoeletrônicas do fosforeno e alguns trabalhos importantes da área da plasmônica em fosforeno, mostrando que as propriedades físicas deste sistema são fortemente anisotrópicas em virtude da natureza anisotrópica das bandas de energia do fosforeno.

No Capítulo 2, desenvolvemos as ferramentas teóricas para lidar com o problema em questão no caso genérico da modulação periódica da condutividade ótica, obedecendo a condição de Bloch $\sigma(x) = \sigma(x + R)$, com R sendo o parâmetro da rede periódica. É importante mencionar que o tal ferramenta é aplicável para qualquer sistema arbitrário 2D com condutividade dependente da posição. Para tal, resolvemos o problema do espalhamento de uma onda eletromagnética incidente, resultando em um sistema de equações lineares, visto como um problema de autovalor generalizado. Os resultados para a transmitância, refletância e absorbância de ondas planas que incidem sobre o sistema específico de uma folha de grafeno com uma condutividade modulada periodicamente em um substrato dielétrico, assemelhando-se a uma estrutura de *gratings*, foram reportados na seção 2.3 para diferentes valores do parâmetro Γ , ângulo de incidência da onda incidente, densidade de carga, largura das nanofitas de grafeno e largura do parâmetro de rede. Mostramos que os resultados apresentados estão em completa concordância quantitativa e qualitativa com aqueles reportados no Capítulo 7 do livro dos pesquisadores N. M. R. Peres e P. A. D. Gonçalves na Ref. (GONÇALVES; PERES, 2016), mostrando que o código computacional

desenvolvido está correto e apto para tratar de outros problemas relacionados.

No Capítulo 3, apresentamos formalismo similar ao desenvolvido no Capítulo 2 mas agora assumindo uma matriz de condutividade para o caso de nanofitas de fosforeno. Investigamos a dependência dos espectros de absorção para o sistema periódico de nanofitas de fosforeno alinhado ao longo das diferentes direções cristalográficas (AC e ZZ) para diferentes parâmetros do problema, tais como: densidade de carga, parâmetro de rede R , e tamanho das nanofitas de fosforeno d_F . Mostramos que (i) a absorbância apresenta valor bem mais altos para o caso AC do que para o caso ZZ, em ambos os casos da folha de fosforeno uniforme e contínua assim como o caso de nanofitas de fosforeno; (ii) a frequência dos plásmons na monocamada de fosforeno obedece uma relação $\omega_{FSP} \approx n^{1/2}$ diferentemente do caso do grafeno que obedece a uma relação $\omega_{GSP} \approx n^{1/4}$ com a densidade de carga; (iii) a absorbância tem uma forte dependência com o ângulo de incidência θ no caso do fosforeno, em virtude da sua natureza anisotrópica.

Como algumas das perspectivas, utilizando o mesmo formalismo empregado nesta dissertação, pretendemos:

- investigar o caso de um sistema periódico formado por diferentes números de camadas de fosforeno;
- investigar o caso de um alinhamento arbitrário em relação as direções cristalográficas além das direções AC e ZZ;
- investigar estruturas quasi-periódicas para o arranjo unidimensional das nanofitas ao longo do eixo x , de forma análoga ao apresentado em redes polaritônicas unidimensionais na Ref. (ALBUQUERQUE; COTTAM, 2004);
- investigar o caso dos modos excitons-plásmons-poláritons ao se considerar por exemplo nanofitas de dicalcogenetos de metais de transição e assumir uma função $\varepsilon(\omega)$.

