

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

**MACÁRIO VITÓRIO MOTA RODRIGUES**

**PLASMONS DE SUPERFÍCIE LOCALIZADOS EM UMA FOLHA DE GRAFENO**  
**COM UMA DEFORMAÇÃO GAUSSIANA**

Fortaleza

2023

MACÁRIO VITÓRIO MOTA RODRIGUES

Plasmons de superfície localizados em uma folha de grafeno com  
uma deformação gaussiana

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

Co-Orientador: Prof. Dr. André Jorge Carvalho  
Chaves

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)

---

- R614p    Rodrigues, Macário.  
          Plasmons de superfície localizados em uma folha de grafeno com uma deformação gaussiana / Macário Rodrigues. – 2023.  
          99 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.
1. Plasmons de superfície localizados. 2. Grafeno. 3. Deformação. I. Título.
- CDD 530
-

MACÁRIO VITÓRIO MOTA RODRIGUES

PLASMONS DE SUPERFÍCIE LOCALIZADOS EM UMA FOLHA DE  
GRAFENO COM UMA DEFORMAÇÃO GAUSSIANA

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: 27 de Fevereiro de 2023.

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa (Orientador)

Departamento de Física – Universidade Federal do Ceará – Brasil

---

Prof. André Jorge Carvalho Chaves (Coorientador)

Departamento de Física – Instituto Tecnológico de Aeronáutica – Brasil

---

Prof. Dr. Gil de Aquino Farias

Departamento de Física – Universidade Federal do Ceará – Brasil

---

Prof. Dr. Daniel Marchesi de Camargo Neves

Departamento de Engenharia Elétrica – Universidade Federal do Ceará

Campus Sobral – Brasil

*Dedico esta Dissertação aos meus pais.*

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a todas as pessoas que me apoiaram quando eu decidi mudar radicalmente de área acadêmica e seguir uma pós graduação no curso de Física, mesmo não possuindo um diploma de graduação na área, onde adquiri conhecimento apenas estudando de maneira independente através do meu gigantesco entusiasmo pela área.

Agradeço ao meu orientador Prof Diego Rabelo da costa pela orientação, ao Prof Prof. André Jorge Carvalho Chaves pela coorientação e aos membros da banca Prof. Dr. Gil de Aquino Farias e Prof. Dr. Daniel Marchesi de Camargo Neves.

Agradeço ao CNPq pelo apoio financeiro.

“I have looked into most philosophical systems  
and I have seen that none will work without  
God”. (James Clerk Maxwell)

## RESUMO

Devido à estrutura eletrônica única e espessura atômica intrínseca, o grafeno é considerado um excelente material plasmônico e, conseqüentemente, um componente promissor para aplicações tecnológicas polaritônicas relacionadas as interações luz-matéria em nanoescala. Plasmons em grafeno apresentam grandes vantagens, quando comparadas com materiais plasmônicos metálicos 3D padrão, (i) suportando plasmons de superfície fortemente confinados em infravermelho médio e na faixa espectral de THz, (ii) exibindo uma frequência sintonizável de ressonâncias de plasmons através do controle do nível de Fermi por meio de dopagem química ou *gating* eletrostático, e (iii) possuindo uma propagação com uma baixa perda, ou seja, sendo plasmons com tempo de vida longo. Divide-se as excitações plasmônicas em plasmons de superfície localizados e plasmons-poláritons de superfície, caso o modo polaritônico seja uma onda de superfície localizada ou uma onda de superfície propagante, sendo a primeira excitada por iluminação de luz direta e usada para concentrar o campo eletromagnético em certas regiões estreitas. Estudos sobre modos plasmônicos localizados têm sido reportados em nanoestruturas de grafeno com diferentes geometrias e arranjos, isolados ou associados em arranjos periódicos (*grating*), como fitas, discos e anéis. Uma rota alternativa para potencializar ou atenuar as ondas superficiais é a presença de rugosidade na superfície, o que dificilmente é inevitável em qualquer processo experimental de crescimento/preparação em sólidos. A este respeito, vários trabalhos nas décadas de 80 e 90 centraram a sua atenção no sentido de examinar as conseqüências de superfícies rugosas/onduladas nas propriedades polaritônicas das ondas localizadas e propagantes. Eles observaram que tais modos estão espacialmente localizados na vizinhança dos defeitos (protuberância/ranhura/saliência, indentação/cunha) e que as frequências desses modos e as distribuições dos campos associadas a eles dependem da forma e das dimensões do defeito. Neste contexto, investigamos neste trabalho as conseqüências no espectro de plasmons-poláritons do grafeno considerando uma folha de grafeno corrugada. Dentro da aproximação eletrostática, nossa abordagem teórica nos permite considerar diferentes formas de superfícies rugosas com perfis unidimensionais ou bidimensionais. Assumimos que a folha de grafeno é corrugada para formar uma ranhura Gaussiana unidimensional localizada na interface entre o vácuo e um substrato dielétrico. Resultados para a relação de dispersão e o comportamento dos campos elétrico e magnético para diferentes parâmetros geométricos são discutidos e comparados com os modos de plasmons-poláritons de grafeno planar.

**Palavras-chave:** Plasmons de superfície localizados; Grafeno; deformação.

## ABSTRACT

Due to the unique electronic structure and intrinsic atomic thickness, graphene is considered an excellent plasmonic material and, consequently, a promising component for technological polaritonic applications related to light-matter interactions at the nanoscale. Plasmons in graphene present great advantages, when compared with standard 3D metallic plasmonic materials, (i) supporting strongly confined surface plasmons in mid-IR and in the THz spectral range, (ii) exhibiting a tunable frequency of plasmon resonances by controlling its Fermi level by means of chemical doping or electrostatic gating, and (iii) possessing a roughly low-loss propagation, i.e. being long-lived plasmons. One divides the plasmonic excitations into localized surface plasmons and surface plasmon polaritons, whether the polaritonic mode is a localized or a propagating surface wave, being the former excited by direct light illumination and used to concentrate the electromagnetic field in certain narrow regions. Studies concerning localized plasmonic modes have been reported in graphene nanostructures with different geometries and arrangements, isolated or partnered in periodic arrays (grating), such as ribbons, disks, and rings. An alternative route to enhance or attenuate the surface waves is the presence of roughness on the surface, which is hardly inevitable in any experimental growing/preparation process in solids. In this regard, several works in the 80s and 90s focused their attention in order to examine the consequences of rough/corrugated surfaces on the polaritonic properties of the localized and propagating waves. They observed that such modes are spatially localized in the vicinity of the defects (protuberance/groove/bump, indentation/wedge) and that the frequencies of these modes and the field distributions associated with them depend on the shape and dimensions of the defect. In this context, we investigate in this work the consequences of the spectrum of plasmon-polaritons in graphene by considering a corrugated graphene sheet. Within the electrostatic approximation, our theoretical approach allows us to consider different shapes of rough surfaces, with one-dimensional or two-dimensional profiles. We assume that the graphene sheet is corrugated to form a Gaussian one-dimensional groove localized in the interface between the vacuum and a dielectric substrate. Results for the dispersion relation and the behavior of the electric and magnetic fields for different geometric parameters are discussed and compared with planar graphene plasmon-polariton modes.

**Keywords:** Localized surface plasmons; Graphene; deformation.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Distribuição das cargas nas superfícies inferior e superior do filme metálico que gera um campo elétrico que irá ditar o movimento oscilatório das cargas.....	17
Figura 2 - Condições de contorno dos campos elétrico (painéis da esquerda) e magnético (painéis da direita).....	24
Figura 3 - Ilustração de um plasmon-polariton de superfície se propagando numa interface metal ( $z < 0$ ) - dielétrico ( $z > 0$ ) com constantes dielétricas $\epsilon_2$ e $\epsilon_1$ , respectivamente.....	26
Figura 4 - Ilustrações dos modos (a) TE e (b) TM para ondas planas incidindo em uma interface-metal-dielétrico. As direções dos momentos incidentes ( $k_1^+$ ), refletidos ( $k_1^-$ ) e transmitidos ( $k_2^+$ ) são apresentados, assim como as direções dos campos elétricos e magnéticos e os ângulos de incidência, reflexão e transmissão.....	26
Figura 5 - Relação de dispersão para um plasmon-polariton de superfície numa interface vácuo-metal. A curva amarela corresponde à relação de dispersão da luz no vácuo, enquanto que a curva azul corresponde a relação de dispersão do plasmon polariton de superfície. O modo de superfície é limitado pela região onde $\omega < \omega_p/\sqrt{2}$ [curva preta tracejada - Eq. (1.42)].....	31
Figura 6 - Comportamento da componente x do campo elétrico ao longo da direção x tomando $z = 0$ e $t = 0$ na Eq. (1.45a).....	33
Figura 7 - Relação de dispersão dos SPPs para o (painel da esquerda) ouro e (painel da direita) cobre. Para o ouro, tem-se que $\omega_p = 1.37 \times 10^{16}$ Hz e $\gamma = 1.07 \times 10^{14}$ Hz. Para o cobre, tem-se que $\omega_p = 1.34 \times 10^{16}$ Hz e $\gamma = 1.5 \times 10^{14}$ Hz.....	34
Figura 8 - Relação de dispersão de SPPs (plasmon-polaritons de superfície) em uma interface vácuo-metal. Três regiões diferentes são apresentadas: $\omega < \omega_p/\sqrt{2}$ que hospedam os SPPs (azul), $\omega_p/\sqrt{2} < \omega < \omega_p$ em que não existe propagação eletromagnética (verde), $\omega > \omega_p$ que hospedam os plasmon-polaritons de volume(verde).....	36
Figura 9 - Ilustração de uma folha de grafeno encapsulada por dois meios dielétricos semi infinitos com constantes dielétricas $\epsilon_1$ ( $z < 0$ ) e $\epsilon_2$ ( $z > 0$ ). A folha de grafeno se encontra no plano $z = 0$ . Figura adaptada da Ref (Gonçalves, 2016).....	38
Figura 10 - Relação de dispersão para os plasmon-polaritons de superfície no grafeno (curva sólida azul) em um sistema composto por um interface formada por ar-grafeno- ar. A curva tracejada amarelada corresponde a dispersão da luz.....	41

Figura 11 - Relação de dispersão para o modo TM de GSPs em uma interface ar-grafeno-ar para diferentes valores de dumping $\gamma$ . Parâmetros $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$ e $E_F = 0.45$ eV. Figura - 12 Uma protuberância na superfície de um filme metálico em um substrato dielétrico semi-infinito. Figura adaptada da Ref (Maradudin, 1985).....	44
Figura 12 - Uma protuberância na superfície de um filme metálico em um substrato dielétrico semi-infinito. Figura adaptada da Ref (Maradudin, 1985).....	47
Figura 13 - Relação de dispersão para o sistema vácuo-metal -dielétrico (painel da esquerda) sem deformação nas interfaces e (painel da direita) deformado como ilustrado na Fig. 12, apresentando os três primeiros modos plasmônicos. Figura adaptada da Ref (Maradudin, 1985).....	47
Figura 14 - Plasmons de canais. Relação de dispersão para o sistema vácuo -metal -dielétrico com uma deformação do tipo (painéis da esquerda) gaussiana e (painéis da direita) poço quadrado. Painéis superiores e inferiores correspondem aos modos pares e ímpares, respectivamente. Figura adaptada da Ref (Maradudin, 1990).....	48
Figura 15 - Deformação $\zeta(x, y)$ do tipo (a) protuberância e (b) indentação no substrato dielétrico com constante dielétrica $\epsilon(\omega)$ e de espessura $d$ . Uma folha plana de grafeno é localizada em $z = 0$ entre os meios dielétricos 1 e 2. Figura adaptada da Ref. (Chaves, Peres, Costa et al., 2018) .....	49
Figura 16 - Relação de dispersão para os plasmons localizados. A curva vermelha sólida $\Gamma(q_y, \omega) = 0$ é a solução para o caso não deformado. As curvas azuis tracejadas correspondem aos modos plasmônicos localizados para o caso deformado. Frequências acima da curva analítica correspondem a modos contínuos. Os parâmetros usados foram: $\epsilon_1 = 1.4$ , $\epsilon_2 = 1$ , $\epsilon = 4$ , $E_F = 0.2\text{eV}$ , $d = 2 \mu\text{m}$ , $R = 250 \mu\text{m}$ e $\zeta_0 = 25 \mu\text{m}$ . Figura adaptada da Ref. (Chaves, Peres, Costa <i>et al.</i> , 2018).....	49
Figura 17 - Potencial e campo elétricos dos plasmon-polártons de superfície para o sistema ilustrado na Fig. 15(a). A linha preta mostra o limite entre as regiões dos dielétricos, $\epsilon_1$ e $\epsilon$ , e a linha dourada representa a folha de grafeno. Os resultados são para a primeira solução par. Painéis: (a) Campo do Potencial; Componentes (b) x e (c) z do campo elétrico; (d) Quadrado do valor absoluto do campo elétrico. Parâmetros: $\epsilon_1 = 1.4$ , $\epsilon_2 = 1$ , $d = 2 \mu\text{m}$ , $R = 250 \mu\text{m}$ , $\zeta_0 = 25 \mu\text{m}$ e $q_y = 0.4 \mu\text{m}^{-1}$ . Figura adaptada da Ref (Chaves, Peres, Costa et al., 2018).....	50
Figura 18 - (a) Vista esquemática de um substrato curvo coberto por grafeno, correspondendo a uma superfície curva unidimensional. (b) Distribuição do campo magnético normalizado para duas interfaces deformadas, uma com protuberância (cima) e um declive (baixo), obtidos analiticamente. (c) Distribuição da densidade de cargas dos modos de canais para os sistemas	

do painel (b) só que estes foram obtidos através de simulação numérica utilizando-se o programa COMSOL. Figura adaptada da Ref (Smirnova et al., 2016).....	51
Figura 19 - No painel da esquerda temos o esquema experimental utilizado para medir a distribuição de intensidade dos plasmon-polaritons de superfície para uma (a) protuberância e um (b) declive. Essa medida é realizada usando um microscópio de varredura de campo próximo (NSOM). No painel da direita temos os resultados experimentais (c-g) e de simulações numéricas (a-b) desse sistema. Figura adaptada da Ref (Hershko; Shiloh; Arie, 2019).....	52
Figura 20 - Ilustração da geometria do problema, retratando um substrato com deformação suave gaussiana onde está depositado uma folha de grafeno. O perfil da superfície desta deformação 1D é caracterizado pela função $\zeta(x)$ . O vetor unitário $n$ é normal à modulação de superfície, enquanto o vetor unitário $t$ é tangente a ela. Figura adaptada da ref (Gonçalves, 2016).....	55
Figura 21 - Potencial e Campos Elétricos do Plasmon localizado, modo par. Parâmetros: $\epsilon_1=1$ , $\epsilon_2 = 2$ , $A/R = 0.1$ .....	93
Figura 22 - Potencial e Campos Elétricos do Plasmon localizado, modo ímpar. Parâmetros: $\epsilon_1=1$ , $\epsilon_2= 2$ , $A/R= 0.1$ .....	94
Figura 23 - Relação de dispersão para o plasmon de superfície para dois valores de $A/R$ , modos Pares. $\epsilon_1 = 1$ , $\epsilon_2 = 2$ e $R = 250\mu\text{m}$ .....	96
Figura 24 - Relação de dispersão para o plasmon de superfície para dois valores de $A/R$ , modos ímpares. $\epsilon_1 = 1$ , $\epsilon_2 = 2$ e $R = 250\mu\text{m}$ .....	96

## Lista de Abreviações

$1D$	Unidimensional
$2D$	Bidimensional
SPP	<i>Surface Plamons Polariton</i>
GSP	<i>Graphene Surface Plamons</i>
LSP	<i>Localized Surface Plasmons</i>
TE	<i>Transverse Electric Mode</i>
TM	<i>Transverse Magnetic Mode</i>
EELS	<i>Electron Energy-Loss Spectroscopy</i>
THz	Terahertz

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO.....</b>	<b>16</b>
<b>1.1</b>	<b>Introdução a plasmônica.....</b>	<b>16</b>
<b>1.2</b>	<b>Ondas eletromagnéticas na matéria.....</b>	<b>19</b>
<b>1.3</b>	<b>Condições de contorno.....</b>	<b>24</b>
<b>1.4</b>	<b>Plasmon-polaritons de superfície na interface metal - dielétrico.....</b>	<b>25</b>
<i>1.4.1</i>	<i>Modo TM.....</i>	<i>27</i>
<i>1.4.2</i>	<i>Modo TE.....</i>	<i>34</i>
<i>1.4.3</i>	<i>Plasmon-polaritons de volume: Modo TM.....</i>	<i>36</i>
<b>1.5</b>	<b>Plasmon-polariton de superfície na interface dielétrico - Grafeno - dielétrico..</b>	<b>37</b>
<i>1.5.2</i>	<i>Modo TM.....</i>	<i>38</i>
<i>1.5.2</i>	<i>Modo TE.....</i>	<i>42</i>
<b>1.6</b>	<b>Exemplos: Plasmons de superfície localizados em sistemas com deformações..</b>	<b>45</b>
<i>1.6.1</i>	<i>Plasmon-polaritons de superfície em uma interface com deformação bidimensional.....</i>	<i>46</i>
<i>1.6.2</i>	<i>Plasmons de canais: Interface com deformação unidimensional.....</i>	<i>47</i>
<i>1.6.3</i>	<i>Plasmons de canais em grafeno plano e substrato com deformação unidimensional.....</i>	<i>48</i>
<i>1.6.4</i>	<i>Plasmons de canais em grafeno curvo.....</i>	<i>50</i>
<i>1.6.5</i>	<i>Plasmon-polaritons de superfície em superfícies curvas: Investigação experimental.....</i>	<i>52</i>
<b>1.7</b>	<b>Escopo do trabalho.....</b>	<b>53</b>
<b>2</b>	<b>MODELO TEÓRICO: PLASMONS DE SUPERFÍCIE LOCALIZADOS EM UMA FOLHA DE GRAFENO DEFORMADA.....</b>	<b>54</b>
<b>2.1</b>	<b>Caracterização da Superfície Rugosa.....</b>	<b>54</b>
<b>2.2</b>	<b>Formulação do problema.....</b>	<b>57</b>
<b>2.3</b>	<b>Teorema de Green, funções de Green e o problema do autovalor.....</b>	<b>61</b>

<b>3</b>	<b>SOLUÇÃO NUMÉRICA E RESULTADOS.....</b>	<b>82</b>
<b>3.1</b>	<b>Solução Numérica.....</b>	<b>82</b>
<b>3.2</b>	<b>Resultados.....</b>	<b>91</b>
<b>4</b>	<b>CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS.....</b>	<b>97</b>
	<b>REFERÊNCIAS.....</b>	<b>99</b>

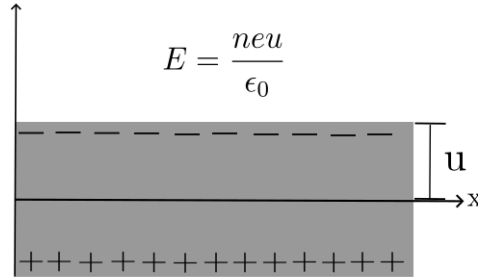
# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 Introdução a Plasmônica

O revolucionário desenvolvimento das equações de Maxwell no fim do século XIX foi o precursor para o surgimento dos primeiros trabalhos no ramo da plasmônica. Na virada do século XX tivemos os trabalhos de A. Sommerfeld e J. Zenneck sobre a propagação de ondas eletromagnéticas ao longo da superfície de um condutor (Sommerfeld; Zenneck, 1899, 1907). Simultaneamente, em 1902, R. H. Wood relatou a observação de quedas anômalas de intensidade no espectro da luz visível difratadas por uma grade metálica, que ficaram conhecidas como anomalias de Wood (Wood, 1902). No entanto, Wood foi incapaz de desenvolver qualquer interpretação para esse fenômeno.

A plasmônica é um ramo da Física que se dedica a estudar excitações na matéria denominadas de plasmons e os possíveis acoplamentos que estas excitações fazem com outras quasipartículas. Os plasmons são modos de oscilação do plasma. O plasma é um meio com concentração igual de cargas positivas e negativas, sendo que pelo menos um dos dois tipos de cargas é móvel. Nos sólidos, as cargas negativas dos elétrons de condução são compensadas pelas cargas positivas dos íons da rede cristalina. Uma oscilação de plasma em um metal é uma excitação longitudinal coletiva do gás de elétrons de condução (Kittel, 2013) que se origina quando elétrons no nível de Fermi são deslocados do equilíbrio, gerando uma força elétrica restauradora que irá regir um movimento oscilatório com uma determinada frequência  $\omega_p$ , denominada de frequência de plasma, que depende do metal analisado. Numa primeira descrição simplificada, imaginemos um filme metálico submetido a um campo elétrico uniforme, o que faz produzir densidades superficiais de carga  $-neu$  na superfície superior da placa e  $+neu$  na superfície inferior, onde  $n$  é a concentração de elétrons. Se o campo elétrico for removido, a força elétrica existente no interior do metal devido a polarização das cargas atuará como uma força restauradora, fazendo com que os elétrons executem um movimento oscilatório semelhante ao de um oscilador harmônico. Considerando um modelo de gás de elétrons livres (assim não teremos

Figura 1: Distribuição das cargas nas superfícies inferior e superior do filme metálico que gera um campo elétrico que irá ditar o movimento oscilatório das cargas.



Fonte: Elaborado pelo autor

efeitos de amortecimento do movimento) teremos a seguinte equação de movimento

$$nm \frac{d^2 u}{dt^2} = -neE = -\frac{n^2 e^2 u}{\epsilon_0}, \quad (1.1)$$

onde  $m$  é a massa do elétron,  $u$  é o deslocamento sofrido pelos portadores de carga, como esquematizado na Fig. ??, e o campo elétrico homogêneo em termos da densidade superficial é escrito como  $E = ne u / \epsilon_0$ , com  $\epsilon_0$  sendo a constante de permissividade do vácuo. Definindo  $\omega_p^2 = \frac{ne^2}{m\epsilon_0}$ , temos que a Eq. (1.1) torna-se uma equação de movimento de um oscilador harmônico simples com frequência  $\omega_p$ :

$$\frac{d^2 u}{dt^2} + \omega_p^2 u = 0, \quad (1.2)$$

em que a frequência de plasma pode ser vista como a frequência natural de oscilação livre do mar de elétrons. Nesta abordagem, assumiu-se que todos os elétrons movem-se em fase e assim  $\omega_p$  corresponde a frequência de oscilação no limite de grandes comprimentos de onda.

Os plasmons podem ser excitados através de bombardeamento de elétrons com elevada energia cinética sobre um condutor (Powell; Swan, 1959, 1957) ou através da interação com a luz, como é relatado em trabalhos pioneiros realizados nos anos 1950 e 1960 (Hessel e Oliner; Ritchie, 1965, 1968). Quando os plasmons se acoplam com a luz, temos a formação dos modos denominados de **plasmons-Polárítons**, que podem ser divididos em dois tipos: **Plasmons-Polárítons de Volume** (*bulk PPs*) e **Plasmons-Polárítons de Superfície** (SPPs, sigla em inglês para *surface plasmons-polaritons*). Os *bulk PPs* correspondem as excitações eletromagnéticas ao longo de todo o volume do material, já os SPPs, cujo é o foco de estudo desse trabalho, são ondas eletromagnéticas de superfície acopladas as excitações coletivas de carga dos elétrons de condução, propagando-se ao longo da interface entre um dielétrico e um condutor (Gonçalves,

2016).

O limite de difração de Abbe dita o limite máximo de confinamento de luz propagante em um meio isotrópico, independente da qualidade do instrumento óptico (Beyond the diffraction limite; Gramotev, 2009,2010). Isto limita o uso de luz para aplicações nanométricas, pois é necessário usar radiação com comprimentos de onda nessa ordem de grandeza para evitar os efeitos da difração da luz nas análises, o que acaba exigindo uso de altas frequências, o que muitas vezes é desvantajoso, pois pode haver deteriorização da amostra analisada. Uma das soluções para ir além desse limite é acoplar a luz com plasmons (Kawata; Y. Inouye; P. Verma, 2009), formando os modos de plasmons-polaritons, como relatado anteriormente. Dessa maneira, é possível reduzir o comprimento de onda da radiação utilizada mantendo sua frequência constante, como veremos na próxima seção.

Os plasmons-polaritons se comportam como ondas evanescentes, ou seja, a intensidade dos campos eletromagnéticos decai exponencialmente a medida que nos afastamos da interface, e dessa maneira, temos ondas confinadas na interface do sistema. Como veremos posteriormente, a presença de um condutor é um ingrediente fundamental para a existência desses modos plasmônicos, pois os elétrons da banda de condução irão interagir mais fortemente com os campos eletromagnéticos externos, possibilitando assim um acoplamento mais intenso. Por outro lado, se tivermos somente dielétricos no sistema, esse acoplamento luz-matéria é bem mais difícil de ocorrer, visto a baixa condutividade desses materiais.

Após o estudo teórico dos plasmons juntamente com sua descoberta experimental e o avanço tecnológico, observou-se que eles possuíam grande potencial para serem utilizados em dispositivos de processamento, transmissão de informações e para detecção bioquímica, além de que esses dispositivos levam vantagem em relação aos aparelhos fotônicos tradicionais, tanto no que se refere a velocidade de resposta e tamanho (Surface plasmon circuitry, 2008). Como um exemplo importante, em aplicações no campo da Química e Bioquímica temos a técnica de ressonância de plasmons de superfície (SPR), que é amplamente usada para a formação de biosensores e sensores químicos, e possui um elevado grau de sensibilidade nas detecções de diversas substâncias (Y. Zhao *et al.*, 2013).

Dentre os dois mencionados plasmons-polaritons, neste trabalho focaremos nossa investigação nos plasmons-polaritons de superfície. Para tal, introduziremos nas próximas seções uma série de conceitos fundamentais para um melhor entendimento desses modos antes de entrarmos no objetivo desse trabalho.

## 1.2 Ondas eletromagnéticas na matéria

As interações da luz com a matéria são descritas pelas equações de Maxwell. No sistema internacional de medidas (SI), elas tomam a seguinte forma (Griffiths, 1989).

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho, \quad (1.3a)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (1.3b)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (1.3c)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J}, \quad (1.3d)$$

que relacionam os seguintes campos macroscópicos: o deslocamento elétrico  $\vec{D} \equiv \vec{D}(\vec{r}, t)$ , o campo elétrico  $\vec{E} \equiv \vec{E}(\vec{r}, t)$ , o campo magnético  $\vec{H} \equiv \vec{H}(\vec{r}, t)$ , e o vetor indução magnética  $\vec{B} \equiv \vec{B}(\vec{r}, t)$ .  $\vec{J} \equiv \vec{J}(\vec{r}, t)$  e  $\rho \equiv \rho(\vec{r}, t)$  correspondem a densidade de corrente e densidade de carga, respectivamente, e satisfazem a equação de continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0, \quad (1.4)$$

devido a lei de conservação de carga.

Se o meio é linear, podemos escrever as seguintes relações constitutivas

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E}, \quad (1.5a)$$

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu} \vec{B}, \quad (1.5b)$$

tal que as as equações de Maxwell (1.3a)-(1.3d) na situação em que não há cargas livres ( $\rho = 0$ ) ou correntes livres ( $\vec{J} = 0$ ) ficam

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0, \quad (1.6a)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (1.6b)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (1.6c)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu\epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (1.6d)$$

onde  $\epsilon$  é a permissividade do material e  $\mu$  é a permeabilidade magnética do meio.

Através das quatro expressões (1.6a)-(1.6d), obtemos as seguintes equações para as ondas eletromagnéticas em meios lineares

$$\nabla^2 \vec{E} = \mu\epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}, \quad (1.7a)$$

$$\nabla^2 \vec{B} = \mu\epsilon \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}, \quad (1.7b)$$

onde utilizamos a igualdade  $\nabla^2 \vec{V} = \nabla(\nabla \cdot \vec{V}) - \nabla \times \nabla \times \vec{V}$ , com  $\vec{V} = \{\vec{E}, \vec{B}\}$ .

Na obtenção das equações para as ondas eletromagnéticas em meios condutores, devemos utilizar as expressões (1.3a)-(1.3d) ao invés das Eqs. (1.6a)-(1.6d), pois agora tem-se elétrons livres na banda de condução, tal que quando um campo eletromagnético penetra em um condutor surgem densidades de corrente  $\vec{J}$  e de carga  $\rho$  não nulas. Assumindo que o meio condutor obedece a lei de Ohm

$$\vec{J} = \sigma \vec{E}, \quad (1.8)$$

obtemos as seguintes equações para os campos desacoplados

$$\begin{aligned} \nabla^2 \vec{E} &= \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla \times \nabla \times \vec{E} \\ &= \frac{\nabla \rho}{\epsilon} - \nabla \times \left( -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right) \\ &= \frac{\nabla \rho}{\epsilon} + \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \vec{B}) \\ &= \frac{\nabla \rho}{\epsilon} + \frac{\partial}{\partial t} \left( \mu \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \mu \vec{J} \right) \\ &= \frac{\nabla \rho}{\epsilon} + \mu \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2} + \mu \frac{\partial \vec{J}}{\partial t} \\ &= \frac{\nabla \rho}{\epsilon} + \mu\epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} + \mu\sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (1.9a)$$

e

$$\begin{aligned}
\nabla^2 \vec{B} &= \nabla(\nabla \cdot \vec{B}) - \nabla \times \nabla \times \vec{B} \\
&= -\nabla \times \left( \mu \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \mu \vec{J} \right) \\
&= -\mu \nabla \times \left( \frac{\partial(\epsilon \vec{E})}{\partial t} + \sigma \vec{E} \right) \\
&= -\mu \left( \epsilon \frac{\partial}{\partial t} + \sigma \right) (\nabla \times \vec{E}) \\
&= -\mu \left( \epsilon \frac{\partial}{\partial t} + \sigma \right) \left( -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right) \\
&= \mu \epsilon \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} + \mu \sigma \frac{\partial \vec{B}}{\partial t},
\end{aligned} \tag{1.9b}$$

onde  $\sigma$  corresponde o tensor condutividade, que em geral depende da frequência e do momento no espaço de Fourier [ $\sigma \equiv \sigma(\vec{q}, \omega)$ ] ou da posição e do tempo no espaço real [ $\sigma \equiv \sigma(\vec{r}, t)$ ].

Vamos também assumir uma dependência temporal harmônica para os campos do tipo  $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(r)e^{-i\omega t}$  e  $\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{B}(r)e^{-i\omega t}$ , que equivale a assumir ondas monocromáticas com frequência  $\omega$ . Daí, obtem-se a seguinte relação entre as derivadas primeira e segunda dos campos com relação ao tempo

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{i}{\omega} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}, \tag{1.10a}$$

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \frac{i}{\omega} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}. \tag{1.10b}$$

Substituindo as Eqs. (1.10a) e (1.10b) nas Eqs. (1.9a) e (1.19), encontramos que as equações para a propagação eletromagnética nesses condutores são dadas por

$$\nabla^2 \vec{E} = \mu \epsilon_m \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} + \frac{\nabla \rho}{\epsilon}, \tag{1.11a}$$

$$\nabla^2 \vec{B} = \mu \epsilon_m \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}, \tag{1.11b}$$

onde definimos uma nova permissividade elétrica para os condutores ôhmicos dada por

$$\epsilon_m = \epsilon + \frac{\sigma i}{\omega}. \tag{1.12}$$

De acordo com a equação da continuidade (1.4) e Eq. (1.3a), para condutores ôhmicos [Eq. (1.8)] temos que

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J} = -\sigma \nabla \cdot \vec{E} = -\sigma \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{\epsilon}, \quad (1.13)$$

resultando em uma equação diferencial de primeira ordem para a densidade de carga, cuja solução é dada por

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_0(\mathbf{r}) e^{-(\sigma/\epsilon)t}. \quad (1.14)$$

Note pela Eq. (1.14) para condutores ôhmicos, que em geral possuem altos valores de condutividade  $\sigma$ , que a densidade de carga irá se dissipar muito rapidamente com relação ao tempo de acordo com o parâmetro  $\sigma/\epsilon$ . Dessa maneira, podemos considerar que  $\rho(\mathbf{r}, t) \approx 0$  e assim simplificar a Eq. (1.11a), tal como

$$\nabla^2 \vec{E} = \mu \epsilon_m \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}. \quad (1.15)$$

Observe que agora temos uma equação de onda tal qual a que descreve os meios dielétricos, com a diferença que no presente caso a permissividade elétrica possui dependência com a frequência e é um número complexo, diferentemente do caso para os meios dielétricos em que suas permissividades assumem valores reais e não negativos. Outro aspecto importante é que a condutividade elétrica em condutores também possui dependência com a frequência da onda eletromagnética, de acordo com o modelo de drude (Gonçalves, 2016).

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m_e(1 - i\omega\tau)}, \quad (1.16)$$

onde  $m_e$  é a massa do elétron e  $\tau$  é um parâmetro fenomenológico conhecido como tempo de relaxamento, que por sua vez está relacionado com o amortecimento do movimento via colisões numa tratativa clássica, dado por  $\tau = 1/\gamma$ . Das Eqs. (1.16) e (1.12), temos que a permissividade elétrica pode ser escrita explicitamente em termos da frequência  $\omega$ , como

$$\epsilon_m = \epsilon + \frac{ine^2\tau}{m_e\omega(1 - i\omega\tau)}. \quad (1.17)$$

O modelo de drude considera que os elétrons do condutor se comportam como um gás de elétrons livres. A polarização de um meio linear e sua permissividade elétrica são dados respec-

tivamente por

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{E}, \quad (1.18a)$$

$$\epsilon = \epsilon_0(1 + \chi). \quad (1.18b)$$

Como estamos trabalhando num modelo que considera gás de elétrons livres, o efeito da polarização é nulo, porque não temos dipolos elétricos (já que os elétrons não interagem com cargas positivas). Dessa forma,  $\chi_e = 0$  e conseqüentemente  $\epsilon = \epsilon_0$ . É importante destacar que estamos tratando de uma situação ideal. Sabemos que na realidade os elétrons interagem com o núcleo dos átomos e entre eles mesmos, porém levando em conta que muitos condutores obedecem muito bem ao modelo de Drude, tal aproximação se torna plausível de ser considerada também aqui. Partindo disso, podemos obter a função dielétrica em condutores ôhmicos dividindo ambos os membros da Eq. (1.17) por  $\epsilon_0$ , resultando, após reorganizar os termos, na seguinte expressão

$$\begin{aligned} \epsilon'_m(\omega) &= 1 + \frac{ine^2\tau}{m_e\epsilon\omega(1 - iw\tau)} \\ &= 1 - \frac{\omega_p^2\tau}{i\omega(1 - iw\tau)} \\ &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\left(\frac{i\omega}{\tau} + \omega^2\right)} \\ &= 1 - \frac{\omega_p^2}{(i\omega\gamma + \omega^2)}, \end{aligned} \quad (1.19)$$

onde  $\epsilon'_m = \epsilon_m/\epsilon_0$  e  $\omega_p^2 = \frac{ne^2}{m\epsilon_0}$  corresponde a frequência do plasma do gás de elétrons livres. Observe que agora  $\epsilon'_m$  tem uma dependência com a frequência da radiação, por isso é chamada de função dielétrica. Podemos escrever a Eq. (1.19) como  $\epsilon'_m = \epsilon_r + i\epsilon_i$  onde suas partes real e imaginária são dadas respectivamente por

$$\epsilon_r = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad (1.20a)$$

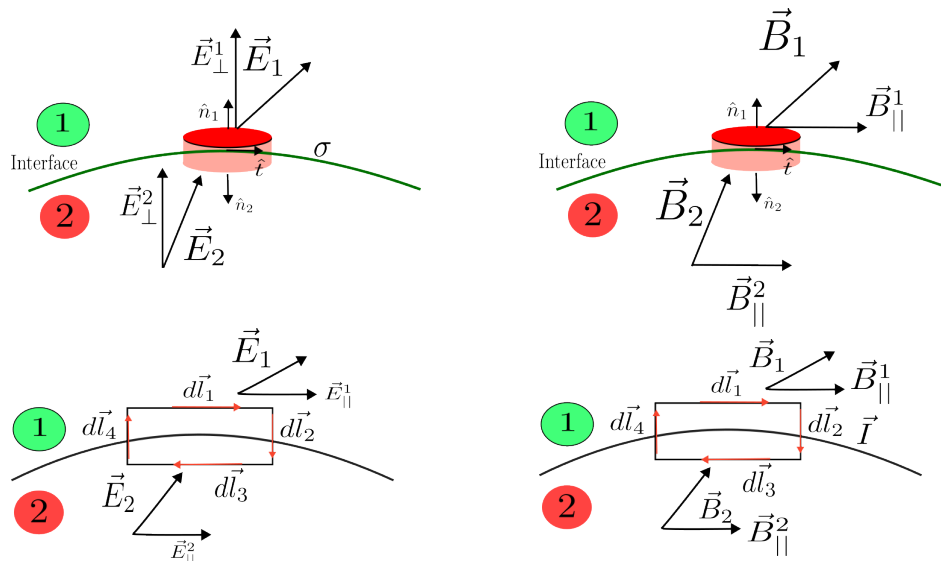
$$\epsilon_i = \frac{\omega_p^2\gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)}. \quad (1.20b)$$

Essa expressão para a permissividade elétrica será muito importante mais a frente quando formos verificar as condições do sistema necessárias para que haja a formação de plasmons-

polártons de superfície, com um destaque importante para o parâmetro  $\gamma$ , cujo é o inverso da taxa de colisão média dos elétrons de acordo com o modelo de Drude. Essa taxa média de colisão corresponde ao tempo médio entre colisões sucessivas dos elétrons em um condutor, que por sua vez está associada ao tempo de vida do plasmon-polárton. Dessa maneira quanto maior essa taxa média de colisão, maior será a diminuição da energia dos elétrons, diminuindo as intensidades das oscilações coletivas e, conseqüentemente, diminuindo as intensidades dos campos. Cada material tem seu  $\gamma$  característico, assim o tempo de vida do plasmon irá variar dependendo do metarial estudado.

### 1.3 Condições de contorno

Figura 2: Condições de contorno dos campos elétrico (painéis da esquerda) e magnético (painéis da direita).



Fonte: Elaborado pelo autor

De acordo com as quatro equações de Maxwell da eletrodinâmica vistas na Seção 1.2, temos as seguintes condições de contorno para uma interface qualquer entre dois meios diferentes (ver Fig. 2) para as componentes normais e tangenciais do campo elétrico são, respectivamente, escritas como [?]

$$\epsilon_1 E_1^\perp - \epsilon_2 E_2^\perp = \sigma_l, \quad (1.21a)$$

$$E_1^\parallel - E_2^\parallel = 0, \quad (1.21b)$$

onde  $E_1^\perp$  e  $E_2^\perp$  são as componentes perpendiculares à interface, enquanto  $E_1^\parallel$  e  $E_2^\parallel$  são as com-

ponentes tangentes à interface.  $\sigma_l$  é a densidade superficial de carga. As equações acima dizem que a componente perpendicular à superfície é descontínua [Eq. (1.21a)], caso haja densidade superficial de carga na interface, enquanto a componente tangente a superfície é contínua [Eq. (1.21b)].

As condições de contorno para as componentes normais e tangenciais do campo magnético são, respectivamente, escritas como [?]

$$B_1^\perp - B_2^\perp = 0, \quad (1.22a)$$

$$\vec{B}_1^\parallel - \vec{B}_2^\parallel = \vec{\kappa} \times \hat{n}, \quad (1.22b)$$

onde  $B_1^\perp$  e  $B_2^\perp$  são as componentes perpendiculares à interface, enquanto  $B_1^\parallel$  e  $B_2^\parallel$  são as componentes tangentes à interface.  $\kappa$  é a corrente superficial de carga e  $\hat{n}$  é o vetor unitário normal à superfície. Para o campo magnético temos que a componente perpendicular é contínua [Eq. (1.22a)] enquanto a componente tangente é descontínua caso haja uma densidade superficial de corrente na interface [Eq. (1.22b)].

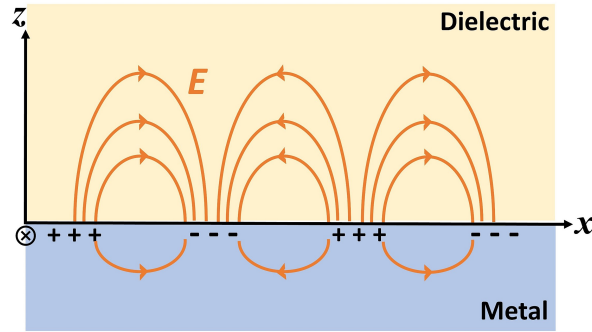
Na Seção 1.4, apresentaremos as soluções das equações de Maxwell que satisfazem as condições para ondas de superfície se propagando na interface entre dois meios. Discutiremos as situações com ou sem amortecimento de tais modos de superfície, isto é, quando o parâmetro  $\gamma$  é zero ou não. Posteriormente, realizaremos o mesmo estudo na presença de um material bi-dimensional na interface entre os dois meios, a fim de verificar a sua influência nas excitações dos plasmons-polárítos de superfície.

#### 1.4 Plasmon-polárítos de superfície na interface metal - dielétrico

Uma onda polaritônica de superfície corresponde a uma perturbação eletromagnética que se propaga ao longo de uma interface entre dois meios e que evanesce (decai exponencialmente) a medida que se distancia da interface. Para melhor entendimento vamos considerar uma única interface, onde esta é plana e ambos os meios são semi-infinitos e isotrópicos. Usando como exemplo a Fig. 3, onde temos o dielétrico ocupando a região  $z < 0$  e o metal a região  $z > 0$ .

Utilizando as equações de Maxwell para cada meio, procuraremos soluções, a priori, do tipo ondas planas. As soluções em ondas planas possuem dois modos importantes, os modos chamados TE (transversal elétrico ou também nomeado polarização do tipo ‘s’) e TM (transversal magnético ou também nomeado polarização do tipo ‘p’). O modo TE ocorre quando as compo-

Figura 3: Ilustração de um plasmon-polárton de superfície se propagando numa interface metal ( $z < 0$ ) - dielétrico ( $z > 0$ ) com constantes dielétricas  $\epsilon_2$  e  $\epsilon_1$ , respectivamente.

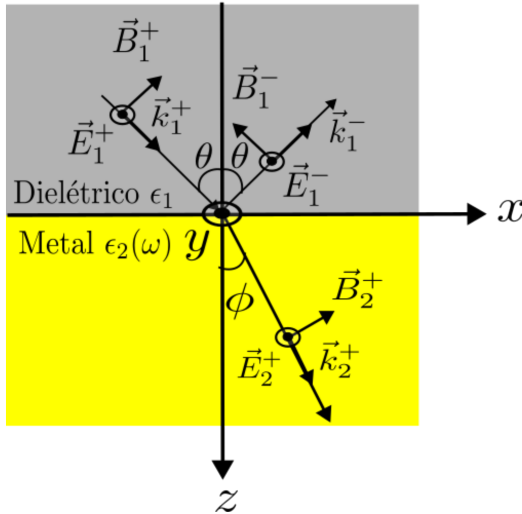


Fonte: Elaborado pelo autor

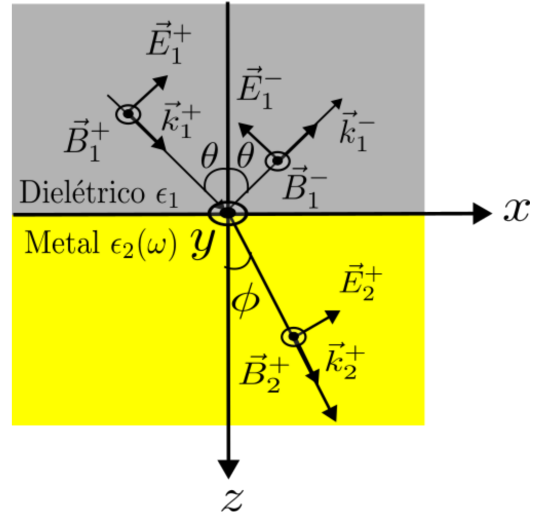
nentes do campo elétrico vibram num plano transversal à direção de propagação [ver Fig. 4(a)]. Já o modo TM corresponde a propagação das componentes do campo magnético em um plano transversal à direção de propagação [ver Fig. 4(b)].

Figura 4: Ilustrações dos modos (a) TE e (b) TM para ondas planas incidindo em uma interface metal - dielétrico. As direções dos momentos incidentes ( $k_1^+$ ), refletidos ( $k_1^-$ ) e transmitidos ( $k_2^+$ ) são apresentadas, assim como as direções dos campos elétricos e magnéticos e os ângulos de incidência, reflexão e transmissão.

(a) Polarização-s (modo TE)



(b) Polarização-p (modo TM)



Fonte: Elaborado pelo autor

Estamos interessados em soluções cuja a propagação seja apenas ao longo da interface (eixo  $x$ ) e que as ondas evanescam a medida que se distanciam dela. Nas próximas duas Subseções 1.4.1 e 1.4.2 vamos considerar tais soluções do tipo TM e TE, respectivamente, buscando as condições para que as soluções TM e TE impostas para os campos  $\vec{E}$  e  $\vec{B}$  sejam válidas.

### 1.4.1 Modo TM

Assumindo aqui soluções do tipo TM, temos que

$$\vec{E}_j = (E_{0,j,x} \hat{x} + E_{0,j,z} \hat{z}) e^{i(qx - \omega t)} e^{-k_j |z|}, \quad (1.23a)$$

$$\vec{B}_j = B_{0,j,y} \hat{y} e^{i(qx - \omega t)} e^{-k_j |z|}, \quad (1.23b)$$

onde  $j = 1, 2$  identifica o meio de acordo com o esquema da Fig. 3 e o termo com índice ‘0’ indica a amplitude de cada campo. Substituindo a Eq. (1.23a) na Eq. (1.7a), temos

$$\begin{aligned} \nabla^2 \vec{E}_j &= (\nabla^2 E_{j,x}) \hat{x} + (\nabla^2 E_{j,z}) \hat{z} \\ &= \{E_{0,j,x} e^{i(qx - \omega t)} e^{-k_j |z|} [-q^2 + k_j^2 \operatorname{sgn}^2(z)]\} \hat{x} + \{E_{0,j,z} e^{i(qx - \omega t)} e^{-k_j |z|} [-q^2 + k_j^2 \operatorname{sgn}^2(z)]\} \hat{z} \\ &= \mu_j \epsilon_j \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = -\mu_j \epsilon_j \omega^2 [(E_{0,j,x} \hat{x} + E_{0,j,z} \hat{z}) e^{i(qx - \omega t)} e^{-k_j |z|}]. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Comparando ambos os lados da Eq. (1.24) e notando que  $\operatorname{sgn}^2(z) = 1$ , obtem-se a seguinte relação

$$k_j = \sqrt{q^2 - \mu_j \epsilon_j \omega^2}. \quad (1.25)$$

Substituindo os campos dados pelas Eqs. (1.23a) e (1.23b) na Eq. (1.6d), obtemos que

$$\nabla \times \vec{B} = \left( -\frac{\partial B_{j,y}}{\partial z} \right) \hat{x} + \left( \frac{\partial B_{j,y}}{\partial x} \right) \hat{z} = B_{j,y} k_j \operatorname{sgn}(z) \hat{x} + B_{j,y} i q \hat{z} = -i \omega \mu_j \epsilon_j (E_{j,x} \hat{x} + E_{j,z} \hat{z}), \quad (1.26)$$

o que leva, comparando ambos os lados da equação, que

$$B_{j,y} = -i \operatorname{sgn}(z) \frac{\omega \mu_j \epsilon_j}{k_j} E_{j,x}, \quad (1.27a)$$

$$B_{j,y} = -\frac{\omega \mu_j \epsilon_j}{q} E_{j,z}, \quad (1.27b)$$

e igualando as Eqs. (1.27a) e (1.27b), resulta em

$$E_{j,x} = -i \operatorname{sgn}(z) \frac{k_j}{q} E_{j,z}. \quad (1.28)$$

Agora, substituindo os campos [Eqs. (1.23a) e (1.23b)] na Eq. (1.6c), obtemos que

$$\nabla \times \vec{E} = \left( \frac{\partial E_{j,x}}{\partial z} - \frac{\partial E_{j,z}}{\partial x} \right) \hat{y} = (-E_{j,x} k_j \operatorname{sgn}(z) - E_{j,z} i q) \hat{y} = i \omega B_{j,y} \hat{y}. \quad (1.29)$$

Substituindo a Eq. (1.27b) na Eq. (1.29), obtem-se que

$$\begin{aligned} -E_{j,x} \operatorname{sgn}(z) k_j - E_{j,z} i q &= -i \frac{\omega^2 \mu_j \epsilon_j}{q} E_{j,z}, \\ \Rightarrow E_{j,x} k_j &= -i \operatorname{sgn}(z) E_{j,z} \left( \frac{-\omega^2 \mu_j \epsilon_j + q^2}{q} \right). \end{aligned} \quad (1.30)$$

Aplicando as condições de contorno [ver Seção 1.3] na interface entre os dois meios em  $z = 0$ , temos que

$$E_{1,x} = E_{2,x}, \quad (1.31a)$$

$$\frac{B_{1,y}}{\mu_1} = \frac{B_{2,y}}{\mu_2}. \quad (1.31b)$$

Substituindo a Eq. (1.27a) na Eq. (1.31b), obtem-se que

$$-\frac{\epsilon_1}{k_1} E_{1,x} = \frac{\epsilon_2}{k_2} E_{2,x}, \quad (1.32)$$

e da condição de contorno (1.31a), encontramos que

$$\frac{\epsilon_1}{k_1} + \frac{\epsilon_2(\omega)}{k_2} = 0. \quad (1.33)$$

Dividindo ambos os membros da Eq. (1.33) por  $\epsilon_0$ , trabalharemos com as constantes dielétricas ( $\epsilon'_1$  e  $\epsilon'_2(\omega)$ ) dos meios e não mais com suas permissividades elétricas. Dessa forma, temos que

$$\frac{\epsilon'_1}{k_1} + \frac{\epsilon'_2(\omega)}{k_2} = 0. \quad (1.34)$$

Para simplificar a notação continuaremos usando  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  sem o índice  $\prime$ , mas tendo em mente que estaremos nos referindo as constantes dielétricas dos meios.

Concluimos então que para que haja a formação de um plasmon de superfície é necessário que a Eq. (1.34) seja satisfeita. Substituindo a Eq. (1.19) na Eq. (1.34), temos que

$$\frac{\omega_p^2}{(i\omega\gamma + \omega^2)k_2} - \frac{1}{k_2} = \frac{\epsilon_1}{k_1}. \quad (1.35)$$

Nas próximas duas subsubseções vamos discutir a relação de dispersão do modo TM dos SPPs e analisar a influência que o parâmetro de amortecimento  $\gamma$  tem sobre a excitação dos SPPs. Primeiramente, na Subsubseção 1.4.1.1, vamos verificar o caso mais simples com  $\gamma = 0$

e em seguida, na Subsubseção 1.4.1.2, o caso mais geral.

#### 1.4.1.1 Relação de dispersão para $\gamma = 0$

Tomando  $\gamma = 0$ , a Eq. (1.35) fica

$$\frac{\omega_p^2}{\omega^2} - 1 = \frac{k_2(q, \omega)\epsilon_1}{k_1(q, \omega)}. \quad (1.36)$$

Note que o primeiro membro da equação acima é uma função real, dessa maneira o segundo membro também deve ser. Como  $\epsilon_1$  é um número real,  $k_1$  e  $k_2$  devem ser também funções reais para todo  $\omega$  e  $q$ . Outra condição é que como o segundo membro é um número real e positivo, o primeiro membro também tem de ser, para isso  $\omega < \omega_p$ . Daí, analisando a função  $k_j = \sqrt{q^2 - \mu_j \epsilon_j \omega^2}$  dada na Eq. (1.25) (lembrando que  $j$  é o índice referente ao meio), temos que para que a Eq. (1.36) seja válida é necessária a condição

$$q - \sqrt{\mu_j \epsilon_j} \omega > 0. \quad (1.37)$$

Agora vamos encontrar explicitamente a função  $q(\omega)$  dos SPPs para esse sistema estudado tomando  $\gamma = 0$ . Lembrando que agora tanto  $k_1$  quanto  $k_2$  estão expressos em função das constantes dielétricas  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  e das permeabilidades magnéticas relativas  $\mu_1$  e  $\mu_2$ . Assim, substituindo a Eq. (1.25) na Eq. (1.34), temos que

$$\begin{aligned} & \frac{\epsilon_1}{\sqrt{q^2 - \mu_1 \epsilon_1 \omega^2 / c^2}} + \frac{\epsilon_2(\omega)}{\sqrt{q^2 - \mu_2 \epsilon_2(\omega) \omega^2 / c^2}} = 0 \\ \Rightarrow & -\epsilon_2(\omega) \sqrt{q^2 - \mu_1 \epsilon_1 \omega^2 / c^2} = \epsilon_1 \sqrt{q^2 - \mu_2 \epsilon_2(\omega) \omega^2 / c^2} \\ \Rightarrow & \epsilon_2^2(\omega) [q^2 - \epsilon_1 \mu_1 \omega^2 / c^2] = \epsilon_1^2 [q^2 - \epsilon_2(\omega) \mu_2 \omega^2 / c^2] \\ \Rightarrow & q^2 [\epsilon_2^2(\omega) - \epsilon_1^2] = -\epsilon_1^2 \epsilon_2(\omega) \mu_2 \omega^2 / c^2 + \epsilon_2^2(\omega) \epsilon_1 \mu_1 \omega^2 / c^2 \\ \Rightarrow & q^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \frac{\epsilon_1 \epsilon_2(\omega) [\epsilon_2(\omega) \mu_1 - \epsilon_1 \mu_2]}{[\epsilon_2^2(\omega) - \epsilon_1^2]} \\ \Rightarrow & q = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_2(\omega) [\epsilon_2(\omega) \mu_1 - \epsilon_1 \mu_2]}{[\epsilon_2^2(\omega) - \epsilon_1^2]}}. \end{aligned} \quad (1.38)$$

Agora, vamos substituir a Eq. (1.19) com  $\gamma = 0$  na Eq. (1.38) para explicitar o comporta-

mento matemático de  $q$  em função de  $\omega$ , o que resulta em

$$q = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_1 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) \left[\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) \mu_1 - \epsilon_1 \mu_2\right]}{\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)^2 - \epsilon_1^2}}. \quad (1.39)$$

Para exemplificar, vamos imaginar uma interface plana entre o vácuo (meio 1), logo  $\epsilon_1 = 1$  e  $\mu_1 = 1$ , e um condutor qualquer (meio 2) não-magnético, tal que  $\mu_2 = 1$ . Dessa forma, a Eq. (1.39) fica

$$\begin{aligned} q &= \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) \left[\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) - 1\right]}{\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)^2 - 1}} \\ \Rightarrow q &= \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) \left[\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) - 1\right]}{\left[\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) - 1\right] \left[\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) + 1\right]}} \\ \Rightarrow q &= \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}}{2 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}}} \\ \Rightarrow q &= \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\omega^2 - \omega_p^2}{2\omega^2 - \omega_p^2}}. \end{aligned} \quad (1.40)$$

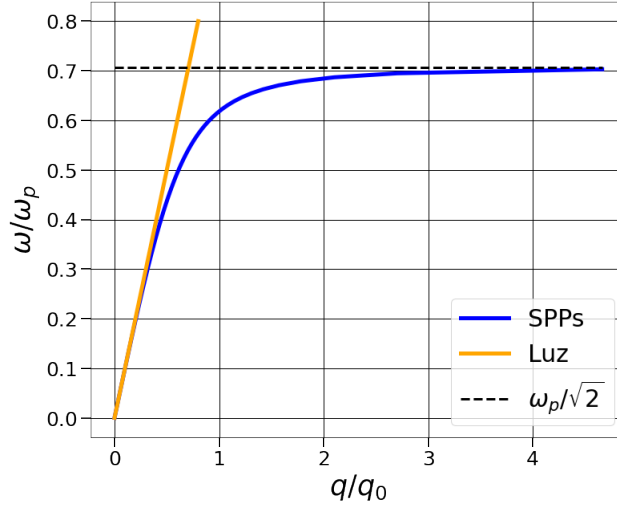
É importante observarmos que como  $q$  é um número real <sup>1</sup> e lembrando que  $\omega < \omega_p$ , a seguinte condição deve ser válida

$$2\omega^2 - \omega_p^2 < 0 \Rightarrow \omega < \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}. \quad (1.41)$$

Na Fig. 5 apresentamos a relação de dispersão dos SPPs (curva sólida em cor azul) obtida na Eq. (1.39) para os parâmetros mencionados ( $\epsilon_1 = 1$ ,  $\mu_1 = 1$ ,  $\mu_2 = 1$ ) resultando na relação (1.40). Note que, uma vez que os SPPs correspondem a modos vinculados de  $q$  e  $k_j$  reais, sua curva de dispersão fica à direita da linha de luz no dielétrico (curva sólida amarela). Conse-

<sup>1</sup> $q$  deve ser um número real, pois senão não existiria propagação eletromagnética ao longo do eixo  $x$ , a onda evanesceria a medida que se afastasse de  $x$  e isso não é o que estamos procurando.

Figura 5: Relação de dispersão para um plasmon-polárton de superfície numa interface vácuo-metal. A curva amarela corresponde a relação de dispersão da luz no vácuo, enquanto que a curva azul corresponde a relação de dispersão do plasmon-polárton de superfície. O modo de superfície é limitado pela região onde  $\omega < \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}$  [curva preta tracejada - Eq. (1.42)].



Fonte: Elaborado pelo autor

quentemente, os SPPs não podem ser excitados por iluminação direta, de modo que é preciso de algum mecanismo capaz de acoplar luz para plasmons de superfície. Exemplos de tais técnicas são a utilização do prisma (configuração de otto e Kretschmann) e o acoplamento através de grades. Observa-se que para o regime de pequenos vetores de onda, a relação de dispersão fica perto da linha de luz, e o SPP se assemelha a uma onda incidente de luz tangente à interface e o campo eletromagnético é pobremente confinado, penetrando profundamente no dielétrico. Isso fica claro quando analisamos a Eq. (1.25) no regime  $k_1 \ll 1$ . Já para grandes vetores de onda temos uma diferença de comportamento em relação a luz se propagando no vácuo, onde temos uma redução significativa do comprimento de onda (devido ao aumento do vetor de onda) em relação ao da luz no dielétrico. No regime que  $q \gg \mu_j \epsilon_k \omega^2 / c^2$  temos que  $\epsilon_1 + \epsilon_2 = 0$ , dessa forma a frequência será

$$\omega_{sp} = \frac{\omega_p}{\sqrt{\epsilon_1 + 1}}, \quad (1.42)$$

que é conhecida como a frequência de plasmons de superfície e corresponde a linha horizontal na Fig. 5. Observa-se que neste regime a velocidade de grupo  $v_g = \frac{d\omega}{dq} \rightarrow 0$ . Portanto, nesse limite temos um modo sem dispersão com um perfil eletrostático. Em resumo, a relação de dispersão desse modo propagante nos diz o quanto conseguimos reduzir o comprimento de onda do plasmon  $\lambda_{SPPs}$  a medida que aumentamos a sua frequência.

### 1.4.1.2 Relação de dispersão para $\gamma \neq 0$

Agora vamos analisar o caso mais geral em que  $\gamma \neq 0$ . Partindo da Eq. (1.38)

$$q = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_2(\omega) [\epsilon_2(\omega) \mu_1 - \epsilon_1 \mu_2]}{[\epsilon_2^2(\omega) - \epsilon_1^2]}},$$

e tomando como exemplo o meio 1 ( $\epsilon_1 = 1$ ) como sendo o vácuo e o meio 2 não-magnético ( $\mu_1 = \mu_2 = 1$ ), obtemos que

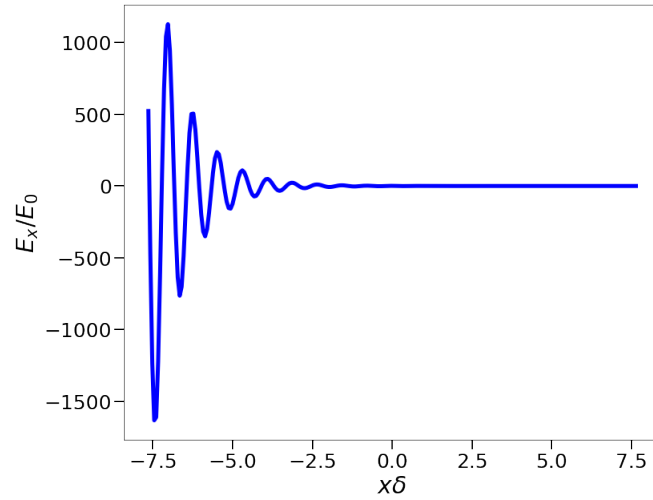
$$q = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_2(\omega) [\epsilon_2(\omega) - 1]}{[\epsilon_2^2(\omega) - 1]}}. \quad (1.43)$$

Substituindo a função dielétrica  $\epsilon_2(\omega)$ , que agora é complexa e dada pela Eq. (1.19), na Eq. (1.43), encontramos que

$$\begin{aligned} q &= \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\left(1 - \frac{\omega_p^2}{(i\omega\gamma + \omega^2)}\right) \left(-\frac{\omega_p^2}{(i\omega\gamma + \omega^2)}\right)}{\left(1 - \frac{\omega_p^2}{(i\omega\gamma + \omega^2)}\right)^2 - 1}} \\ q &= \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\left(1 - \frac{\omega_p^2}{(i\omega\gamma + \omega^2)}\right) \left(-\frac{\omega_p^2}{(i\omega\gamma + \omega^2)}\right)}{\left[1 - \left(\frac{\omega_p^2}{(i\omega\gamma + \omega^2)}\right) - 1\right] \left[\left(1 - \frac{\omega_p^2}{(i\omega\gamma + \omega^2)}\right) + 1\right]}} \\ q &= \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{1 - \frac{\omega_p^2}{(i\omega\gamma + \omega^2)}}{2 - \frac{\omega_p^2}{(i\omega\gamma + \omega^2)}}} \\ q &= \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\frac{(i\omega\gamma + \omega^2) - \omega_p^2}{(i\omega\gamma + \omega^2)}}{\frac{2(i\omega\gamma + \omega^2) - \omega_p^2}{(i\omega\gamma + \omega^2)}}} \\ q &= \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{(i\omega\gamma + \omega^2) - \omega_p^2}{2(i\omega\gamma + \omega^2) - \omega_p^2}}. \end{aligned} \quad (1.44)$$

A relação de dispersão dada na Eq. (1.44) nos mostra que agora o vetor de onda  $q$  é uma função complexa ( $q = \eta + \delta i$ ), diferentemente da situação anterior na Eq. (1.40) para  $\gamma = 0$ , e assim tanto  $k_1$  quanto  $k_2$  serão também funções complexas ( $k_j = \alpha_j + \beta_j i$ ). Dessa forma, os

Figura 6: Comportamento da componente  $x$  do campo elétrico ao longo da direção  $x$  tomando  $z = 0$  e  $t = 0$  na Eq. (1.45a).