REFERÊNCIAS

- ALBUQUERQUE, E. L.; COTTAM, M. G. **Polaritons in periodic and quasiperiodic structures**. [S. l.]: Elsevier, 2004.
- ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Solid State Physics**. [S. l.]: Saunders College Publishing, 1976.
- ATWATER, H. A. The promise of plasmonics. **Scientific American**, v. 296, n. 4, p. 56–63, 2007.
- AVOURIS, P.; XIA, F. Graphene applications in electronics and photonics. **Mrs Bulletin**, v. 37, n. 12, p. 1225–1234, 2012.
- BISTRITZER, R.; MACDONALD, A. H. Electronic cooling in graphene. **Physical Review Letters**, v. 102, n. 20, p. 206410, 2009.
- BOZHEVOLNYI, S. I. Localization phenomena in elastic surface-polariton scattering caused by surface roughness. **Phys. Rev. B**, v. 54, p. 8177–8185, 1996.
- CASTRO NETO, A. H. C.; GUINEA, F.; PERES, N. M. R.; NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, v. 81, 2009.
- CHRISTENSEN, J.; MANJAVACAS, A.; THONGRATTANASIRI, S.; KOPPENS, F. H. L.; ABAJO, F. J. G. de. Graphene plasmon waveguiding and hybridization in individual and paired nanoribbons. **ACS Nano**, v. 6, n. 1, p. 431–440, 2012.
- DRUDE, P. Zur elektronentheorie der metalle. **Annalen der Physik**, v. 306, p. 566–613, 1909.
- FALKOVSKY, L. A.; PERSHOGUBA, S. S. Optical far-infrared properties of a graphene monolayer and multilayer. **Physical Review B**, v. 76, n. 15, p. 153410, 2007.
- FANO, U. The theory of anomalous diffraction gratings and of quasistationary waves on metallic surfaces (sommerfeld's waves). **J. Opt. Soc. Am.**, v. 31, p. 213–222, 1941.
- FARHAT, M.; GUENNEAU, S.; BAGCI, H. Exciting graphene surface plasmon polaritons through light and sound interplay. **Phys. Rev. Lett.**, v. 111, p. 237404, 2011.
- FENG, N.; AL. et. Near-unity anisotropic infrared absorption in monolayer black phosphorus with/without subwavelength patterning design. **IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics**, v. 25, n. 3, p. 1–7, 2018.
- GEIM, K. S.; NOVOSELOV, A. K.; MOROZOV, S. V.; JIANG, D.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S. V.; GRIGORIEVA, I. V.; FIRSOV, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. **Science**, v. 306, p. 666, 2004.
- GONÇALVES, P. A. D.; PERES, N. M. M. R. **An introduction to graphene plasmonics**. [S. l.]: World Scientific, 2016.
- GRIFFITHS, D. J. **Eletrodinâmica**. 3. ed. [S. l.]: Person, 1999.
- GUSYNIN, V. P.; SHARAPOV, S. G.; CARBOTTE, J. P. On the universal ac optical background in graphene. **New Journal of Physics**, v. 11, n. 9, p. 095013, 2009.

- JU, L.; GENG, B.; HORNG, J.; GIRIT, C.; MARTIN, M.; HAO, Z.; BECHTEL, H. A.; LIANG, X.; ZETTL, A.; SHEN, Y. R.; WANG, F. Graphene plasmonics for tunable terahertz metamaterials. **Nature Nanotechnology**, v. 6, p. 630–634, 2011.
- KHOA, D. Q. *et al.* Strain engineering of optical activity in phosphorene. **RSC Advances**, v. 9, n. 33, p. 19006–19015, 2019.
- KRETSCHMANN, E. Die bestimmung optischer konstanten von metallen durch anregung von oberflächenplasmaschwingungen. **Zeitschrift für Physik**, v. 241, n. 4, p. 313–324, 1971.
- LEE, I.-H. *et al.* Anisotropic acoustic plasmons in black phosphorus. **ACS Photonics**, v. 5, n. 6, p. 2208–2216, 2018.
- LEE, S. H.; CHOI, M.; KIM, T. T.; LEE, S.; LIU, M.; YIN, X.; MIN, B. Switching terahertz waves with gate-controlled active graphene metamaterials. **Nature materials**, v. 11, n. 11, p. 936–941, 2012.
- LI, L. *et al.* Black phosphorus field-effect transistors. **Nature Nanotechnology**, v. 9, n. 5, p. 372–377, 2014.
- LIU, H. *et al.* Phosphorene: an unexplored 2d semiconductor with a high hole mobility. **ACS Nano**, v. 8, n. 4, p. 4033–4041, 2014.
- LOW, T. *et al.* Plasmons and screening in monolayer and multilayer black phosphorus. **Physical Review Letters**, v. 113, n. 10, p. 106802, 2014.
- LOW, T. *et al.* Tunable optical properties of multilayer black phosphorus thin films. **Physical Review B**, v. 90, n. 7, p. 075434, 2014.
- MAHAN, G. D. **Many-particle physics**. [S. l.]: Springer Science and Business Media, 2000.
- MAIER, S. A. **Plasmonics: fundamentals and applications**. [S. l.]: Springer, 2007.
- MARKOS, P.; SOUKOULIS, C. M. **Wave propagation: from electrons to photonic crystals and left-handed materials**. [S. l.]: Princeton University Press, 2008.
- MENABDE, S.; MASON, D.; KORNEV, E.; LEE, C.; PARK, N. Direct optical probing of transverse electric mode in graphene. **Scientific Reports**, v. 6, p. 21523, 2016.
- NOVOSELOV, K. S. *et al.* Two-dimensional atomic crystals. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 102, n. 30, p. 10451–10453, 2005.
- OTTO, A. Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection. **Z. Physik**, v. 216, p. 398–410, 1968.
- PERES, N. M. R.; FERREIRA, A.; BLUDOV, Y. V.; VASILEVSKIY, M. I. Light scattering by a medium with a spatially modulated optical conductivity: the case of graphene. **J. Phys.: Condens. Matter**, v. 24, p. 245303, 2012.
- PETTIT, R. B.; SILCOX, J.; VINCENT, R. Measurement of surface-plasmon dispersion in oxidized aluminum films. **Phys. Rev. B**, v. 11, p. 3116–3123, 1975.