Fonte: Elaborado pelo autor

campos eletromagnéticos terão o seguinte comportamento

$$\vec{E} = (E_{0,j,x} \hat{x} + E_{0,j,z} \hat{z}) e^{i\eta x} e^{-\delta x} e^{-\alpha_j |z|} e^{-i\beta_j |z|} e^{i\omega t}, \quad (1.45a)$$

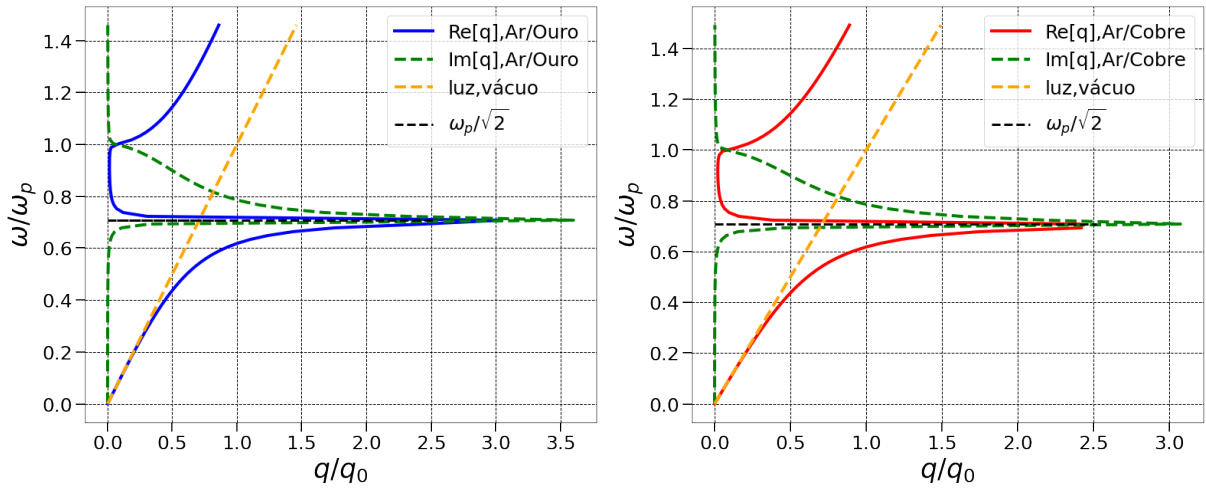
$$\vec{B} = B_{0,j,y} e^{i\eta x} e^{-\beta x} e^{-\alpha_j |z|} e^{-i\beta_j |z|} e^{i\omega t} \hat{y}. \quad (1.45b)$$

Fisicamente falando, teremos campos eletromagnéticos que se propagam de maneira tal que a amplitude dos campos diminui a medida que a onda se propaga (equivalente a um oscilador harmônico simples amortecido), até o instante em que a intensidade do campo vai a zero. Esse intervalo de tempo de propagação é chamado tempo de vida do plasmons-polariton. Observe que a parte real de  $q$  na Eq. (1.44) vai determinar a propagação do SPPs ao longo do eixo  $x$ , enquanto que sua parte imaginária vai determinar como os campos evanescem ao longo do eixo  $x$ , ou seja, estará associada ao tempo de vida do SPPs. A Fig. 6 ilustra o comportamento do campo elétrico ao longo da direção  $x$  utilizando a tomando  $z = 0$  e  $t = 0$  na Eq. (1.45a). Note que temos o mesmo comportamento do campo ao longo do eixo  $z$  e este estará relacionado ao confinamento perpendicular a interface.

Gráficos das relações de dispersão para o *damping* ( $\gamma$ ) não-nulo são apresentados na Fig. 7 tomando os metais como sendo o ouro (panel da esquerda) e o cobre (painel da direita). Como  $q$  é uma função complexa, apresentamos separadamente no espectro as contribuições das componentes real (curva sólida) e imaginária (curva tracejada) do vetor de onda. Observe que para frequências baixas ( $\omega \ll \omega_p$ ) o comportamento é praticamente linear, assim como o da luz

no vácuo (curva tracejada amarela). Outra observação importante é que diferente do caso para  $\gamma = 0$ , cujas frequências dos SPPs eram menores que  $\omega_p/\sqrt{2}$ , agora o espectro se encontra numa faixa mais ampla de frequência, no entanto agora os SPPs possuem uma propagação limitada ao longo da superfície dependendo do valor de  $\gamma$ , assim os modos plasmônicos se propagarão com perdas como já discutido anteriormente. Note agora que na presença de damping há modos presentes na região  $\omega_p/\sqrt{2} < \omega < \omega_p$ , onde no caso sem damping não eram estados permitidos. Os modos nessa região são chamados de quase-ligados pois representam uma transição entre os modos predominantemente de superfície SPPs e os modos predominantemente de bulk.

Figura 7: Relação de dispersão dos SPPs para o (painel da esquerda) ouro e (painel da direita) cobre. Para o ouro, tem-se que  $\omega_p = 1.37 \times 10^{16}$  Hz e  $\gamma = 1.07 \times 10^{14}$  Hz. Para o cobre, tem-se que  $\omega_p = 1.34 \times 10^{16}$  Hz e  $\gamma = 1.5 \times 10^{14}$  Hz.



Fonte: Elaborado pelo autor

### 1.4.2 Modo TE

Agora que vimos os casos para o modo TM, vamos encontrar quais as condições para que haja o surgimento dos plasmons-polártons em modos de onda TE. Neste caso, podemos assumir o seguinte comportamento para o campo eletromagnético [ver Fig. 4(b)]

$$\vec{B} = (B_{0,j,x} \hat{x} + B_{0,j,z} \hat{z}) e^{i(qx - \omega t)} e^{-k_j |z|}, \quad (1.46a)$$

$$\vec{E} = E_{0,j,y} \hat{y} e^{i(qx - \omega t)} e^{-k_j |z|}. \quad (1.46b)$$

Substituindo a Eq. (1.46b) na Eq. (1.7a), temos que

$$\nabla^2 E_{j,y} = E_{0,j,y} e^{i(qx-\omega t)} e^{-k_j|z|} (-q^2 + k_j^2) = -\mu_j \epsilon_j \omega^2 E_{0,j,y} e^{i(qx-\omega t)} e^{-k_j|z|}. \quad (1.47)$$

Comparando ambos os lados da Eq. (1.47), obtemos aqui para o modo TE a mesma relação para os  $k_j$ 's encontrada para o modo TM [Eq. (1.25)]

$$k_j = \sqrt{q^2 - \mu_j \epsilon_j \omega^2}. \quad (1.48)$$

Substituindo as Eqs. (1.46a) e (1.46b) na Eq. (1.6c), temos que

$$\nabla \times \vec{E} = \left( \frac{\partial E_{j,y}}{\partial z} \right) \hat{x} - \left( \frac{\partial E_{j,y}}{\partial x} \right) \hat{z} = -E_{j,y} k_j \operatorname{sgn}(z) \hat{x} - E_{j,y} i q \hat{z} = i \omega \mu_j \epsilon_j (B_{j,x} \hat{x} + B_{j,z} \hat{z}). \quad (1.49)$$

Comparando ambos os lados da Eq. (1.49) ao longo das direções  $\hat{x}$  e  $\hat{y}$ , obtemos que

$$E_{j,y} = -i \operatorname{sgn}(z) \frac{\omega \mu_j \epsilon_j}{k_j} B_{j,x}, \quad (1.50a)$$

$$E_{j,y} = -\frac{\omega \mu_j \epsilon_j}{q} B_{j,z}. \quad (1.50b)$$

Aplicando as condições de contorno [Eqs. (1.21a) e (1.21b) para o campo elétrico e Eqs. (1.22a) e (1.22b) para o campo magnético] para esse problema em  $z = 0$  vistas na Seção 1.3, temos que

$$E_{1,y} = E_{2,y}, \quad (1.51a)$$

$$\frac{B_{1,x}}{\mu_1} = \frac{B_{2,x}}{\mu_2}, \quad (1.51b)$$

$$\frac{\omega \mu_1 \epsilon_1}{k_1} B_{1,x} = -\frac{\omega \mu_2 \epsilon_2}{k_2} B_{2,x}, \quad (1.51c)$$

$$\frac{\mu_1^2 \epsilon_1}{k_1} B_{2,x} + \frac{\mu_2^2 \epsilon_2}{k_2} B_{2,x} = 0. \quad (1.51d)$$

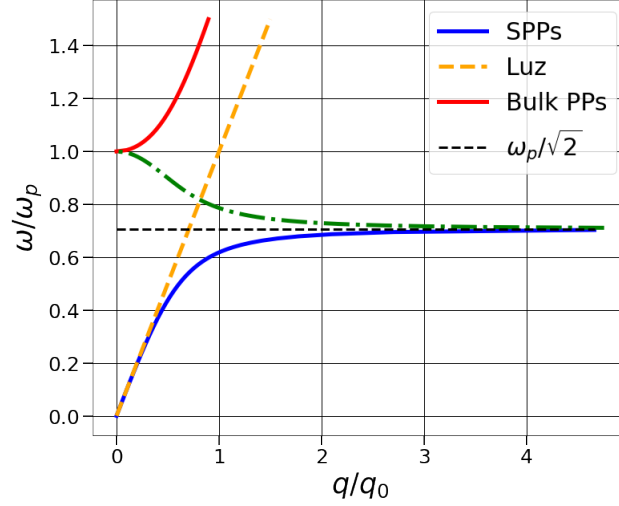
$$B_{1,z} = B_{2,z}, \quad (1.51e)$$

$$-\frac{\omega \mu_1 \epsilon_1}{q} B_{1,z} = -\frac{\omega \mu_2 \epsilon_2(\omega)}{q} B_{2,z}, \quad (1.51f)$$

$$\mu_1 \epsilon_1 = \mu_2 \epsilon_2(\omega). \quad (1.51g)$$

Substituindo a Eq. (1.51g) na Eq. (1.51d) e dividindo ambos os membros da Eq. (1.51d) por

Figura 8: Relação de dispersão de SPPs (plasmon-polártons de superfície) em uma interface vácuo-metal. Três regiões diferentes são apresentadas:  $\omega < \omega_p/\sqrt{2}$  que hospedam os SPPs (azul),  $\omega_p/\sqrt{2} < \omega < \omega_p$  em que não existe propagação eletromagnética (verde),  $\omega > \omega_p$  que hospedam os plasmon-polártons de volume (verde)



Fonte: Elaborado pelo autor

$\mu_0$  encontramos a seguinte relação para modos de onda TE

$$\left( \frac{\mu_1}{\sqrt{q^2 - \mu_1 \epsilon_1 \omega^2 / c^2}} + \frac{\mu_2}{\sqrt{q^2 - \mu_2 \epsilon_2(\omega) \omega^2 / c^2}} \right) B_{1,x} = 0. \quad (1.52)$$

Essa condição pode ser satisfeita se  $B_{2,x} = 0$  ou  $\left( \frac{\mu_1}{k_1} + \frac{\mu_2}{k_2} \right) = 0$ . Contudo, como queremos modos condinados na interface metal-dielétrico temos que  $Re[k_1] > 0$  e  $Re[k_2] > 0$ , de tal forma que a condição da Eq. (1.52) só pode ser satisfeita se  $B_{2,x} = B_{1,x} = 0$ . Assim,  $E_{1,y} = E_{2,y} = 0$  e não teremos ondas de superfície em modos TE numa interface metal-dielétrico. Se um dos meios for um meio magnético  $\mu(\omega)$ , teremos modos TE de superfície conhecidos como magnons polaritons de superfície.

### 1.4.3 Plasmon-polaritons de volume: Modo TM

No caso de *bulk* plasmon-polaritons teríamos uma propagação eletromagnética ao longo de todo o volume do material. Os campos para esse caso seriam da forma (considerando ondas

planas com modo TM:

$$\vec{E} = (E_{0,j,x} \hat{x} + E_{0,j,z} \hat{z}) e^{i(qx - \omega t)} e^{ik_j z}, \quad (1.53a)$$

$$\vec{B} = B_{0,j,y} \hat{y} e^{i(qx - \omega t)} e^{ik_j z}. \quad (1.53b)$$

Seguindo o mesmo método utilizado para encontrar os plasmon-polaritons de superfície nas seções anteriores, onde substituímos as soluções impostas nas equações de Maxwell, chegamos na seguinte expressão

$$\frac{\epsilon_1}{k_1} - \frac{\epsilon_2(\omega)}{k_2} = 0 \Rightarrow \epsilon_2(\omega) = \frac{k_2 \epsilon_1}{k_1}. \quad (1.54)$$

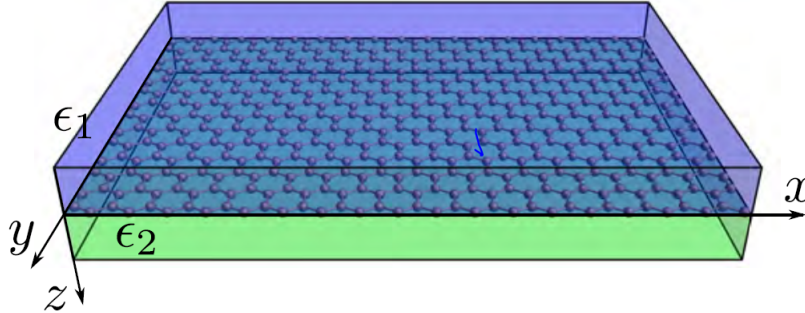
Para que a Eq. (1.54) seja válida, a constante dielétrica  $\epsilon_2$  teria que assumir um valor real e positivo, já que  $\epsilon_1$ ,  $k_1$  e  $k_2$  são reais positivos. Entretanto  $\epsilon_2$  é um número complexo. Para  $\epsilon_2$  ser real positivo, deveríamos ter então que  $\gamma = 0$ , tornando a parte imaginária da função dielétrica nula, e a parte real de  $\epsilon_2$  um número positivo com a condição de que  $\omega > \omega_p$ . O espectro plasmônico para esse caso está mostrado pela curva vermelha sólida na Fig. 8.

### 1.5 Plasmon-polártons de superfície na interface dielétrico - grafeno - dielétrico

Nos últimos anos, uma impressionante explosão no campo da plasmônica tem sido vista com vários artigos de bastante relevância sobre o assunto sendo publicados com grande frequência. Boa parte da renovação do interesse pela área da plasmônica se deve ao grafeno (Gonçalves, 2016). Este também tem sido um dos tópicos mais ativos na comunidade de física da matéria condensada desde seu isolamento em 2004 (Novoselov *et al.*, 2004). A combinação das vantagens eletrônicas, óticas, magnéticas e mecânicas do grafeno (Neto *et al.*, 2009) aliado ao campo da plasmônica para propostas de dispositivos plasmônicos cuja suportam modos polaritônicos baseados em nesse material fez surgir o campo que hoje chamamos de *Graphene Plasmonics*. Os modos de superfície hospedados no grafeno são chamados de plasmon-polártons de grafeno (GSPs, sigla em inglês para *graphene surface plasmon-polariton*). O campo da nanoplasmonica de grafeno ganhou força com a observação experimental desses modos GSPs. Assim, essa área combina dois dos tópicos mais relevantes da física atual e promete proporcionar um enorme impacto em tecnologias futuras que vão desde novos dispositivos optoeletrônicos (Liang *et al.*, 2014) até aplicações em nanomedicina (Zheng *et al.*, 2012).

Plasmons em grafeno apresentam grandes vantagens quando comparados com materiais plasmônicos metálicos: (i) suportam plasmons de superfície fortemente confinados em infra-

Figura 9: Ilustração de uma folha de grafeno encapsulada por dois meios dielétricos semi-infinitos com constantes dielétricas  $\epsilon_1$  ( $z < 0$ ) e  $\epsilon_2$  ( $z > 0$ ). A folha de grafeno se encontra no plano  $z = 0$ . Figura adaptada da Ref (Gonçalves, 2016).



vermelho médio e na faixa espectral de THz, (ii) exibem uma frequência sintonizável de ressonâncias com o plasmon, controlando seu nível de Fermi por meio de dopagem química ou *gating* eletrostático e (iii) possuem uma propagação com aproximadamente uma baixa perda, ou seja, sendo plasmons com tempo de vida longos (Gonçalves, 2016).

Dessa maneira, como forma de introduzir os GSPs, vamos estudar um sistema que consiste em dois meios dielétricos com uma folha de grafeno entre eles. O problema a ser discutido agora é semelhante aquele da Seção 1.4, onde tínhamos uma interface plana dividindo dois meios homogêneos e isotrópicos. Entretanto, agora ao considerarmos uma folha de grafeno em  $z = 0$ , temos que a diferença matemática do presente problema daquele tratado na Seção 1.4, é que o grafeno possui uma densidade superficial de carga não-nula o que levará uma descontinuidade nas condições de contorno, como será discutido mais a frente. Nas próximas duas subseções, vamos assumir que os dois meios são dielétricos, localizados na região  $z < 0$  (substrato - meio 1) e na região  $z > 0$  (superstrato - meio 2), conforme mostra a Fig. 9. Discutiremos a seguir os modos TM e TE no grafeno nas Subseções 1.5.1 e 1.5.1, respectivamente.

### 1.5.1 Modo TM

Assumindo soluções em ondas planas com modo TM, podemos escrever os campos eletromagnéticos da seguinte forma

$$\vec{E} = (E_{0,j,x} \hat{x} + E_{0,j,z} \hat{z}) e^{i(qx - \omega t)} e^{-k_j |z|}, \quad (1.55a)$$

$$\vec{B} = B_{0,j,y} \hat{y} e^{i(qx - \omega t)} e^{-k_j |z|}. \quad (1.55b)$$

Substituindo a solução para o campo elétrico [Eq. (1.55a)] na Eq. (1.7a), temos que

$$\begin{aligned}
\nabla^2 \vec{E}_j &= (\nabla^2 E_{j,x}) \hat{x} + (\nabla^2 E_{j,z}) \hat{z} = \mu_j \epsilon_j \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \\
&\Rightarrow \left( \frac{\partial^2 E_{j,x}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_{j,x}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_{j,x}}{\partial z^2} \right) \hat{x} + \left( \frac{\partial^2 E_{j,z}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_{j,z}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_{j,z}}{\partial z^2} \right) \hat{z} = \mu_j \epsilon_j \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \\
&\Rightarrow E_{0,j,x} e^{i(qx - \omega t)} e^{-k_j z} [-q^2 + k_j^2 \operatorname{sgn}^2(z)] \hat{x} + E_{0,j,z} e^{i(qx - \omega t)} e^{-k_j z} [-q^2 + k_j^2 \operatorname{sgn}^2(z)] \hat{z} \\
&= -\mu_j \epsilon_j \omega^2 [(E_{0,j,x} \hat{x} + E_{0,j,z} \hat{z}) e^{i(qx - \omega t)} e^{-k_j |z|}], \tag{1.56}
\end{aligned}$$

resultando na seguinte relação para  $k_j$ 's, ao compararmos as componentes ao longo das direções  $\hat{x}$  e  $\hat{z}$  em ambos os lados da equação

$$k_j = \sqrt{q^2 - \mu_j \epsilon_j \omega^2}. \tag{1.57}$$

Substituindo os campos (1.55a) e (1.55b) na Eq. (1.6d), obtemos que

$$\begin{aligned}
\nabla \times \vec{B} &= \left( -\frac{\partial B_{j,y}}{\partial z} \right) \hat{x} + \left( \frac{\partial B_{j,y}}{\partial x} \right) \hat{z} = \mu_j \epsilon_j \left[ \left( \frac{\partial E_{j,x}}{\partial t} \right) \hat{x} + \left( \frac{\partial E_{j,z}}{\partial t} \right) \hat{z} \right] \\
&\Rightarrow B_{j,y} k_j \operatorname{sgn}(z) \hat{x} + B_{j,y} i q \hat{z} = -i \omega \mu_j \epsilon_j (E_{j,x} \hat{x} + E_{j,z} \hat{z}),
\end{aligned}$$

resultando nas seguintes expressões

$$B_{j,y} = -i \operatorname{sgn}(z) \frac{\omega \mu_j \epsilon_j}{k_j} E_{j,x}, \tag{1.58}$$

$$B_{j,y} = -\frac{\omega \mu_j \epsilon_j}{q} E_{j,z}. \tag{1.59}$$

Note que até o momento a demonstração aqui desenvolvida segue os mesmo passos feitos para o problema na Seção 1.4.1. Entretanto, o diferencial aqui será nas condições de contorno das equações de Maxwell, pois agora temos uma folha de grafeno com uma densidade superficial de carga, como veremos a seguir.

Das condições de contorno apresentadas nas Eqs. (1.21b) e (1.22b) para as componentes tangenciais, temos que

$$E_{1,x} = E_{2,x}, \tag{1.60a}$$

$$\left( \frac{B_{2,y}}{u_1} \right) \hat{y} - \left( \frac{B_{1,y}}{u_2} \right) \hat{y} = \vec{\kappa} \times \hat{z} = \kappa \hat{x} \times \hat{z} = \kappa \hat{y}, \tag{1.60b}$$

onde  $\vec{\kappa}$  é o vetor de corrente superficial na direção  $x$ .

Substituindo a Eq. (1.58) para cada meio na Eq. (1.60b), obtemos

$$\begin{aligned} & \left( \frac{-i \operatorname{sgn}(z) \frac{\omega \mu_2 \epsilon_2}{k_2} E_{2,x}}{\mu_2} \right) \hat{y} - \left( \frac{-i \operatorname{sgn}(z) \frac{\omega \mu_1 \epsilon_1}{k_1} E_{1,x}}{\mu_1} \right) \hat{y} = \kappa \hat{y} \\ \Rightarrow & - \left( i \frac{\omega \epsilon_2}{k_2} E_{2,x} \right) \hat{y} - \left( i \frac{\omega \epsilon_2}{k_2} E_{2,x} \right) \hat{y} = \kappa \hat{y} \\ \Rightarrow & i\omega \left( \frac{\epsilon_1}{k_1} + \frac{\epsilon_2}{k_2} \right) E_{1,x} = -\kappa, \end{aligned} \quad (1.61)$$

onde usamos o fato de que  $\operatorname{sgn}^2(z) = 1$  e a Eq. (1.81).

Usando a lei de ohm para a corrente superficial [Eq. (1.8)], a Eq. (1.61) pode ser reescrita como

$$i\omega \left( \frac{\epsilon_1}{k_1} + \frac{\epsilon_2}{k_2} \right) E_{1,x} = -\sigma_g E_{1,x} \Rightarrow \frac{\epsilon_1}{k_1} + \frac{\epsilon_2}{k_2} + \frac{i\sigma_g(\omega)}{\omega} = 0, \quad (1.62)$$

onde  $\sigma_g$  é a condutividade do grafeno. Se dividirmos ambos os membros da Eq. (1.62) por  $\epsilon_0$ , o resultado ficará em função das constantes dielétricas dos dois meios  $\epsilon'_1 = \epsilon_1/\epsilon_0$  e  $\epsilon'_2 = \epsilon_2/\epsilon_0$ . Novamente, como nas seções anteriores, usaremos a mesma notação das permissividades elétricas, isto é, sem o índice  $\prime$ , tal como  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  para as constantes dielétricas. Assim, temos que

$$\frac{\epsilon_1}{k_1} + \frac{\epsilon_2}{k_2} + \frac{i\sigma_g(\omega)}{\epsilon_0\omega} = 0, \quad (1.63)$$

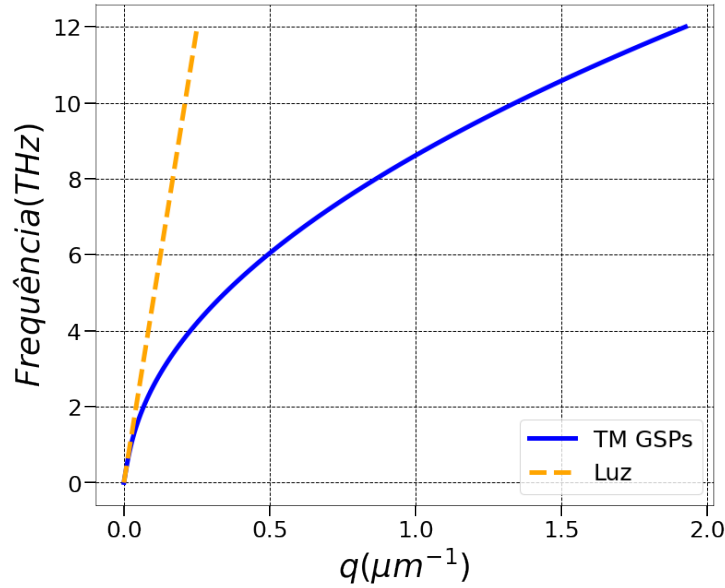
ou ainda, explicitando a dependência dos  $k_j$ 's com  $\omega$  através da Eq. (1.57), podemos escrever a Eq. (1.63) como

$$\frac{\epsilon_1}{\sqrt{q^2 - \mu_1 \epsilon_1 \omega^2 / c^2}} + \frac{\epsilon_2}{\sqrt{q^2 - \mu_2 \epsilon_2 \omega^2 / c^2}} + \frac{i\sigma_g(\omega)}{\epsilon_0\omega} = 0. \quad (1.64)$$

As Eqs. (1.63) e (1.64) correspondem duas formas diferentes, explícita ou não, de escrever a expressão que resulta na relação de dispersão dos plasmon-polártons de superfície do grafeno. Comparando a Eq. (1.63) para o caso do modo TM do grafeno com o caso sem grafeno dado pela Eq. (1.34), note que a diferença entre essas expressões surge no último termo contendo a condutividade do grafeno  $\sigma_g$ . Assim, se fizermos  $\sigma_g = 0$  na Eq. (1.63) retornamos a Eq. (1.34), como era de se esperar.

Particularizando, vamos agora assumir que  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$  e  $\mu_1 = \mu_2 = 1$ , isto é, que o grafeno

Figura 10: Relação de dispersão para os plasmon-polártons de superfície no grafeno (curva sólida azul) em um sistema composto por um interface formada por ar - grafeno - ar. A curva tracejada amarelada corresponde a dispersão da luz.



Fonte: Elaborado pelo autor

está suspenso. Assim, a Eq. (1.64) fica

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{\sqrt{q^2 - \omega^2/c^2}} + \frac{1}{\sqrt{q^2 - \omega^2/c^2}} + \frac{i\sigma_g(\omega)}{\epsilon_0\omega} = 0 \\
 \Rightarrow & \frac{2}{\sqrt{q^2 - \omega^2/c^2}} = -\frac{i\sigma_g(\omega)}{\epsilon_0\omega} \\
 \Rightarrow & \sqrt{q^2 - \omega^2/c^2} = -\frac{2\epsilon_0\omega}{i\sigma_g(\omega)} \\
 \Rightarrow & q^2 - \omega^2/c^2 = \frac{4\epsilon_0^2\omega^2}{i^2\sigma_g^2(\omega)} \\
 \Rightarrow & q = \sqrt{\omega^2/c^2 - \frac{4\epsilon_0^2\omega^2}{\sigma_g^2(\omega)}}.
 \end{aligned} \tag{1.65}$$

A condutividade intrabanda do grafeno  $\sigma_g(\omega)$  considerando que  $E_F \gg K_B T$  é dada por (Gonçalves, 2016)

$$\sigma_g(\omega) = \frac{\sigma_0}{\pi} \frac{4E_F}{\hbar\gamma - i\hbar\omega}. \tag{1.66}$$

Para  $\gamma = 0$ , temos que  $\sigma_g(\omega)$  fica

$$\sigma_g(\omega) = i\frac{\sigma_0}{\pi} \frac{4E_F}{\hbar\omega}, \tag{1.67}$$

e assim a Eq. (1.65) nesse caso fica

$$\begin{aligned}
 q &= \sqrt{-\frac{4\epsilon_0^2\omega^2}{\left(\frac{i\sigma_0 4E_F}{\pi\hbar\omega}\right)^2} + \omega^2/c^2} \\
 \Rightarrow q &= \sqrt{\frac{4\epsilon_0^2\omega^2}{\frac{\sigma_0^2 16E_F^2}{\pi^2\hbar^2\omega^2}} + \omega^2/c^2} \\
 \Rightarrow q &= \sqrt{\frac{\epsilon_0^2\pi^2\hbar^2\omega^4}{4\sigma_0^2 E_F^2} + \omega^2/c^2}.
 \end{aligned} \tag{1.68}$$

A Fig. 10 apresenta graficamente a relação de dispersão dada pela Eq. (1.68) para o casos sem *damping* ( $\gamma = 0$ ) tomando um interface formada por ar - grafeno - ar, isto é, a folha de grafeno se encontra suspensa. Note que o modo TM do grafeno possui uma dispersão com dependência com  $\sqrt{q}$ .

### 1.5.2 Modo TE

Vamos agora analisar o caso do modo de onda TE para esse mesmo sistema ilustrado na Fig. 9. Os campos para modo TE podem ser escritos como

$$\vec{B} = (B_{j,x} \hat{x} + B_{j,z} \hat{z}) e^{i(qx - \omega t)} e^{-|k_j|z}, \tag{1.69a}$$

$$\vec{E} = E_{0,j,y} \hat{y} e^{i(qx - \omega t)} e^{-|k_j|z}. \tag{1.69b}$$

Substituindo a Eq. (1.69b) na Eq. (1.7a), temos que

$$\begin{aligned}
 \nabla^2 E_{j,y} &= \left( \frac{\partial^2 E_{j,y}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_{j,y}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_{j,y}}{\partial z^2} \right) = \mu_j \epsilon_j \frac{\partial^2 E_{j,y}}{\partial t^2} \\
 \Rightarrow E_{0,j,y} e^{i(qx - \omega t)} e^{-k_j|z|} (-q^2 + k_j^2) &= -\mu_j \epsilon_j \omega^2 E_{0,j,y} e^{i(qx - \omega t)} e^{-k_j|z|},
 \end{aligned} \tag{1.70}$$

o que resulta em

$$k_j = \sqrt{q^2 - \mu_j \epsilon_j \omega^2}. \tag{1.71}$$

Substituindo os campos do modo TE [Eqs. (1.69a) e (1.69b)] na Eq. (1.6c), obtemos que

$$\begin{aligned}\nabla \times \vec{E} &= \left(-\frac{\partial E_{j,y}}{\partial z}\right) \hat{x} + \left(\frac{\partial E_{j,y}}{\partial x}\right) \hat{z} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \Rightarrow -E_{j,y} k_j \operatorname{sgn}(z) \hat{x} + E_{j,y} i q \hat{z} &= i\omega (B_{j,x} \hat{x} + B_{j,z} \hat{z}),\end{aligned}\quad (1.72)$$

o que leva as seguintes expressões, ao se comparar ambos os lados da equação acima

$$E_{j,y} = i \operatorname{sgn}(z) \frac{\omega}{k_j} B_{j,x}, \quad (1.73a)$$

$$E_{j,y} = \frac{\omega}{q} B_{j,z}. \quad (1.73b)$$

As condições de contorno para o problema são (ver Seção 1.3)

$$E_{1,y} = E_{2,y}, \quad (1.74)$$

$$\left(\frac{B_{2,x}}{\mu_2}\right) \hat{x} - \left(\frac{B_{1,x}}{\mu_1}\right) \hat{x} = \vec{\kappa} \times \hat{z} = \kappa \hat{y} \times \hat{z} = \kappa \hat{x}. \quad (1.75)$$

Substituindo a Eq. (1.73a) na Eq. (1.74), encontramos que

$$-\frac{B_{1,x}}{k_1} = \frac{B_{2,x}}{k_2}. \quad (1.76)$$

Aplicando a lei de Ohm (1.8) na Eq. (1.75), chegamos na expressão

$$\begin{aligned}\left(\frac{B_{2,x}}{\mu_2}\right) - \left(\frac{B_{1,x}}{\mu_1}\right) &= \sigma_g E_{1,y} = -i\sigma_g \frac{\omega}{k_1} B_{1,x} \\ \Rightarrow \left(-\frac{1}{\mu_1} + i\sigma_g \frac{\omega}{k_1}\right) B_{1,x} + \frac{B_{2,x}}{\mu_2} &= 0.\end{aligned}\quad (1.77)$$

Substituindo a Eq. (1.76) na Eq. (1.77), obtemos

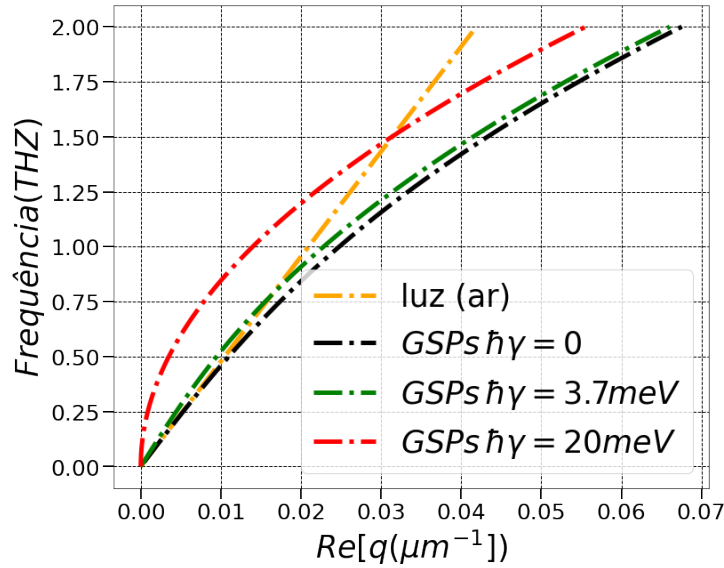
$$\left(-\frac{1}{\mu_1} + \sigma_g \frac{i\omega}{k_1}\right) B_{1,x} - \frac{k_2}{k_1 \mu_2} B_{1,x} = 0, \quad (1.78)$$

que para ser satisfeita, para o caso não trivial, é necessário que a condição abaixo seja satisfeita

$$-\frac{1}{\mu_1} + i\sigma_g \frac{\omega}{k_1} - \frac{k_2}{k_1 \mu_2} = 0. \quad (1.79)$$

Ao multiplicarmos ambos os membros por  $k_1 \mu_0$  encontramos a relação acima em termos das

Figura 11: Relação de dispersão para o modo TM de GSPs em uma interface ar-grafeno-ar para diferentes valores de dumping  $\gamma$ . Parâmetros  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$  e  $E_F = 0.45$  eV



Fonte: Elaborado pelo autor

permeabilidades magnéticas relativas (agora sendo dadas por  $\mu'_1$  e  $\mu'_2$ ),

$$\frac{k_1(q, \omega)}{\mu'_1} + \frac{k_2(q, \omega)}{\mu'_2} = i\omega\mu_0\sigma_g(\omega). \quad (1.80)$$

Observe que o primeiro membro da Eq. (1.80) é um valor positivo, visto que  $k_1$  e  $k_2$  são reais. Por outro lado, o segundo membro da Eq. (1.80) é um número negativo, isto se consideramos que a condutividade tem um *damping* nulo ( $\gamma = 0$ ). Portanto, não há como a Eq. (1.80) acima ser satisfeita, e consequentemente para modo TE não existe excitação plasmônica nesse sistema com grafeno. Lembrando que no caso aqui tratado as permeabilidades magnéticas relativas são números reais positivos. Vale destacar que existem sim materiais cuja a permeabilidade magnética é uma função complexa de  $\omega$ , tal que a equação acima seria satisfeita e assim teríamos determinadas condições para a excitação de GSPs. Se consideramos a condutividade interbanda do grafeno, podemos ter excitação dos modos, porém em uma faixa muito pequena de frequência e com um confinamento muito baixo, devido ao fato da relação de dispersão ser muito próxima da linha da luz.

Agora voltando aos modos TM, vamos verificar como ficaria a relação de dispersão para  $\gamma \neq 0$ , ou seja, tratando de uma situação onde ocorre absorção de energia pela superfície. Subs-

tituindo a Eq. (1.66) da condutividade do grafeno  $\sigma_g$  na Eq. (1.80), obtemos que

$$q = \sqrt{-\frac{4\epsilon_0^2\omega^2}{\sigma_g(\omega)^2} + \omega^2/c^2} \Rightarrow q = \sqrt{-\frac{4\epsilon_0^2\omega^2}{\left(\frac{\sigma_0}{\pi} \frac{4E_F}{\hbar\gamma - i\hbar\omega}\right)^2} + \omega^2/c^2}. \quad (1.81)$$

Observe agora que  $q$  será uma função complexa e nesse caso, como visto anteriormente, o plasmon-poláríton terá uma propagação com perdas, ou seja, a intensidade da radiação eletromagnética decai ao longo da interface, significando que houve uma absorção de energia pelo meio.

A Fig. 11 apresenta a relação de dispersão do plasmon-poláríton do grafeno do modo TM em uma interface ar - grafeno - ar considerando as situações com ou sem perdas. Um fator interessante da Fig. 11 é que a relação de dispersão do GSP é deslocada para frequências mais altas em relação à curva preta para o caso sem perdas ( $\hbar\gamma = 0$ ) quanto maior for o valor  $\hbar\gamma$ . O valor escolhido para  $\hbar\gamma$  de 3, 7 meV corresponde a um parâmetro de amortecimento típico obtido a partir de medições de transporte (Li *et al.*, 2008), enquanto  $\hbar\gamma = 20$  meV corresponde a um valor bastante alto.

Analisando a Fig. 11 à primeira vista, pode-se pensar que deveria ser possível excitar GSPs diretamente usando radiação eletromagnética de propagação livre, uma vez que as curvas de dispersão dos GSPs cruzam as linhas de luz em um determinado ponto. No entanto, a região plotada na Fig. 11 cai dentro do regime de superamortecido ( $\omega_{spp}/\gamma < 1$ ), nos quais os GSPs (e SPPs em geral) não podem ser sustentados. Embora a presença de um *damping* diferente de zero não altere significativamente o comportamento da curva de dispersão, esse parâmetro desempenha um papel importante na atenuação dos SPPs, que aumenta com o aumento de  $\gamma$ . Entretanto muitas vezes, as perdas são o principal fator limitante em sistemas plasmônicos, de modo que geralmente se deseja um valor de  $\gamma$  menor possível (Boltasseva; Yan *et al.*, 2012, 2013).

## 1.6 Exemplos: Plasmons de superfície localizados em sistemas com deformações

Nas seções anteriores exploramos os casos mais simples de sistemas para excitar os plasmon-polárítons de superfície, onde tínhamos apenas uma única interface e esta era plana. Discutimos ambos os casos com ou sem a presença de uma monocamada de grafeno localizado na interface plana entre dois meios, demonstrando qual o efeito da densidade de carga induzida na folha de

grafeno faz na excitação dos plasmon-polárítos de superfície. Existem diferentes formas para localizar e manipular os plasmon-polárítos de superfície, seja por confinamento estrutural por pequenas regiões tais como discos e nanofitas (Gonçalves, 2016) ou através do uso de superfícies deformadas (Maradudin; Rahman; Chaves; Smirnova; Hershko, 1982, 1986, 1990, 1980, 2018, 2016, 2019). Propostas de excitação dos plasmon-polárítos em sistemas deformados dentro do ramo da plasmônica remontam das décadas de 80 e 90 nos trabalhos reportados por Alexei A. Maradudin e colaboradores (Maradudin; Rahman, 1982, 1986, 1985, 1980). Após a descoberta do grafeno buscou-se avaliar qual era o efeito que este material faria na excitação dos plasmon-polárítos de superfície nessas interfaces com deformidades. Dessa maneira, na presente seção vamos destacar resumidamente algumas ideias levantadas por alguns desses trabalhos e seus resultados mais importantes que nos motivaram a realizar o estudo discutido nesta dissertação: Plasmons de superfície localizados em uma folha de grafeno deformada. Nas Subseções 1.6.1, 1.6.2, 1.6.3, 1.6.4, e 1.6.5 vamos apresentar os trabalhos citados anteriormente.

### **1.6.1 Plasmon-polárítos de superfície em uma interface com deformação bidimensional**

Começamos apresentando um dos primeiros trabalhos que temos conhecimento no tema de plasmons localizados devido a presença de interface deformada publicado em 1985 por Maradudin e Visscher. O mencionado artigo se propõe a estudar os plasmon-polárítos de superfície em uma interface que possui uma determinada deformação bidimensional  $\zeta(x, y) \neq 0$ . Diferentemente da abordagem tratada nas seções anteriores utilizando os campos eletromagnéticos, os autores do artigo fizeram o estudo através do potencial eletrostático impondo soluções para os plasmon-polárítos de superfície através da equação de Laplace. O sistema investigado por eles está mostrado na Fig. 12 que consiste de três meios: vácuo, um metal e um meio dielétrico. A deformidade está na interface vácuo - metal. A Fig. 13 mostra a relação de dispersão para o caso das interfaces (painel da esquerda) planas e (painel da direita) deformada de acordo com a ilustração da Fig. 12. No caso com deformação em uma das interfaces (no caso, na interface vácuo-metal) é mostrado as frequências plasmônicas para os três primeiros modos. Observa-se que no caso onde a deformação é levada em consideração, o espectro plasmônico se encontra em regiões de frequência onde não eram possíveis no sistema não deformado ( $\omega_p/\sqrt{2} > \omega > \omega_p/\sqrt{\epsilon_d + 1}$  e  $\omega > \omega_p$ ), assim a presença de uma deformidade melhora a capacidade de atenuar as ondas de superfície com o aparecimento de novos modos de superfície.

Figura 12: Uma protuberância na superfície de um filme metálico em um substrato dielétrico semi-infinito. Figura adaptada da Ref (Maradudin, 1985).

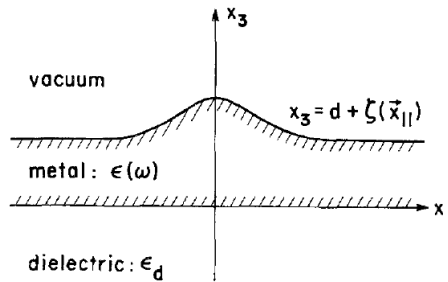
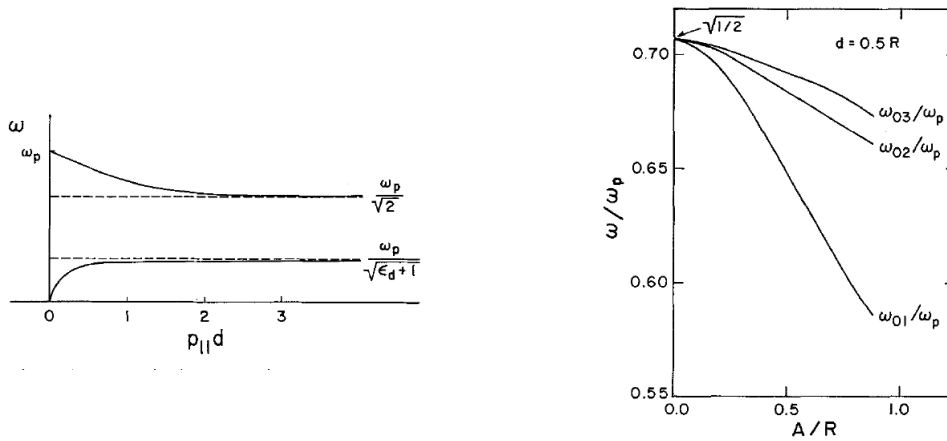


Figura 13: Relação de dispersão para o sistema vácuo - metal - dielétrico (painel da esquerda) sem deformação nas interfaces e (painel da direita) deformado como ilustrado na Fig. 12, apresentando os três primeiros modos plasmônicos. Figura adaptada da Ref (Maradudin, 1985).

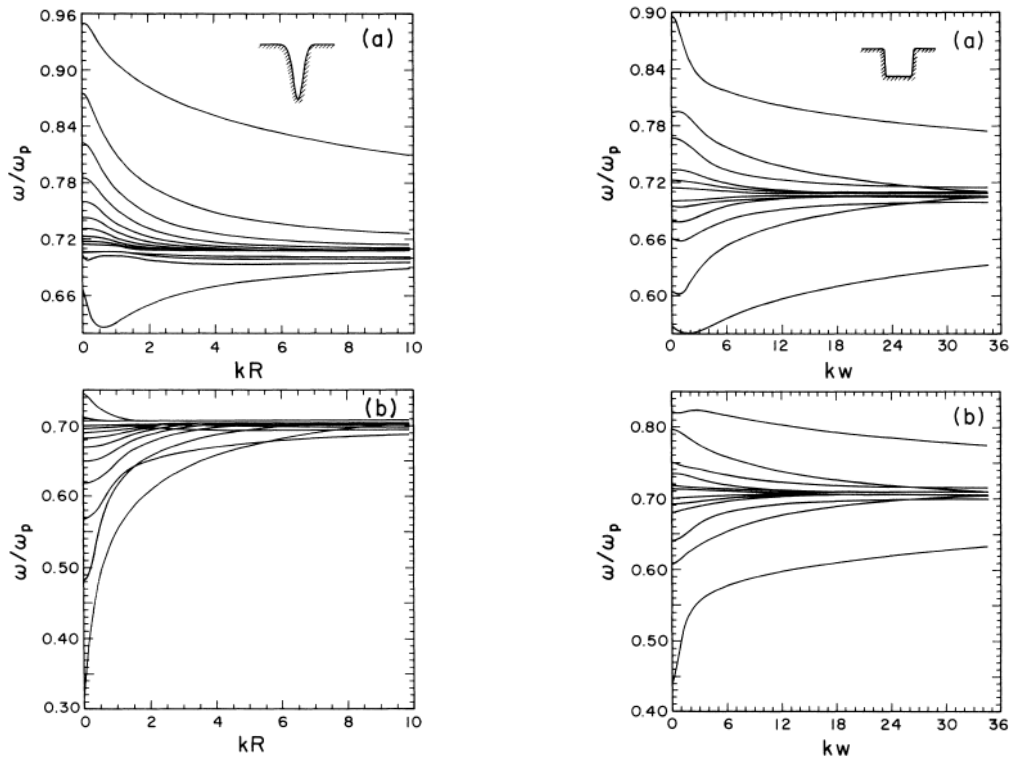


### 1.6.2 Plasmons de canais: Interface com deformação unidimensional

Seguindo a mesma linha de estudo de sistemas plasmônicos deformados, J. Q. Lu e A. A. Maradudin em 1990 se propuseram a encontrar a relação de dispersão para sistemas com uma interface metal - dielétrico possuindo uma deformação unidimensional, de maneira análoga a um canal. Dois tipos de deformações foram investigados, como mostra a Fig. 14: (painéis da esquerda) uma deformação do tipo gaussiana e (painéis da direita) do tipo poço quadrado. O artigo observou que novos modos foram encontrados em regiões de frequência que para o caso planar não eram possíveis. No caso da interface metal - dielétrico plana, como já visto, os plasmon-polártons de superfície só podiam ser excitados na região  $\omega < \omega_p/\sqrt{2}$ , tomando por exemplo o caso de *damping* nulo ( $\gamma = 0$ ). Dessa maneira, notou-se que a presença das deformações aumentaram a região do espectro de frequências para os plasmon-polártons de superfície, encontrando-se vários modos plasmônicos nas regiões  $\omega < \omega_p/\sqrt{2}$ ,  $\omega > \omega_p/\sqrt{2}$  e

$\omega > \omega_p$  com simetrias (painéis de cima) par e (painéis de baixo) ímpar, chamados de plasmons de canais (do inglês, *channel plasmons*), em virtude da geometria unidimensional de localização dos modos. O mesmo foi verificado para um canal na presença de um filme, como é reportado na Ref. [?], onde modos foram encontrados nas regiões  $\frac{\omega_p}{\sqrt{\epsilon_d + 1}} < \omega < \omega_p/\sqrt{2}$  como mostra a Fig. 13 (painel da direita).

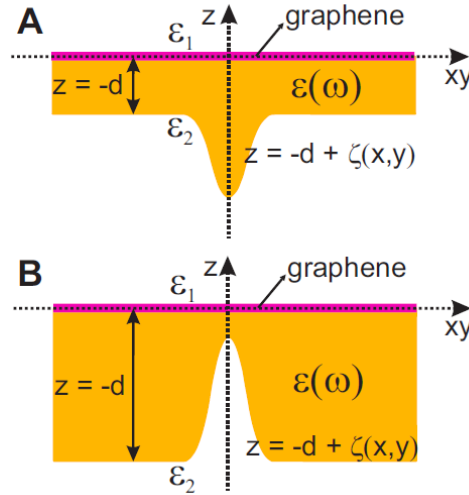
Figura 14: Plasmons de canais. Relação de dispersão para o sistema vácuo - metal - dielétrico com uma deformação do tipo (painéis da esquerda) gaussiana e (painéis da direita) poço quadrado. Painéis superiores e inferiores correspondem aos modos pares e ímpares, respectivamente. Figura adaptada da Ref (Maradudin, 1990).



### 1.6.3 Plasmons de canais em grafeno plano e substrato com deformação unidimensional

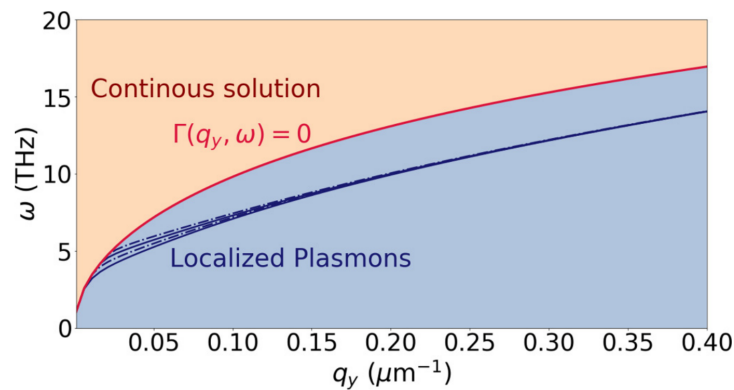
Com o surgimento da área de nanoplasmonica de grafeno, um caminho natural foi investigar diferentes propostas para localizar os plasmon-polárítons de superfície com a presença de deformações. Nesse sentido, o trabalho realizado pelos orientadores do presente projeto (Chaves, Peres, Costa *et al.*, 2018) estudou os plasmon-polárítons de superfície em um sistema formado por três meios lineares, onde uma das interfaces possui uma deformação  $\zeta(x, y)$  e na região  $z = 0$

Figura 15: Deformação  $\zeta(x, y)$  do tipo (a) protuberância e (b) indentação no substrato dielétrico com constante dielétrica  $\epsilon(\omega)$  e de espessura  $d$ . Uma folha plana de grafeno é localizada em  $z = 0$  entre os meios dielétricos 1 e 2. Figura adaptada da Ref. (Chaves, Peres, Costa *et al.*, 2018)



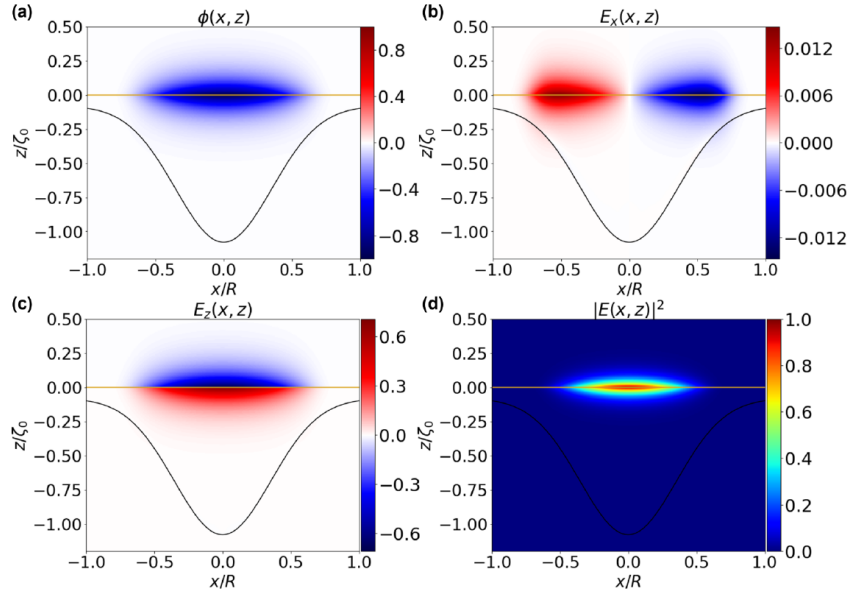
existe uma monocamada de grafeno com uma densidade superficial de carga  $\sigma_g \neq 0$ , conforme está ilustrado na Fig. 15.

Figura 16: Relação de dispersão para os plasmons localizados. A curva vermelha sólida  $\Gamma(q_y, \omega) = 0$  é a solução para o caso não deformado. As curvas azuis tracejadas correspondem aos modos plasmônicos localizados para o caso deformado. Frequências acima da curva analítica correspondem a modos contínuos. Os parâmetros usados foram:  $\epsilon_1 = 1.4$ ,  $\epsilon_2 = 1 = 1$ ,  $\epsilon = 4$ ,  $E_F = 0.2\text{eV}$ ,  $d = 2\text{ }\mu\text{m}$ ,  $R = 250\text{ }\mu\text{m}$  e  $\zeta_0 = 25\text{ }\mu\text{m}$ . Figura adaptada da Ref. (Chaves, Peres, Costa *et al.*, 2018).



O objetivo do trabalho foi encontrar a relação de dispersão dos plasmon-polaritons de superfície para os sistemas apresentados na Fig. 15, assim como verificar o comportamento dos potenciais e campos elétricos em todo o espaço. A relação de dispersão reportada na Ref. [?] é mostrada na Fig. 16. Nota-se duas regiões com cores distintas correspondendo as regiões onde se tem soluções dos plasmons confinados (azul) e solução contínua (vermelha). De acordo com a Fig. 16, nota-se que a presença da deformação gerou uma redução nas frequências plasmônicas

Figura 17: Potencial e campo elétricos dos plasmon-polártons de superfície para o sistema ilustrado na Fig. 15(a). A linha preta mostra o limite entre as regiões dos dielétricos,  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$ , e a linha dourada representa a folha de grafeno. Os resultados são para a primeira solução par. Painéis: (a) Campo do Potencial; Componentes (b)  $x$  e (c)  $z$  do campo elétrico; (d) Quadrado do valor absoluto do campo elétrico. Parâmetros:  $\epsilon_1 = 1.4$ ,  $\epsilon_2 = 1$ ,  $d = 2 \mu m$ ,  $R = 250 \mu m$ ,  $\zeta_0 = 25 \mu m$  e  $q_y = 0.4 \mu m^{-1}$ . Figura adaptada da Ref (Chaves, Peres, Costa *et al.*, 2018)



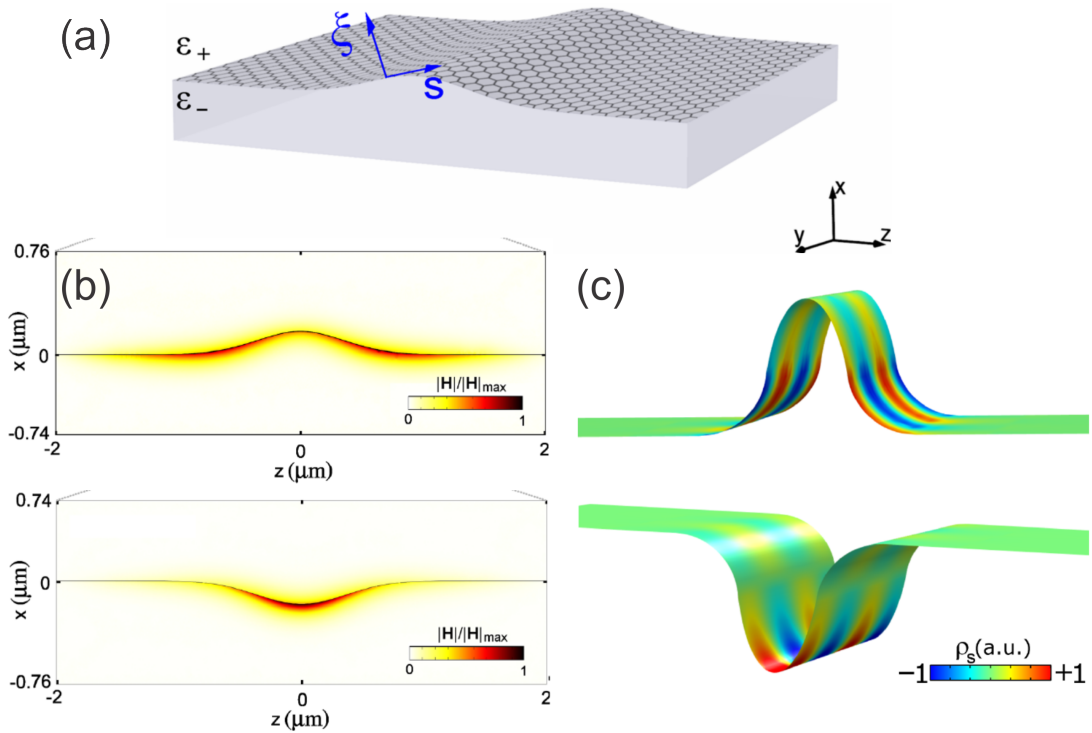
assim como os campos elétricos para esses modos ficaram confinados à região da deformação, como mostra a Fig. 17 para um dos modos plasmônicos. Os modos, seja do contínuo ou os localizados, foram encontrados em frequências da ordem do THz, como esperado devido a presença do grafeno. Um parâmetro importante na relação de dispersão desse sistema é a energia de Fermi do grafeno, pois o espectro plasmônico possui uma dependência com  $E_F$ , como mostra a Eq. (1.81). Dessa maneira, podemos sintonizar as frequências plasmônicas ajustando o parâmetro  $E_F$ . Fisicamente falando, isto é possível através de uma dopagem química no grafeno, alterando a energia de Fermi na sua estrutura de bandas e consequentemente gerando novos modos no espectro de momentos e frequências.

#### 1.6.4 Plasmons de canais em grafeno curvo

D. Smirnova e colaboradores em 2016 publicaram o trabalho reportado na Referência (Smirnova *et al.*, 2016) em que estudaram os modos plasmônicos em um substrato deformado, com uma protuberância e um declive, coberto com uma monocamada de grafeno, conforme ilustra a Fig. 18. Como metodologia, eles utilizaram um método analítico baseado nas equações de Maxwell sob certas aproximações e outro método via simulação com o *software* COMSOL,

com a finalidade de comparar os resultados. Eles reportaram a presença de modos confinados de canais na interface, como mostram as Figs. 18(b) e 18(c) com resultados obtidos via modelagem analítica e computacional, respectivamente. Observou-se que a maior concentração da densidade superficial de carga calculada via COMSOL [Fig. 18(c)] se distribuía exatamente nas regiões onde o campo magnético calculado analiticamente era mais intenso [Fig. 18(b)]. É importante destacar que este estudo realizado não apresenta de forma sistemática as relações de dispersões para os diferentes parâmetros geométricos da superfície gaussiana, como pretendemos mostrar. Além disso, eles reportaram a presença de apenas dois modos confinados para um dado valor de momento fixo. Enquanto espera-se obter mais modos no limite de frequências com valor inferior ao do contínuo (ver Fig. 16 para comparação).

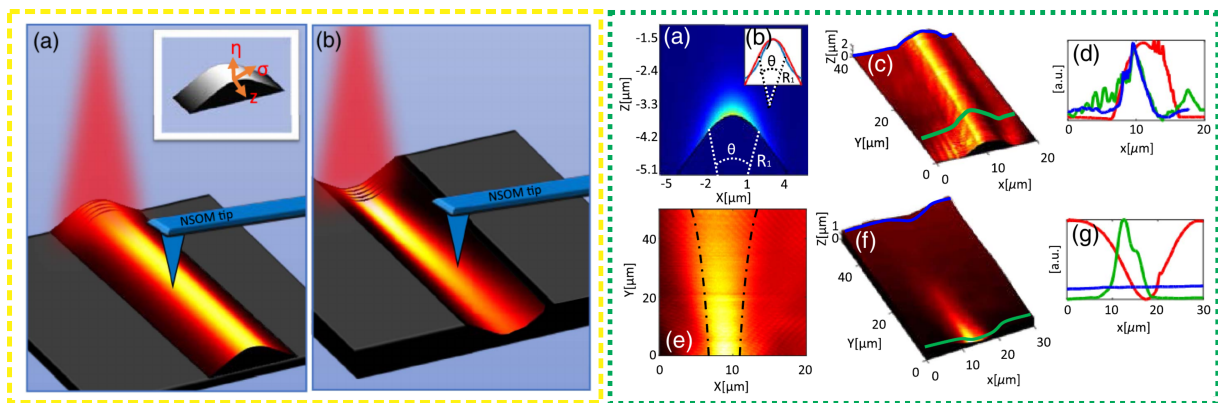
Figura 18: (a) Vista esquemática de um substrato curvo coberto por grafeno, correspondendo a uma superfície curva unidimensional. (b) Distribuição do campo magnético normalizado para duas interfaces deformadas, uma com protuberância (cima) e um declive (baixo), obtidos analiticamente. (c) Distribuição da densidade de cargas dos modos de canais para os sistemas do painel (b) só que estes foram obtidos através de simulação numérica utilizando-se o programa COMSOL. Figura adaptada da Ref (Smirnova *et al.*, 2016).



### 1.6.5 Plasmon-polárítons de superfície em superfícies curvas: Investigação experimental

Recentemente, trabalho liderado pelo pesquisador Ady Arie da Tel-Aviv University de Israel (Hershko; Shiloh; Arie, 2019), relatou resultados experimentais medindo a distribuição de intensidade dos plasmon-polárítons de superfície em perfis curvados, tanto no caso de protuberância [ver painel (a) da esquerda na Fig. 19] como de declive [ver painel (b) da esquerda na Fig. 19]. Foi utilizada a técnica experimental de microscopia de varredura de campo próximo (NSOM). Os resultados experimentais foram comparados com os resultados teóricos obtidos via *software* Lumerical, conforme mostram os painéis da direita na Fig. 19. Pode-se notar que tanto as medições experimentais quanto as simulações numéricas mostram os campos eletromagnéticos se confinando na região da deformação. Percebe-se apenas uma leve assimetria no comportamento dos campos no painel (c) da direita na Fig. 19. Teoricamente isso não era esperado de ocorrer, sendo explicado por prováveis erros experimentais no manuseio da ponteira do NSOM.

Figura 19: No painel da esquerda temos o esquema experimental utilizado para medir a distribuição de intensidade dos plasmon-polárítons de superfície para uma (a) protuberância e um (b) declive. Essa medida é realizada usando um microscópio de varredura de campo próximo (NSOM). No painel da direita temos os resultados experimentais (c-g) e de simulações numéricas (a-b) desse sistema. Figura adaptada da Ref (Hershko; Shiloh; Arie, 2019).



Até o presente momento, nenhum trabalho experimental para superfícies deformadas com grafeno para obter os modos localizados de canais foram reportados ainda na literatura. Tal fato é bastante motivador, pois nos mostra que tal campo de estudo de estruturas deformadas com materiais bidimensionais possui grande expectativa de ser palco de futuras propostas de nanodispositivos plasmônicos baseados em nanoestruturas de materiais bidimensionais deformados.