- PHUONG, L. T. T.; PHONG, T. C.; YARMOHAMMADI, M. Spin-splitting effects on the interband optical conductivity and activity of phosphorene. **Scientific Reports**, v. 10, n. 1, p. 9201, 2020.
- RAETHER, H. **Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings**. Heidelberg: Springer, 1988. 4–39 p.
- RAMÍREZ-DUVERGER, A. S.; GARCÍA-LLAMAS, R. Diseño y construcción de un esparcímetero de luz. **Revista mexicana de física**, v. 50, n. 5, p. 541–548, 2004.
- RAYLEIGH, L. On the dynamical theory of gratings. **Proc. R. Soc. Lond. A**, v. 79, p. 399–416, 1907.
- RITCHIE, R. H. Plasma losses by fast electrons in thin films. **Physical Review**, v. 106, n. 5, p. 874, 1957.
- SCHIEFELE, J.; PEDRÓS, J.; SOLS, F.; CALLE, F.; GUINEA, F. Coupling light into graphene plasmons through surface acoustic waves. **Phys. Rev. Lett.**, v. 111, p. 237405, 2013.
- SOMMERFELD, A. Über die fortpflanzung elektrodynamischer wellen an längs eines drahtes. **Ann. der Physik und Chemie**, v. 67, p. 233–290, 1899.
- STAUBER, T.; PERES, N. M. R.; GUINEA, F. Electronic transport in graphene: A semi-classical approach including midgap states. **Physical Review B**, v. 76, p. 205423, 2007.
- STAUBER, T.; PERES, N. M. R.; GUINEA, F. Optical conductivity of graphene in the visible region of the spectrum. **Physical Review B**, v. 78, n. 8, p. 085432, 2008.
- TRAN, V. *et al.* Tunable band gap and anisotropic optical response in few-layer black phosphorus. **arXiv preprint arXiv:1402.4192**, 2014.
- WOOD, R. W. On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum. **Philosophical Magazine**, v. 4, p. 396–402, 1902.
- WU, Q. *et al.* Electronic and transport properties of phosphorene nanoribbons. **Physical Review B**, v. 92, n. 3, p. 035436, 2015.
- XIONG, F. *et al.* Strong anisotropic perfect absorption in monolayer black phosphorous and its application as a tunable polarizer. **Journal of Optics**, v. 19, n. 7, p. 075002, 2017.
- YAN, H.; LI, X.; CHANDRA, B.; TULEVSKI, G.; WU, Y.; FREITAG, M.; ZHU, W.; AVOURIS, P.; XIA, F. Tunable infrared plasmonic devices using graphene/insulator stacks. **Nature Nanotechnology**, v. 7, p. 330–334, 2012.
- ZAYATS, A. V.; SMOLYANINOV, I. I. Near-field photonics: surface plasmon polaritons and localized surface plasmons. **Journal of Optics A: pure and applied optics**, v. 5, n. 4, p. S16, 2003.
- ZENNECK, J. Über die fortpflanzung ebener elektro-magnetischer wellen langs einer ebenen leiterfläche und ihre beziehung zur drahtlosen telegraphie. **Annalen der Physik**, v. 23, p. 846–866, 1907.