## 1.7 Escopo do trabalho

Motivados por todo entusiasmo da área de nanoplasmônica e estruturas deformadas, no restante desta dissertação apresentaremos solução analítica para obtenção dos plasmon-polárítons de superfície em substrato deformado coberto com grafeno. Para tal, apresentaremos no Capítulo 2 as ferramentas matemáticas básicas para se tratar de superfícies rugosas com deformações bidimensionais ou unidimensionais, iremos expor o problema em si, e apresentar a solução analítica. No Capítulo 3, formularemos a abordagem numérica para resolver computacionalmente a equação de autovalor generalizado derivada no final do Capítulo 2. Resultados para a relação de dispersão e perfis dos potenciais para diferentes parâmetros da superfície deformada do tipo gaussiana são também discutidos. As conclusões e perspectivas são apresentadas no Capítulo 4.

## 2 MODELO TEÓRICO: PLASMONS DE SUPERFÍCIE LOCALIZADOS EM UMA FOLHA DE GRAFENO DEFORMADA

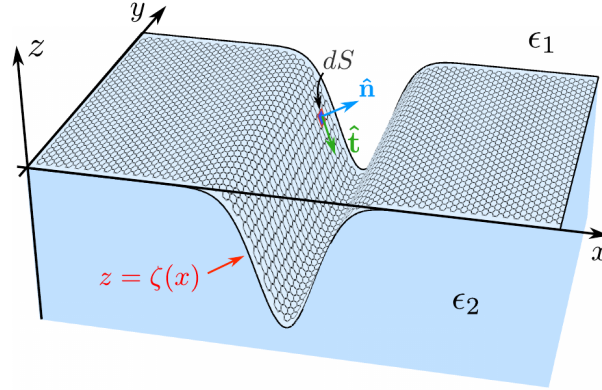
Neste capítulo apresentaremos formalismo matemático para estudar plasmons localizados em superfícies deformadas considerando uma folha de grafeno na interface seguindo o mesmo perfil do substrato deformado (ver Fig. 20). É importante mencionar que o procedimento desenvolvido ao longo das próximas seções é baseado na Ref (Gonçalves, 2016) (ver Seção 8.5 da Ref (Gonçalves, 2016)) que por sua vez considerou a presença de grafeno na interface entre vácuo e um dielétrico, adaptando toda a física de plasmons de superfície em superfícies rugosas e as ferramentas teóricas derivadas por Alexei A. Maradudin e colaboradores (Maradudin; Rahman, 1982, 1985, 1986, 1980) das décadas de 80 e 90.

Na Seção 2.1 apresentaremos quantidades matemáticas, tais como derivada ao longo da direção normal à superfície e elemento diferencial de superfície de área. Estas serão importantes no desenvolvimento matemático na formulação do problema exposto na Seção 2.2. Tendo em vista que o problema em questão a ser discutido aqui dos plasmons de canais com grafeno deformado se trata de um problema já reportado na literatura na Seção 8.5 da Ref (Gonçalves, 2016), dessa maneira objetivamos apresentar de forma bastante detalhada o passo a passo analítico para a obtenção da expressão de autovalor generalizado a ser resolvida numericamente. Vale destacar que durante o desenvolvimento matemático feito pelo prof. Nuno Peres, o autor resolveu particularizando o problema tomando o caso do momento  $k_y = 0$  ao longo da direção  $y$  [a saber Eq. (2.81)], o que por sua vez não deveria levar a encontrar resultados numéricos. Aqui não fizemos tal consideração e resolvemos numericamente a expressão não aproximada [a saber Eq. (2.78)].

### 2.1 Caracterização da Superfície Rugosa

É intuitivo de se pensar que as superfícies dos meios materiais ou mesmo as interfaces entre meios distintos não possuam em geral uma forma regular, mas sim são superfícies/interfaces rugosas. A seguir apresentaremos as ferramentas matemáticas básicas para se tratar de super-

Figura 20: Ilustração da geometria do problema, retratando um substrato com deformação suave gaussiana onde está depositado uma folha de grafeno. O perfil da superfície desta deformação 1D é caracterizado pela função  $\zeta(x)$ . O vetor unitário  $\hat{n}$  é normal à modulação de superfície, enquanto o vetor unitário  $\hat{t}$  é tangente a ela. Figura adaptada da ref (Gonçalves, 2016).



fícies rugosas determinísticas e aleatórias<sup>1</sup>, tal como o vetor gradiente normalizado ( $\hat{n}$ ), isto é, um vetor unitário perpendicular à superfície, a derivada normal ( $\partial/\partial n = \hat{n} \cdot \nabla$ ), e o elemento diferencial de área da superfície ( $ds$ ).

Sem perda de generalidade, tomando como superfície plana não-perturbada o plano  $z = 0$ . Na presença de rugosidades, a equação que define a superfície torna-se

$$z = \zeta(\mathbf{r}_{||}), \quad (2.1)$$

onde a função real  $\zeta(\mathbf{r}_{||})$  é chamada de *função perfil de superfície*, sendo uma função do vetor posição bidimensional  $\mathbf{r}_{||} = (x, y)$ , isto é, um vetor no plano  $z = 0$ . Assim, qualquer ponto na interface, que compõe o perfil rugoso, pode ser determinado por  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{||} + z\hat{\mathbf{z}}$ .

De uma maneira geral, em muitos problemas o vetor normal e o vetor unitário normal à superfície em cada ponto é necessário. Para uma superfície definida como

$$f(\mathbf{r}) = z - \zeta(\mathbf{r}_{||}), \quad (2.2)$$

o vetor normal é dado como o gradiente da função  $f(\mathbf{r}_{||})$ , tal como

$$\mathbf{n} = \nabla f(\mathbf{r}_{||}) = \left( -\frac{\partial \zeta(\mathbf{r}_{||})}{\partial x}, -\frac{\partial \zeta(\mathbf{r}_{||})}{\partial y}, 1 \right), \quad (2.3)$$

e imediatamente temos que o vetor unitário normal será o gradiente normalizado aplicado na

<sup>1</sup>Trataremos do caso aleatório depois como perspectiva para os trabalhos a serem desenvolvidos nessa dissertação

direção normal à  $f(\mathbf{r}_{||})$ , isto é

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\mathbf{n}}{|\mathbf{n}|} = \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(\mathbf{r}_{||})}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \zeta(\mathbf{r}_{||})}{\partial y} \right)^2 \right]^{-1/2} \left( -\frac{\partial \zeta(\mathbf{r}_{||})}{\partial x}, -\frac{\partial \zeta(\mathbf{r}_{||})}{\partial y}, 1 \right). \quad (2.4)$$

Dependendo da análise a ser feita e da forma da deformação na superfície pode-se tratar com o vetor unitário normalizado apontando para região  $z < \zeta(\mathbf{r}_{||})$  ou  $z > \zeta(\mathbf{r}_{||})$ . Consideraremos o caso em que a região  $z > \zeta(\mathbf{r}_{||})$  é vácuo enquanto que a região  $z < \zeta(\mathbf{r}_{||})$  é ocupada por um meio dielétrico. Para remover ambiguidades que possam surgir, vamos utilizar o subscrito  $>$  and  $<$  para denotar o vetor  $\hat{\mathbf{n}}$  apontando para a região  $z < \zeta(\mathbf{r}_{||})$  ou  $z > \zeta(\mathbf{r}_{||})$ , respectivamente, tal que

$$\hat{\mathbf{n}}_> = \hat{\mathbf{n}} = -\hat{\mathbf{n}}_<. \quad (2.5)$$

Como veremos, duas quantidades que precisaremos nas próximas seções são a derivada ao longo da direção normal à superfície, dada por

$$\frac{\partial}{\partial n} = \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla = \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(\mathbf{r}_{||})}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \zeta(\mathbf{r}_{||})}{\partial y} \right)^2 \right]^{-1/2} \left( -\frac{\partial \zeta(\mathbf{r}_{||})}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial \zeta(\mathbf{r}_{||})}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (2.6)$$

e o elemento diferencial de superfície de área,  $dS$ , expressa por

$$dS = \frac{d\mathbf{r}_{||}}{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{z}}} = \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(\mathbf{r}_{||})}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \zeta(\mathbf{r}_{||})}{\partial y} \right)^2 \right]^{1/2} d\mathbf{r}_{||}, \quad (2.7)$$

onde  $d\mathbf{r}_{||} = dx dy$  é o elemento diferencial de área no plano  $z = 0$ .

Para o caso de deformações unidimensionais, temos que a função perfil da superfície rugosa [Eq. 2.1] depende agora apenas de uma coordenada. Perfis com formato de Gaussianas ou Lorentzianas são os comumente considerados por permitirem soluções analíticas. Na Fig. 20, considera-se uma ranhura Gaussiana ao longo da direção  $x$  da seguinte forma

$$z = \zeta(x) = A e^{-x^2/R^2}, \quad (2.8)$$

onde  $A$  e  $R$  são constantes associadas com a amplitude e largura da deformação Gaussiana, respectivamente. Note que se  $A > 0$  ou  $A < 0$  gera-se uma superfície com uma protuberância ou declive. No caso genérico de uma deformação unidimensional  $z = \zeta(x)$ , o vetor normal normalizado [Eq. (2.4)], a derivada ao longo da direção normal [Eq. (2.6)], e o elemento diferencial

[Eq. (2.7)] tornam-se respectivamente:

$$\hat{\mathbf{n}} = \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x)}{\partial x} \right)^2 \right]^{-1/2} \left( -\frac{\partial \zeta(x)}{\partial x}, 0, 1 \right), \quad (2.9a)$$

$$\frac{\partial}{\partial n} = \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x)}{\partial x} \right)^2 \right]^{-1/2} \left( -\frac{\partial \zeta(x)}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (2.9b)$$

$$dS = \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x)}{\partial x} \right)^2 \right]^{1/2} d\mathbf{r}_{\parallel}. \quad (2.9c)$$

Outro vetor associado à superfície que irá nos ajudar a descrever o problema com geometria deformada unidimensional é o vetor unitário tangente à superfície, como ilustrado pelo vetor verde na Fig. 20 e dado por

$$\hat{\mathbf{t}} = \frac{\mathbf{t}}{|\mathbf{t}|} = \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(\mathbf{r}_{\parallel})}{\partial x} \right)^2 \right]^{-1/2} \left( 1, 0, \frac{\partial \zeta(\mathbf{r}_{\parallel})}{\partial x} \right). \quad (2.10)$$

## 2.2 Formulação do problema

Trataremos o problema de uma folha de grafeno contínua deformada no plano  $xy$ . Com a abordagem descrita na Seção 2.1 podemos considerar diferentes formas de superfícies rugosas, com perfis unidimensionais (1D) ou bidimensionais. Nós assumiremos que a folha de grafeno é corrugada para formar uma ranhura 1D, como apresentado na Fig. 20, afim de reproduzir os resultados da Seção 8.5 da Ref. [?]. Dessa maneira, o sistema consiste de uma folha de grafeno corrugada localizada na interface  $[z = \zeta(x)]$  entre vácuo [região  $z > \zeta(x)$ ] e um meio dielétrico [região  $z < \zeta(x)$ ]. O objetivo é determinar como o espectro de plasmon-polaritons no grafeno não-deformado e modificado pela presença da deformação e comparar tais resultados na ausência de grafeno na interface, como reportado na literatura por Alexei A. Maradudin e colaboradores (Maradudin; Rahman, 1982, 1985, 1986, 1980) em trabalhos das décadas de 80 e 90.

Para determinar o espectro dos Plasmons polárítions de superfície desse sistema, nós iremos trabalhar no limite eletrostático (Abajo, 2013), onde consideramos que o vetor de onda plasmônico  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  é muito maior que o vetor de onda da radiação livre no espaço, assim poderemos utilizar as equações da eletrostática, como veremos em detalhes adiante. Nesse regime não há efeitos de retardamento. Assumiremos que não existe cargas no espaço ao redor da

folha de grafeno, exceto no próprio grafeno e procuraremos soluções nessas regiões aplicando as condições de contorno adequadas. Denotaremos a densidade de carga de superfície atribuída ao grafeno por  $\rho_{2D}$ .

Como visto no Capítulo 1, sabemos que o campo eletromagnético em regiões onde não há presença de cargas e correntes se propaga governado pelas equações abaixo

$$\nabla^2 \vec{E}_j = \mu_j \epsilon_j \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}, \quad (2.11a)$$

$$\nabla^2 \vec{B}_j = \mu_j \epsilon_j \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}, \quad (2.11b)$$

lembrando que o índice  $j$  se refere aos meios abaixo e acima da folha de grafeno deformada ( $j = 1, 2$ ).

Para encontrarmos soluções para os campos que ditam o comportamento plasmônico em sistemas deformados é necessário descrever os campos de uma maneira mais geral. Podemos fazer isso através de uma transformada de Fourier no espaço dos momentos, pois uma onda plana não irá satisfazer as condições de contorno devido a deformação, como veremos adiante em detalhes. Considerando que os campos sejam da seguinte forma  $\vec{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$ ,  $\vec{B}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$ , substituindo na Eq. (2.11a) chegamos na equação de Helmholtz.

$$\nabla^2 \vec{E}_j(\mathbf{r}) + \mu_j \epsilon_j \omega^2 \vec{E}_j(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.12a)$$

$$\nabla^2 \vec{B}_j(\mathbf{r}) + \mu_j \epsilon_j \omega^2 \vec{B}_j(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.12b)$$

Fazendo a transformada de Fourier (o mesmo procedimento é feito no campo magnético) no campo elétrico teremos,

$$\vec{E}_j = \int \int \vec{E}_{0,j}(k_x, k_y) e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{-k_j |z|} dk_x dk_y. \quad (2.13)$$

Substituindo a Eq. (2.13) na Eq. (2.12a) e tomando o laplaciano, temos que

$$\begin{aligned} & \int \int dk_x dk_y \vec{E}_{0,j}(k_x, k_y) e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{-k_j |z|} [-k_x^2 - k_y^2 + k_j^2 \text{sgn}^2(z)] \\ &= - \int \int dk_x dk_y \vec{E}_{0,j}(k_x, k_y) e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{-k_j |z|} \mu_j \epsilon_j \omega^2. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Para que essa igualdade seja válida, as funções integradas no espaço de momentos em ambos os

membros devem ser iguais, o que resulta na seguinte relação

$$k_j = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 - \mu_j \epsilon_j \omega^2}. \quad (2.15)$$

Note que  $\mu_j \epsilon_j \omega^2$  é o vetor de onda da radiação livre no espaço. Se trabalharmos no regime onde  $k_y^2 \gg \mu_j \epsilon_j \omega^2$ , teremos que  $k_j = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ . Se atuarmos com o laplaciano no campo elétrico (com  $k_j$  sendo dado por Eq. (2.15)), veremos que este se anula. Isso é o equivalente a estarmos resolvendo a equação de onda sem efeitos de retardamento, ou seja, estamos tratando de um regime eletrostático. Assim, nesse regime os campos  $\vec{E}$  e  $\vec{B}$  são dados por

$$\nabla^2 \vec{E}_j = 0, \quad (2.16a)$$

$$\nabla^2 \vec{B}_j = 0. \quad (2.16b)$$

Agora como o laplaciano dos campos é nulo, fisicamente seria o mesmo que considerar que a velocidade da luz seja infinita  $\left( \lim_{v_j \rightarrow \infty} \nabla^2 \vec{E}_j = \lim_{v_j \rightarrow \infty} \frac{1}{v_j^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \right)$ . Utilizando a seguinte identidade vetorial  $\nabla \times (\nabla \times \lambda) = \nabla(\nabla \cdot \lambda) - \nabla^2 \lambda$  e como  $\nabla \cdot \vec{E}_j = 0$  (já que estamos em regiões onde não há carga) e  $\nabla \cdot \vec{B}_j = 0$ , temos que

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}_j) = \nabla \times \left( -\frac{\partial \vec{B}_j}{\partial t} \right) = 0, \quad (2.17a)$$

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{B}_j) = \nabla \times \left( -\frac{\partial \vec{E}_j}{\partial t} \right) = 0. \quad (2.17b)$$

Como os campos possuem dependência temporal da forma  $e^{-i\omega t}$ , a única possibilidade para satisfazer as Eqs. (2.17a) e (2.17b) seriam que os campos  $\vec{E}$  e  $\vec{B}$  fossem campos irrotacionais  $\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0$  e  $\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0$  (lembrando que o campo magnético tem rotacional nulo apenas porque estamos em uma região onde não há densidade de corrente). Dessa forma, o campo elétrico é descrito de acordo com na eletrostática  $E = -\nabla \phi(\mathbf{r}, t)$ . Então, iremos descrever o problema em função do potencial elétrico. Com este determinado, o campo elétrico é trivialmente encontrado.

Para derivarmos as equações que governam a propagação dos plasmons de superfície através da superfície rugosa, encontraremos os potenciais nas regiões ao redor do grafeno e utilizaremos as condições de contorno para descrever a propagação na interface no grafeno. Como não existe cargas no espaço ao redor da folha de grafeno, os potenciais nas regiões acima e abaixo da folha

de grafeno satisfazem a equação de Laplace, isto é

$$\nabla^2 \phi_{>}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \text{para } z > \zeta(x), \quad (2.18a)$$

$$\nabla^2 \phi_{<}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \text{para } z < \zeta(x). \quad (2.18b)$$

Considerando o regime linear de ondas monocromáticas, podemos assumir soluções do tipo

$$\phi_{>}(\mathbf{r}, t) = \phi_{>}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}, \quad (2.19)$$

com a dependência temporal em decomposições de Fourier.

Utilizando o método da separação de variáveis, as soluções das Eqs. (2.18a) e (2.18b) são dadas de maneira geral, respectivamente, por

$$\phi_{>}(\mathbf{r}) = \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x + k_y y)} e^{-k_{||} z} dk_x \quad \text{para } z > \zeta(x), \quad (2.20a)$$

$$\phi_{<}(\mathbf{r}) = \int \frac{B(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x + k_y y)} e^{k_{||} z} dk_x \quad \text{para } z < \zeta(x). \quad (2.20b)$$

Para a deformação 1D ao longo da direção  $x$ , como apresentado na Fig. 20, temos que o sistema possui simetria translacional ao longo da direção  $y$ , e consequentemente  $k_y$  é bem definido. É importante enfatizar que na região chamada selvedge region ( $0 > z > \zeta(x)$ ) nós não podemos utilizar as soluções descritas acima devido ao fato de que nessa região existe uma dependência das variáveis (nesse caso  $z$  e  $x$ ) que modifica a equação de laplace e consequentemente a combinação linear de ondas planas dada pelas Eqs. (2.20a) e (2.20b) não são soluções. Entretanto se assumirmos um regime de baixas curvaturas (aproximação de rayleigh) nós podemos considerar a expansão em ondas planas como solução e assim aplica-las nas condições de contorno.

De acordo com as condições de contorno na superfície,  $z = \zeta(x)$ , para a continuidade do potencial e para a descontinuidade da componente normal do vetor deslocamento elétrico, temos respectivamente que

$$\phi_{>}(\mathbf{r}, t)|_{z=\zeta(x)} = \phi_{<}(\mathbf{r}, t)|_{z=\zeta(x)}, \quad (2.21a)$$

$$\epsilon_1 \frac{\partial \phi_{>}(\mathbf{r}, t)}{\partial n} \Big|_{z=\zeta(x')} - \epsilon_2 \frac{\partial \phi_{<}(\mathbf{r}, t)}{\partial n} \Big|_{z=\zeta(x)} = -\frac{\rho_{2D}(\mathbf{r}, t)}{\epsilon_0}, \quad (2.21b)$$

onde  $\rho_{2D}$  é a densidade de carga superficial na folha de grafeno.  $\epsilon_0$  é a permissividade no vácuo,  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  são as permissividades relativas acima e abaixo da folha de grafeno, respectivamente,

como esquematizado na Fig. 20. Vale ressaltar que determinaremos o potencial elétrico nas diferentes regiões do espaço aplicando as condições de contorno [Eqs. (2.21a) e (2.21b)] combinado com o uso do teorema de Green, como será tratado na próxima seção. Tal procedimento resultará em uma equação integral para o coeficiente  $A(k_x)$  associado ao potencial elétrico na região  $z > \zeta(x)$ , que será resolvida numericamente como um problema de autovalor generalizado.

### 2.3 Teorema de Green, funções de Green e o problema do autovalor

O teorema de Green para funções escalares  $u$  e  $v$  diz que

$$\int_V (u \nabla^2 v - v \nabla^2 u) d^3r = \int_\Sigma \left( u \frac{\partial v}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n} \right) ds, \quad (2.22)$$

onde  $V$  é o volume limitado pela superfície  $\Sigma$ . Vamos utilizar as chamadas funções de Green, cuja são funções que satisfazem a seguinte equação diferencial

$$\nabla^2 G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.23)$$

Através da Eq. (2.23) concluímos que  $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ . Utilizando a transformada de Fourier na função de Green, temos que

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int \frac{G(\mathbf{q})}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d^3q, \quad (2.24)$$

onde  $q \equiv |\mathbf{q}| = \sqrt{q_x^2 + q_y^2 + q_z^2}$  e a função delta é então dada por

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d^3q. \quad (2.25)$$

Substituindo as Eqs. (2.24) and (2.25) na Eq. (2.23), obtem-se que

$$\nabla^2 \int \frac{G(\mathbf{q})}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d^3q = - \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d^3q. \quad (2.26)$$

O Laplaciano atua dentro da integral na variável de espaço (sem o símbolo  $\prime$ ), o que resulta em

$$\int \frac{G(\mathbf{q})}{(2\pi)^3} \nabla^2 e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d^3q = - \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d^3q, \quad (2.27)$$

com

$$\begin{aligned}
\nabla^2 e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} &= \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) e^{i[q_x(x-x') + q_y(y-y') + q_z(z-z')]} \\
&= e^{i[q_y(y-y') + q_z(z-z')]} \frac{\partial^2 e^{iq_x(x-x')}}{\partial x^2} + e^{i[q_x(x-x') + q_z(z-z')]} \frac{\partial^2 e^{iq_y(y-y')}}{\partial y^2} \\
&\quad + e^{i[q_x(x-x') + q_y(y-y')]} \frac{\partial^2 e^{iq_z(z-z')}}{\partial z^2} \\
&= i^2 q_x^2 e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} + i^2 q_y^2 e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} + i^2 q_z^2 e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \\
&= -e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} (q_x^2 + q_y^2 + q_z^2) \\
&= -q^2 e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} .
\end{aligned} \tag{2.28}$$

Dessa maneira, substituindo a Eq. (2.28) na Eq. (2.27), obtem-se que

$$- \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} G(\mathbf{q}) q^2 e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = - \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} . \tag{2.29}$$

Para que essa igualdade seja válida para um volume (no espaço dos  $q$ 's) arbitrário, as funções integradas em ambos os membros devem ser iguais, o que resulta em

$$G(\mathbf{q}) = \frac{1}{q^2} . \tag{2.30}$$

Assim, da Eq. (2.24) temos que a função de Green no espaço das posições será dada por

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{q^2} d^3 q \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint \frac{e^{i[q_x(x-x') + q_y(y-y') + q_z(z-z')]} }{q_x^2 + q_y^2 + q_z^2} dq_x dq_y dq_z \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \iint \frac{e^{i\mathbf{q}_{||} \cdot (\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})} e^{iq_z(z-z')}}{q_{||}^2 + q_z^2} d\mathbf{q}_{||} dq_z \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q}_{||} e^{i\mathbf{q}_{||} \cdot (\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})} \left[ \frac{1}{2\pi} \int \frac{e^{iq_z(z-z')}}{q_{||}^2 + q_z^2} dq_z \right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q}_{||} e^{i\mathbf{q}_{||} \cdot (\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})} \left[ \frac{1}{2\pi} \frac{\pi e^{-q_{||}|z-z'|}}{q_{||}} \right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q}_{||} \frac{e^{-q_{||}|z-z'|}}{2q_{||}} e^{i\mathbf{q}_{||} \cdot (\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})} ,
\end{aligned} \tag{2.31}$$

onde  $q^2 = q_{||}^2 + q_z^2$ ,  $\mathbf{q}_{||} = (q_x, q_y)$ ,  $q_{||} \equiv |\mathbf{q}_{||}| = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$ , e  $dq_{||} = dq_x dq_y$ . Nos últimos passos

realizamos a integral usando as técnicas de integração de contornos no plano complexo, tomando o contorno na metade superior do plano (isto é, contendo o pólo  $q_z = iq_{||}$ ) quando  $z - z' > 0$ , e tomando o contorno na metade inferior do plano (isto é, contendo o pólo  $q_z = -iq_{||}$ ) para  $z - z' < 0$ , tal como

$$\begin{aligned}
 \int_C \frac{e^{iq_z(z-z')} dq_z}{q_{||}^2 + q_z^2} &= \int_C \frac{e^{iq_z z} dq_z}{(q_z + iq_{||})(q_z - iq_{||})} \\
 &= \int_C dq_z \frac{e^{iq_z(z-z')}}{2iq_{||}} \left[ \frac{1}{(q_z - iq_{||})} - \frac{1}{(q_z + iq_{||})} \right] \\
 &= \frac{\pi}{q_{||}} \begin{cases} \text{Res}_{q_z=iq_{||}} f(q_z) & \text{for } z - z' \geq 0 \\ \text{Res}_{q_z=-iq_{||}} f(q_z) & \text{for } z - z' < 0 \end{cases} \\
 &= \frac{\pi e^{-q_{||}|z-z'|}}{q_{||}}.
 \end{aligned} \tag{2.32}$$

Utilizando o teorema de Green, tomando na Eq. (2.22)  $u$  como o potencial ( $u \rightarrow \phi$ ) e  $v$  como a função de Green ( $v \rightarrow G$ ), temos que

$$\int_V (\phi \nabla^2 G - G \nabla^2 \phi) d^3r = \int_{\Sigma} \left( \phi \frac{\partial G}{\partial n} - G \frac{\partial \phi}{\partial n} \right) dS. \tag{2.33}$$

Uma vez que a função de Green satisfaz a Eq. (2.23) e o potencial  $\phi_{<}(\mathbf{r})$  satisfaz a equação de Laplace [Eq. (2.18b)], temos que o lado esquerdo da Eq. (2.33) fica

$$\begin{aligned}
 \int_V [\phi_{<}(\mathbf{r}) \nabla^2 G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \nabla^2 \phi_{<}(\mathbf{r})] d^3r &= \int_V [\phi_{<}(\mathbf{r}) (-\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) - G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \cdot 0] d^3r \\
 &= - \int_V \phi_{<}(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3r \\
 &= -\phi_{<}(\mathbf{r}') \theta_V(\mathbf{r}'),
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

onde definimos que

$$\theta_V(\mathbf{r}') = \int_V \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3r = \begin{cases} 1 & \text{se } \mathbf{r}' \in V \\ 0 & \text{se } \mathbf{r}' \notin V \end{cases}. \tag{2.35}$$

Combinando as Eqs. (2.33) and (2.34), e tendo em mente que o volume que estamos realizando a integração corresponde ao volume abaixo da superfície da folha de grafeno deformada, temos

para  $z < \zeta(x')$  e  $z > \zeta(x')$ , respectivamente, que

$$-\phi_{<}(\mathbf{r}')\theta_V(\mathbf{r}') = \int_{\Sigma} \left[ \phi_{<}(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')}{\partial n'} - G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \frac{\partial \phi_{<}(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right] dS', \quad (2.36a)$$

$$0 = \int_{\Sigma} \left[ \phi_{>}(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')}{\partial n'} - G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \frac{\partial \phi_{>}(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right] dS'. \quad (2.36b)$$

Considerando a Eq. (2.36a) e aplicando as condições de contorno [Eqs. (2.21a) e (2.21b)] para a solução na região  $z > \zeta(x')$ , encontra-se que lado esquerdo é zero, pois  $\theta_V(\mathbf{r})=0$ , e o lado direito da Eq. (2.36a) fica

$$\begin{aligned} & \int_{\Sigma} dS' \left[ \phi_{<}(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')}{\partial n'} - G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \frac{\partial \phi_{<}(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right] \Big|_{z'=\zeta(x')} \\ &= \int_{\Sigma} dS' \left[ \phi_{>}(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')}{\partial n'} - G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \left( \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \frac{\partial \phi_{>}(\mathbf{r}')}{\partial n'} + \frac{\rho_{2D}(\mathbf{r}')}{\epsilon_2 \epsilon_0} \right) \right] \Big|_{z'=\zeta(x')}, \end{aligned} \quad (2.37)$$

resultando em

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Sigma} dS' \left[ \phi_{>}(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')}{\partial n'} \right] \Big|_{z'=\zeta(x')} - \int_{\Sigma} dS' \left[ G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \frac{\partial \phi_{>}(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right] \Big|_{z'=\zeta(x')} \\ &\quad - \int_{\Sigma} dS' G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \left[ \frac{\rho_{2D}(\mathbf{r}')}{\epsilon_2 \epsilon_0} \right] \Big|_{z'=\zeta(x')}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Vamos agora calcular cada uma das integrais da Eq. (2.38). Para o cálculo da primeira delas utilizaremos a função de Green da Eq. (2.31) e o elemento diferencial de área superficial  $dS$ , dado na Eq. (2.9c) para o caso da deformação unidimensional. Primeiramente, aplicando a

derivada  $\partial/\partial n'$ , dada na Eq. (2.9b), na função de Green da Eq. (2.31), temos que

$$\begin{aligned}
\frac{\partial G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')}{\partial n'} &= \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} \left( -\frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \frac{\partial}{\partial x'} + \frac{\partial}{\partial z'} \right) \left[ \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q}_{||} \frac{e^{-q_{||}|z-z'|}}{2q_{||}} e^{i\mathbf{q}_{||} \cdot (\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})} \right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} \left\{ -\frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \int d\mathbf{q}_{||} \frac{e^{-q_{||}|z-z'|}}{2q_{||}} \frac{\partial [e^{i\mathbf{q}_{||} \cdot (\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})}]}{\partial x'} \right. \\
&\quad \left. + \int d\mathbf{q}_{||} \frac{e^{i\mathbf{q}_{||} \cdot (\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})}}{2q_{||}} \frac{\partial [e^{-q_{||}|z-z'|}]}{\partial z'} \right\} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} \left\{ \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \int d\mathbf{q}_{||} \frac{e^{-q_{||}|z-z'|}}{2q_{||}} i q_x e^{i\mathbf{q}_{||} \cdot (\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})} \right. \\
&\quad \left. + \int d\mathbf{q}_{||} \frac{e^{i\mathbf{q}_{||} \cdot (\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})}}{2q_{||}} q_{||} e^{-q_{||}|z-z'|} \right\} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} \left\{ \int d\mathbf{q}_{||} \frac{e^{-q_{||}|z-z'|}}{2q_{||}} e^{i\mathbf{q}_{||} \cdot (\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})} \left( q_{||} + i q_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right) \right\}, \quad (2.39)
\end{aligned}$$

onde usou-se a derivada da função módulo

$$f(z') = |z - z'| = \begin{cases} z - z', & \text{se } z - z' \geq 0 \\ -(z - z'), & \text{se } z - z' \leq 0 \end{cases}, \quad (2.40)$$

tal como

$$\frac{\partial f(z')}{\partial z'} = \frac{\partial |z - z'|}{\partial z'} = \begin{cases} +1, & \text{se } z - z' \geq 0 \\ -1, & \text{se } z - z' \leq 0 \end{cases}, \quad (2.41)$$

resultando  $\frac{\partial |z-z'|}{\partial z'} = +1$ , como estamos tomando a situação em que  $z - z' > 0$ , e assim

$$\frac{\partial [e^{-q_{||}|z-z'|}]}{\partial z'} = q_{||} e^{-q_{||}|z-z'|} \frac{\partial |z - z'|}{\partial z'} = q_{||} e^{-q_{||}|z-z'|}. \quad (2.42)$$

Agora, considerando o elemento diferencial de área superficial  $dS$  dado na Eq. (2.9c) e o

resultado da derivada dado pela Eq. (2.39), temos que a primeira integral na Eq. (2.38) fica

$$\begin{aligned}
\int dS' \left[ \phi_{>}(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')}{\partial n'} \right] &= \int d\mathbf{r}'_{\parallel} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{1/2} \left[ \phi_{>}(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')}{\partial n'} \right] \\
&= \int d\mathbf{r}'_{\parallel} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{1/2} \phi_{>}(\mathbf{r}') \left\{ \frac{1}{(2\pi)^2} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} \right. \\
&\quad \times \left[ \int d\mathbf{q}_{\parallel} \frac{e^{-q_{\parallel}|z-z'|}}{2q_{\parallel}} e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot (\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel})} \left( q_{\parallel} + i q_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right) \right] \Big\} \\
&= \int d\mathbf{r}'_{\parallel} \phi_{>}(\mathbf{r}') \left[ \int \frac{d\mathbf{q}_{\parallel}}{(2\pi)^2} \frac{e^{-q_{\parallel}|z-z'|}}{2q_{\parallel}} e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot (\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel})} \left( q_{\parallel} + i q_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right) \right]. \tag{2.43}
\end{aligned}$$

Vamos agora calcular o segundo termo da Eq. (2.38). Aplicando a derivada  $\partial/\partial n'$ , dada na Eq. (2.9b), no potencial  $\phi_{>}$ , dado pela Eq. (2.20a), e considerando o elemento diferencial de área superficial  $dS$ , dado na Eq. (2.9c), obtemos que

$$\begin{aligned}
&\int dS' \left\{ G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \frac{\partial \phi_{>}(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right\} \\
&= \int d\mathbf{r}'_{\parallel} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{1/2} \left\{ G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \frac{\partial}{\partial n'} \left[ \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x' + k_y y')} e^{-k_{\parallel} z'} dk_x \right] \right\} \\
&= \int d\mathbf{r}'_{\parallel} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{1/2} \left\{ G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} \right. \\
&\quad \times \left( -\frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \frac{\partial}{\partial x'} + \frac{\partial}{\partial z'} \right) \left[ \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x' + k_y y')} e^{-k_{\parallel} z'} dk_x \right] \Big\} \\
&= \int d\mathbf{r}'_{\parallel} G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \left[ -\frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \int \frac{A(k_x)}{2\pi} \frac{\partial (e^{i(k_x x' + k_y y')})}{\partial x'} e^{-k_{\parallel} z'} dk_x \right. \\
&\quad \left. + \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x' + k_y y')} \frac{\partial (e^{-k_{\parallel} z'})}{\partial z'} dk_x \right] \\
&= \int d\mathbf{r}'_{\parallel} G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \left[ -i \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \int \frac{A(k_x)}{2\pi} k_x e^{i(k_x x' + k_y y')} e^{-k_{\parallel} z'} dk_x \right. \\
&\quad \left. - \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x' + k_y y')} k_{\parallel} e^{-k_{\parallel} z'} dk_x \right] \\
&= - \int d\mathbf{r}'_{\parallel} G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \left\{ \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x' + k_y y')} e^{-k_{\parallel} z'} \left[ k_{\parallel} + i k_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right] dk_x \right\}. \tag{2.44}
\end{aligned}$$

Podemos reescrever o terceiro termo da Eq. (2.38) utilizando o elemento diferencial de área

superficial  $dS$ , dado na Eq. (2.9c), obtendo

$$\int dS' G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \left[ \frac{\rho_{2D}(\mathbf{r}')}{\epsilon_2 \epsilon_0} \right] = \int d\mathbf{r}'_{\parallel} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{1/2} \left[ G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \frac{\rho_{2D}(\mathbf{r}')}{\epsilon_2 \epsilon_0} \right]. \quad (2.45)$$

Substituindo os termos obtidos nas Eqs. (2.43), (2.44) e (2.45) na Eq. (2.38), obtemos que

$$\begin{aligned} 0 = & \int d\mathbf{r}'_{\parallel} \left[ \phi_{>}(\mathbf{r}') \int \frac{d\mathbf{q}_{\parallel}}{(2\pi)^2} \frac{e^{-q_{\parallel}|z-z'|}}{2q_{\parallel}} e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot (\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel})} \left( q_{\parallel} + iq_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right) \right] \Big|_{z'=\zeta(x')} \\ & + \int d\mathbf{r}'_{\parallel} \left[ G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x' + k_y y')} e^{-k_{\parallel} z'} \left( k_{\parallel} + ik_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right) dk_x \right] \Big|_{z'=\zeta(x')} \\ & - \int d\mathbf{r}'_{\parallel} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{1/2} \left[ G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \frac{\rho_{2D}(\mathbf{r}')}{\epsilon_2 \epsilon_0} \right] \Big|_{z'=\zeta(x')}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Agora, substituindo o potencial  $\phi_{>}$  [Eq. (2.20a)] e a função de Green [Eq. (2.31)] na Eq. (2.46), obtemos

$$\begin{aligned} 0 = & e^{-i\omega t} \int d\mathbf{r}'_{\parallel} \left[ \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x' + k_y y')} e^{-k_{\parallel} z'} dk_x \right. \\ & \times \left. \int \frac{d\mathbf{q}_{\parallel}}{(2\pi)^2} \frac{e^{-q_{\parallel}|z-z'|}}{2q_{\parallel}} e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot (\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel})} \left( q_{\parallel} + iq_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right) \right] \Big|_{z'=\zeta(x')} \\ & + e^{-i\omega t} \int d\mathbf{r}'_{\parallel} \left[ \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q}_{\parallel} \frac{e^{-q_{\parallel}|z-z'|}}{2q_{\parallel}} e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot (\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel})} \right. \\ & \times \left. \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x' + k_y y')} e^{-k_{\parallel} z'} \left( k_{\parallel} + ik_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right) dk_x \right] \Big|_{z'=\zeta(x')} \\ & - \int d\mathbf{r}'_{\parallel} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{1/2} \left[ \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q}_{\parallel} \frac{e^{-q_{\parallel}|z-z'|}}{2q_{\parallel}} e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot (\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel})} \frac{\rho_{2D}(\mathbf{r}')}{\epsilon_2 \epsilon_0} \right] \Big|_{z'=\zeta(x')}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Como veremos a seguir, a Eq. (2.47) [ $0 = \mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2 + \mathcal{I}_3$ ] pode ser simplificada resolvendo a integral em  $dy'$ . Tal integral resultará na função delta de Dirac, dada por

$$\frac{1}{2\pi} \int e^{iy'(k_y - q_y)} dy' = \delta(k_y - q_y), \quad (2.48)$$

onde usaremos também a propriedade de filtragem da função delta. Assim, agrupando os termos

de cada coordenada nas primeiras duas parcelas na Eq. (2.47), temos que a primeira delas fica

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_1 &= e^{-i\omega t} \int d\mathbf{r}'_{||} \left[ \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x' + k_y y')} e^{-k_{||} z'} dk_x \int \frac{d\mathbf{q}_{||}}{(2\pi)^2} \frac{e^{-q_{||}|z-z'|}}{2q_{||}} e^{i\mathbf{q}_{||} \cdot (\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})} \left( q_{||} + iq_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right) \right] \\
&= e^{-i\omega t} \iint dx' dy' \left[ \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x' + k_y y')} e^{-k_{||} z'} dk_x \iint \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^2} \frac{e^{-q_{||}|z-z'|}}{2q_{||}} e^{i\mathbf{q}_{\mathbf{x}}(x-x')} e^{i\mathbf{q}_{\mathbf{y}}(y-y')} \right. \\
&\quad \left. \times \left( q_{||} + iq_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right) \right] \\
&= \frac{e^{-i\omega t}}{(2\pi)^2} \int dk_x A(k_x) e^{-k_{||} z'} \int dq_x e^{iq_x x} \int dq_y \frac{e^{-q_{||}|z-z'|}}{2q_{||}} e^{iq_y y} \int dx' e^{ix'(k_x - q_x)} \left( q_{||} + iq_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right) \\
&\quad \times \left[ \frac{1}{2\pi} \int dy' e^{iy'(k_y - q_y)} \right] \\
&= \frac{e^{-i\omega t}}{(2\pi)^2} \int dk_x A(k_x) e^{-k_{||} z'} \int dq_x e^{iq_x x} \left[ \int dq_y \frac{e^{-q_{||}|z-z'|}}{2q_{||}} e^{iq_y y} \int dx' e^{ix'(k_x - q_x)} \left( q_{||} + iq_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right) \right. \\
&\quad \left. \times \delta(k_y - q_y) \right] \\
&= e^{-i\omega t} \frac{e^{ik_y y}}{(2\pi)^2} \int dk_x A(k_x) e^{-z' \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \int dq_x e^{iq_x x} \frac{e^{-|z-z'| \sqrt{q_x^2 + k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2 + k_y^2}} \int dx' e^{ix'(k_x - q_x)} \\
&\quad \times \left( \sqrt{q_x^2 + k_y^2} + iq_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right), \tag{2.49}
\end{aligned}$$

e a segunda fica

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_2 &= e^{-i\omega t} \int d\mathbf{r}'_{||} \left[ \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q}_{||} \frac{e^{-q_{||}|z-z'|}}{2q_{||}} e^{i\mathbf{q}_{||} \cdot (\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})} \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x' + k_y y')} e^{-k_{||} z'} \right. \\
&\quad \left. \times \left( k_{||} + ik_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right) dk_x \right] \\
&= \frac{e^{-i\omega t}}{(2\pi)^2} \iint dx' dy' \left[ \iint dq_x dq_y \frac{e^{-q_{||}|z-z'|}}{2q_{||}} e^{i[q_x(x-x') + q_y(y-y')]} \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x' + k_y y')} e^{-k_{||} z'} \right. \\
&\quad \left. \times \left( k_{||} + ik_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right) dk_x \right] \\
&= \frac{e^{-i\omega t}}{(2\pi)^2} \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \int dk_x A(k_x) e^{-k_{||} z'} \int dq_x e^{iq_x x} \int dq_y \frac{e^{-q_{||}|z-z'|}}{2q_{||}} e^{iq_y y} \int dx' e^{ix'(k_x - q_x)} \\
&\quad \times \left( k_{||} + ik_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right) \left[ \frac{1}{2\pi} \int dy' e^{iy'(k_y - q_y)} \right] \\
&= \frac{e^{-i\omega t}}{(2\pi)^2} \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \int dk_x A(k_x) e^{-k_{||} z'} \int dq_x e^{iq_x x} \left[ \int dq_y \frac{e^{-q_{||}|z-z'|}}{2q_{||}} e^{iq_y y} \int dx' e^{ix'(k_x - q_x)} \right. \\
&\quad \left. \times \left( k_{||} + ik_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right) \delta(k_y - q_y) \right] \\
&= e^{-i\omega t} \frac{e^{ik_y y}}{(2\pi)^2} \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \int dk_x A(k_x) e^{-z' \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \int dq_x e^{iq_x x} \frac{e^{-|z-z'| \sqrt{q_x^2 + k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2 + k_y^2}} \int dx' e^{ix'(k_x - q_x)} \\
&\quad \times \left( \sqrt{k_x^2 + k_y^2} + ik_x \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right). \tag{2.50}
\end{aligned}$$

Somando as Eqs. (2.49) e (2.50), temos que

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2 &= e^{-i\omega t} \frac{e^{ik_y y}}{(2\pi)^2} \int dk_x A(k_x) e^{-z' \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \int dq_x e^{iq_x x} \frac{e^{-|z-z'| \sqrt{q_x^2 + k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2 + k_y^2}} \int dx' e^{ix'(k_x - q_x)} \\
&\quad \times \left[ \sqrt{q_x^2 + k_y^2} + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} + i \left( q_x + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right]. \tag{2.51}
\end{aligned}$$

Agora, vamos desenvolver a última parcela da Eq. (2.47), que envolve a densidade superficial de carga. Para encontramos no final do dia um problema de autovalor para os coeficientes  $A(k_x)$ , precisamos escrever uma expressão para a densidade de carga superficial  $\rho_{2D}$  em termos do potencial  $\phi_{>}(\mathbf{r})$ . De acordo com a equação da continuidade, temos que

$$\frac{\partial \rho_{2D}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_{2D} = 0, \tag{2.52}$$

onde  $\mathbf{J}_{2D}$  é a densidade de corrente de superfície.

De forma análoga ao que assumimos para a dependência temporal para o potencial elétrico na

Eq. (2.19), vamos também considerar aqui o regime linear com frequência monocromática para a forma da densidade de carga superficial, tal como  $\rho_{2D} = Ce^{-i\omega t}$ , onde  $C$  é uma constante. Vale destacar que a consideração da dependência temporal para a densidade de carga superficial é uma maneira simples de introduzir dinâmica no problema. Outra forma possível, seria introduzir uma função dielétrica dependente da frequência, isto é,  $\epsilon \equiv \epsilon(\omega)$ . Assim a equação de continuidade no espaço das frequências fica

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_{2D} = -\frac{\partial \rho_{2D}}{\partial t} = -\frac{\partial [Ce^{-i\omega t}]}{\partial t} = i\omega Ce^{-i\omega t} = i\omega \rho_{2D}. \quad (2.53)$$

De acordo com a lei de Ohm, temos que

$$\mathbf{J}_{2D} = \sigma \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)|_{z=\zeta(x)}, \quad (2.54)$$

em que o termo  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)|_{z=\zeta(x)}$  representa o campo elétrico no plano  $z = \zeta(x)$  e  $\sigma$  é a condutividade óptica, que em geral é um tensor, mas para o presente problema será considerado como um escalar e isotrópica. Podemos escrever ainda o campo  $\mathbf{E}$  em termos do potencial escalar  $\phi$ , tal como

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \phi(\mathbf{r}, t). \quad (2.55)$$

Da Eq. (2.55), temos que a lei de Ohm [Eq. (2.54)] para a região  $z = \zeta(x)$ , pode ser reescrita como

$$\mathbf{J}_{2D} = -\sigma [\nabla \phi_{>}(\mathbf{r}, t)]|_{z=\zeta(x)}. \quad (2.56)$$

Aplicando o operador divergente na Eq. (2.56), temos que

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_{2D} = -\sigma \nabla \cdot \nabla \phi_{>}|_{z=\zeta(x)} = \sigma \nabla \cdot \{ [-\hat{\mathbf{t}} \cdot \nabla \phi_{>}] \hat{\mathbf{t}} + [-\hat{\mathbf{y}} \cdot \nabla \phi_{>}] \hat{\mathbf{y}} \}|_{z=\zeta(x)}, \quad (2.57)$$

em que o lado direito da igualdade está escrito na forma decomposta, explicitando as contribuições dos campos das componentes tangenciais e ao longo da direção  $y$ .

Utilizando o vetor unitário tangente dado na Eq. (2.10), a contribuição da componente tan-

gente do campo na Eq. (2.57) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} -\hat{\mathbf{t}} \cdot \nabla \phi_{>} &= - \left\{ \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \right]^{-1/2} \left( 1, 0, \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right) \right\} \cdot \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \phi_{>} \\ &= - \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \right]^{-1/2} \left( \frac{\partial \phi_{>}}{\partial x} + \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial \phi_{>}}{\partial z} \right), \end{aligned} \quad (2.58)$$

e a contribuição associada a componente  $y$  do campo na Eq. (2.57) pode ser escrita como

$$-\hat{\mathbf{y}} \cdot \nabla \phi_{>} = -\hat{\mathbf{y}} \cdot \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \phi_{>} = -\frac{\partial \phi_{>}}{\partial y}. \quad (2.59)$$

Substituindo as Eqs. (2.58) e (2.59) na Eq. (2.57), e expressando o versor  $\hat{\mathbf{t}}$  dado pela Eq. (2.10) em coordenadas cartesianas, obtemos que

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \mathbf{J}_{2D} &= \sigma \nabla \cdot \left\{ \left[ - \left( 1 + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \right)^{-1/2} \left( \frac{\partial \phi_{>}}{\partial x} + \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial \phi_{>}}{\partial z} \right) \right] \hat{\mathbf{x}} + \left[ - \frac{\partial \phi_{>}}{\partial y} \right] \hat{\mathbf{y}} \right\} \Big|_{z=\zeta(x)} \\
&= -\sigma \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \right]^{-1/2} \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot \left[ \left( \frac{\partial \phi_{>}}{\partial x} + \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial \phi_{>}}{\partial z} \right) \hat{\mathbf{x}} + \frac{\partial \phi_{>}}{\partial y} \hat{\mathbf{y}} \right] \Big|_{z=\zeta(x)} \\
&= -\sigma \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \right]^{-1/2} \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot \left[ \left( \frac{\partial \phi_{>}}{\partial x} + \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial \phi_{>}}{\partial z} \right) \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \right]^{-1/2} \right. \\
&\quad \left. \times \left( 1, 0, \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right) + \frac{\partial \phi_{>}}{\partial y} \hat{\mathbf{y}} \right] \Big|_{z=\zeta(x)} \\
&= -\sigma \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \right]^{-1} \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot \left( \frac{\partial \phi_{>}}{\partial x} + \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial \phi_{>}}{\partial z}, \frac{\partial \phi_{>}}{\partial y}, \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial \phi_{>}}{\partial z} \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial \phi_{>}}{\partial z} \right) \Big|_{z=\zeta(x)} \\
&= -\sigma \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \right]^{-1} \left[ \frac{\partial^2 \phi_{>}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \frac{\partial \phi_{>}}{\partial z} + \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial^2 \phi_{>}}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 \phi_{>}}{\partial y^2} + \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial^2 \phi_{>}}{\partial x \partial z} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x \partial z} \frac{\partial \phi_{>}}{\partial z} + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 \phi_{>}}{\partial z^2} \right] \Big|_{z=\zeta(x)} \\
&= -\sigma \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \right]^{-1} \left[ \frac{\partial^2 \phi_{>}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \frac{\partial \phi_{>}}{\partial z} + 2 \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial^2 \phi_{>}}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 \phi_{>}}{\partial y^2} \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 \phi_{>}}{\partial z^2} \right] \Big|_{z=\zeta(x)}, \tag{2.60}
\end{aligned}$$

lembrando que  $\zeta \equiv \zeta(\mathbf{r}_{||})$  e assim  $\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x \partial z} = 0$ . Substituindo a Eq. (2.53)  $[\nabla \cdot \mathbf{J}_{2D} = i\omega \rho_{2D}]$  no lado esquerdo da Eq. (2.60) e explicitando a densidade superficial de carga  $\rho_{2D}$ , obtemos que

$$\begin{aligned}
\rho_{2D} &= \frac{i\sigma}{\omega} e^{-i\omega t} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \right]^{-1} \left[ \frac{\partial^2 \phi_{>}(\mathbf{r})}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \frac{\partial \phi_{>}(\mathbf{r})}{\partial z} + 2 \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial^2 \phi_{>}(\mathbf{r})}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 \phi_{>}(\mathbf{r})}{\partial y^2} \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 \phi_{>}(\mathbf{r})}{\partial z^2} \right] \Big|_{z=\zeta(x)}, \tag{2.61}
\end{aligned}$$

em que explicitamos a dependência temporal como fizemos na Eq. (2.19), tal como  $\phi_{>}(\mathbf{r}, t) = \phi_{>}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}$ .

Substituindo a Eq. (2.20a) do potencial  $\phi_{>}(\mathbf{r})$  na Eq. (2.61) e aplicando as derivadas, que

estão atuando sobre o potencial, obtemos

$$\begin{aligned}
\rho_{2D} &= \frac{i\sigma}{\omega} e^{-i\omega t} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \right]^{-1} \left\{ \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \frac{\partial}{\partial z} + 2 \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \right. \\
&\quad \left. \times \left[ \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x + k_y y)} e^{-k_{||} z} dk_x \right] \right\} \Big|_{z=\zeta(x)} \\
&= \frac{i\sigma}{\omega} e^{-i\omega t} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \right]^{-1} \left\{ \int \frac{A(k_x)}{2\pi} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{ik_x x} \right] e^{ik_y y} e^{-k_{||} z} dk_x \right. \\
&\quad + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x + k_y y)} \left[ \frac{\partial}{\partial z} e^{-k_{||} z} \right] dk_x + 2 \frac{\partial \zeta}{\partial x} \int \frac{A(k_x)}{2\pi} \left[ \frac{\partial}{\partial x} e^{ik_x x} \right] e^{ik_y y} \left[ \frac{\partial}{\partial z} e^{-k_{||} z} \right] dk_x \\
&\quad + \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{ik_x x} \left[ \frac{\partial^2}{\partial y^2} e^{ik_y y} \right] e^{-k_{||} z} dk_x + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x + k_y y)} \left[ \frac{\partial^2}{\partial z^2} e^{-k_{||} z} \right] dk_x \Big\} \Big|_{z=\zeta(x)} \\
&= \frac{i\sigma}{\omega} e^{-i\omega t} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \right]^{-1} \left\{ \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x + k_y y)} e^{-k_{||} z} \left[ -k_x^2 - k_{||} \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} - 2ik_x k_{||} \frac{\partial \zeta}{\partial x} - k_y^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + k_{||}^2 \left( \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2 \right] dk_x \right\} \Big|_{z=\zeta(x)}. \tag{2.62}
\end{aligned}$$

Com a expressão explícita da densidade de carga  $\rho_{2D}$ , vamos agora desenvolver o último termo do segundo membro da Eq. (2.47), ou equivalentemente Eq. (2.45) ou último termo da Eq. (2.46). Para tal, substituiremos a Eq. (2.62) e utilizaremos a propriedade de filtragem da função delta dada pela Eq. (2.48), o que resulta em

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_3 &= - \int dS' G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \left[ \frac{\rho_{2D}(\mathbf{r}')}{\epsilon_2 \epsilon_0} \right] \Big|_{z'=\zeta(x')} \\
&= - \int d\mathbf{r}'_{||} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{1/2} \left[ G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \frac{\rho_{2D}(\mathbf{r}')}{\epsilon_2 \epsilon_0} \right] \Big|_{z'=\zeta(x')} \\
&= - \int d\mathbf{r}'_{||} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{1/2} \left[ \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q}_{||} \frac{e^{-q_{||}|z-z'|}}{2q_{||}} e^{i\mathbf{q}_{||} \cdot (\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})} \frac{\rho_{2D}(\mathbf{r}')}{\epsilon_2 \epsilon_0} \right] \Big|_{z'=\zeta(x')} \\
&= - \int d\mathbf{r}'_{||} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{1/2} \left\{ \frac{1}{(2\pi)^2 \epsilon_2 \epsilon_0} \int d\mathbf{q}_{||} \frac{e^{-q_{||}|z-z'|}}{2q_{||}} e^{i\mathbf{q}_{||} \cdot (\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})} \left[ \frac{i\sigma}{\omega} e^{-i\omega t} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1} \right. \right. \\
&\quad \times \left. \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x' + k_y y')} e^{-k_{||} z'} \left( -k_x^2 - k_{||} \frac{\partial^2 \zeta(x')}{\partial x'^2} - 2ik_x k_{||} \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} - k_y^2 + k_{||}^2 \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right) dk_x \right] \Big\} \Big|_{z'=\zeta(x')} \\
&= - \iint dx' dy' \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} \left\{ \frac{1}{(2\pi)^2 \epsilon_2 \epsilon_0} \iint dq_x dq_y \frac{e^{-\sqrt{q_x^2 + q_y^2} |z-z'|}}{2\sqrt{q_x^2 + q_y^2}} e^{iq_x(x-x')} e^{iq_y(y-y')} \right. \\
&\quad \times \left. \left[ \frac{i\sigma}{\omega} e^{-i\omega t} \int \frac{A(k_x)}{2\pi} e^{i(k_x x' + k_y y')} e^{-k_{||} z'} \left( -k_x^2 - k_{||} \frac{\partial^2 \zeta(x')}{\partial x'^2} - 2ik_x k_{||} \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} - k_y^2 + k_{||}^2 \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right) dk_x \right] \right\} \Big|_{z'=\zeta(x')}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\int dx' \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} \left\{ \frac{1}{(2\pi)^2 \epsilon_2 \epsilon_0} \iint dq_x dq_y \frac{e^{-\sqrt{q_x^2 + q_y^2} |z-z'|}}{2\sqrt{q_x^2 + q_y^2}} e^{iq_x(x-x')} e^{iq_y y} \left[ \frac{1}{2\pi} \int dy' e^{iy'(k_y - q_y)} \right] \right. \\
&\times \left. \left[ \frac{i\sigma}{\omega} e^{-i\omega t} \int A(k_x) e^{ik_x x'} e^{-k_{||} z'} \left( -k_x^2 - k_{||} \frac{\partial^2 \zeta(x')}{\partial x'^2} - 2ik_x k_{||} \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} - k_y^2 + k_{||}^2 \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right) dk_x \right] \right\} \Big|_{z'=\zeta(x')} \\
&= -\int dx' \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} \left\{ \frac{1}{(2\pi)^2 \epsilon_2 \epsilon_0} \iint dq_x dq_y \frac{e^{-\sqrt{q_x^2 + q_y^2} |z-z'|}}{2\sqrt{q_x^2 + q_y^2}} e^{iq_x(x-x')} e^{iq_y y} \delta(k_y - q_y) \right. \\
&\times \left. \left[ \frac{i\sigma}{\omega} e^{-i\omega t} \int A(k_x) e^{ik_x x'} e^{-k_{||} z'} \left( -k_x^2 - k_{||} \frac{\partial^2 \zeta(x')}{\partial x'^2} - 2ik_x k_{||} \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} - k_y^2 + k_{||}^2 \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right) dk_x \right] \right\} \Big|_{z'=\zeta(x')} \\
&= -\int dx' \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} \left\{ \frac{1}{(2\pi)^2 \epsilon_2 \epsilon_0} \int dq_x \frac{e^{-\sqrt{q_x^2 + k_y^2} |z-z'|}}{2\sqrt{q_x^2 + k_y^2}} e^{iq_x(x-x')} e^{ik_y y} \right. \\
&\times \left. \left[ \frac{i\sigma}{\omega} e^{-i\omega t} \int A(k_x) e^{ik_x x'} e^{-k_{||} z'} \left( -k_x^2 - k_{||} \frac{\partial^2 \zeta(x')}{\partial x'^2} - 2ik_x k_{||} \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} - k_y^2 + k_{||}^2 \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right) dk_x \right] \right\} \Big|_{z'=\zeta(x')} \\
&= -\frac{i\sigma e^{-i\omega t} e^{ik_y y}}{(2\pi)^2 \epsilon_2 \epsilon_0 \omega} \left\{ \int dk_x A(k_x) e^{-z' \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \int dq_x e^{iq_x x} \frac{e^{-|z-z'| \sqrt{q_x^2 + k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2 + k_y^2}} \int dx' \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} e^{ix'(k_x - q_x)} \right. \\
&\times \left. \left[ -k_x^2 - \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \frac{\partial^2 \zeta(x')}{\partial x'^2} - 2ik_x \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} - k_y^2 + (k_x^2 + k_y^2) \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right] \right\} \Big|_{z'=\zeta(x')}. \tag{2.63}
\end{aligned}$$

Somando a expressão de  $\mathcal{I}_3$ , dada pela Eq. (2.63), com a soma de  $\mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2$ , dada pela Eq. (2.51), teremos então todas os termos da Eq. (2.47) a serem calculado em  $z = \zeta(x)$ . Assim, podemos escrever a soma  $0 = \mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2 + \mathcal{I}_3$  como

$$\begin{aligned}
0 &= e^{-i\omega t} \frac{e^{ik_y y}}{(2\pi)^2} \left\{ \int dk_x A(k_x) e^{-z' \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \int dq_x e^{iq_x x} \frac{e^{-|z-z'| \sqrt{q_x^2 + k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2 + k_y^2}} \right. \\
&\times \int dx' e^{ix'(k_x - q_x)} \left[ \sqrt{q_x^2 + k_y^2} + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} + i \left( q_x + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right] \Big|_{z'=\zeta(x')} \\
&- \frac{i\sigma e^{-i\omega t} e^{ik_y y}}{(2\pi)^2 \epsilon_2 \epsilon_0 \omega} \left\{ \int dk_x A(k_x) e^{-z' \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \int dq_x e^{iq_x x} \frac{e^{-|z-z'| \sqrt{q_x^2 + k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2 + k_y^2}} \right. \\
&\times \int dx' \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} e^{ix'(k_x - q_x)} \left[ -k_x^2 - \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \frac{\partial^2 \zeta(x')}{\partial x'^2} \right. \\
&\times \left. \left. - 2ik_x \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} - k_y^2 + (k_x^2 + k_y^2) \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right] \right\} \Big|_{z'=\zeta(x')}. \tag{2.64}
\end{aligned}$$

Simplificando a Eq. (2.64), multiplicando ambos os lados da equação por  $(2\pi)^2 e^{i\omega t} e^{-ik_y y}$ ,

obtemos que

$$\begin{aligned}
0 = & \int dk_x A(k_x) e^{-z' \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \int dq_x e^{iq_x x} \frac{e^{-|z-z'| \sqrt{q_x^2 + k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2 + k_y^2}} \int dx' e^{ix'(k_x - q_x)} \left\{ \sqrt{q_x^2 + k_y^2} \right. \\
& + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} + i \left( q_x + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} \\
& \times \left[ (k_x^2 + k_y^2) \left( 1 - \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right) + \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \frac{\partial^2 \zeta(x')}{\partial x'^2} + 2ik_x \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right] \left. \right\} \Big|_{z'=\zeta(x')}.
\end{aligned} \tag{2.65}$$

Como estamos tomando a situação em que  $z - z' > 0$ , então pela Eq. (2.40) temos que  $e^{-|z-z'| \sqrt{q_x^2 + k_y^2}} = e^{-(z-z') \sqrt{q_x^2 + k_y^2}} = e^{-z \sqrt{q_x^2 + k_y^2}} e^{z' \sqrt{q_x^2 + k_y^2}}$ . Daí, tomando  $z' = \zeta(x')$  na Eq. (2.65), obtemos que

$$\begin{aligned}
0 = & \int dk_x A(k_x) e^{-\zeta(x') \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \int dq_x e^{iq_x x} \frac{e^{(-z+\zeta(x')) \sqrt{q_x^2 + k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2 + k_y^2}} \int dx' e^{ix'(k_x - q_x)} \left\{ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \right. \\
& + i \left( q_x + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} + \sqrt{q_x^2 + k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} \left[ 1 + \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} \\
& \times \left[ (k_x^2 + k_y^2) \left( 1 - \left( \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right) + \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \frac{\partial^2 \zeta(x')}{\partial x'^2} + 2ik_x \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \frac{\partial \zeta(x')}{\partial x'} \right] \left. \right\}.
\end{aligned} \tag{2.66}$$

Trabalhos anteriores envolvendo interfaces deformadas entre dois meios com constantes dielétricas diferentes foram publicados por Alexei Maradudin et al. [?] e Nuno Peres et al. [?] em que introduziram as seguintes relações, a fim de simplificar a equação integral a ser resolvida:

$$e^{\alpha \zeta(x')} = 1 + \alpha \int \frac{dQ}{2\pi} J(\alpha; Q) e^{iQx'}, \tag{2.67a}$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial x'} e^{\alpha \zeta(x')} = \int \frac{dQ}{2\pi} iQ J(\alpha; Q) e^{iQx'}, \tag{2.67b}$$

$$\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x'^2} e^{\alpha \zeta(x')} = - \int \frac{dQ}{2\pi} Q^2 J(\alpha; Q) e^{iQx'}. \tag{2.67c}$$

Organizando a Eq. (2.66) para explicitar os termos que envolvem a função perfil de superfície  $\zeta(x')$  análogos estes apresentados nas Eqs. (2.67a)-(2.67c), podemos assim reescrever a

Eq. (2.66) como

$$\begin{aligned}
0 = & \int dq_x \int dx' \int dk_x A(k_x) e^{iq_x x} \frac{e^{-z\sqrt{q_x^2+k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2+k_y^2}} e^{ix'(k_x-q_x)} \left\{ \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2+k_y^2} + \sqrt{q_x^2+k_y^2} \right. \right. \\
& + \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} \left[ 1 + \left( \frac{\partial\zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} (k_x^2+k_y^2) \left( 1 - \left( \frac{\partial\zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right) \left. \right] e^{\zeta(x')(\sqrt{q_x^2+k_y^2}-\sqrt{k_x^2+k_y^2})} \\
& + \left[ i \left( q_x + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) - \frac{2\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} k_x \sqrt{k_x^2+k_y^2} \left[ 1 + \left( \frac{\partial\zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} \right] \frac{\partial\zeta(x')}{\partial x'} e^{\zeta(x')(\sqrt{q_x^2+k_y^2}-\sqrt{k_x^2+k_y^2})} \\
& + \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} \left[ 1 + \left( \frac{\partial\zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \right]^{-1/2} \sqrt{k_x^2+k_y^2} \frac{\partial^2\zeta(x')}{\partial x'^2} e^{\zeta(x')(\sqrt{q_x^2+k_y^2}-\sqrt{k_x^2+k_y^2})} \left. \right\}. \quad (2.68)
\end{aligned}$$

As derivadas primeira e segunda da função perfil de superfície  $\zeta(x')$  representam a inclinação e curvatura da deformação. Assumindo deformações suaves, podemos desconsiderar termos de ordem mais alta em  $\zeta(x')$ , tal como o termo quadrático  $\left( \frac{\partial\zeta(x')}{\partial x'} \right)^2 \rightarrow 0$  que aparece na Eq. (2.68). Dentro dessa aproximação, a Eq. (2.68) fica

$$\begin{aligned}
0 = & \int dq_x \int dx' \int dk_x A(k_x) e^{iq_x x} \frac{e^{-z\sqrt{q_x^2+k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2+k_y^2}} e^{ix'(k_x-q_x)} \\
& \times \left\{ \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2+k_y^2} + \sqrt{q_x^2+k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} (k_x^2+k_y^2) \right] e^{\zeta(x')(\sqrt{q_x^2+k_y^2}-\sqrt{k_x^2+k_y^2})} \right. \\
& + \left[ i \left( q_x + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) - \frac{2\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} k_x \sqrt{k_x^2+k_y^2} \right] \frac{\partial\zeta(x')}{\partial x'} e^{\zeta(x')(\sqrt{q_x^2+k_y^2}-\sqrt{k_x^2+k_y^2})} \\
& + \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} \sqrt{k_x^2+k_y^2} \frac{\partial^2\zeta(x')}{\partial x'^2} e^{\zeta(x')(\sqrt{q_x^2+k_y^2}-\sqrt{k_x^2+k_y^2})} \left. \right\}. \quad (2.69)
\end{aligned}$$

Identificando as expressões na Eq. (2.69) como aquelas dadas nas Eqs. (2.67a)-(2.67c), temos que

$$\begin{aligned}
0 = & \int dq_x \int dx' \int dk_x A(k_x) e^{iq_x x} \frac{e^{-z\sqrt{q_x^2+k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2+k_y^2}} e^{ix'(k_x-q_x)} \\
& \times \left\{ \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2+k_y^2} + \sqrt{q_x^2+k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} (k_x^2+k_y^2) \right] \right. \\
& \times \left[ 1 + \left( \sqrt{q_x^2+k_y^2} - \sqrt{k_x^2+k_y^2} \right) \int \frac{dQ}{2\pi} J \left( \sqrt{q_x^2+k_y^2} - \sqrt{k_x^2+k_y^2}; Q \right) e^{iQx'} \right] \\
& + \left[ i \left( q_x + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) - \frac{2\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} k_x \sqrt{k_x^2+k_y^2} \right] \int \frac{dQ}{2\pi} iQ J \left( \sqrt{q_x^2+k_y^2} - \sqrt{k_x^2+k_y^2}; Q \right) e^{iQx'} \\
& - \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} \sqrt{k_x^2+k_y^2} \int \frac{dQ}{2\pi} Q^2 J \left( \sqrt{q_x^2+k_y^2} - \sqrt{k_x^2+k_y^2}; Q \right) e^{iQx'} \left. \right\}, \quad (2.70)
\end{aligned}$$

e organizando os termos e agrupando aqueles com integral  $\int dQ$ , obtemos que

$$\begin{aligned}
0 &= \int dq_x \int dx' \int dk_x A(k_x) e^{iq_x x} \frac{e^{-z\sqrt{q_x^2+k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2+k_y^2}} e^{ix'(k_x-q_x)} \\
&\times \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2+k_y^2} + \sqrt{q_x^2+k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} (k_x^2+k_y^2) \right] \\
&+ \int dq_x \int dx' \int dk_x A(k_x) e^{iq_x x} \frac{e^{-z\sqrt{q_x^2+k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2+k_y^2}} e^{ix'(k_x-q_x)} \\
&\times \int \frac{dQ}{2\pi} J\left(\sqrt{q_x^2+k_y^2} - \sqrt{k_x^2+k_y^2}; Q\right) e^{iQx'} \\
&\times \left\{ \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2+k_y^2} + \sqrt{q_x^2+k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} (k_x^2+k_y^2) \right] \left( \sqrt{q_x^2+k_y^2} - \sqrt{k_x^2+k_y^2} \right) \right. \\
&\left. + iQ \left[ i \left( q_x + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) - \frac{2\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} k_x \sqrt{k_x^2+k_y^2} \right] - \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} \sqrt{k_x^2+k_y^2} Q^2 \right\}, \tag{2.71}
\end{aligned}$$

ou ainda

$$\begin{aligned}
0 &= \int dq_x \int dk_x A(k_x) e^{iq_x x} \frac{e^{-z\sqrt{q_x^2+k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2+k_y^2}} \\
&\times \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2+k_y^2} + \sqrt{q_x^2+k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} (k_x^2+k_y^2) \right] \left[ \int dx' e^{ix'(k_x-q_x)} \right] \\
&+ \int dq_x \int dk_x A(k_x) e^{iq_x x} \frac{e^{-z\sqrt{q_x^2+k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2+k_y^2}} \int dQ J\left(\sqrt{q_x^2+k_y^2} - \sqrt{k_x^2+k_y^2}; Q\right) \\
&\times \left\{ \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2+k_y^2} + \sqrt{q_x^2+k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} (k_x^2+k_y^2) \right] \left( \sqrt{q_x^2+k_y^2} - \sqrt{k_x^2+k_y^2} \right) \right. \\
&\left. + iQ \left[ i \left( q_x + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) - \frac{2\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} k_x \sqrt{k_x^2+k_y^2} \right] - \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} \sqrt{k_x^2+k_y^2} Q^2 \right\} \left[ \frac{1}{2\pi} \int dx' e^{ix'(k_x-q_x+Q)} \right]. \tag{2.72}
\end{aligned}$$

Podemos identificar funções delta de Dirac, como dado na Eq. (2.48), tal que a Eq. (2.72) fica

$$\begin{aligned}
0 = & \int dq_x \int dk_x A(k_x) e^{iq_x x} \frac{e^{-z\sqrt{q_x^2 + k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2 + k_y^2}} \\
& \times \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} + \sqrt{q_x^2 + k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} (k_x^2 + k_y^2) \right] [2\pi \delta(k_x - q_x)] \\
& + \int dq_x \int dk_x A(k_x) e^{iq_x x} \frac{e^{-z\sqrt{q_x^2 + k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2 + k_y^2}} \int dQ J\left(\sqrt{q_x^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2}; Q\right) \\
& \times \left\{ \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} + \sqrt{q_x^2 + k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} (k_x^2 + k_y^2) \right] \left( \sqrt{q_x^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \right) \right. \\
& \left. + iQ \left[ i \left( q_x + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) - \frac{2\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} k_x \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \right] - \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} Q^2 \right\} \delta(k_x - q_x + Q).
\end{aligned} \tag{2.73}$$

Utilizando a propriedade de filtragem da função delta, eliminaremos a integral em  $q_x$  no primeiro termo do segundo membro da Eq. (2.73) e a integral em  $Q$  no segundo termo, resultando na seguinte expressão

$$\begin{aligned}
0 = & \pi \int dk_x A(k_x) e^{ik_x x} \frac{e^{-z\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \left[ \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{k_x^2 + k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} (k_x^2 + k_y^2) \right] \\
& + \int dq_x \int dk_x A(k_x) e^{iq_x x} \frac{e^{-z\sqrt{q_x^2 + k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2 + k_y^2}} J\left(\sqrt{q_x^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2}; q_x - k_x\right) \\
& \times \left\{ \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} + \sqrt{q_x^2 + k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} (k_x^2 + k_y^2) \right] \left( \sqrt{q_x^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \right) \right. \\
& \left. + i(q_x - k_x) \left[ i \left( q_x + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) - \frac{2\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} k_x \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \right] - \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} (q_x - k_x)^2 \right\},
\end{aligned} \tag{2.74}$$

Multiplicando ambos os lados da Eq. (2.74) por  $e^{-iqx}$  e integrando em  $x$ , obtem-se que

$$\begin{aligned}
0 = & \pi \int dk_x A(k_x) \frac{e^{-z\sqrt{k_x^2+k_y^2}}}{\sqrt{k_x^2+k_y^2}} \left[ \left(1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}\right) \sqrt{k_x^2+k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} (k_x^2+k_y^2) \right] \left[ \int dx e^{ix(k_x-q)} \right] \\
& + \int dq_x \int dk_x A(k_x) \frac{e^{-z\sqrt{q_x^2+k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2+k_y^2}} J\left(\sqrt{q_x^2+k_y^2} - \sqrt{k_x^2+k_y^2}; q_x - k_x\right) \\
& \times \left\{ \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2+k_y^2} + \sqrt{q_x^2+k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} (k_x^2+k_y^2) \right] \left( \sqrt{q_x^2+k_y^2} - \sqrt{k_x^2+k_y^2} \right) \right. \\
& + i(q_x - k_x) \left[ i \left( q_x + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) - \frac{2\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} k_x \sqrt{k_x^2+k_y^2} \right] - \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} \sqrt{k_x^2+k_y^2} (q_x - k_x)^2 \Big\} \\
& \times \left[ \int dx e^{ix(q_x-q)} \right]. \tag{2.75}
\end{aligned}$$

Identificando tais funções como funções delta de Dirac, análogas à Eq. (2.48), teremos que

$$\begin{aligned}
0 = & \pi \int dk_x A(k_x) \frac{e^{-z\sqrt{k_x^2+k_y^2}}}{\sqrt{k_x^2+k_y^2}} \left[ \left(1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}\right) \sqrt{k_x^2+k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} (k_x^2+k_y^2) \right] [2\pi\delta(k_x - q)] \\
& + \int dq_x \int dk_x A(k_x) \frac{e^{-z\sqrt{q_x^2+k_y^2}}}{2\sqrt{q_x^2+k_y^2}} J\left(\sqrt{q_x^2+k_y^2} - \sqrt{k_x^2+k_y^2}; q_x - k_x\right) \\
& \times \left\{ \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2+k_y^2} + \sqrt{q_x^2+k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} (k_x^2+k_y^2) \right] \left( \sqrt{q_x^2+k_y^2} - \sqrt{k_x^2+k_y^2} \right) \right. \\
& + i(q_x - k_x) \left[ i \left( q_x + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) - \frac{2\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} k_x \sqrt{k_x^2+k_y^2} \right] - \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} \sqrt{k_x^2+k_y^2} (q_x - k_x)^2 \Big\} \\
& \times [2\pi\delta(q_x - q)]. \tag{2.76}
\end{aligned}$$

Pela propriedade de filtragem da função delta, o que permitirá eliminar a integral  $\int dk_x$  na primeira expressão do lado direito da Eq. (2.76) e a integral  $\int dq_x$  na segunda expressão, temos que

$$\begin{aligned}
0 = & 2\pi^2 A(q) \frac{e^{-z\sqrt{q^2+k_y^2}}}{\sqrt{q^2+k_y^2}} \left[ \left(1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}\right) \sqrt{q^2+k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} (q^2+k_y^2) \right] \\
& + 2\pi \int dk_x A(k_x) \frac{e^{-z\sqrt{q^2+k_y^2}}}{2\sqrt{q^2+k_y^2}} J\left(\sqrt{q^2+k_y^2} - \sqrt{k_x^2+k_y^2}; q - k_x\right) \\
& \times \left\{ \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2+k_y^2} + \sqrt{q^2+k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} (k_x^2+k_y^2) \right] \left( \sqrt{q^2+k_y^2} - \sqrt{k_x^2+k_y^2} \right) \right. \\
& + i(q - k_x) \left[ i \left( q + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) - \frac{2\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} k_x \sqrt{k_x^2+k_y^2} \right] - \frac{i\sigma}{\epsilon_2\epsilon_0\omega} \sqrt{k_x^2+k_y^2} (q - k_x)^2 \Big\}. \tag{2.77}
\end{aligned}$$

Cancelando os termos iguais em ambos os membros da Eq. (2.77), obtemos que

$$\begin{aligned}
0 = & 2\pi A(q) \left[ \left(1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}\right) \sqrt{q^2 + k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} (q^2 + k_y^2) \right] \\
& + \int dk_x A(k_x) J \left( \sqrt{q^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2}; q - k_x \right) \\
& \times \left\{ \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} + \sqrt{q^2 + k_y^2} + \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} (k_x^2 + k_y^2) \right] \left( \sqrt{q^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \right) \right. \\
& \left. + i(q - k_x) \left[ i \left( q + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) - \frac{2\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} k_x \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \right] - \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} (q - k_x)^2 \right\}. \quad (2.78)
\end{aligned}$$

A Eq. (2.78) será resolvida numericamente ao transformá-la em um problema de autovalor generalizado, como discutido no próximo capítulo (Seção 3.1).

A fim de verificar se obtivemos uma expressão coerente com aquela apresentada na Seção 8.5 do livro *An introduction to Graphane Plasmonics* do prof. Nuno Peres (Ref. [?]), tendo em vista que o prof. Nuno assumiu o caso particular de momento  $k_y = 0$  na direção  $y$ , faremos  $k_y = 0$  na Eq. (2.78). Temos que

$$\begin{aligned}
0 = & 2\pi A(q) \left[ \left(1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}\right) |q| + \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} q^2 \right] + \int dk_x A(k_x) J(|q| - |k_x|; q - k_x) \\
& \times \left\{ \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} |k_x| + |q| + \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} k_x^2 \right] (|q| - |k_x|) + i(q - k_x) \left[ i \left( q + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) - \frac{2\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} k_x |k_x| \right] \right. \\
& \left. - \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} |k_x| (q - k_x)^2 \right\}. \quad (2.79)
\end{aligned}$$

Desenvolvendo o segundo termo do segundo membro, sabendo que  $q = |q| \text{sgn}(q)$ , tal que  $q^2 = |q|^2$  pois  $\text{sgn}^2(q) = 1$ , temos que

$$\begin{aligned}
0 = & \frac{2\pi A(q)}{\epsilon_2} |q| \left[ \epsilon_1 + \epsilon_2 + \frac{i\sigma}{\epsilon_0 \omega} |q| \right] + \frac{1}{\epsilon_2} \int dk_x A(k_x) J(|q| - |k_x|; q - k_x) \\
& \times \left\{ \epsilon_1 |q| |k_x| + \epsilon_2 |q|^2 + \frac{i\sigma}{\epsilon_0 \omega} k_x^2 |q| - \epsilon_1 |k_x|^2 - \epsilon_2 |q| |k_x| - \frac{i\sigma}{\epsilon_0 \omega} k_x^2 |k_x| - \epsilon_2 q^2 + \epsilon_2 q k_x - \epsilon_1 q k_x \right. \\
& \left. + \epsilon_1 k_x^2 - i \frac{2\sigma}{\epsilon_0 \omega} q k_x |k_x| + i \frac{2\sigma}{\epsilon_0 \omega} k_x^2 |k_x| - \frac{i\sigma}{\epsilon_0 \omega} |k_x| q^2 + 2 \frac{i\sigma}{\epsilon_0 \omega} q k_x |k_x| - \frac{i\sigma}{\epsilon_0 \omega} k_x^2 |k_x| \right\}, \quad (2.80)
\end{aligned}$$

ou ainda, usando o fato que  $k_x = |k_x| \text{sgn}(k_x)$ , obtemos que

$$\begin{aligned}
& \int \frac{dk_x}{2\pi} A(k_x) J(|q| - |k_x|; q - k_x) |k_x| \left\{ (\epsilon_2 - \epsilon_1) [1 - \text{sgn}(q) \text{sgn}(k_x)] + \frac{i\sigma}{\epsilon_0 \omega} (|q| - |k_x|) \right\} \\
& = A(q) \left[ \epsilon_1 + \epsilon_2 + \frac{i\sigma}{\epsilon_0 \omega} |q| \right]. \quad (2.81)
\end{aligned}$$

A Eq. (2.81) é a mesma encontrada pela Eq. (8.233) na página 257 da Ref (gonçalves, 2016).

### 3 SOLUÇÃO NUMÉRICA E RESULTADOS

#### 3.1 Solução Numérica

Na presente seção vamos manipular a Eq. (2.78) afim de transformar o problema da equação integral em um problema matricial de autovalor generalizado. Vamos reescrever a Eq. (2.78) como

$$-A(q) \left(1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}\right) \sqrt{q^2 + k_y^2} - \int dk_x A(k_x) M(k_x, q) = \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} \left\{ A(q) (q^2 + k_y^2) + \int dk_x A(k_x) K(k_x, q) \right\}, \quad (3.1)$$

onde definimos

$$\begin{aligned} M(k_x, q) &= \frac{1}{2\pi} J \left( \sqrt{q^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2}; q - k_x \right) \\ &\times \left\{ \left[ \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} + \sqrt{q^2 + k_y^2} \right] \left( \sqrt{q^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \right) - (q - k_x) \left( q + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} k_x \right) \right\} \\ &= \frac{1}{2\pi} J \left( \sqrt{q^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2}; q - k_x \right) \left[ \left( \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \left( k_y^2 + q k_x - \sqrt{q^2 + k_y^2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.2a)$$

$$\begin{aligned} K(k_x, q) &= \frac{1}{2\pi} J \left( \sqrt{q^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2}; q - k_x \right) \\ &\times \left\{ (k_x^2 + k_y^2) \left( \sqrt{q^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \right) - 2(q - k_x) k_x \sqrt{k_x^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2} (q - k_x)^2 \right\} \\ &= \frac{1}{2\pi} J \left( \sqrt{q^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2}; q - k_x \right) \left\{ (k_x^2 + k_y^2) \sqrt{q^2 + k_y^2} - (q^2 + k_y^2) \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \right\}. \end{aligned} \quad (3.2b)$$

Vamos fazer as seguintes mudanças de variável a fim de simplificar o problema e o tratamento numérico.

$$v = k_x R, u = q R, x = x' R, q_y = k_y R$$

Então teremos,

$$\begin{aligned}
& -a(u) \left(1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}\right) \frac{1}{R} \sqrt{u^2 + q_y^2} - \frac{1}{R} \int dv a(v) M'(v, u) = \\
& \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} \left\{ \frac{a(u)}{R^2} (u^2 + q_y^2) + \frac{1}{R^2} \int dv a(v) K'(v, u) \right\},
\end{aligned} \tag{3.3}$$

A função  $J(\sqrt{q_x^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2}; q_x - k_x)$  ficará,

$$\begin{aligned}
J(\sqrt{q_x^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2}; q_x - k_x) &= 2 \int_0^\infty dx \cos([q - k_x]x) \frac{e^{(\sqrt{q_x^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2})\zeta(x)} - 1}{\sqrt{q_x^2 + k_y^2} - \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \\
&= 2 \int_0^\infty dx' R \cos([u - v]x/R) \frac{e^{(k_2 - k_1)\zeta(x)/R} - 1}{(k_2 - k_1)/R} \\
&= 2R^2 \int_0^\infty dx' \cos([u - v]x') \frac{e^{(k_2 - k_1)\zeta(x)/R} - 1}{k_2 - k_1}
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Onde  $k_2 = \sqrt{u^2 + q_y^2}$  e  $k_1 = \sqrt{v^2 + q_y^2}$

A função  $\zeta(x)$  é dada por,

$$-Ae^{-x^2/R^2} \tag{3.5}$$

Absorvendo  $1/R$  da equação (3.4) na função  $\zeta(x)$  e mudando a variável para  $x'$  teremos,

$$\zeta_2(x') = -\frac{A}{R} e^{-x'^2} \tag{3.6}$$

onde agora a equação (3.4) será em função de  $\zeta_2(x')$ .

$$J(k_2 - k_1; u - v) = 2R^2 \int_0^\infty dx' \cos([u - v]x') \frac{e^{(k_2 - k_1)\zeta_2(x')} - 1}{k_2 - k_1} \tag{3.7}$$

Definindo

$$Q(k_2 - k_1; u - v; A/R) = 2 \int_0^\infty dx' \cos([u - v]x') \frac{e^{(k_2 - k_1)\zeta_2(x')} - 1}{k_2 - k_1} \tag{3.8}$$

As funções  $M'(u, v)$  e  $K'(u, v)$  ficarão descritas da seguinte forma,

$$M'(u, v) = \frac{1}{2\pi} Q(k_2 - k_1; u - v; L) \left[ \left( \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2} \right) (q_y^2 + uv - \sqrt{u^2 + q_y^2} \sqrt{v^2 + q_y^2}) \right] \quad (3.9)$$

$$K'(u, v) = \frac{1}{2\pi} Q(k_2 - k_1; u - v; L) \left\{ (v^2 + q_y^2) \sqrt{u^2 + q_y^2} - (u^2 + q_y^2) \sqrt{v^2 + q_y^2} \right\}. \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} -a(u) \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \frac{1}{R} \sqrt{u^2 + q_y^2} - \frac{1}{R} \int dv a(v) M'(v, u) = \\ \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega} \left\{ \frac{a(u)}{R^2} (u^2 + q_y^2) + \frac{1}{R^2} \int dv a(v) K'(v, u) \right\}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

Multiplicado ambos os membros por R teremos,

$$-a(u) \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{u^2 + q_y^2} - \int dv a(v) M'(v, u) = \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega R} \left\{ a(u) (u^2 + q_y^2) + \int dv a(v) K'(v, u) \right\}, \quad (3.12)$$

Definindo  $\lambda = \frac{i\sigma}{\epsilon_2 \epsilon_0 \omega R}$  e reajustando a equação teremos

$$-a(u) \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{u^2 + q_y^2} - \int dv a(v) M'(v, u) = \lambda a(u) (u^2 + q_y^2) + \lambda \int dv a(v) K'(v, u) \quad (3.13)$$

$$a(u) \left[ - \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{u^2 + q_y^2} - \lambda (u^2 + q_y^2) \right] = \lambda \int dv a(v) K'(v, u) + \lambda \int dv a(v) M'(v, u) \quad (3.14)$$

$$a(u) \left[ - \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{u^2 + q_y^2} - \lambda (u^2 + q_y^2) \right] = \int dv a(v) [\lambda K'(v, u) + M'(v, u)] \quad (3.15)$$

A equação (3.15) é uma equação integral homogênea linear de Fredholm, cujo é da forma,

$$a(u)\Gamma(\omega, q_y, u) = \int_a^b a(v)\gamma_{q_y, \omega}(u, v) dv \quad (3.16)$$

onde,

$$\gamma_{q_y, \omega}(u, v) = [\lambda K'(v, u) + M'(v, u)] \quad (3.17)$$

$$\Gamma(\omega, q_y, u) = \left[ - \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{u^2 + q_y^2} - \lambda (u^2 + q_y^2) \right] \quad (3.18)$$

A equação integral (3.16) pode ser classificada em dois tipos, dependendo da solução para a seguinte equação,

$$\Gamma(\omega, q_y, u) = 0 \quad (3.19)$$

Se a equação (3.19) tiver soluções para  $u_0 \in [a, b]$  então teremos uma equação integral homogênea de Fredholm de terceiro tipo. como o intervalo  $[a, b]$  está no conjunto dos reais (pois a integral é de  $-\infty$  até  $+\infty$ ) as soluções  $u_0$  devem ser números reais. Dado isso, é importante analisarmos quais são os valores de  $\omega$  e  $q_y$  que satisfazem essa condição. Para isso vamos partir da equação 3.19 e colocar  $u$  em função de  $q_y$  e  $\omega$ .

$$\left[ - \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{u^2 + q_y^2} - \lambda (u^2 + q_y^2) \right] = 0 \quad (3.20)$$

$$-\lambda \sqrt{u^2 + q_y^2} = \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \quad (3.21)$$

$$-\frac{i\sigma_g}{\epsilon_2\epsilon_0\omega R} \sqrt{u^2 + q_y^2} = \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \quad (3.22)$$

$$\sqrt{u^2 + q_y^2} = \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \frac{i\epsilon_2\epsilon_0\omega R}{\sigma_g} \quad (3.23)$$

$$\sqrt{u^2 + q_y^2} = \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \frac{i\epsilon_2\epsilon_0\omega R}{i\frac{\sigma_0}{\pi} \frac{4E_F}{\hbar\omega}} \quad (3.24)$$

$$\sqrt{u^2 + q_y^2} = \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \frac{\epsilon_2\epsilon_0 R \pi \hbar \omega^2}{4E_F \sigma_0} \quad (3.25)$$

$$u = \pm \sqrt{\left[ \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \frac{\epsilon_2\epsilon_0 R \pi \hbar}{4E_F \sigma_0} \right]^2 \omega^4 - q_y^2} \quad (3.26)$$

para facilitar a análise vamos definir

$$\beta = \left[ \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \frac{\epsilon_2\epsilon_0 R \pi \hbar}{4E_F \sigma_0} \right]^2 \quad (3.27)$$

logo teremos,

$$u = \pm \sqrt{\beta \omega^4 - q_y^2} = \pm u_0 \quad (3.28)$$

No caso da integral de terceiro tipo,  $u$  dever ser um número real, assim,

$$\beta \omega^4 > q_y^2 \quad (3.29)$$

$$\omega > \sqrt{\frac{4E_F \sigma_0}{\epsilon_0 \pi \hbar} \frac{q_y}{(\epsilon_1 + \epsilon_2) R}} = \omega_{flat} \quad (3.30)$$

$\omega_{flat}(q_y)$  é a relação de dispersão para o grafeno flat no regime eletrostático. Deduzimos então que as frequências encontradas serão maiores que as frequências para o grafeno plano.

As soluções da equação integral de terceiro tipo são descritas por (G. Bart; R. warnock, 1973);

$$a(u) = \sum_i^N \alpha_i \delta(u - u_i) + a_{reg}(u) \quad (3.31)$$

Onde  $u_i$  corresponde a soluções que satisfazem a equação (3.19) e  $a(u)_{reg}$  é a parte regular da solução. No caso temos duas soluções, então a equação (3.31) ficará,

$$a(u) = \alpha_1 \delta(u - u_0) + \alpha_2 \delta(u + u_0) + a_{reg}(u) \quad (3.32)$$

Note que se substituirmos essa solução no potencial elétrico descrito pela equação (2.20a) teremos uma solução em ondas planas adicionada de um termo integral que dependerá da parte regular da solução.

$$\phi(x)_> = A e^{-iu_0 x} e^{iq_y y} e^{-k_{||} z} + B e^{iu_0 x} e^{iq_y y} e^{-k_{||} z} + \int \frac{A_{reg}(k_x)}{2\pi} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{-\sqrt{k_x^2 + k_y^2} z} dk_x \quad (3.33)$$

Observe que pelo comportamento matemático da equação (3.33) o potencial elétrico e consequentemente o campo elétrico terá sua distribuição espacial ao longo de toda a superfície da bump, ou seja, não temos modos localizados.

Substituindo a equação (3.32) na equação (3.16) obtemos,

$$(\alpha_1 \delta(u - u_0) + \alpha_2 \delta(u + u_0) + a_{reg}(u)) \Gamma(\omega, q_y, u) = \int_a^b (\alpha_1 \delta(v - u_0) + \alpha_2 \delta(v + u_0) + a_{reg}(v)) \gamma_{q_y, \omega}(u, v) dv \quad (3.34)$$

$$\begin{aligned} & \alpha_1 \Gamma(\omega, q_y, u) \delta(u - u_0) + \alpha_2 \delta(u + u_0) \Gamma(\omega, q_y, u) + a_{reg}(u) \Gamma(\omega, q_y, u) \\ &= \alpha_1 \gamma_{q_y, \omega}(u, u_0) + \alpha_2 \gamma_{q_y, \omega}(u, -u_0) + \int a_{reg}(v) \gamma_{q_y, \omega}(u, v) dv \end{aligned} \quad (3.35)$$

integrando ambos os termos em  $u$  obtemos,

$$a_{reg}(u) \Gamma(\omega, q_y, u) = \alpha_1 \gamma_{q_y, \omega}(u, u_0) + \alpha_2 \gamma_{q_y, \omega}(u, -u_0) + \int a_{reg}(v) \gamma_{q_y, \omega}(u, v) dv \quad (3.36)$$

lembrando que  $u_0 = \sqrt{\beta\omega^4 - q_y^2}$ . Analisando a equação acima é possível verificarmos que não conseguimos transforma-la num problema de autovalor e autovetor, onde os autovalores (estariam relacionados com a frequência). Portanto, teremos um conjunto contínuo para o espectro plasmônico, ou seja, para qualquer  $q_y$  e  $\omega$  (para frequências acima do grafeno flat) teremos uma solução para a função  $a_{reg}(u)$ .

Se a equação (3.19) tiver soluções para  $u \notin [a, b]$  então a equação (3.16) será uma equação integral de Fredholm de segundo tipo. Essa equação, para um dado  $q_y$ , tem soluções para valores particulares de  $\omega$ , como veremos melhor adiante. Se  $u \notin [a, b]$ ,  $u$  não será um número real, logo o espectro de frequências nesse caso (analisando a equação (3.28)) será na região  $\omega < \omega_{flat}$ . No caso da integral de segundo tipo, a equação (3.15) pode ser reescrita da seguinte forma,

$$a(u) \left[ - \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{u^2 + q_y^2} - \lambda (u^2 + q_y^2) \right] = \int dv a(v) [\lambda K'(v, u) + M'(v, u)] \quad (3.37)$$

$$-a(u) \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{u^2 + q_y^2} + \int dv a(v) M'(v, u) = \lambda(\omega) \left( a(u) (u^2 + q_y^2) + \int dv a(v) K'(v, u) \right) \quad (3.38)$$

A equação acima pode ser vista como,

$$H(u, v)a(v) = \lambda(\omega)B(u, v)a(v) \quad (3.39)$$

Onde  $H(u, v)$  e  $B(u, v)$  são operadores integrais que atuam na função  $a(u)$ . Temos então uma equação de autovalor e autovetor, onde para um dado  $q_y$  temos somente alguns valores de  $\lambda$  permitidos, ou seja, o espectro é discreto.

Devido a paridade da função  $\gamma_{q_y, \omega}(u, v)$  (Observe que  $\gamma_{q_y, \omega}(u, v) = \gamma_{q_y, \omega}(-u, -v)$ ). Dessa maneira é possível construir uma solução simétrica e uma antisimétrica da seguinte forma,

$$S_{even}(u) = a(u) + a(-u) \quad (3.40)$$

$$S_{odd}(u) = a(u) - a(-u) \quad (3.41)$$

$$a(u)\Gamma(q_y, u) \pm a(-u)\Gamma(q_y, -u) = \int a(v)\gamma_{q_y, \omega}(u, v) dv \pm \int a(-v)\gamma_{q_y, \omega}(-u, -v) dv \quad (3.42)$$

$$a(u)\Gamma(q_y, u) \pm a(-u)\Gamma(q_y, u) = \int a(v)\gamma_{q_y, \omega}(u, v) dv \pm \int a(-v)\gamma_{q_y, \omega}(u, v) dv \quad (3.43)$$

$$\Gamma(q_y, u)(a(u) \pm a(-u)) = \int \gamma_{q_y, \omega}(u, v)(a(v) \pm a(-v)) dv \quad (3.44)$$

onde teremos o sinal + se a solução for par e – se for ímpar.

A equação integral ficará,

$$S(u) \left[ - \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{u^2 + q_y^2} - \lambda (u^2 + q_y^2) \right] = \lambda \int dv S(v) K'(u, v) + \int dv S(v) M'(u, v) \quad (3.45)$$

Onde  $S(v)$  pode ser uma solução par ou ímpar. Vamos agora usar a paridade das funções a fim de mudar os limites de integração.

$$\begin{aligned} S(u) \left[ - \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{u^2 + q_y^2} - \lambda (u^2 + q_y^2) \right] = \\ \lambda \int_0^\infty dv S(v) K'(u, v) + \int_0^\infty dv S(v) M'(u, v) + \lambda \int_{-\infty}^0 dv S(v) K'(u, v) + \int_{-\infty}^0 dv S(v) M'(u, v) \end{aligned} \quad (3.46)$$

$$\begin{aligned} S(u) \left[ - \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{u^2 + q_y^2} - \lambda (u^2 + q_y^2) \right] = \\ \lambda \int_0^\infty dv S(v) K'(u, v) + \int_0^\infty dv S(v) M'(u, v) + \lambda \int_0^\infty d|v| S(-|v|) K'(u, -|v|) \\ + \int_0^\infty d|v| S(-|v|) M'(u, -|v|) \end{aligned} \quad (3.47)$$

$$S(u) \left[ - \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{u^2 + q_y^2} - \lambda (u^2 + q_y^2) \right] =$$

$$\lambda \int_0^\infty dv S(v) K'(u, v) + \int_0^\infty dv S(v) M'(u, v) \pm \lambda \int_0^\infty dv S(v) K'(u, -v) \pm \int_0^\infty dv S(v) M'(u, -v)$$
(3.48)

$$S(u) \left[ - \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{u^2 + q_y^2} - \lambda (u^2 + q_y^2) \right] =$$

$$\lambda \int_0^\infty dv S(v) (K'(u, v) \pm K'(u, -v)) + \int_0^\infty dv S(v) (M'(u, v) \pm M'(u, -v))$$
(3.49)

onde  $v \geq 0$ .

$$S(u) \left[ - \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{u^2 + q_y^2} - \lambda (u^2 + q_y^2) \right] = \lambda \int_0^\infty dv S(v) D_1(v, u) + \int_0^\infty dv S(v) D_2(v, u)$$
(3.50)

Então arrumamos a equação (3.50) da forma da equação (3.39) e obtemos uma equação de autovalor e autovetor que pode ser resolvida numericamente através da discretização das integrais, transformando-as em um problema matricial, conhecido como problema do autovalor generalizado, onde para cada vetor de onda  $q_y$  teremos apenas algumas frequências permitidas.

$$\mathbf{M}_1 \mathbf{A} = \lambda \mathbf{M}_2 \mathbf{A}$$
(3.51)

Onde  $\mathbf{M}_1$  e  $\mathbf{M}_2$  são matrizes,  $\mathbf{A}$  é o autovetor (associado perfil dos campos) e  $\lambda$  o autovalor (associado as frequências).

É importante notar que se fizermos  $\sigma_g = 0$  e  $\epsilon_2 = \epsilon_2(\omega)$  na Eq. (3.15) teremos,

$$a(u) \left[ - \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \right) \sqrt{u^2 + q_y^2} \right]$$

$$= \int dv a(v) \frac{1}{2\pi} Q(k_2 - k_1; u - v; L) \left[ \left( \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2} \right) (q_y^2 + uv - \sqrt{u^2 + q_y^2} \sqrt{v^2 + q_y^2}) \right]$$
(3.52)

Rearrajando os termos teremos,

$$a(u) \frac{\epsilon_2(\omega) + \epsilon_1}{\epsilon_2(\omega) - \epsilon_1} = \int dv \frac{a(v)}{2\pi} Q(k_2 - k_1; u - v; L) \frac{(-uv + k_2 k_1 - q_y^2)}{\sqrt{u^2 + q_y^2}} \quad (3.53)$$

Note que a função  $\frac{\epsilon_2(\omega) + \epsilon_1}{\epsilon_2(\omega) - \epsilon_1}$  não depende da variável  $u$ , portanto não temos nenhuma função multiplicando  $a(u)$  cujo tenha raízes no intervalo de integração, então teremos uma equação integral homogênea de Fredholm de segundo tipo, que como discutido anteriormente só possui soluções discretas de  $\omega$  para um determinado valor de  $q_y$ . Dessa forma não teremos um espectro contínuo para um sistema sem grafeno. Partindo dessa análise, podemos ver que o surgimento de um espectro contínuo pode aparecer não somente com a presença de Grafeno, mas também com algum material 2D cujo tenha uma condutividade optica semelhante ou que de alguma maneira satisfaça as devidas condições descritas anteriormente.

### 3.2 Resultados

Após a obtenção dos autovalores e autovetores conseguimos encontrar a relação de dispersão e os campos. Antes disso vamos mostrar como ficam descritos o campo elétrico e o potencial elétrico no que se refere aos modos pares e ímpares.

Como as soluções da equação (3.50) estão divididas em modos pares e ímpares o potencial elétrico será também dividido em modos pares e ímpares.

Para modos pares teremos,

$$\phi_{>}(\mathbf{r})_{even} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A(k_x)_{even}}{2\pi} (\cos(k_x x) + i \sin(k_x x)) e^{ik_y y} e^{-k_{||} z} dk_x \quad \text{para } z > \zeta(x), \quad (3.54)$$

Devido a propriedade de paridade de funções é possível mostrar que,

$$\phi_{>}(\mathbf{r})_{even} = \int_0^{\infty} \frac{A(k_x)_{even}}{\pi} \cos(k_x x) e^{ik_y y} e^{-k_{||} z} dk_x \quad \text{para } z > \zeta(x), \quad (3.55)$$

Da mesma maneira para os modos ímpares teremos,

$$\phi_{>}(\mathbf{r})_{odd} = i \int_0^{\infty} \frac{A(k_x)_{odd}}{\pi} \sin(k_x x) e^{ik_y y} e^{-k_{||} z} dk_x \quad \text{para } z > \zeta(x), \quad (3.56)$$

O campo elétrico pode ser obtido de  $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ . As componentes do campo elétrico para os

modos pares são dadas por,

$$E_x^{even}(x, y = 0, z, t = 0) = \int_0^\infty \frac{A(k_x)_{even}}{\pi} k_x \text{sen}(k_x x) e^{-k_{||} z} dk_x \quad (3.57a)$$

$$E_z^{even}(x, y = 0, z, t = 0) = \int_0^\infty \frac{A(k_x)_{even}}{\pi} k_{||} \text{cos}(k_x x) e^{-k_{||} z} dk_x \quad (3.57b)$$

$$E_y = -ik_y \phi_{>}(\mathbf{r})_{even} \quad (3.57c)$$

Enquanto que para os modos ímpares teremos,

$$E_x^{odd}(x, y = 0, z, t = 0) = -i \int_0^\infty \frac{A(k_x)_{even}}{\pi} k_x \text{cos}(k_x x) e^{-k_{||} z} dk_x \quad (3.58a)$$

$$E_z^{odd}(x, y = 0, z, t = 0) = i \int_0^\infty \frac{A(k_x)_{even}}{\pi} k_{||} \text{sen}(k_x x) e^{-k_{||} z} dk_x \quad (3.58b)$$

$$E_y = k_y \phi_{>}(\mathbf{r})_{odd} \quad (3.58c)$$

Com as expressões já bem estabelecidas podemos então obter o perfil dos campos para os modos pares e ímpares através do autovetores calculados através do método numérico.

Primeiramente mostramos na Fig. 21 o perfil do potencial e do campo elétrico para uma bump com uma deformação  $A/R = 0.1$ . O modo plasmônico mostrado corresponde ao modo par de mais baixa frequência para o vetor de onda  $q_y = 0.08 \mu m^{-1}$  para os parâmetros descritos na figura abaixo. Na Fig. 22 obtemos novamente um modo par fundamental, para uma bump com deformação  $A/R = 0.2$ , com um vetor de onda  $q_y = 0.12 \mu m^{-1}$ . É possível notar que o confinamento do modo é maior para a bump com deformação de  $A/R = 0.5$  em relação ao caso  $A/R = 0.1$ , pois quanto maior a deformação mais confinados são os campos, isso pode ser visto verificando o comportamento das equações (3.55),(3.56),(3.57) e (3.58).

Note que o comportamento do potencial e da componente  $z$  do campo elétrico, para ambos os modos, são simétricos em relação ao centro da bump ( $x = 0$ ). Já a componente  $x$  do campo elétrico é antisimétrica em relação ao centro da bump. Isso podemos ver claramente quando analisamos o comportamento das equações citadas anteriormente ao longo de  $x$ .

Abaixo seguem os gráficos do perfil do campo elétrico para modos pares e ímpares.

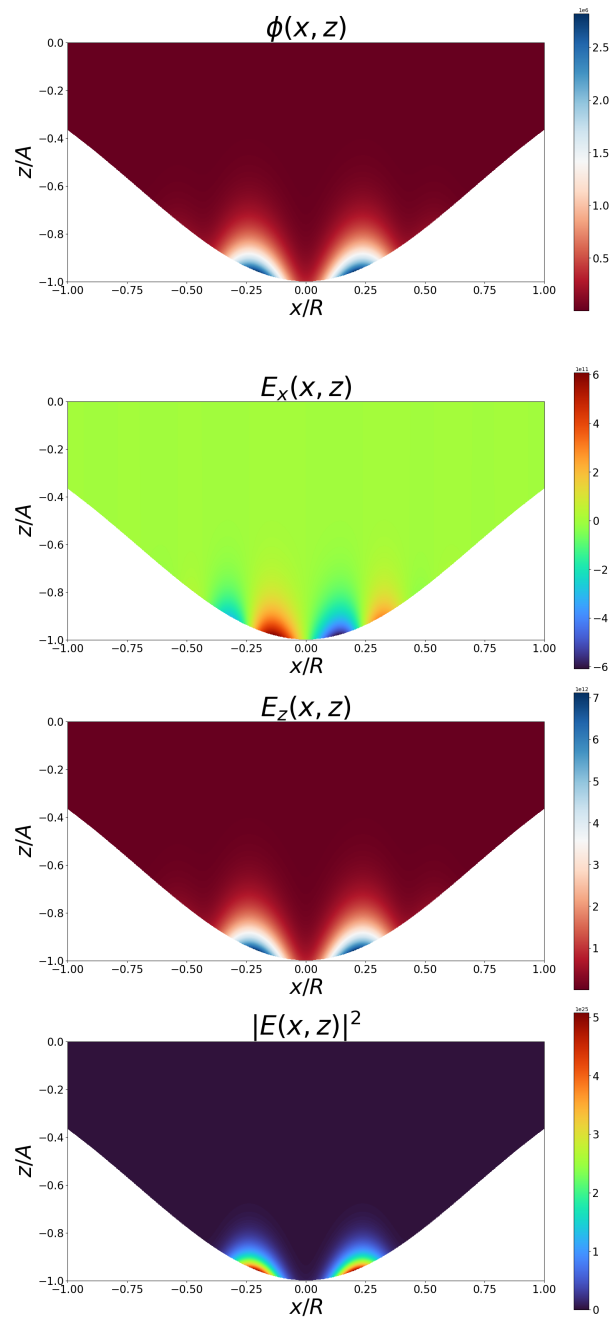


Figura 21: Potencial e Campos Elétricos do Plasmon localizado, modo par. Parâmetros:  $\epsilon_1 = 1$ ,  $\epsilon_2 = 2$ ,  $A/R = 0.1$ .

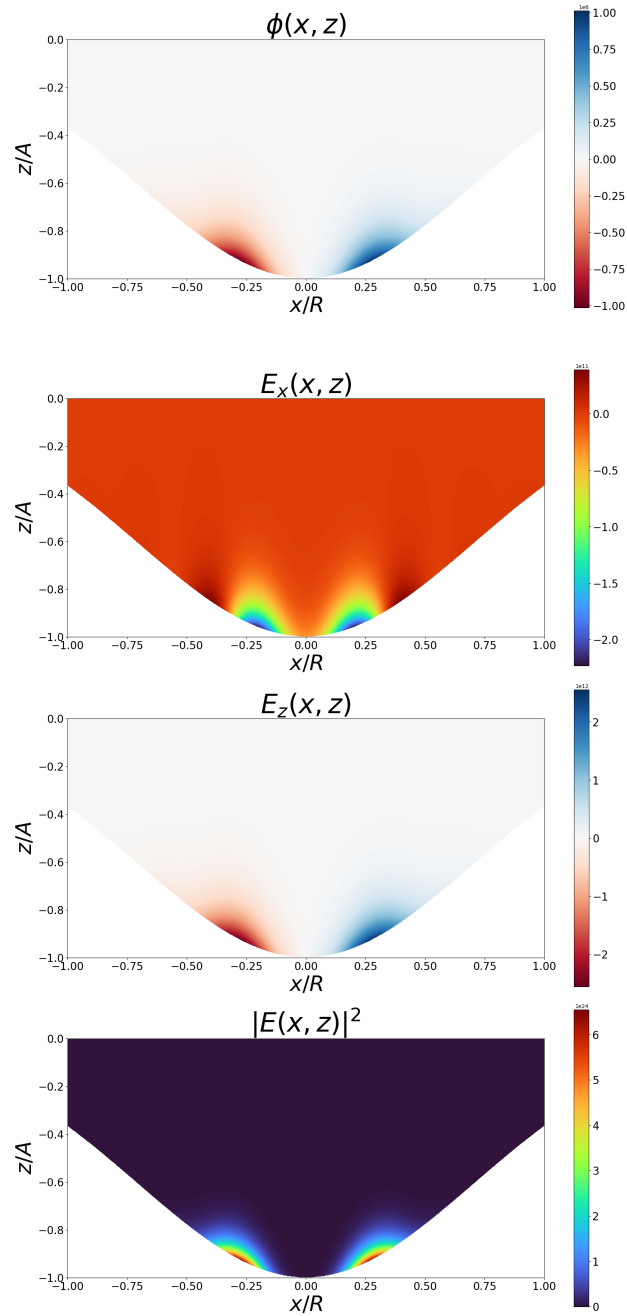


Figura 22: Potencial e Campos Elétricos do Plasmon localizado, modo ímpar. Parâmetros:  $\epsilon_1 = 1$ ,  $\epsilon_2 = 2$ ,  $A/R = 0.1$ .

Quanto a relação de dispersão, esta é obtida através dos autovalores obtidos na diagonalização da equação (3.50), onde os autovalores estão associados a frequência da seguinte maneira,

$$\lambda_n = \frac{i\sigma_g}{\epsilon_2\epsilon_0\omega R} \quad (3.59)$$

$$\lambda_n\epsilon_2\epsilon_0\omega R = - \left( \frac{\sigma_0 4E_F}{\pi\hbar\omega} \right) \quad (3.60)$$

$$\omega_n = \sqrt{-\frac{4E_F\sigma_0}{\pi\hbar\epsilon_2\epsilon_0 R\lambda_n(q_y)}} \quad (3.61)$$

No caso, como estamos considerando frequências reais, os autovalores devem ser negativos. O índice  $n$  está associado a ordem do autovalor de maneira crescente, por exemplo, se  $n = 1$  então estamos tratando do modo de mais baixa frequência, também chamado de estado fundamental, se  $n = 2$ , estamos tratando do primeiro estado excitado e assim por diante. É importante observar que o formato da curva de dispersão só depende apenas do fator geométrico  $A/R$  e os parâmetros na Eq. (3.61) apenas mudam a escala do excitação dos modos plasmônicos. Note que a energia de Fermi  $E_F$  pode servir como um sintonizador de frequências, lembrando que esse parâmetro é alterado por mudanças na temperatura ou mudanças químicas na estrutura do grafeno.

Por razões de instabilidade numérica, não foi possível obter muitas curvas para diferentes razões de  $A/R$ , de tal forma que apenas modos para  $A/R = 0.1$  e  $A/R = 0.2$  convergiram. Além disso não foi possível determinar a natureza exata dos modos obtidos (estado fundamental, primeiro estado excitado e assim por diante) devido a questão do problema de convergência citado. Note que houve uma pequena diferença entre as frequências dos modos plasmônicos confinados e as frequências do grafeno plano. Abaixo foram plotadas as relações de dispersão para os modos pares e ímpares.

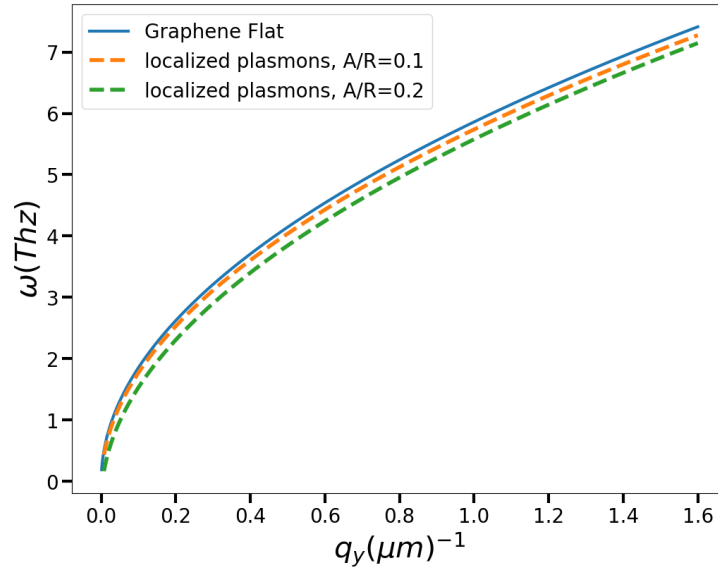


Figura 23: Relação de dispersão para o plasmon de superfície para dois valores de  $A/R$ , modos Pares.  $\epsilon_1 = 1$ ,  $\epsilon_2 = 2$  e  $R = 250\mu m$ .

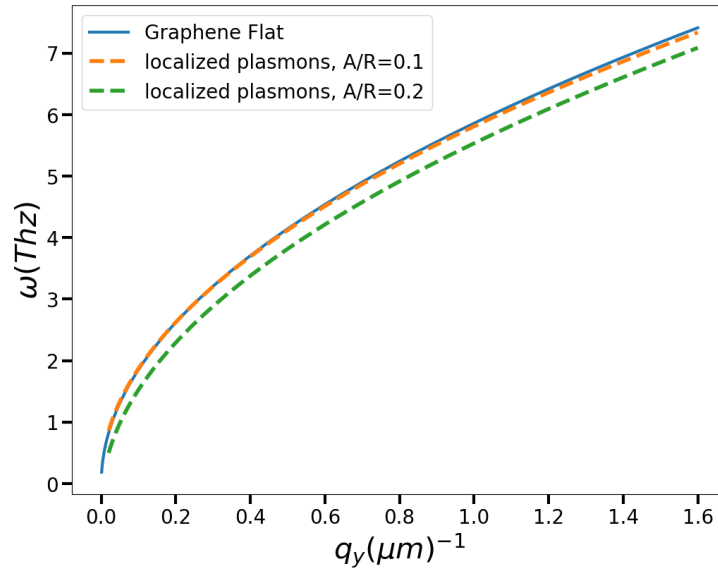


Figura 24: Relação de dispersão para o plasmon de superfície para dois valores de  $A/R$ , modos ímpares.  $\epsilon_1 = 1$ ,  $\epsilon_2 = 2$  e  $R = 250\mu m$ .

## 4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Este trabalho teve como objetivo investigar os plasmon-polárítos de superfície localizados excitados devido uma deformação unidimensional na folha de grafeno, que por sua vez está posicionada no meio de dois meios dielétricos.

No Capítulo 1, revisamos a forma macroscópica das equações de Maxwell; introduzimos as condições de contorno devido uma interface entre dois meios dielétricos; fornecemos as definições das ondas polarizadas do tipo p e do tipo s associadas aos modos transversais magnéticos e elétricos, respectivamente; calculamos o espectro para os modos TE e TM dos plasmon-polárítos de superfície entre um metal e um dielétrico; consideramos o estudo similar dos modos TE e TM para o caso da interface entre dois meios agora com a presença de grafeno, onde neste caso, discutimos as modificações nas condições de contorno e analisamos brevemente a relação de dispersão para o modo TM. Por fim, destacamos alguns trabalhos de plasmon-polárítos de superfície em sistemas com deformações já reportados na literatura, em especial chamando atenção aos trabalhos do prof. Alexei A. Maradudin e colaboradores e do prof. Nuno Peres e colaboradores.

No Capítulo 2, apresentamos as ferramentas matemáticas básicas para se tratar de superfícies rugosas com deformações bidimensionais ou unidimensionais, tal como o vetor gradiente normalizado ( $\hat{n}$ ), isto é, um vetor unitário perpendicular à superfície, a derivada normal ( $\partial/\partial n = \hat{n} \cdot \nabla$ ), e o elemento diferencial de área da superfície ( $ds$ ). Em seguida, formulamos propriamente o problema em questão que se trata de uma folha de grafeno com uma ranhura unidimensional localizada na interface entre vácuo e um meio dielétrico. Para tal, escrevemos os potenciais em cada região, acima e abaixo do plano de grafeno deformado, e as condições de contorno relacionadas com a continuidade do potencial e a descontinuidade da componente normal do vetor deslocamento elétrico. No desenvolvimento analítico deste problema utilizamos o teorema de Green, função de Green, equação da continuidade, as condições de contorno descritas, e as ferramentas matemáticas básicas apresentadas. Todos esses ingredientes reunidos resultam em uma equação integral para os coeficientes do potencial elétrico, que será resolvido

numericamente como um problema de autovalor generalizado.

Por fim, destacamos que até o presente momento já foram desenvolvidas as ferramentas teóricas necessárias para se calcular o espectro plasmônico dos plasmon-polártons de superfície localizados do sistema com uma determinada deformação na interface entre dois meios dielétricos homogêneos e isotrópicos com a presença de grafeno na interface. Além disso foram desenvolvidos códigos computacionais que se encontram em fase de teste e comparação dos resultados com aqueles já reportados na literatura.

Tendo em vista que as ferramentas desenvolvidas até aqui nos dão liberdade numérica com respeito a forma da deformação implementada, temos como perspectivas: (i) reproduzir os espectros e os gráficos dos potenciais e campos para o caso da deformação unidimensional na folha de grafeno, comparando tais resultados com o caso na ausência de grafeno na interface; (ii) considerar o caso de duas ranhuras unidimensionais na folha de grafeno, investigando o papel dos parâmetros do sistema na localização dos plasmon-polártons de superfície, tais como a distância entre as *bumps* e suas amplitudes; (iii) considerar o caso periódico, como exemplo uma rugosidade no formato senoidal; e (iv) considerar o caso do meio dielétrico ser anisotrópico e reproduzir os resultados descritos nos itens anteriores.

## REFERÊNCIAS

ABAJO, F. J. G. de. Multiple excitation of confined graphene plasmons by single free electrons. **ACS Nano**, [s. l.], v. 7, n. 12, p. 11409–11419, 2013.

BART, G. R.; WARNOCK, R. L. Linear Integral Equations of the Third Kind. **SIAM Journal on Mathematical Analysis**, [s. l.], v. 4, n. 4, 1973.

BEYOND the diffraction limit. *Nature Photonics*, v. 3, n. 7, p. 361, 2009. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/nphoton.2009.100>. Acesso em: 17 jun. 2025.

CASTRO NETO, A. H.; GUINEA, F.; PERES, N. M. R.; NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K. The electronic properties of graphene. **Reviews of Modern Physics**, [s. l.], v. 81, p. 109–394, 2009. Disponível em: <https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.81.109>. Acesso em: 17 jun. 2025.

CHAVES, A. J.; PERES, N. M. R.; COSTA, D. R. da.; FARIAS, G. A. Channel surface plasmons in a continuous and flat graphene sheet. **Physical Review B**, [s. l.], v. 97, p. 205435, 2018.

COMSOL. **Multiphysics Reference Manual**. version 5.3. Disponível em: [www.comsol.com](http://www.comsol.com). Acesso em: 17 jun. 2025.

EBBESEN, T. W.; GENET, C.; BOZHEVOLNYI, S. I. Surface plasmon circuitry. **Nature**, [s. l.], v. 61, p. 44–50, may 2008. Disponível em: <https://pubs.aip.org/physicstoday/articleabstract/61/5/44/915046/Surface-plasmon-circuitryElectromagnetic-wavesat?redirectedFrom=fulltext>. Acesso em: 17 jun. 2025.

GRAMOTNEV, D.; BOZHEVOLNYI, S. Plasmonics beyond the diffraction limit. **Nature Photonics**, [s. l.], v. 4, n. 83, 2010. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/nphoton.2009.282>. Acesso em: 17 jun. 2025.

GRIFFITHS, D. J. **Electrodynamics**. [S. l.]: Pearson, 1989.

GONÇALVES, P. A. D.; PERES, N. M. R. **An introduction to graphene plasmonics**. [S. l.]: World Scientific, 2016.

HESSEL, A.; OLINER, A. A. A new theory of Wood's anomalies on optical gratings. **Applied Optics**, [s. l.], v. 4, n. 10, p. 1275–1297, 1965. Disponível em: <https://opg.optica.org/ao/fulltext.cfm?uri=ao-4-10-1275&id=13932>. Acesso em: 17 jun. 2025.

KAWATA, S.; INOUE, Y.; VERMA, P. Plasmonics for near-field nanoimaging and superlensing. **Nature Photonics**, [s. l.], v. 3, n. 7, p. 388–394, 2009. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/nphoton.2009.111>. Acesso em: 17 jun. 2025.

KHUURGIN, J. B.; BOLTASSEVA, A. Reflecting upon the losses in plasmonics and metamaterials. **MRS Bulletin**, [s. l.], v. 37, p. 768–779, aug. 2012.

KITTEL, C. **Introdução à Física do estado sólido**. 8. ed. São Paulo: LTC, 2013.

- KRETSCHMANN, E.; RAETHER, H. Radiative decay of nonradiative surface plasmon excited by light. **Zeitschrift für Naturforschung A**, [s. l.], v. 23, n. 12, p. 2135–2136, 1968.
- LI, Z. Q.; HENRIKSEN, E. A.; JIANG, Z.; HAO, Z.; MARTIN, M. C.; KIM, P.; STORMER, H. L.; BASOV, D. N. Dirac charge dynamics in graphene by infrared spectroscopy. **Nature Physics**, [s. l.], v. 4, p. 532–535, 2008.
- LIBSTER-HERSHKO, A.; SHILOH, R.; ARIE, A. Surface plasmon polaritons on curved surfaces. **Optica**, [s. l.], v. 6, n. 1, p. 115–118, 2019.
- LIANG, Z.; SUN, J.; JIANG, Y.; JIANG, L.; CHEN, X. Plasmonic enhanced optoelectronic devices. **Plasmonics**, [s. l.], v. 9, p. 859–866, feb. 2014. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s11468-014-9682-7>. Acesso em: 17 jun. 2025.
- LU, J. Q.; MARADUDIN, A. A. Channel plasmons. **Physical Review B**, [s. l.], v. 42, n. 17, p. 11159–11165, dec. 1990.
- MARADUDIN, A. A. Electromagnetic surface excitations on rough surfaces. In: WALLIS, R. F.; STEGEMAN, G. I. (Ed.). **Electromagnetic Surface Excitations**. Berlin: Springer-Verlag, 1986. p. 57–131.
- MARADUDIN, A. A. Interaction of surface polaritons and plasmons with surface roughness. **Modern Problems in Condensed Matter Sciences**, [s. l.], v. 1, p. 405–510, 1982.
- MARADUDIN, A. A.; VISSCHER, W. M. Electrostatic and electromagnetic surface shape resonances. **Zeitschrift für Physik B Condensed Matter**, [s. l.], v. 60, n. 2, p. 215–230, jun. 1985.
- NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K.; MOROZOV, S. V.; JIANG, D. E.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S. V.; GRIGORIEVA, I. V.; FIRSOV, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. **Science**, [s. l.], v. 306, p. 666–669, oct. 2004. Disponível em: <https://www.science.org/doi/10.1126/science.1102896>. Acesso em: 17 jun. 2025.
- OTTO, A. Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection. **Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei**, [s. l.], v. 216, n. 4, p. 398–410, aug. 1968.
- POWELL, C. J.; SWAN, J. B. Origin of the characteristic electron energy losses in aluminum. **Physical Review**, [s. l.], v. 115, n. 4, p. 869–875, aug. 1959. Disponível em: <https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.115.869>. Acesso em: 17 jun. 2025.
- RAHMAN, T. S.; MARADUDIN, A. A. Surface-plasmon dispersion relation in the presence of surface roughness. **Physical Review B**, v. 21, n. 6, p. 2137–2143, 1980.
- RITCHIE, R. H. Plasma losses by fast electrons in thin films. **Physical Review**, [s. l.], v. 106, n. 5, p. 874–881, 1957. Disponível em: <https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.106.874>. Acesso em: 17 jun. 2025.
- RITCHIE, R. H.; ARAKAWA, E. T.; COWAN, J. J.; HAMM, R. N. Surface plasmon resonance effect in grating diffraction. **Physical Review Letters**, [s. l.], v. 21, n. 22, p. 1530–1533, nov. 1968. Disponível em: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.21.1530>. Acesso em: 17 jun. 2025.

SMIRNOVA, D.; MOUSAVI, S. H.; WANG, Z.; KIVSHAR, Y. S.; KHANIKAEV, A. B. Trapping and guiding surface plasmons in curved graphene landscapes. **ACS Photonics**, [s. l.], v. 3, n. 5, p. 719–911, may 2016.

SOMMERFELD, A. Über die fortpflanzung elektrodynamischer wellen an längs eines drahtes. **Annalen der Physik**, [s. l.], v. 303, n. 2, p. 233–492, jan. 1899. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/andp.18993030202>. Acesso em: 17 jun. 2025.

WOOD, R. W. On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum. **Philosophical Magazine**, [s. l.], v. 18, n. 1, p. 269–275, 1902. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1478-7814/18/1/325>. Acesso em: 17 jun. 2025.

YAN, H.; LOW, T.; ZHU, W.; WU, Y.; FREITAG, M.; LI, X.; GUINEA, F.; AVOURIS, P.; XIA, F. Damping pathways of mid-infrared plasmons in graphene nanostructures. **Nature Photonics**, [s. l.], v. 7, n. 5, p. 394–399, may 2013.

ZENNECK, J. Über die Fortpflanzung ebener elektromagnetischer Wellen längs einer ebenen Leiterfläche und ihre Beziehung zur drahtlosen Telegraphie. **Annalen der Physik**, [s. l.], v. 328, n. 10, p. 809–1000, jan. 1907. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/andp.19073281003>. Acesso em: 17 jun. 2025.

ZHENG, Y. B.; KIRALY, B.; WEISS, P. S.; HUANG, T. J. Molecular plasmonics for biology and nanomedicine. **Nanomedicine**, [s. l.], v. 7, n. 5, p. 751–770, may 2012.

ZHAO, Y.; HU, X.; CHEN, G.; ZHANG, X.; TAN, Z.; CHEN, J.; RUOFF, R. S.; ZHU, Y.; LU, Y. Infrared biosensors based on graphene plasmonics: modeling. **Physical Chemistry Chemical Physics**, [s. l.], v. 15, p. 17118–17125, 2013. Disponível em: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2013/cp/c3cp51952j>. Acesso em: 17 jun. 2025.